



# UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO

## PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA



PGQ7343 FÍSICO-QUÍMICA AVANÇADA

45 HORAS, 03 CRÉDITOS

### EMENTA:

Conceitos de Energia, Trabalho e Calor; 1ª Lei da Termodinâmica e aplicações; Funções de Estado e potencial químico; Entalpia e Termoquímica; Entropia; Conceito microscópico de entropia; 2ª Lei da Termodinâmica; 3ª Lei da Termodinâmica; Energia livre; Equilíbrio de fases; Equilíbrio químico e aplicações; Noções de Termodinâmica estatística e a importância do modelo quântico na termodinâmica; Teoria cinética de gases; Transporte por difusão; Velocidade de reações químicas; Teoria do estado de transição; Mecanismos de reação; Noções de dinâmica molecular; Reações em solução; Catálise; Reações em estado sólido; Alguns tópicos avançados: termodinâmica do efeito de solvente; noções de análise conformacional; efeito isotópico em reações.

### BIBLIOGRAFIA:

1. Atkins, P. W. e de Paula, J. *Físico-química*, 8ª ed., Rio de Janeiro, LTC, 2006.
2. Levine, I. N. *Physical chemistry*. 5th ed. New York : McGraw-Hill, 2001.
3. Atkins, P. W., de Paula, J. And Friedman, R. *Quanta, Matter and Change: A molecular approach to physical chemistry*, New York, Oxford University Press, 2009.
4. Dykstra, C. E., *Physical Chemistry-A Modern Introduction*, New Jersey, Prentice-Hall, 1997.
5. C. Reichardt, *Solvents and solvent effects in organic chemistry*, 3rd Ed., VCH, Weinheim, 2003.

### SÍTIOS PARA CONSULTA NA INTERNET:

1. <http://quimicanova.sbq.org.br/>
2. <http://qnint.sbq.org.br/qni/>
3. <http://jbcs.sbq.org.br/>
4. <http://pubs.acs.org/journal/jpcbfbk>
5. <http://www.hindawi.com/journals/jtd/>