

DEPARTAMENTO: Engenharia Mecânica

DISCIPLINA: TÓPICOS ESPECIAIS – FÍSICO QUÍMICA AVANÇADA

SIGLA: TOE -
FQA

CARGA HORÁRIA TOTAL: 60

TEORIA: 04

PRÁTICA: -

CURSO: Mestrado/Doutorado em Ciência e Engenharia de Materiais

PRÉ-REQUISITOS: -

PROFESSOR RESPONSÁVEL: Sérgio Henrique Pezzin

EMENTA

Leis da Termodinâmica; Conceito microscópico de entropia e a distribuição de Boltzmann; Funções de Estado e potencial químico; Equilíbrio de fases; Equilíbrio químico; Equilíbrio de soluções eletrolíticas; Teoria de Debye-Huckel e extensões. Leis de velocidade e mecanismos de reações; Elementos de Teoria cinética dos gases; Colisões; Teoria do estado de transição.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Unidade 1: Leis da termodinâmica: Lei Zero, 1ª, 2ª e 3ª Lei da Termodinâmica. Funções de Estado. Relações de Maxwell. Relações Termodinâmicas para um sistema em equilíbrio. Potencial químico e relações termodinâmicas. Interpretação molecular da entropia. Fundamentos da Teoria cinética dos gases: Lei da distribuição de Boltzmann; distribuição das velocidades moleculares.

Unidade 2: Soluções Ideais e não ideais. Atividade e relação com propriedade coligativa e potencial químico. Teoria de Debye-Huckel de soluções de eletrólitos. Equilíbrio de fases de monocomponente: potencial químico e mudança de fase, Equação de Clapeyron. Equilíbrio de fases em sistemas Multicomponente: equilíbrio líquido-vapor; equilíbrio líquido-líquido, equilíbrio sólido líquido, solubilidade. Equilíbrio químico: constante K, equilíbrio químico em soluções de não eletrólito e de eletrólitos.

Unidade 3: Cinética das reações químicas; medida da velocidade das reações; integração das Leis de velocidade; determinação experimental da Lei de velocidade; efeito da temperatura: equação de Arrhenius; relação entre constante cinética e equilíbrio químico; mecanismos de reação: reações elementares e reações complexas. Teoria das colisões, teoria do estado de transição. Catálise.

BIBLIOGRAFIA

Bibliografia Básica

1. LEVINE, I.N.; Physical Chemistry, 6a ed., MacGrawHill, 2008.
2. BERRY R.S.; RICE, S.A.; Physical Chemistry, Rice & J. Ross, 2th ed., Oxford, 2000.
3. LAIDLER, K. J.; Chemical Kinetics, 3th ed., Harper & Row, 1987.
4. CONNORS K.A.; Chemical Kinetics: The Study of Reaction Rates in Solution, Wiley-VCH, 1990.

Bibliografia Complementar

5. BILLING, G.; MIKKELSON, K.; Advanced Molecular Dynamics and Chemical Kinetics, Wiley-Interscience, 1997.
6. CASTELLAN, G.; Fundamentos de Físico-Química. Rio de Janeiro: LTC, 1986.
7. HAMILL, W.H.; WILLIAMS, J.R.; MACKAY, R.R.; Principles of Physical Chemistry. 2 ed. New Jersey, Prentice-Hall, 1966.
8. ATKINS, P.W.; DE PAULA, J.; Físico-Química. 9. ed. v. 1. Rio de Janeiro: LTC, 2009.

Centro de Ciências Tecnológicas - CCT/FEJ
Rua: Paulo Malschitzki, 200 - Campus Universitário Prof. Avelino Marcante"
Zona Industrial Norte - CEP: 89219-710
Fones: (047) 4009-7900 FAX: (047) 4009-7940
Joinville - Santa Catarina - Brasil