

CARACTERIZAÇÃO DE DISCIPLINA
BACHARELADO EM QUÍMICA/LICENCIATURA EM QUÍMICA
FÍSICO-QUÍMICA V

CURSO/SEMESTRE	Bacharelado em Química (obrigatória)7° semestre Licenciatura em Química (optativa)
DISCIPLINA	FÍSICO-QUÍMICA V
CARÁTER DA DISCIPLINA	Obrigatória
PRÉ-REQUISITO	Físico-Química II B ou Físico-Química II L, Estatística Básica
CÓDIGO	150079
DEPARTAMENTO	Química Analítica e Inorgânica
CARGA HORÁRIA TOTAL	51 horas
CRÉDITOS	03 créditos
NATUREZA ANO/SEMESTRE	(2-0-1) 2006/01
PROFESSORES E CARGA HORÁRIA	Profa. Dra. Irene Teresinha Santos Garcia 3h/semana
OBJETIVOS	Gerais: Ampliar conceitos fundamentais de Físico-Química previamente desenvolvidos nas disciplinas introdutórias do curso de Química e dar suporte teórico aos conceitos fenomenológicos desenvolvidos previamente. Específicos: Discutir aspectos relevantes termodinâmica Estatística referentes aos principais conceitos, como Ensembles, Funções de Partição, Funções Termodinâmicas, e correlacionar os diversos assuntos referentes à disciplina em questão com atividades de pesquisa por meio de artigos científicos e simulações computacionais.
EMENTA	Mecânica estatística. Ensembles. Funções de partição. Funções termodinâmicas. Teoria mecânico-estatística de Boltzmann. Descrição microscópica de gases, fluidos e sólidos.
PROGRAMA	UNIDADE I- INTRODUÇÃO À TERMODINÂMICA ESTATÍSTICA 1.1. Introdução à Físico-química V 1.2. Leis de distribuição de probabilidade 1.3. Teorema dos valores médios Prática: Simulação da distribuição das velocidades utilizando o programa modellus. UNIDADE II - ENSEMBLES E FUNÇÃO DE PARTIÇÃO 2.1. O Ensemble micro-Canônico 2.2. O Ensemble canônico 2.3. Energia Interna, Entropia, Energia Livre, Potencial químico 2.4. O Ensemble Gran-Canônico 2.5. Outros Ensembles

	<p>UNIDADE III- NOÇÕES DE MECÂNICA ESTATÍSTICA QUÂNTICA</p> <p>3.1 Sistemas de dois estados 3.2 Princípio de Pauli e Estatística de Fermi-Dirac 3.3 Estatística de Bose-Einstein 3.4 Equilíbrio de energia 3.5 Radiação de Corpo Negro</p> <p>Prática: Programas de Simulação em mecânica estatística</p> <p>IV - APLICAÇÕES DA MECÂNICA ESTATÍSTICA</p> <p>4.1 Entropia da mistura, 4.2 Gás ideal monoatômico, 4.3 Reações químicas 4.4 constantes de equilíbrio 4.5 Sólidos: Modelos de Einstein e Debye</p> <p>Prática: Simulação do comportamento da capacidade térmica de sólidos</p>
BIBLIOGRAFIA BÁSICA	1. McQUARRIE, D. A.; SIMON, J. T. Physical chemistry: A molecular approach, University Science Books, 1997.
BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR	4. MCQUARRIE, D. A.; Statistical Mechanics, University Science Books, 2 nd Revised edition, 2000. 5. GOODISMAN, J., Statistical Mechanics for Chemists, Wiley-Interscience, 1997. 6. DAVID CHANDLER; Introduction to Modern Statistical Mechanics, Oxford University Press, New York, 1987. 7. BENJAMIN WIDOM; Statistical Mechanics, A Concise Introduction for Chemists, Cambridge University Press, Cambridge, 2002. 8. SONTAG, R., VAN WYLEN, G. Fundamentals of statistical thermodynamics, Florida: RE Krieger Company, 1966,368p. 9. MOORE, W. J., Físico-Química, 2 vols. São Paulo, Ed. Edgard Blücher, 1977.