

IQU-707 Físico-Química Avançada (60 horas)

Ementa:

Postulados fundamentais da mecânica quântica. Partícula na caixa, oscilador harmônico, rotor-rígido. Átomo hidrogenóide. Métodos aproximados para resolver a equação de Schrödinger. Átomos polieletrônicos. Estrutura de moléculas diatômicas e poliatômicas. Leis da Termodinâmica. Potenciais termodinâmicos. Equilíbrio químico. Configurações e pesos estatísticos. Funções de partição. Ensemble canônico. Outros ensembles. Estatística de Boltzmann, Fermi-Dirac e Bose-Einstein. Tratamento do gás ideal e do equilíbrio químico pela termodinâmica estatística.

Bibliografia

1. Quantum Chemistry, 5a Ed., I. N. Levine, Prentice Hall, 739 pp., 2000.
2. Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics, 2a Ed, H. B. Callen, John Wiley & Sons, 493 pp., 1985.
3. Statistical Mechanics, D. A. Mcquarrie, University Science Books, Sausalito, California, 641 pp., 2000.