

Conteúdo Programático
Edital UFRJ nº 54, de 30 de janeiro de 2024

Haverá Prova Prática: () Sim (X) Não

Unidade: Instituto de Química

Código da Opção de Vaga	MC-119	Departamento ou Programa / Setorização Definitiva	Físico-Química / Físico-Química Experimental
Conteúdo Programático	<ol style="list-style-type: none">1. Leis da Termodinâmica. Trabalho, calor, energia interna e entalpia. Termoquímica. Entropia, energia livre de Helmholtz e energia livre de Gibbs. Entropias absolutas.2. Equilíbrio de fases para substâncias puras. Diagramas de fases.3. Termodinâmica das misturas e soluções. Grandezas molares parciais. Potencial químico. Soluções ideais e não ideais.4. Postulados da mecânica quântica e aplicações aos problemas com solução exata: partícula na caixa tridimensional, oscilador harmônico e rotor rígido. Átomo de hidrogênio.5. Teoria da perturbação dependente do tempo. Momento de dipolo de transição. Regras de seleção.6. Espectroscopia rotacional, vibracional e eletrônica de moléculas diatômicas. Correções anarmônicas. Acoplamento rovibracional. Princípio de Franck-Condon. Teoria de grupos aplicada a transições vibracionais e eletrônicas em moléculas. Transições vibrônicas.7. Espectroscopia de fotoelétrons: UPS e XPS. Espectroscopia de fotoabsorção.8. Cinética fenomenológica: definições, leis de velocidade, ordem de reação, leis de velocidade integradas e equação de Arrhenius.9. Reações complexas: reações reversíveis, consecutivas e competitivas. Aproximação do estado estacionário. Aproximação do pré-equilíbrio. Controle cinético e controle termodinâmico.10. Cinética química e mecanismos. Reações unimoleculares. Teoria do estado de transição.		