



**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO**  
**UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA**

**212050 – TERMODINÂMICA ESTATÍSTICA AVANÇADA APLICADA A SÓLIDOS E INTERFACES**

CRÉDITOS: 04 (quatro) – 60 horas/aula

**EMENTA:** Construção das expressões específicas de funções de partição e potenciais termodinâmicos para sólidos e gases. Simulações de potenciais termodinâmicos para adsorção molecular e quimissorção reativa. Teoria de Eyring: fundamentos e aplicações práticas. Inclusão de efeito solvente para problemas termodinâmicos de adsorção e reação. Dinâmica clássica aplicada aos compostos de intercalação e à difusão molecular em sólidos. Fundamentos e aplicações da técnica Monte Carlo Grande-Canônico.

**PROGRAMA:**

1. Revisão de conceitos de termodinâmica estatística;
2. Potenciais termodinâmicos para sólidos e gases;
3. Termodinâmica de adsorção e de reações entre gases e sólidos;
4. Efeito solvente e processos de troca iônica;
5. Diagramas de fase T x fração molar e outros diagramas de fase;
6. Processos em alta pressão, transformações de fase;
7. Termodinâmica de reações em alta pressão;
8. Fundamentos da mecânica clássica e dinâmica clássica;
9. Dinâmica clássica aplicada compostos lamelares intercalados;
10. Dinâmica clássica aplicada a compostos nanoporosos;
11. Fundamentos da simulação de Monte Carlo clássica;
12. Aplicação da metodologia Monte Carlo grande canônica no acúmulo de gases em materiais.

**BIBLIOGRAFIA:**

1. ATKINS, P.; DE PAULA, J. Físico-Química. 8ª Edição. Rio de Janeiro: LTC, 2008. Vol. 1. 592 págs. (ISBN: 8521616007).
2. SIMON, J. D.; MCQUARRIE, D. A. Physical Chemistry. Mill Valey, CA, USA: University Science Books, 1998. 1360 págs. (ISBN: 0935702997).
3. Artigos científicos recentes.
4. Manuais dos códigos utilizados.

**Prof. Dr. Renato Camargo Matos**  
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Química  
Universidade Federal de Juiz de Fora

---



Documento assinado eletronicamente por **Renato Camargo Matos, Coordenador(a)**, em 25/11/2022, às 18:11, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).

---



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Ufjf ([www2.ufjf.br/SEI](http://www2.ufjf.br/SEI)) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **1013412** e o código CRC **202EFCD7**.

---