



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

PPGEQ0043 - Tópicos Especiais em Engenharia Química: Solvatação.

(CH = 45 h, Cr = 3)

Formulação termodinâmica para solvatação, energia livre de solvatação, cavitação, energia de cavitação, energia de van der Waals, geometria molecular em solutos, energia de dispersão, modelos de solvatação, dinâmica de solvatação

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

1)R. Christian, W. Thomas, Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry, New York, 2010. 2)M. Benedetta, C. Roberto, Continuum Solvation Models in Chemical Physics: From Theory to Applications, New York, 2007. 3)H. Fumio, Molecular Theory of Solvation, New York, 2003. 4)M.H. Nelson; C. Kaline, Métodos de química teórica e modelagem molecular. São Paulo, 2007.