

# QUÍMICA FÍSICA A

## 2022/2023

Prof. Ana Aguiar Ricardo, Gab. 536A, Ext. 10980 (air@fct.unl.pt)  
Prof. João Carlos Lima, Gab. 428, Ext. 10922 (sotomayor@fct.unl.pt)  
Doutor José M. Esperança, Gab. 322, Ext. 10930 (jmesp@fct.unl.pt)

Técnicos de Laboratório de QF , Lab 421 e Lab 423  
D. Idalina Martins  
Lic. Carlos Rodrigues

## 1) Parte teórica

- a) nota de 3 testes ou exame final. O teste 1 (Cinética Química e Dinâmica Reacional), o teste 2 (Química Física de Superfícies) vale 30% da nota teórica vale 30% da nota teórica, o teste 3 (Espectroscopias) vale 40% da nota teórica. O exame final vale 100% da nota teórica. A nota teórica tem um peso de 70% na nota final da unidade curricular
- b) Para aprovação a nota final da parte teórica terá de ser  $\geq 9,5$  val.
- c) Avaliações:
  - 1º teste a 29 de março
  - 2º teste a 29 de abril
  - 3º teste a 9 de Junho

## 2) Parte prática

Frequência das 4 sessões de laboratório (4 trabalhos práticos), conforme plano pré-estabelecido. Durante a sessão prática os docentes irão avaliar a preparação do aluno.

Entrega e discussão de 1 relatório referente a um dos trabalhos práticos realizados.

Os valores obtidos em cada uma das sessões de laboratório serão entregues na altura e os respetivos cálculos terão de ser entregues via mail até 1 (uma) semana após a execução de cada trabalho prático.

Na discussão do relatório entregue haverá um sorteio de uma pessoa do grupo para fazer uma exposição de até 10 minutos sobre o trabalho. O resto da discussão será não só sobre o relatório entregue como também do outro trabalho realizado no laboratório.

A nota laboratorial tem um peso de 30% na nota final da cadeira.

As notas práticas têm a validade **apenas** no ano letivo em que foram obtidas.

Uma nota prática obtida por um aluno em 2021/2022 só terá validade neste ano letivo, mantendo-se no entanto válida a Frequência à unidade curricular. Atenção, nos casos em que a aprovação teórica é obtida num ano posterior à frequência prática, a nota final será dada somente pela nota da teórica.

# Conteúdo Programático

Semana	Data	Tópicos	Professor	Data	Laboratórios	
1	03-Mar Aula 1	Genética química. Revisões. Métodos de determinação de ordem de equações cinéticas.	AAR			
2	06-Mar Aula 2	Genética Química - Mecanismos complexos; aproximação de estado estacionário.	AAR	09-Mar	P1	P2
	10-Mar Aula 3	Reações explosivas cinéticas rápidas	AAR			
3	13-Mar Aula 4	Dinâmica da Reação Química: teorias existentes. Teoria das colisões: pressupostos, dedução e críticas.	AAR	16-Mar	P3	P4
	17-Mar	Dinâmica da Reação Química. - Secção reta de colisão e secção reta de reação. Factor p. Mecanismo de arção para valores de $p > 1$ . - Exercícios de aplicação. Teoria do Complexo Activado: pressupostos e dedução da teoria. Curvas de potencial. Exemplos e cálculo dos parâmetros termodinâmicos do estado de activação: $\Delta H^\ddagger$ , $\Delta G^\ddagger$ , $\Delta S^\ddagger$ . Comparação da Teoria do Complexo Activado com a Teoria das Colisões.				
4	20-Mar	Aplicações da Teoria do Complexo Activado: cálculo de $\Delta S^\ddagger$ , caso da reação entre iões e dependência com a força iónica. Dependência da constante dielétrica do solvente, cálculo de $DV^\ddagger$ , caso da reação entre átomos e comparação com a Teoria das Colisões. Exercícios de aplicação.	AAR	23-Mar	P1	P2
	24-Mar Aula 6	Fenómenos ligados à Química Física das superfícies. Interfaces. Interfaces líquidas. Tensão superficial. Equação de Laplace. Equação de Kelvin. Ascensão e depressão capilares. Exercícios de aplicação.	AAR			
5	27-Mar Aula 8	Revisões CQ e DR	AAR	30-Mar	P3	P4
	29-Mar	1º Teste				
	31-Mar Aula 10	Dependência da tensão superficial com a temperatura. O Parácor. Ângulos de contacto. Tensões interfaciais $\gamma_{SV}$ , $\gamma_{LV}$ , $\gamma_{SL}$ . Trabalho de adesão e de coesão. Equação de Young e Young Dupré. Molhabilidade. Adsorção em superfícies líquidas. Excesso superficial. Exercícios de aplicação.	AAR			
6	03-Apr Aula 11	Adsorção em superfícies líquidas. Excesso superficial. Adsorção positiva e adsorção negativa. Isotérmica de adsorção de Gibbs. Pressão superficial. Filmes de Langmuir. Estruturas em monocamadas em interfaces. Exercícios de aplicação.		13-Apr	P1	P2
	14-Apr Aula 12	Filmes de Langmuir-Blodgett. "Self assembling" – auto-organização de moléculas. Micelas, micelas invertidas e vesículas. Tensioativos. Exercícios de aplicação.	AAR			
7	17-Apr Aula 13	Superfícies sólidas. Adsorção física versus adsorção química. Tipos de isotérmicas. Isotérmica de Langmuir. Exercícios de aplicação. Determinação da variação da entalpia de adsorção.	AAR	20-Apr	P3	P4
	21-Apr Aula 14	Adsorção competitiva. Adsorção com dissociação. Isotérmica BET. Catálise heterogénea e seus mecanismos: mecanismo unimolecular, mecanismo de Rideal e mecanismo bimolecular. Exercícios de aplicação.	AAR			
8	24-Apr Aula 15	Revisões: Tensão superficial, Adsorção, Catálise homogénea e Catálise Heterogénea	AAR	04-May		
	28/04/2023 Aula 16	Equação de valores próprios. Aproximação de Born-Oppenheimer. Método das Perturbações e Método das variações. Aproximação de Huckel do Método de CLOA. Determinante Secular. Caso do etileno. Cálculo de energias e de coeficientes de função de onda. O determinante secular para o caso do Butadieno. Energia de ressonância. A molécula do benzeno	JCL			
	29-Apr	2º Teste			P3	P4

9	05-May 24-feira	Não há aula de QFA				
10	08-May Aula 17	Tabelas multiplicativas. Construção das tabelas multiplicativas. Classes de simetria. Representação matricial das operações de simetria. Bases de operações de simetria. Representações redutíveis e irredutíveis. Traço e ordem das representações. Notação das representações irredutíveis. Obtenção das representações redutíveis através da soma de representações irredutíveis	JCL	11-May	DISCUSSÕES	DISCUSSÕES*
	12-May Aula 18	Aplicação da simetria molecular à hibridação de orbitais. Caso das ligações sigma do BF <sub>3</sub> . Exemplo das hibridações possíveis das ligações duplas para uma molécula de simetria D <sub>3h</sub> . Representação esquemática da simetria das orbitais usadas para a formação das ligações covalentes numa molécula de água e de amoníaco.	JCL			
11	15-May Aula 20	Aplicação da simetria molecular ao estudo das vibrações moleculares. Graus de liberdade e modos normais de vibração. O caso do ião sulfato.	JCL	18-May	DISCUSSÕES	DISCUSSÕES*
	19-May Aula 21	Aplicação da simetria molecular ao estudo das vibrações moleculares. Graus de liberdade e modos normais de vibração. O caso do ião sulfato	JCL			
12	22-May Aula 22	Espectroscopia Rotacional. Modelo do rotor-rígido. Momentos de inércia e angular. Energia rotacional. O modelo segundo a mecânica clássica e a mecânica quântica. Regras de seleção. Riscas observadas. Distorção centrífuga. Moléculas poliatómicas lineares e não lineares de eixo simétrico. Cálculo dos momentos de inércia e previsão de espectros rotacionais.	JCL			
	26-May Aula 23	Espectroscopia vibracional. Modelo do oscilador harmónico linear. Energia vibracional. O modelo segundo a mecânica clássica e a mecânica quântica. Regras de seleção. Anarmonicidade. Espectroscopia vibracional-rotacional: regras de seleção e riscas observadas	JCL			
13	29-May Aula 24	Espectroscopia de Raman: método e aparelho. Regras de seleção. Espectroscopia de Raman rotacional e vibracional-rotacional. O princípio de exclusão mútua. Espectroscopia eletrónica. Diagramas de Jablonski. Absorção, fluorescência e fosforescência. Princípio de Franck-Condon.	JCL			
	01-Jun Aula 25	Espectroscopia electrónica. Tipos de transição. Regras de selecção e violação dessas regras. Distinção entre as transições n-p* e p-p*. Princípio de Franck-Condon. Lasers.	JCL			
14	05-Jun Aula 26	Revisões e exercícios de aplicação.	JCL			
	09-Jun	3º Teste				

\*Discussões nos horários dos turnos práticos

## Trabalhos Práticos

(CQ) – Cinética da redução do corante azul de toluidina pelo ião sulfito – obtenção da lei cinética, efeito da força iónica, da temperatura e do catalisador

(Cat Het) – Hidrólise ácida de ésteres com catálise heterogénea – catálise através de resinas de permuta iónica a funcionar no ciclo de  $H^+$

(Tens) - Medidas de tensiometria e de ângulos de contato – obtenção de CMC de tensioativos e relacionamento com a sua estrutura química

(Ads Ac) - Adsorção de corantes em carvão – obtenção de uma isotérmica de adsorção segundo a teoria de Langmuir

Toda a informação em : <http://moodle.fct.unl.pt>

Disciplina: Química Física A 2022/2023

Password: QFA\_22/23

<https://moodle.fct.unl.pt/course/view.php?id=8143>

Horário de dúvidas: a definir