



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA
PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA



1º Semestre - 2019

Disciplina	
Código	Nome
QF637	Introdução à Espectroscopia e à Termodinâmica Estatística

Turmas	Horário	Local
A	Seg: 16-18; Qua: 8-10	IQ03

Disponível em <https://www.iqm.unicamp.br/gradua%C3%A7%C3%A3o>

Docentes
Leandro Martínez - leandro@iqm.unicamp.br - Sala H312

Critérios de Avaliação e Aprovação
<p>A disciplina contará com duas provas, cada uma correspondente a um dos tópicos: Espectroscopia ou Termodinâmica Estatística. Para ser aprovado sem a realização do EXAME, o aluno deve ter nota maior ou igual a 3,0 em ambas as provas, e média aritmética de provas maior ou igual a 5,0.</p> <p>Em caso de aprovação direta, a média de avaliações do aluno será a média aritmética das provas.</p> <p>Caso o aluno tenha que fazer exame em função das notas das provas, a média de avaliações será a média aritmética da nota do exame com a média aritmética das notas das provas.</p> <p>O Exame abarcará todo o conteúdo da disciplina, mesmo que o aluno tenha obtido nota maior que 5,0 em um dos tópicos.</p> <p>Por fim, a disciplina conta com uma lista de exercícios para cada tópico. As listas devem ser feitas a mão e entregues, e receberão uma nota de 0 a 10, em função da quantidade de exercícios feitos. Para cada 2 exercícios que não foram feitos com cuidado, a nota cai 1 ponto.</p> <p>A nota final da disciplina será calculada pela média geométrica da nota da lista com a média de avaliações. Se a nota final for maior ou igual a 5,0, o aluno será aprovado. Se for menor que 5,0, o aluno será reprovado.</p> <p>As provas serão entregues corrigidas, e sua resolução será discutida nos dias reservados no cronograma, exclusivamente.</p> <p>Notas, exercícios e informações adicionais: http://leandro.iqm.unicamp.br, no link "Material Didático".</p>

Calendário

Cronograma		
Mês	Dia	Atividade
Fevereiro	27	Apresentação/Aula
Março	4,6	Feriado
	11,13,18,20,25,27	Aulas
Abril	1,3,8,10,15,17,22,24,29	Aulas
Maio	1	Feriado
	6	Prova 1
	8	Correção da Prova 1 / Aula
	13,15,20	Aulas
	22	Não haverá aula.
	27,29	Aulas
	3,5,10,12,17,19,24,26	Aulas
Junho	24	Prova 2
	26	Correção da Prova 2
Julho	1 - 6	Semana de Estudos
	8	Exame

Outras informações relevantes

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

Disciplina	
Código	Nome
QF637	Introdução à Espectroscopia e à Termodinâmica Estatística

Vetor
OF:S-1 T:004 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:004 SL:004 C:004 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req	QF536 *F 428
---------	--------------

Ementa
Espectroscopia molecular. Espectroscopia de ressonância paramagnética de elétrons (ERP) e magnética nuclear (RMN). Lasers. Fotoquímica. Ensembles e postulados. Funções de partição e termodinâmica. Sistemas de partículas independentes: distinguíveis e indistinguíveis.

Programa
<p>I. As propriedades dos gases. Equação de estado para um gás perfeito e as relações entre pressão, volume e temperatura. Mistura de gases; pressões parciais. Gases reais: fator de compressão; constantes críticas; Equação de Van der Waals.</p> <p>II. Princípios da Termodinâmica. Conceitos básicos: calor, trabalho, energia. Funções de estado. A 1ª Lei da Termodinâmica; energia interna. Processos adiabáticos e isotérmicos. Capacidades caloríficas. Termoquímica. Entalpia de reação, de formação, de mudança de estado e de solução. Influência da temperatura na entalpia da reação. A 2ª Lei. Escala termodinâmica de temperatura. Entropia. Variação da entropia em sistemas isolados e nas vizinhanças. Variações de entropia para um gás ideal e em transições de fase. A 3ª Lei da Termodinâmica. Funções de Gibbs e de Helmholtz. Critério para espontaneidade. Trabalho máximo. Combinação das Leis da Termodinâmica: relações de Maxwell. Influência da temperatura e da pressão na energia de Gibbs.</p> <p>III. Soluções. Mudanças de estado de substâncias puras, misturas e diagramas de fase Potencial químico. Sistemas abertos e variações na composição. Fases e componentes. Diagrama de fases para um componente. Misturas simples; quantidades molares parciais. Solução ideal. O potencial químico de líquidos. Solubilidade de gases em líquidos. Propriedades coligativas. Sistemas com 2 componentes. Diagramas pressão-composição e temperatura-composição. Destilação. Variação da pressão de vapor com temp. e pressão. Diagramas L-L, L-S; eutéticos. Soluções sólidas.</p> <p>IV. Equilíbrio químico Equilíbrio químico e a energia de Gibbs. Equilíbrio para um gás ideal. Equilíbrio em sistemas não ideais; gases reais; fugacidade, atividade. Relação entre as constantes de equilíbrio. Influência da temperatura e pressão. Equilíbrios químicos envolvendo fases condensadas.</p> <p>V. Cinética química</p>

Velocidade das reações químicas. Ordem de reação. Equações integradas; reações de 1ª e 2ª ordem; constantes de velocidade; tempo de meia-vida. Influência da temperatura na velocidade de reação.

Mecanismos. Reações elementares. Reações consecutivas. Etapa determinante da velocidade. Aproximação do estado estacionário. Pré-equilíbrio. Energia de ativação

Teoria das colisões; requisitos de energia e estéricos. Teoria do complexo ativado.

Catálise; mecanismos. Enzimas. Cinética de reações enzimáticas. Mecanismo de Michaelis-Menten.

Bibliografia

Peter W. Atkins & Júlio de Paula. *Physical-Chemistry* (7th edition). Oxford University Press, 2002. (as edições anteriores também são indicadas).

Walter J. Moore. *Físico-Química* (Tradução da 4a. edição americana). Editora Edgard Blucher Ltda., 1976.

Paulo A. Netz & George G. Ortega. *Fundamentos de Físico-Química: uma abordagem conceitual para as ciências farmacêuticas*. ArtMed Editora, 2002.

Critérios de Avaliação

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)