



**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><b>I. As propriedades dos gases.</b> 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><b>II. Princípios da Termodinâmica.</b> 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><b>III. Soluções. Mudanças de estado de substâncias puras, misturas e diagramas de fase</b> 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><b>IV. Equilíbrio químico</b> 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><b>V. Cinética química</b></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)