NOME	TERMODINÂMICA E CINÉTICA AVANÇADA
Carga horária	10 créditos - 150 h
Docente Responsável	Prof. Luciano Caseli
SIGLA	CTS16
Obrigatória	SIM
Ementa	O objetivo geral deste curso é apresentar fundamentos de Termodinâmica e Cinética Química, aplicadas a transformações químicas e físicas elementares, processos industriais e bioquímicos, partindo de uma abordagem molecular. Módulo 1: Desenvolvimento da Termodinâmica a partir da função da Partição - Função de partição e Gases Ideais - Função de partição para estados eletrônicos e vibracionais Leis da termodinâmica – sistemas macroscópicos x microscópicos Módulo 2: Aplicações da Termodinâmica - Leis da Termodinâmica aplicada a processos industriais - Energia de Gibbs aplicada à formação de proteínas e membranas biológicas. - Aplicações da Termodinâmica a Equilíbrio de Fases - Descrição Termodinâmica das Misturas - Termodinâmica Envolvendo transporte de cargas - Bioenergética: transferência de elétrons. - Aplicações da Termodinâmica ao Equilíbrio Químico - Termodinâmica aplicada a sistemas coloidais e Interfaces Módulo 3: Termodinâmica de Processos Irreversíveis - Produção de entropia - Relação entre reações químicas e processos de difusão - Princípio de entropia mínima no estado estacionário - Estruturas Dissipativas - Caos Químico Módulo 4: Cinética Química - Fundamentos e Técnicas Experimentais para determinar velocidades de reações - Leis de velocidade de reações e constantes cinéticas, resposta à Temperatura - Superfícies de Energia Potencial - Cinética farmacológica: estudo de casos. - Mecanismos de reações: reações elementares e consecutivas, casos complexos - Estudo de casos: 1) Enovelamento de proteínas, 2) Catálise por enzimas controladas por difusão - Superfícies de Energia Potencial - Dinâmica de reações: teoria de colisões, e do estado de transição - Estudo de casos: 1) Efeito de sais em cinética química, 2) colisões moleculares de gases - Estudo de casos: 1) Transporte através de biomembranas, 2) Transferência de elétrons em sistemas biológicos (relação cruzada de Marcus)
Bibliografia	1. Thermodynamics and Kinetics for Biological Sciences, G. Gordon, Wiley-Interscience, 2000, ISBN-10: 0471374911

	2. Thermodynamics and Kinetics in Material Science – A short Course, B.S. Bokstein, M.I. Mendelev, D.J.Srolovitz, Oxford University Press, 2005, ISBN-10: 0198528043 3. Chemical Kinetics and Dynamics, J.I.Steinfield, J.S.Francisco, W.L.Hase, Prentice Hall, 1998, ISBN-10: 0137371233 4. Statistical Mechanics, D.A. McQuarrie, University Science Books, 2000, ISBN-10: 1891389157 5. Physical Chemicistry: A molecular approach, D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Sausalito: University Science Books, 1997, ISBN-10: 0935702887 6. Físico-Química Biológica, P. Atkins, J. de Paula, Rio de Janeiro: LTC, 2008, ISBN-10: 9788521616238 7. Reaction Kinetics, M.J.Pilling, P.W .Seakins, Oxford Science Publications, 2005, ISBN-10:019855527X 8. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química, J.M. Smith, H.C. Van Ness, M.M.Abbott, LTC, 7ª ed., 2007, ISBN-10: 9788521615538 9. Thermodynamics, E. Fermi, Dover Publications, 2000, ISBN-10: 1607962381 10. Thermodynamics, Statistical Thermodynamics, & Kinetics, T. Engel, P. Reid, Prentice Hall, 3ª ed., 2012, ISBN-10: 0321766180
Docentes envolvidos	1. Luciano Caseli 2. Carolina Vautier Teixeira Giongo 3. Romilda Fernandez Felisbino 4. João Lago 5. Alexandre Keiji Tashima 6. Leonardo José Amaral de Siqueira