

Nome: Física Estatística de Líquidos e Soluções – teoria, modelos e experimento

Objetivos:

Introdução à física estatística de modelos de líquidos simples e de biomoléculas e seus agregados em solução, neutra ou iônica, em conexão com resultados experimentais.

Justificativa:

A física estatística de líquidos complexos é utilizada em áreas diferentes de pesquisa do IFUSP, tanto teóricas, como experimentais. A teoria de líquidos simples ou soluções moleculares não faz parte do programa da disciplina de Mecânica Estatística, obrigatória na graduação. No entanto, a teoria de líquidos simples, como também a de soluções iônicas assimétricas tem sido retomada nos estudos teóricos, acompanhando o rápido crescimento de simulações numéricas de líquidos atômicos e moleculares e o interesse crescente na biofísica molecular.

Conteúdo:

1. Biomoléculas, proteínas e membranas - experimentos e modelos
2. Teoria de líquidos simples
 - Estrutura de líquido: função de distribuição radial e sua relação com a intensidade da luz espalhada por técnicas de espalhamento em diferentes comprimentos de onda (raio X e luz visível)
 - Modelos estatísticos “grão grosso” para líquidos simples e propriedades térmicas
 - Equações integrais e relações de fechamento.
3. Teoria de líquidos iônicos
Interação Coulombiana e abordagens analíticas: Poisson-Boltzmann, aplicações e aproximações - Debye-Huckel, Guy-Chapman, modelo de dupla camada.
Interação DLVO e adaptações.
4. Modelos estatísticos para biomoléculas e agregados – 4 semanas
 - a. Modelo mínimo para solução iônica simétrica (rede e contínuo)
 - b. Modelo mínimo para solução iônica assimétrica – coloides
 - c. Explorando dados experimentais na perspectiva dos modelos estatísticos

Seminários orientados – 3 semanas

Bibliografia:

Líquidos simples

- T.L. Hill, “An Introduction to Statistical Thermodynamics”, Dover 1960 e 1986
- D.L. Goodstein, “States of Matter”, Dover 1975 a 1985
- J.P. Hansen e I.R. McDonald, “The Theory of Simple Liquids”, 2nd ed., Academic Press, 1986

- Donald A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Univ Science Books, 2000

Líquidos iônicos

- E.J. Verwey e J.Th.G. Overbeek, Theory of Lyophobic Colloids, Dover, 1999

- T. Markovich, D. Andelman, and R. Podgornik, Charged Membranes: Poisson-Boltzmann theory, DLVO Paradigm and Beyond, in Handbook of Lipid Membranes: Molecular, Funcional and Material Aspects, C. R. Safinya and J. O. Raedler, eds, Taylor and Francis (2021)

Biofísica Molecular e colóides

- M.V. Volkenstein, "Biophysics", Mir 1983

- M. Daune, "Molecular Biophysics", Oxford, 1999

- Robert J. Hunter, Foundations of colloid Science, 2nd ed, Oxford 2001

- Notas de aula e artigos da literatura científica

Forma de avaliação:

Seminários e trabalho escrito.

Para quem: estudantes de pós-graduação das áreas de Física, Química, Engenharia envolvidos com o tema.

Observação:

PRÉ-REQUISITOS: Mecânica Estatística.

Carga horária:

Total: 180 h

Teórica: 4 h

Prática: 0 h

Estudo: 8 h

Créditos: 12

Duração: 15 Semanas