

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: TERMODINÂMICA QUÍMICA I

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: QUÍMICA - ESTRUTURA, CÁLCULO II E FÍSICA II.

Público-alvo: Bacharelado em Química e Licenciatura em Química

OBJETIVOS: Formular um modelo ideal do comportamento dos gases para estudar suas propriedades. Apresentar modelos empíricos para gases reais. Comparar e contrastar o comportamento de gases reais com o comportamento de um gás ideal. Introduzir conceitos de interação molecular. Apresentar um modelo cinético para o comportamento de gases ideais baseado em velocidades moleculares. Introduzir e discutir as leis da termodinâmica, suas conceituações e os seus formalismos matemáticos. Definir as funções de estado termodinâmicas e suas inter-relações. Introduzir conceitos termoquímicos e aplicá-los na previsão de calor de reação, estabilidade termoquímica e energias médias de ligação. Correlacionar as propriedades termodinâmicas com a estrutura molecular de substâncias sólidas, líquidas e gasosas. Apresentar uma visão molecular da entropia. Caracterizar o estado de equilíbrio termodinâmico e deduzir a equação fundamental da termodinâmica. Aplicar conceitos de equilíbrio para reações químicas. Verificar como o estado de equilíbrio termodinâmico é perturbado. Usar as perturbações no equilíbrio químico para maximizar o rendimento de uma reação. Iniciar o uso de ferramentas computacionais para resolução de problemas numéricos e algébricos.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS Compreender o modelo de gases ideais e aplicá-lo em problemas de química. Diferenciar o comportamento de um gás ideal e um gás real. Destacar o papel das interações moleculares nas propriedades dos gases reais. Calcular a distribuição das velocidades moleculares para um gás usando a distribuição de Maxwell-Boltzmann. Identificar e calcular as várias formas de trabalho. Formular as leis da termodinâmica, avaliando as transformações termodinâmicas baseadas nessas leis. Entender a visão molecular da entropia. Calcular a entalpia, energia livre e entropia de reação a partir de dados termoquímicos. Relacionar as propriedades termodinâmicas dos compostos com sua estrutura molecular. Verificar o efeito da temperatura nas propriedades termoquímicas das substâncias. Derivar as equações de Gibbs a partir de transformadas de Legendre. Entender a visão microscópica da entropia. Compreender espontaneidade e reversibilidade de uma transformação. Identificar o estado de equilíbrio termodinâmico e derivar as suas expressões. Entender como o estado de equilíbrio pode ser perturbado. Calcular concentrações, atividades e pressões parciais de substâncias no estado de equilíbrio. Prever o sentido de uma reação química após o estado de equilíbrio ser perturbado. Aplicar a equação de van't Hoff. Usar programas computacionais na resolução de problemas numéricos e algébricos.

EMENTA/PROGRAMA

INTRODUÇÃO

Variáveis de estado : Volume, temperatura, pressão. Conceitos, notações e unidades.

GASES

1. Gases ideais: Lei de Boyle, lei de Gay-Lussac, e princípio de Avogadro. Equação de estado, superfície P-V-T para um gás ideal, mistura de gases, lei de Dalton, lei de Amagat, lei de Graham, determinação de massas moleculares.
2. Gás real: equação de van der Waals, isotermas de um gás de van der Waals, constantes críticas, outras equações de estado. Princípios dos estados correspondentes. Conceitos de interação molecular.
3. Teoria Cinética Molecular dos Gases: hipóteses fundamentais, cálculo da pressão de um gás, energia cinética e temperatura, distribuição de velocidades e energias moleculares, parâmetros de colisão.

TERMODINÂMICA QUÍMICA

1. Objetivos, métodos e limitações, conceitos básicos: propriedades, calor e trabalho, energia interna, processos reversíveis e irreversíveis, função de estado, diferencial exata e inexata, equilíbrio térmico e lei zero da termodinâmica.
2. Primeira lei da termodinâmica: bases empíricas, natureza da função energia interna, aplicações a gases ideais, processos a volume e à pressão constantes, isotérmicos e adiabáticos, função entalpia, capacidade térmica a volume e à pressão constantes. Calor e trabalho a nível molecular.
3. Termoquímica: medidas calorimétricas, calor de reação, estado padrão, calor de reação a volume e à pressão constantes, lei de Hess, dependência do calor de reação com a temperatura, calor de combustão, calor de neutralização, calor de solução e diluição, entalpia e energia de ligação. Ciclos de Haber-Born.

4. Segunda lei da termodinâmica: necessidades, natureza e origem, a função entropia, desigualdade de Clausius, variação de entropia em sistemas isolados, entropia como critério de equilíbrio em sistemas isolados, cálculo da variação de entropia para gases ideais e mudanças de fase. Interpretação molecular da entropia, distribuição de Boltzmann.

5. Terceira lei da termodinâmica: entropias absolutas, variação de entropia nas reações químicas.

ESPONTANEIDADE E EQUILÍBRIO

1. Condições gerais de equilíbrio e espontaneidade, energia livre de Gibbs e de Helmholtz, suas propriedades e seus significados, dependência da energia livre com a pressão e a temperatura. Relações de Maxwell.

2. Energia livre dos gases ideais, desvio do comportamento ideal, conceito de fugacidade e atividade.

3. Resumo das equações termodinâmicas para sistemas fechados de composição constante.

4. Definição de potencial químico e suas propriedades, aplicação para gases ideais puros e em misturas. A equação fundamental da termodinâmica.

EQUILÍBRIO QUÍMICO

1. Expressão geral de equilíbrio químico, a constante de equilíbrio e sua determinação experimental.

2. Equilíbrio homogêneo, reações de gases ideais e gases reais, dependência da constante de equilíbrio com a pressão e temperatura, equação de van't Hoff.

METODOLOGIA

Aulas expositivas e de exercícios. Uso de programas específicos para resolução de problemas. Apresentação de seminários.

AVALIAÇÃO

Realização de exercícios e seminários, provas escritas e participação nas aulas.

BIBLIOGRAFIA

1. ATKINS, P. W., "Físico-Química", 7ª Ed., Vol. I, Ed. LTC: R. de Janeiro, 2003.

2. LEVINE, I. N., "Physical Chemistry", 5ª Ed., McGraw-Hill, N.Y., 2001.

3. BARROW, G. M., "Physical Chemistry", 6ª Ed., McGraw-Hill, N.Y., 1996.

4. MCQUARRIE, D.A., SIMON, J.D., "Physical Chemistry: A Molecular Approach", University Science Books, N.Y., 1997.

5. CASTELLAN, G., "Fundamentos de Físico-Química", Livros Téc. e Cient. Ed. 1989.

6. ALBERTY, R. A., SILBEY, R. J., "Physical Chemistry", 2ª Ed., J. Willey, N.Y., 1996.

7. A.P. CHAGAS, "Termodinâmica Química", Ed. Unicamp, Campinas, 1999.

8. CROPPER, W.H., "Mathematica Computer Programs for Physical Chemistry", Springer, 1998.

9. ANDRADE L. N., "Introdução à Computação Algébrica com o MAPLE", 1ª Ed., Sociedade Brasileira de Matemática, 2004.