



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
Centro de Ciências Físicas e Matemáticas
Departamento de Química
Programa de Pós-Graduação em Química
Campus Universitário-Trindade - 88040-900 - Florianópolis - SC - Brasil
Fone: (048) 3721-6849 - Fax: +55 48 3721 6850 - E-mail: ppgqmc@contato.ufsc.br

SEMESTRE 2016.2

I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	Nº DE HORAS-AULA SEMANAIS		TOTAL DE HORAS-AULA SEMESTRAIS
		TEÓRICAS	PRÁTICAS	
QMC3426	Físico-Química	04	0	72

I.1. HORÁRIO

TURMAS TEÓRICAS

Terça-feira: 08:20 – 10:00h (Sala PG1) e Quinta-feira: 08:20 – 10:00h (Sala PG1)

II. PROFESSOR (ES) MINISTRANTE (S)

Prof. Giovanni Finoto Caramori - e-mail: giovanni.caramori@ufsc.br

III CURSO (S) PARA O QUAL(IS) A DISCIPLINA É OFERECIDA

Programa de Pós-Graduação em Química

IV. EMENTA

Gases ideais e reais. Princípio dos estados correspondentes. As leis da termodinâmica. Energia Livre e Equilíbrio Químico. Noções de Termodinâmica estatística: leis de distribuição, funções de partição, entropia estatística, cálculo de funções termodinâmicas. Equilíbrios de fase, Soluções

V. OBJETIVOS

Gerais: Com base nos conhecimentos adquiridos durante o curso, o aluno deverá ser capaz de :
Enunciar e comentar os principais conceitos estudados; Aplicar os princípios da Termodinâmica a diferentes tipos de transformações; Reconhecer os problemas específicos em físico-química; Resolver problemas sobre os temas desenvolvidos.

Específicos:

Relacionar leis e propriedades gerais dos gases; Definir gás ideal; Mostrar como foi obtida a equação de estado do gás ideal; Descrever as diferenças entre as propriedades de um gás real e do gás ideal. Enunciar os princípios básicos da termodinâmica em termos de sua fundamentação teórica; Desenvolver as equações que inter-relacionam ΔU , ΔH , ΔS , ΔG e outras funções termodinâmicas; Aplicar os princípios da termodinâmica à diferentes tipos de transformações, as quais são submetidos os sistemas; Aplicar as equações fundamentais da termodinâmica para calcular as trocas de energia do sistema com o meio. Enunciar os critérios termodinâmicos de equilíbrio e espontaneidade; Predizer os efeitos da temperatura e da pressão sobre a energia livre de Gibbs; Deduzir e operar relações matemáticas que envolvam as equações fundamentais da termodinâmica nas condições de equilíbrio; Conceituar potencial químico e calcular o mesmo para sistemas termodinâmicos em equilíbrio; Descrever os critérios de espontaneidade para que uma transformação termodinâmica ocorra naturalmente. Aplicar funções estatísticas na interpretação de fenômenos estudados em termodinâmica tais como movimentos moleculares e processos no equilíbrio. Além de aplicar os conceitos obtidos para o entendimento de equilíbrios entre fases, soluções e propriedades coligativas

VI. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1. Propriedade dos Gases

- 1.1. O comportamento dos gases ideais
 - 1.1.1. *Leis e propriedades dos gases*
 - 1.1.2. *Definições: pressão, temperatura, princípio zero.*
- 1.2. Gases reais
 - 1.2.1. *Desvios do comportamento ideal: interações moleculares, fator de compressibilidade, coeficientes do virial, coordenadas críticas.*
 - 1.2.2. *As equações de estado de van der Waals e Redlich-Kwong*
 - 1.2.3. *O Princípio dos estados correspondentes e outras equações de estado*
 - 1.2.4. *Teoria cinética dos gases*

2. A Primeira Lei da Termodinâmica:

- 2.1. Conceitos fundamentais: trabalho, calor e energia, transformações reversíveis e irreversíveis
- 2.2. Trocas térmicas: calorimetria
- 2.3. Entalpia e termoquímica
 - 2.3.1. *Transformações a volume constante e a pressão constante*
 - 2.3.2. *Transformações adiabáticas*
 - 2.3.3. *Dependência da entalpia com a temperatura: compressibilidade isotérmica e o efeito Joule-Thomson.*
 - 2.3.4. *Entalpias padrão de formação.*
- 2.4. Capacidades caloríficas a pressão e volume constantes
- 2.5. Funções de estado: diferenciais exatas e não-exatas
- 2.6. Energia interna: a experiência de Joule

3. Segunda e Terceira Leis da Termodinâmica

- 3.1. A segunda lei da termodinâmica
 - 3.1.1. *O sentido da mudança espontânea*
 - 3.1.2. *Entropia: definição termodinâmica*
 - 3.1.3. *O Ciclo de Carnot: máquinas térmicas*
 - 3.1.4. *A desigualdade de Clausius*
 - 3.1.5. *Propriedades da entropia*
- 3.2. A Terceira lei da termodinâmica
 - 3.2.1. *Teorema do calor de Nernst*

4. Energia Livre e Equilíbrio Químico

- 4.1. As energias de Helmholtz e de Gibbs
 - 4.1.1. *A energia livre de Gibbs: Propriedades e variação com T e P para gases, sólidos e líquidos*
 - 4.1.2. *Energia de Gibbs molar padrão*
 - 4.1.3. *A energia livre de Helmholtz : Definição e propriedades*
- 4.2. Propriedades da energia Interna: relações de Maxwell
- 4.3. Reações química espontâneas
 - 4.2.2. *A energia de Gibbs de reação*
 - 4.2.3. *A descrição do equilíbrio*
 - 4.2.4. *Resposta do equilíbrio à pressão e temperatura*
 - 4.2.5. *A equação de Van't Hoff*

5. Termodinâmica Estatística

- 5.1. Macro e Micro estados de um sistema
- 5.2. Probabilidade termodinâmica e entropia
 - 5.2.1. *Lei de distribuição de velocidades moleculares: distribuição de Maxwell Boltzmann*
- 5.3. Função de partição de um gás ideal e tipos de movimentos moleculares
- 5.4. Funções termodinâmicas e constantes de equilíbrio
- 5.5. Níveis de Energia e Degenerescência

6. Equilíbrio de fases

- 6.1. Diagrama de fases.
- 6.2. Energia livre de Gibbs e diagramas de fases.
- 6.3. Potenciais químicos.
- 6.4. Equação de Clausius-Clapeyron.

7. Soluções Líquido-líquido

- 7.1. Quantidades molares parciais.
- 7.2. Equação de Gibbs-Duhem.
- 7.3. Lei de Raoult.
- 7.4. Soluções não-ideais

8. Soluções Sólido-líquido

- 8.1. Lei de Henry.

- 8.2. Atividade de solutos não-voláteis.
- 8.3. Propriedades coligativas.
- 8.4. Soluções de eletrólitos
- 8.5. Teoria de Debye-Hueckel e suas extensões

VII. METODOLOGIA DE ENSINO / DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA

Os recursos básicos utilizados serão aulas teóricas expositivas, as quais empregaram recursos de multimídia. Além disso, aulas dedicadas à resolução de problemas propostos também serão realizadas.

VIII. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO

A avaliação do desempenho na disciplina se dará através de três provas, de mesmo peso. A média final será a média das três provas.

IX. NOVA AVALIAÇÃO (Substitutiva / Recuperação)

Recuperação: prova teórica no final do semestre versando sobre todo o conteúdo programático específico.

XII. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. McQUARRIE, D. A.; SIMON, Physical Chemistry – A Molecular Approach, 1st. Ed., University Science Books, Sausalito California, 1997.
2. McQuarrie, D. A.; Simon, J. D.; Molecular Thermodynamics 1st. Ed. University Science Books, Sausalito California, 1999.
3. Helrich, C. S.; Modern Thermodynamics with Statistical Mechanics, Springer Verlage, Heidelberg, 2009.
4. ATKINS, P.W.; de Paula, J.; Physical Chemistry, 8th. Ed. Oxford University Press, 2006.
5. GLASTONE, S. Thermodynamics for Chemists; Narahari press. 2007.