



## PROGRAMA DE DISCIPLINA

<b>Código: QUI-528</b>	<b>Nome: FÍSICO-QUÍMICA AVANÇADA</b>			
	<i>Teórica</i>	<i>Prática</i>	<i>Total</i>	<i>Unidade:</i> INSTITUTO DE QUÍMICA
<i>Carga Horária</i>	60	00	60	<i>Departamento:</i> FÍSICO-QUÍMICA
<i>Créditos</i>	04	00	04	Curso(s): MESTRADO / DOUTORADO
<i>Módulo</i>				<b>SEMESTRE: 02.1</b>

### EMENTA

Equações de estado e variáveis termodinâmicas. Gás ideal e gás real. Leis da termodinâmica. Potenciais termodinâmicos. Equilíbrio de fases. Equilíbrio químico. Físico-química de superfícies.

### OBJETIVOS

Proporcionar ao aluno:

- (i) aprofundamento e sedimentação dos conhecimentos adquiridos no curso de graduação;
- (ii) aquisição de conhecimento teórico que lhe permita a interpretação dos fenômenos relacionados à termodinâmica;
- (iii) capacidade de relacionar o conhecimento adquirido com o trabalho de pesquisa a ser desenvolvido;
- (iv) capacidade de identificar os tópicos e exercícios adequados a um curso de graduação.

### CONTEÚDO PROGRAMÁTICO (TÓPICOS)

#### 1. Equações de Estado, Variáveis Termodinâmicas e o Comportamento do Gás

Sistema termodinâmico, variáveis intensivas e extensivas. Equação do gás ideal. A escala absoluta de temperatura. Misturas de gases ideais e pressões parciais. Lei de Dalton e Amagat. Origem do comportamento não ideal. Equação de van der Waals e as forças intermoleculares. Equação virial. Fator de compressibilidade. Variáveis reduzidas. Temperatura de Boyle. Fator de compressibilidade volumétrico. Princípio dos estados correspondentes. Equação de Berthelot. Equação de Dietriche. Equação de Beattie-Bridgman. Equação de Benson-Goling.

#### 2. Energia, Trabalho e Calor

Conceito de energia e de trabalho. Variação do trabalho com o caminho. Transferência de calor. Primeira Lei da Termodinâmica e suas consequências. Processos reversíveis e irreversíveis. Processos quasi-estáticos. Capacidade calorífica. Expansão de Joule. Processos Adiabáticos. Processo adiabático reversível de um gás ideal. Caminhos equivalentes de um processo adiabático. Entalpia. Efeito Joule-Thomson. Calor de combustão. Lei de Hess. Calor de reação. Calor de formação.

#### 3. Espontaneidade, Equilíbrio e Entropia

Visão estatística da entropia. Visão termodinâmica da entropia. Visão matemática da entropia. Escalas de temperatura. Segunda Lei da Termodinâmica. Propriedades gerais das variações de entropia. Consequências da entropia ser função de estado. Relações de Maxwell. Fator de expansão térmico isobárico.

#### **4. Capacidades Caloríficas, Zero Absoluto e a Terceira Lei da Termodinâmica**

Variação da entropia com a temperatura. Vida no zero absoluto. Significado da capacidade calorífica: sólidos, líquidos e gases. Variação da capacidade calorífica com a temperatura e a pressão. Transições e fases. A Terceira Lei e a Entropia Absoluta. Cálculos de entropias absolutas.

#### **5. Estabilidade, Energia Livre e Potenciais Termodinâmicos**

Natureza no estado de equilíbrio. Condições para o equilíbrio estável. Energia Livre de Helmholtz. Energia Livre de Gibbs. Estabilidade do estado de equilíbrio de um sistema unicomponente. Sistemas multicomponentes e o Potencial Químico. Cálculo do potencial químico. Gás ideal e o estado padrão. Fugacidade. Relações de Maxwell. Fugacidade.

#### **6. Equilíbrio de Fases**

Diagrama de fases. Energia livre de Gibbs e o equilíbrio de fases. Equação de Clausius-Clapeyron. Soluções de gases em líquidos. Solubilidade. Lei de Henry. Desvios da lei de Henry. Sistemas líquidos binários. Líquidos completamente miscíveis. Equação de Duhem-Margules. Sistemas ideais. Lei de Raoult. Desvios positivos e negativos da Lei de Raoult. Destilação de misturas binárias. Líquidos parcialmente miscíveis e sua destilação. Regra das fases. Líquidos imiscíveis e sua destilação. Equilíbrio sólido-líquido. Propriedades coligativas. Equilíbrio sólido-sólido. Soluções sólidas. Equilíbrio sólido-líquido-vapor. Sistemas ternários.

#### **7. Equilíbrio Químico**

Equilíbrio químico e Energia Livre de Gibbs. Constante de equilíbrio. Princípio de Le Chatelier. Equação de Van't Hoff. Equilíbrio em sistemas líquidos e gasosos. Influência da temperatura, pressão, gases inertes e excesso de substâncias. Sistemas não ideais. Atividade e velocidade de reação. Reações heterogêneas. Constante de equilíbrio, atividade e fugacidade.

#### **8. Físico-Química de Superfície**

Estrutura e natureza química das superfícies sólidas. Características das superfícies. Tensão superficial e Energia livre superficial. Forma de equilíbrio de um cristal. Adsorção física e adsorção química. Aspectos elétricos da superfície. A dupla camada elétrica. O potencial Zeta.

---

#### **BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL**

1. Winn, John S.; Physical Chemistry. Harper Collins College Publisher.
2. McQuarrie, Donald A.; Simon, John D.; Physical Chemistry. A Molecular Approach. University Science Books. California.
3. Adamson, Arthur W.; A Textbook of Physical Chemistry. Academic Press. Orlando.
4. Berry, R. Stephen; Rice, Stuart A.; Ross, John; Physical Chemistry. John Willey and Sons. New York.
5. Glasstone, Samuel; Tratado de Química Física. Aguilar. Madrid.
6. Adamson, Arthur W.; Physical Chemistry of Surface. John Willey and Sons. New York. 1982.