

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

Componente Curricular: TERMODINÂMICA QUÍMICA II
Carga Horária: 60 horas.
Numero de Créditos: 04
Pré-Requisitos: TERMODINÂMICA QUÍMICA I
Público-alvo: Bacharelado em Química e Licenciatura em Química

OBJETIVOS: Abordar o estado de equilíbrio em transformações físicas de substâncias. Definir pressão de vapor. Apresentar o formalismo matemático para a elaboração de diagrama de fases de substâncias puras. Apresentar o critério termodinâmico para estabilidade das fases. Deduzir e aplicar a equação de Clausius-Clapeyron. Abordar o equilíbrio físico para sistemas de dois componentes. Tratar os sistemas de dois componentes: líquido-líquido, sólido-líquido, sólido-sólido. Estudar os fenômenos que envolvem a mistura de duas substâncias puras. Abordar graficamente os diagramas de fases para sistemas de três componentes. Introduzir os princípios físico-químicos em que se baseiam os métodos de separação de misturas utilizados em processos industriais. Elaborar um modelo para uma solução ideal e estudar suas propriedades. Definir o conceito de atividade. Apresentar e aplicar as leis de Henry e de Raoult no estudo de soluções ideais. Abordar as propriedades coligativas. Estudar o comportamento de soluções não-eletrolíticas não-ideais. Definir soluções eletrolíticas, condutividade elétrica em solução e condutância equivalente. Abordar os fatores que afetam a condutância equivalente. Estudar os fundamentos básicos do equilíbrio em soluções iônicas, em especial aquosas. Apresentar a lei de Kohlrausch da migração independente dos íons. Introduzir o conceito de atividade em soluções eletrolíticas. Apresentar a teoria de Debye-Hückel do coeficiente de atividade. Descrever o funcionamento de células eletroquímicas. Estudar o processo de eletrólise. Definir o conceito de célula padrão. Descrever os tipos mais usados de eletrodos. Descrever os processos de interface que acontecem nos eletrodos. Abordar pilhas eletroquímicas. Usar programas matemáticos para resolução de problemas numéricos e algébricos relacionados com os assuntos abordados.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Obter noções do equilíbrio termodinâmico envolvido em transformações físicas de substâncias. Saber extrair informações a partir de diagramas de fases de substâncias puras e misturas. Usar a regra das fases para encontrar o número de graus de liberdade. Reconhecer a importância dos diagramas de fases no estudo das propriedades dos materiais. Adquirir a habilidade de calcular a energia de Gibbs total de uma mistura. Saber usar a equação de Clausius-Clapeyron para calcular dados termoquímicos de envolvendo equilíbrio de fases. Compreender o modelo de soluções ideais e entender suas propriedades. Entender o conceito de atividade. Aplicar as leis de Henry e de Raoult no estudo de soluções ideais diluídas. Entender as propriedades de soluções não-ideais. Entender a origem das propriedades coligativas e determinar a partir desses dados massas molares e coeficientes de atividade. Entender o comportamento de íons em soluções. Utilizar a teoria de Debye-Hückel para calcular o coeficiente de atividade dos solutos. Entender o funcionamento de células eletroquímicas e processos eletroquímicos empregados na indústria. Calcular o potencial de uma célula eletroquímica. Diferenciar os diversos tipos de eletrodos e reconhecer em quais circunstâncias devem ser utilizados. Compreender como técnicas eletroquímicas podem ser usadas para a obtenção de propriedades termodinâmicas de reações químicas. Saber usar programas computacionais na resolução de problemas numéricos e algébricos.

EMENTA/PROGRAMA

TRANSFORMAÇÕES FÍSICAS DE SUBSTÂNCIAS PURAS

1. Conceitos fundamentais: pressão de vapor e fatores que a influenciam, temperatura de fusão, temperatura de ebulição, temperatura crítica, etc.
2. Diagramas de fases e sua análise termodinâmica. A regra das fases.
3. Estabilidade e transições de fases: a equação de Clapeyron.
4. Classificação de transições de fases segundo Ehrenfest.

SOLUÇÕES

1. Quantidades parciais molares e sua determinação, equação de Gibbs-Duhem. Solução ideal e suas propriedades termodinâmicas. Solução diluída ideal e suas propriedades termodinâmicas.
2. Soluções não-ideais: desvios em relação ao comportamento ideal. Atividade do solvente e do soluto. Funções de excesso.
3. Propriedades coligativas.

DIAGRAMAS DE FASES

1. Definições: fase, componente e grau de liberdade. Dedução da regra das fases.
2. Sistemas binários:
 - 2.1. Equilíbrios líquido-vapor. Diagramas de pressão de vapor-composição e temperatura-composição. Destilação fracionada; Azeótropos.
 - 2.2. Equilíbrio entre fases condensadas. Equilíbrios entre fases líquidas. Destilação de líquidos parcialmente miscíveis e imiscíveis. Lei de distribuição. Equilíbrio líquido-sólido. Diagrama eutético. Diagramas com formação de compostos. Fusão congruente e incongruente. Miscibilidade total e parcial no estado sólido.
3. Sistemas ternários. Equilíbrios líquido-líquido. Solubilidade de sais. Efeito do íon comum. Formação de sal duplo.

A NATUREZA DAS SOLUÇÕES ELETROLÍTICA

1. Condutores eletrônicos e eletrolíticos. Condutividade elétrica das soluções. Condutância equivalente e sua determinação experimental. A dependência da condutividade iônica em relação à concentração. Lei de Kohlrausch da migração independente dos íons.
2. Eletrólise. Leis de Faraday. Mobilidade iônica, número de transporte e sua determinação experimental.
3. Atividade e coeficientes de atividade em soluções eletrolíticas. Teoria de Debye-Hückel do coeficiente de atividade.

ELETROQUÍMICA DE EQUILÍBRIO

1. Eletrostática. Potenciais de eletrodo reversíveis. Células eletroquímicas. Força eletromotriz e sua determinação experimental. Célula padrão.
2. Tipos de eletrodos. Eletrodo padrão de hidrogênio. Eletrodo de calomelano. Potenciais padrão de eletrodos. Série eletroquímica. Convenção de sinal. Cálculo teórico da FEM de uma célula. Atividade e a equação de Nernst.
3. Célula química e célula de concentração com e sem transferência. Potencial de junção líquida e ponte salina.
4. Aplicações de medidas de FEM: funções termodinâmicas de células, determinação de constantes de equilíbrio, determinação de coeficiente de atividade e atividade; determinação de potencial formal para uma meia-célula.

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, LTC, R. de Janeiro, 2003.
2. CASTELLAN, G., "Fundamentos de Físico-Química", Livros Téc. e Cient. Ed. 1989.
3. D. R. CROW, "Principles and Applications of Electrochemistry", 4ª Ed., BA Professional, NY, 1996.
4. LEVINE, I. N., "Physical Chemistry", 5ª Ed., McGraw-Hill, N.Y., 2001.
5. BARROW, G. M., "Physical Chemistry", 6ª Ed., McGraw-Hill, N.Y., 1996.
6. MCQUARRIE, D.A., SIMON, J.D., "Physical Chemistry: A Molecular Approach", University Science Books, Califórnia, 1997.
7. ALBERTY, R. A., SILBEY, R. J., "Physical Chemistry", 2ª Ed., J. Willey, N.Y., 1996.
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., Editora da Sociedade Brasileira de Matemática, 2004.