



Informações da disciplina

| Código Ofertado | Disciplina/Unidade Curricular | Modo de Avaliação | Modalidade da disciplina | Oferta |
|-----------------|-------------------------------|----------------------------|--------------------------|-----------|
| QM65A | Físico-Química Aplicada | Nota/Conceito E Frequência | Presencial | Semestral |

| Carga Horária | | | | | |
|---|----|-----|-----|------|-------|
| AT | AP | APS | ANP | APCC | Total |
| 3 | 0 | 0 | 0 | 3 | 45 |
| <ul style="list-style-type: none">• AT: Atividades Teóricas (aulas semanais).• AP: Atividades Práticas (aulas semanais).• ANP: Atividades não presenciais (horas no período).• APS: Atividades Práticas Supervisionadas (aulas no período).• APCC: Atividades Práticas como Componente Curricular (aulas no período, esta carga horária está incluída em AP e AT).• Total: carga horária total da disciplina em horas. | | | | | |

Objetivo

Introduzir descrição termodinâmica de transformações químicas e transformações físicas de substâncias puras e misturas. Aplicar os conceitos termodinâmicos para determinar a evolução de sistemas para o equilíbrio e a estabilidade dos estados de equilíbrio. Estender os conceitos de termodinâmica para abordagem de sistemas fora do equilíbrio, tanto nas situações próximas do equilíbrio e longe do equilíbrio. Aplicar a termodinâmica irreversível próximo do equilíbrio para descrição de fenômenos de transporte de matéria e energia. Descrever a velocidade das reações químicas longe de equilíbrio pelos conceitos da cinética química.

Ementa

Termodinâmica química. Funções termodinâmicas padrão. Evolução para o equilíbrio e estabilidade do equilíbrio. Equilíbrio de fases. Sistemas fora de equilíbrio: produção de entropia. Relações fluxo-força em regime linear. Aplicações aos fenômenos de transporte. Teoria de velocidade de reações químicas.

Conteúdo Programático

| Ordem | Ementa | Conteúdo |
|-------|--------|----------|
|-------|--------|----------|

| Ordem | Ementa | Conteúdo |
|-------|--|---|
| 1 | Termodinâmica química. Funções termodinâmicas padrão. | Interações intermoleculares e gases reais; Leis fundamentais da termodinâmica. 1ª lei: Energia; 2ª lei: Entropia. Interpretação microscópica. Processos reversíveis e irreversíveis. Potenciais termodinâmicos: Entalpia e Energias Livre de Gibbs e de Helmholtz. Relações entre as propriedades termodinâmicas. Mudanças de estados de equilíbrio. Variação de Entalpia, Entropia e Energia livre de Gibbs Padrão de reações químicas e mudanças de fase. Sistemas de Composição Variável: Equação de Gibbs. Extensividade. Equações de Gibbs-Duhem. |
| 2 | Evolução para o equilíbrio e estabilidade do equilíbrio. | Aplicação da Equação de Gibbs para determinar a evolução de sistemas fora de equilíbrio. Condições de equilíbrio. Critérios de estabilidade dos estados de equilíbrio. Equilíbrio de fases de substâncias puras. Diagramas de fase. Equação de Clapeyron e de Clausius-Clapeyron. Metaestabilidade. Potencial químico. Potencial químico de gases. Pressão de vapor e potencial químico de líquidos e sólidos puros e soluções: Atividade. Equilíbrio químico. Estabilidade do Equilíbrio Químico. Efeitos de temperatura e pressão na posição do equilíbrio químico. |
| 3 | Sistemas fora de equilíbrio. Relações fluxo-força em regime linear | Termodinâmica Irreversível Clássica: Equilíbrio local. Balanço de energia, massa e entropia em sistemas contínuos. Fluxo de entropia e densidade de produção de entropia. Relações fluxo-força em regime linear. Lei de Curie e Relações de reciprocidade (Onsager-Casimir). Princípio do Mínimo de Produção de Entropia e Estados Estacionários fora de equilíbrio. |
| 4 | Aplicações aos fenômenos de transporte. | Lei de Fourier de condução de calor e lei de Fick da difusão. Aplicações em condução de calor e transporte de massa por difusão. |

| Ordem | Ementa | Conteúdo |
|-------|---|---|
| 5 | Teoria de velocidade de reações químicas. | Reações químicas: etapas elementares, reações complexas, mecanismos de reação e intermediários. Definição de velocidade de reação. Reações químicas na vizinhança do equilíbrio: Aproximação linear. Princípios da reversibilidade microscópica e do balanço detalhado. Produção e troca de entropia em reações químicas. Reações químicas longe do equilíbrio: Leis empíricas de velocidade; Ordem de Reação. Cinética de 1ª e 2ª Ordem. Lei de velocidade de etapas elementares. Hipótese de estado estacionário e obtenção da lei de velocidade de reações complexas a partir do mecanismo de reação. Efeitos da temperatura na velocidade das reações químicas. Equação de Arrhenius e Energia de Ativação. |

Bibliografia Básica

PRIGOGINE, Ilya; KONDEPUDI, Dilip. **Termodinâmica: dos motores térmicos às estruturas dissipativas**. Lisboa: Instituto Piaget, 1999. 418 p. (Ciência e técnica. 13) ISBN 9727712975.

ATKINS, P. W.; PAULA, Julio de. **Físico-química**. 8. ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2008. 2 v. ISBN 9788521616009 (v.1).

CASTELLAN, Gilbert William. **Fundamentos de físico-química**. Rio de Janeiro, RJ: LTC, c1986. xx, 527 p. ISBN 9788521604891.

LEVINE, Ira N. **Físico-química**. 6. ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC, c2012. 2 v. ISBN 9788521606611 (v.2).

Bibliografia Complementar

GROOT, Sybren Ruurds; MAZUR, Peter. **Non-equilibrium thermodynamics**. New York: Dover Publications, 1984. x, 510 p. ISBN 0486647412 (broch.).

LEBON, Georgy; JOU, David; CASAS-VÁZQUEZ, José. **Understanding non-equilibrium thermodynamics: foundations, applications, frontiers**. Berlin: Springer, c2010. 325 p. ISBN 9783642093593.

NON-EQUILIBRIUM thermodynamics and the production of entropy: life, earth, and beyond. Berlin, DE: Springer, 2005. 260 p. (Understanding Complex Systems) ISBN 3-540-22495-5.

BEJAN, Adrian; MAMUT, Eden (Ed.). **Thermodynamic optimization of complex energy systems**. Dordrecht: Kluwer, 1998. 465 p. ISBN 0-7923-5726-4.

BEJAN, Adrian; TSATSARONIS, George; MORAN, Michael. **Thermal design and optimization**. New York: J. Wiley, 1996. xv, 542 p. ISBN 0-471-58467-3.

SCOTT, Steven K. **Oscillations, waves, and chaos in chemical kinetics**. New York: Oxford University Press, c1994. 90 p. (Oxford Chemistry Primers ; 18) ISBN 9780198558446.

| # | Resumo da Alteração | Edição | Data | Aprovação | Data |
|---|--|-----------------------------|------------|-----------------------------|------------|
| 1 | Plano de ensino inserido de Plano de ensino inserido. | Sueli Tavares De Melo Souza | 22/02/2018 | Sueli Tavares De Melo Souza | 22/02/2018 |