

# Química-Física I

## Aula 01

---

**Apresentação**



# Funcionamento

- Manuel Minas da Piedade
- memp@fc.ul.pt
- Link ZOOM das aulas:
- <https://videoconf-colibri.zoom.us/j/2071175106>
- 14 semanas de aulas
- 42 Aulas teóricas
- 14 Aulas teórico-práticas

## Bibliografia

- **Livro adotado:**

P. W. Atkins, J. de Paula

*Elements of Physical Chemistry*, 7th Ed.; Oxford University Press: Oxford, 2017

- **Aditamentos** (Download no Fénix):

a) Relação entre as definições de pH em termos de actividade e concentração

b) Reações opostas

c) Variação de  $k$  com  $I$

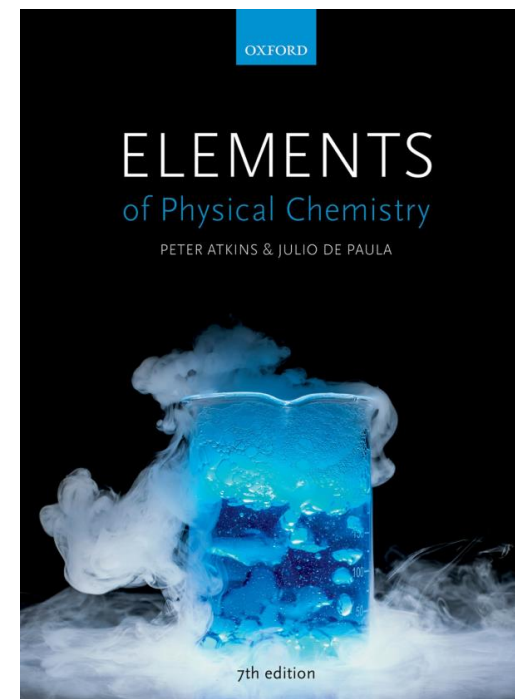
d) Atkins: Processos de transporte em membranas

## Recursos (Download no Fénix)

a) Folha de Excel sobre a distribuição de Maxwell (Maxwell.xlsx).

b) Folha de Excel sobre a composição fracionária das espécies da glicina em função do pH (Glicina\_CompFrac.xlsx).

c) Diagrama de fases p-T da água (vale a pena visitar também o site sobre a estrutura e propriedades da água em: (Diagrama de fases da água)



**Dúvidas** Enviar email. Marca-se sessão ZOOM

# Funcionamento

## **Avaliação**

- Componente teórica (2/3)
- Componente prática (1/3)

Aprovação implica classificações  $\geq 9.5$  em ambas as componentes

## **Avaliação teórica**

### Regime de Testes.

- 2 testes a realizar durante o período de aulas (1º em novembro; 2º na última semana de aulas)
- Nota mínima do 1º teste  $\geq 7.0$  valores
  - a) Nota do 1º teste  $< 7.0 \rightarrow$  Regime de avaliação por exame
  - b) Nota do 1º teste  $\geq 7.0 \rightarrow$  Pode escolher:
    - Permanecer no regime de avaliação por testes e realizar o 2º teste
    - Passar para o regime de avaliação por exame final
- Média dos dois testes  $< 9.5 \rightarrow$  uma só data de exame

### Regime de Avaliação por Exame Final

2 oportunidades de exame

### Prova oral

No caso de a classificação do exame ou, da média dos dois testes, estar compreendida entre 8.5 e 9.4 valores

# Matéria que vamos abordar: Qual é e para que serve?

**Química.** Ciência que estuda a matéria e as suas transformações

- O átomos, mas sobretudo as moléculas são o elemento central da Química
- Na Bioquímica as moléculas e transformações de interesse são mais restritas (moléculas e transformações da vida)
- Na Química Tecnológica interessam sobretudo moléculas e transformações com aplicação industrial

**Química-Física.** Trata dos princípios físicos que estão na base das transformações químicas e bioquímicas.

As explicações são dadas em termos de modelos físicos.

Por exemplo, em certas condições o comportamento de um gás pode ser traduzido pela equação  $pV = nRT$  que corresponde ao modelo do gás perfeito.

**A Química-Física é uma ferramenta muito poderosa!**

Permite:

- Quantificar
- Prever
- Ligar observações macroscópicas a modelos microscópicos

Por exemplo, com base na Termodinâmica (uma área da Química-Física) e na noção de equilíbrio químico podemos prever quantitativamente:

- A tendência de evolução de um sistema químico ou bioquímico
- A composição de uma mistura reacional uma vez atingido o equilíbrio

Com base em conceitos de Cinética Química (outra área da Química-Física) podemos prever

- A composição da mistura reacional ao longo do tempo

Com base na Teoria Cinética de Gases (outra área da Química-Física) é possível explicar o comportamento de gases a nível molecular

# O curso está centrado nos seguintes tópicos

## 1. Propriedades dos gases

Os gases constituem um estado da matéria muito importante (estamos cercados de gases; necessitamos de oxigénio atmosférico para viver; os gases estão envolvidos em aplicações domésticas e tecnológicas muito importantes, e.g. gás natural  $\text{CH}_4$ , produção de polietileno a partir do etileno).

No âmbito da disciplina são abordados com dois objetivos principais:

- São sistemas muito convenientes para introduzir conceitos básicos de Termodinâmica Química
- São também ideais para explicar:
  - O modo como se pode estabelecer um modelo microscópico capaz de racionalizar e prever observações macroscópicas (por exemplo, a previsão da relação entre pressão e volume de um gás perfeito com base na Teoria Cinética de Gases ).
  - O modo como variações de propriedades macroscópicas como pressão e volume refletem a importância de interações entre moléculas.

## 2. Termodinâmica Química

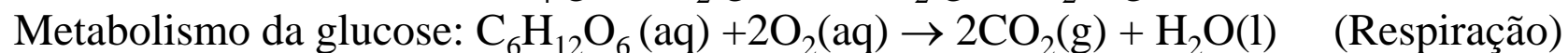
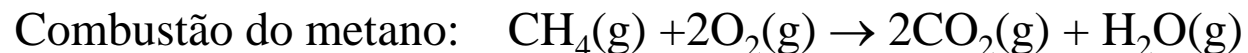
Corresponde ao capítulo mais extenso. Assenta em 4 princípios:

- O Princípio Zero introduz a noção de **temperatura ( $T$ )**, como a propriedade que permite determinar quantitativamente se dois ou mais sistemas estão em equilíbrio térmico. Tem o seguinte enunciado: Se dois sistemas estão em equilíbrio térmico com um terceiro estão em equilíbrio térmico entre si.
- O Primeiro Princípio (ou da conservação da energia) introduz a noção de **energia interna ( $U$ )** que reflete a quantidade de energia que este contém e pode trocar com outros sistemas. É conservada no Universo. Ou seja, a energia total do universo mantém-se constante, embora possa haver trocas de energia entre os sistemas que o constituem.

São também introduzidas as quantidades **trabalho ( $w$ )**, **calor ( $q$ )**, **capacidade calorífica ( $c$ )** e **entalpia ( $H$ )**, relacionadas com a energia interna ou com o seu cálculo.

No âmbito do curso o Primeiro Princípio e as suas “ferramentas”, servem essencialmente para:

- Efetuar balanços energéticos associados a transformações físicas (e.g. evaporação de um líquido, fusão de um sólido) ou reações químicas.



- Prever o efeito de variações nas condições experimentais (e.g. temperatura, pressão) nos balanços energéticos.

- O Segundo Princípio introduz a noção de **entropia ( $S$ )**. A entropia é uma medida da quantidade de energia que, embora sendo conservada, deixa de estar disponível para realizar trabalho quando um sistema sofre uma transformação. Na visão da Mecânica Estatística desenvolvida por Ludwig Boltzmann é normalmente associada ao grau de desordem de um sistema.

São também introduzidas as grandezas **energia de Gibbs ( $G$ )** e **potencial químico ( $\mu$ )**. No âmbito do curso o Segundo Princípio e as suas “ferramentas”, servem essencialmente para:

- Prever se um processo tem ou não tendência para ocorrer espontaneamente, isto é, sem a realização de trabalho.
  - Definir de modo quantitativo as condições de equilíbrio de um dado sistema.
  - Verificar como é que as conclusões relativas a espontaneidade e equilíbrio são afetadas por variações de condições experimentais como pressão, temperatura ou concentração dos componentes.
- O Terceiro Princípio estabelece que a entropia é nula ao zero absoluto  $S(0 \text{ K}) = 0$  para substâncias cristalinas perfeitas.

Em resumo, com base na Termodinâmica conseguimos:

- Fazer balanços energéticos
- Avaliar se uma transformação tem **tendência** para ocorrer espontaneamente (sem realização de trabalho)
- Definir em que condições um sistema está em equilíbrio.

Regra geral na matéria de Termodinâmica

- Primeiro são introduzidas as “ferramentas”  $U$ ,  $H$ ,  $S$ ,  $G$ ,  $\mu$ , etc.
- Depois são tratadas aplicações como:
  - Balanços energéticos.
  - Transformações de fase e diagramas de fase
  - Propriedades coligativas, como a osmose ou o abaixamento crioscópico.
  - Equilíbrio químico geral
  - Casos particulares dos equilíbrios ácido-base e eletroquímico

Mas, por vezes, as ferramentas são também introduzidas através de exemplos de aplicação.



### 3. Cinética Química

A Termodinâmica permite discutir se uma dada transformação num sistema tem tendência a ocorrer espontaneamente e em que condições o sistema atinge o equilíbrio. Mas nada nos diz sobre a velocidade da transformação. Este aspeto é crucial, pois uma transformação pode ter uma grande tendência para ocorrer espontaneamente, mas a sua velocidade ser de tal modo baixa que, para todos os efeitos não ocorre.

A Cinética Química trata precisamente da velocidade dos processos que interessam à Química. No presente curso vamos abordar apenas velocidades de reações químicas e bioquímicas, deixando de fora processos físicos como a evaporação de um líquido. Convém, no entanto, referir que, as velocidades destes últimos podem ser analisadas de forma análoga à utilizada no caso de reações químicas. Será, assim, ilustrado o modo como a Cinética Química permite discutir questões como:

- Qual a velocidade de consumo de reagentes a formação de produtos?
- Qual a concentração de um reagente ou produto num dado instante?
- Como é que essa velocidade depende de condições experimentais como concentração das espécies que nela participam, temperatura, força iónica, etc.?
- Qual o mecanismo da reação, isto é o conjunto de passos elementares que conduzem dos reagentes aos produtos? Quais as espécies intermediárias neles envolvidas?

As discussões da Cinética Química assentam principalmente em noções como velocidade de reação ( $v$ ), constante de velocidade de reação ( $k$ ) ordem de reação ( $n$ ) ou energia de ativação ( $E_a$ ), que serão a seu tempo introduzidas.

Tal como no caso da Termodinâmica:

- Primeiro são introduzidas estas ferramentas
- Depois são tratadas aplicações

## 4. Fenómenos de Transporte

Este bloco de matéria trata dos aspectos termodinâmicos e cinéticos do transporte de moléculas em líquidos por **difusão**. São abordadas questões como:

- Há ou não tendência para que uma espécie se desloque espontaneamente de um ponto para outro no seio de um líquido?
- Essa tendência é grande ou pequena?
- A que velocidade acontece o deslocamento?

Vamos usar como modelo a transferência de espécies através de uma membrana biológica. Veremos, por exemplo como é que a Química-Física permite explicar:

- A necessidade de possuímos coração.
- Porque razão existem canais iónicos nas membranas celulares e como é que funciona a sua seletividade?