

# Introdução à Química - Física

Licenciaturas em Química Aplicada e Mestrado integrado em Engenharia Química e Bioquímica

**1º Semestre – 2021 / 2022**

**Docentes envolvidos:**

**Prof. Dr.<sup>a</sup> Ana Aguiar-Ricardo (gab. 536A, ext.10980); email: air@fct.unl.pt**

**Prof. Dr.<sup>a</sup> Luís Paulo Rebelo.** email: luis.rebelo@fct.unl.pt

**Apoio técnico aulas Práticas:**

D. Idalina Martins (**Lab. 417, ext. 10960**)

D. Palminha (Lab. 521)

**Aulas de dúvidas:**

Prof. Ana Aguiar-Ricardo    Quartas-feiras 08:30 H

# 1. Programa e planeamento:

## 1. AULAS TEÓRICAS

### 1.1. Introdução – 2 hora T

- 1.1.1. Sólidos, líquidos e gases.
- 1.1.2. Mudanças de fase.
- 1.1.3. Diagramas de fase de substâncias puras
- 1.1.4. Gases ideais e gases reais.
- 1.1.5. Equações de estado

### 1.2. Termoquímica – 3 horas T

- 1.2.1. Revisão de alguns conceitos: sistemas, trabalho, energia e calor.
- 1.2.2. Calorimetria. Calor específico e capacidade calorífica.
- 1.2.3. 1<sup>a</sup> Lei da Termodinâmica.
- 1.2.4. Trocas de energia em reacções químicas.
- 1.2.5. Entalpia. Entalpias de formação e de reacção.

## **1. Programa e planeamento (cont.):**

### **1.3. Entropia e energia de Gibbs - 2 horas T**

- 1.3.1. Processos espontâneos.
- 1.3.2. Entropia e a 2<sup>a</sup> lei da Termodinâmica.
- 1.3.3. Variação total de entropia.
- 1.3.4. Energia de Gibbs.
- 1.3.5. Energia de Gibbs e equilíbrio.

### **1.4. Equilíbrio Físico – 3 horas T**

- 1.4.1. Diagramas de fase e transições de fase.

### **1º TESTE (3 de Novembro)**

- 1.4.2. Solubilidade.
- 1.4.3. Propriedades coligativas.
- 1.4.4. Misturas líquidas binárias.

## 1. Programa e planeamento (cont.):

### 1.5. Equilíbrio químico – 2 horas T

- 1.5.1. Conceito de equilíbrio químico. Formas de expressar constantes de equilíbrio químico.
- 1.5.2. Factores que afectam o equilíbrio químico.  
Princípio de Le Châtelier.

### 1.6. Equilíbrio ácido-base – 3 horas T

- 1.6.1. Ácidos e bases conjugados. Auto-ionização da água e escala de pH.
- 1.6.2. pH de soluções.
- 1.6.3. Soluções tampão.

## 2º TESTE (29 de Novembro)

### 1.7. Equilíbrio de solubilidade – 2 horas T

- 1.7.1. Equilíbrio de solubilidade e produto de solubilidade.
- 1.7.2. Efeito de ião comum.
- 1.7.3. Aplicações.

# 1. Programa e planeamento (cont.):

## 1.8. Electroquímica – 3 horas T

- 1.8.1. Célula galvânica. Representação esquemática de células galvânicas.
- 1.8.2. Potencial padrão de eléctrodo.
- 1.8.3. Equação de Nernst.
- 1.8.4. Célula electrolítica.
- 1.8.5. Electrólise.

## 1.9. Cinética Química – 3 horas T

- 1.9.1. Velocidades de reacção.
- 1.9.2. Determinação de leis de velocidade. Método integral e método diferencial.
- 1.9.3. Lei de Arrhenius e energia de activação.
- 1.9.4. Mecanismo reacional. Reacções elementares. Molecularidade.
- 1.9.5. Breve introdução à teoria das colisões e à teoria do complexo activado.

**3º TESTE (11 de Janeiro)**

# 1. Programa e planeamento (cont.):

## 2. AULAS PRÁTICAS

- 2.1. Ficha de estudo dirigido: Calorimetria – [Lab1](#)
- 2.2. Ficha de estudo dirigido: Diagramas de fase – [Lab2](#)
- 2.2. Preparação de aulas de laboratório PL4 e PL5 – [Lab 3](#)
- 2.3. Titulações ácido-base. Constância do produto de solubilidade – [Lab4](#)
- 2.4. Cinética da reacção de corantes com o ião hidróxido – [Lab5](#)

## **2. Bibliografia recomendada**

- Chemical Principles. The Quest for Insight, P. Atkins and L. Jones, Freeman 5th ed.(2010).
- Chemical Principles Student Solutions Manual, C. Hoeger, L. Lavelle and Y. Ma 6th ed. (2013), ISBN: 978-1-4641-0707-8.
- Química, R. Chang & K. A. Goldsby, McGraw-Hill 11<sup>th</sup> ed.

## 3. Avaliação

### Classificação final:

1/5 (nota prática) + 1/5 (nota teórico-prática) + 3/5 (nota teórica)  
(obriga à realização de todos os questionários teórico-práticos –  
Mini-testes do Moodle).

### Frequência teórica:

A frequência da disciplina é obtida através da realização de **4 Mini-Testes** do Moodle e frequência de **50 % das aulas T e 50 % das aulas TP**.

### Frequência prática:

A frequência prática da disciplina é obtida através da realização de **todos** os trabalhos práticos .

### 3. Avaliação

#### Nota teórico-prática

Classificação média dos **4 mini-testes do moodle.**

#### Nota teórica:

A avaliação da disciplinas compreenderá a realização de 3 testes com a duração máxima de 90 min. Para aprovação na disciplina, a média final dos 3 testes terá que ser maior ou igual a 9,5.

#### Nota prática:

Avaliação dos resultados obtidos em todos os trabalhos práticos.

A nota prática só vale no ano em que é feita. Após esse período de tempo mantém-se a frequência prática à cadeira mas perde-se a nota. A nota final passa a ser calculada com base em **4/5 da nota teórica e 1/5 da nota teórico-prática.**

## IQF –datas de aulas práticas e de avaliação



Minitestes no moodle



Testes intercalares



Trabalhos práticos on-line



Trabalhos práticos

**TP** – Mini-testes teórico-práticos a funcionar no Moodle e a submeter on-line até às 24 horas de segunda-feira indicada.

**1º Miniteste TP** – período de 27 a 29 de Outubro

**2º Miniteste TP** – período de 24 a 27 de Novembro

**3º Miniteste TP** – período de 13 a 15 de Dezembro

**4º Miniteste TP** – período de 5 a 7 de Janeiro

**1º Teste T** - 3 de Novembro, 17:00 h

**2º Teste T** – 29 de Novembro, 18:00 h

**3º Teste T** – 11 de Janeiro, 18:00 h

### SALAS A DIVULGAR

#### Trabalhos práticos:

**PL1** – Ficha de estudo dirigido: Calorimetria,  
(16 e 23 de Outubro, on-line)

**PL2** – Ficha de estudo dirigido: Diagramas de fase,  
(6 e 13 de Novembro, on-line)

**PL3** – Preparação de aulas de laboratório PL4 e PL5  
(23 e 26 de Novembro - lab 417; 25 de Novembro – lab 521).

**PL4** – Titulações ácido-base. Constância do produto de solubilidade,  
(30 de Novembro, laboratório 417; 2 e 3 de Dezembro- lab 521).

**PL5** – Cinética da reacção de corantes com o ião hidróxido,  
(4, 6 e 7 de Janeiro, laboratório 417).

OUTUBRO							
S	T	Q	Q	S	S	D	
		6	7	8	9	10	
11	12	13	14	15	16	17	
18	19	20	21	22	23	24	
25	26	27	28	29	30	31	
NOVEMBRO							
S	T	Q	Q	S	S	D	
1	2	3	4	5	6	7	
8	9	10	11	12	13	14	
15	16	17	18	19	20	21	
22	23	24	25	26	27	28	
29	30						
DEZEMBRO							
S	T	Q	Q	S	S	D	
		1	2	3	4	5	
6	7	8	9	10	11	12	
13	14	15	16	17	18	19	
20	21	22	23	24	25	26	
27	28	29	30	31	1	2	
JANEIRO							
S	T	Q	Q	S	S	D	
3	4	5	6	7	8	9	
10	11	12	13				

# **Mini-Testes Teórico-Práticos**

**Obrigatórios para todos os alunos !!**

**Nota teórico-prática**

Classificação média dos **4** mini-testes teórico-práticos.

$1/5 \text{ (nota prática)} + 1/5 \text{ (nota teórico-prática)} + 3/5 \text{ (nota teórica)}$

**Requer inscrição na plataforma de e-learning da FCT**

**<http://moodle.fct.unl.pt>**

**<http://moodle.fct.unl.pt>**

**Chave de inscrição: IQF\_21/22**

**<http://moodle.fct.unl.pt>**

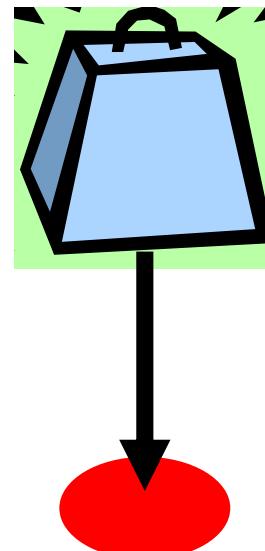


# The nature of gases

- Gases are readily compressible and immediately fill the space available to them.
- Gases are more compressible than solids and liquids
- Gases are less dense than solids and liquids.

$$\text{Pressure} = \frac{\text{Force}}{\text{Area}}$$

(force = mass x acceleration)



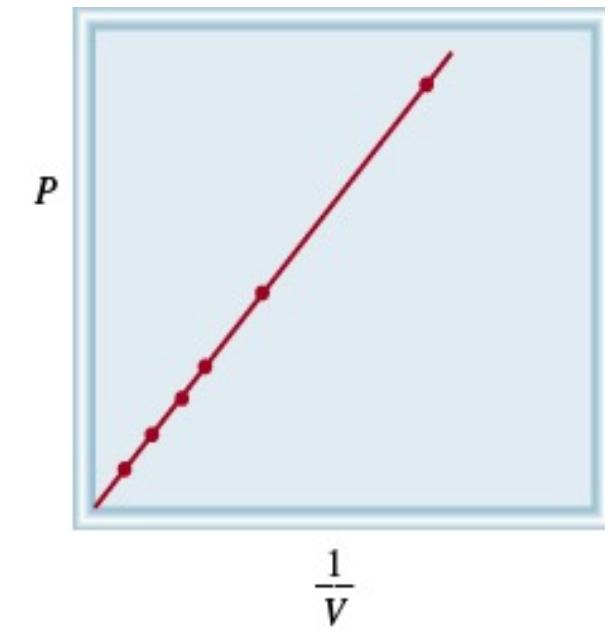
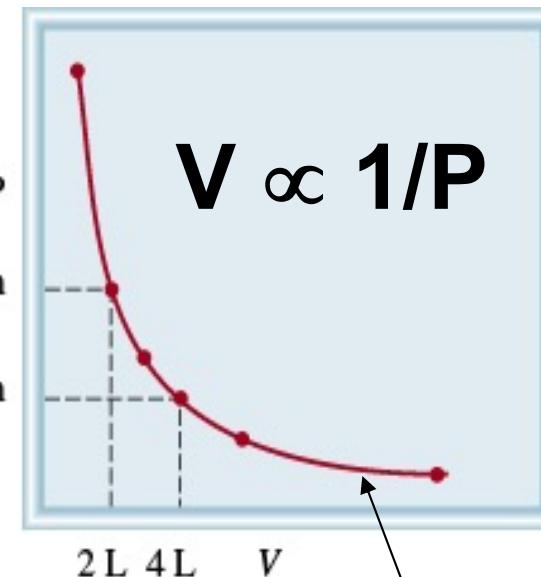
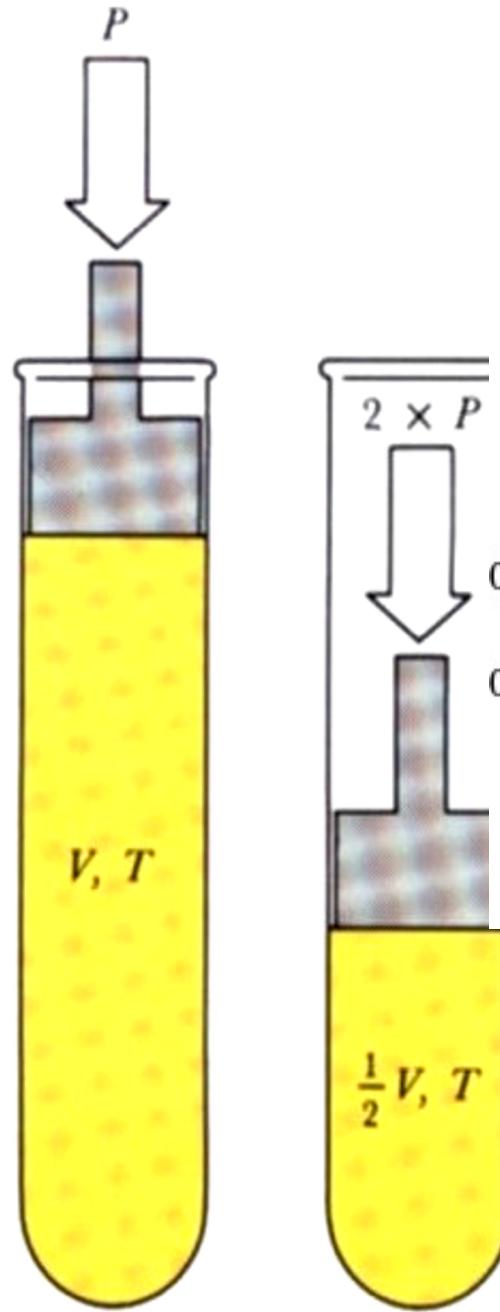
## Pressure units

1 Pascal (Pa) = 1 N/m<sup>2</sup>

1 atm = 760 mmHg = 760 Torr

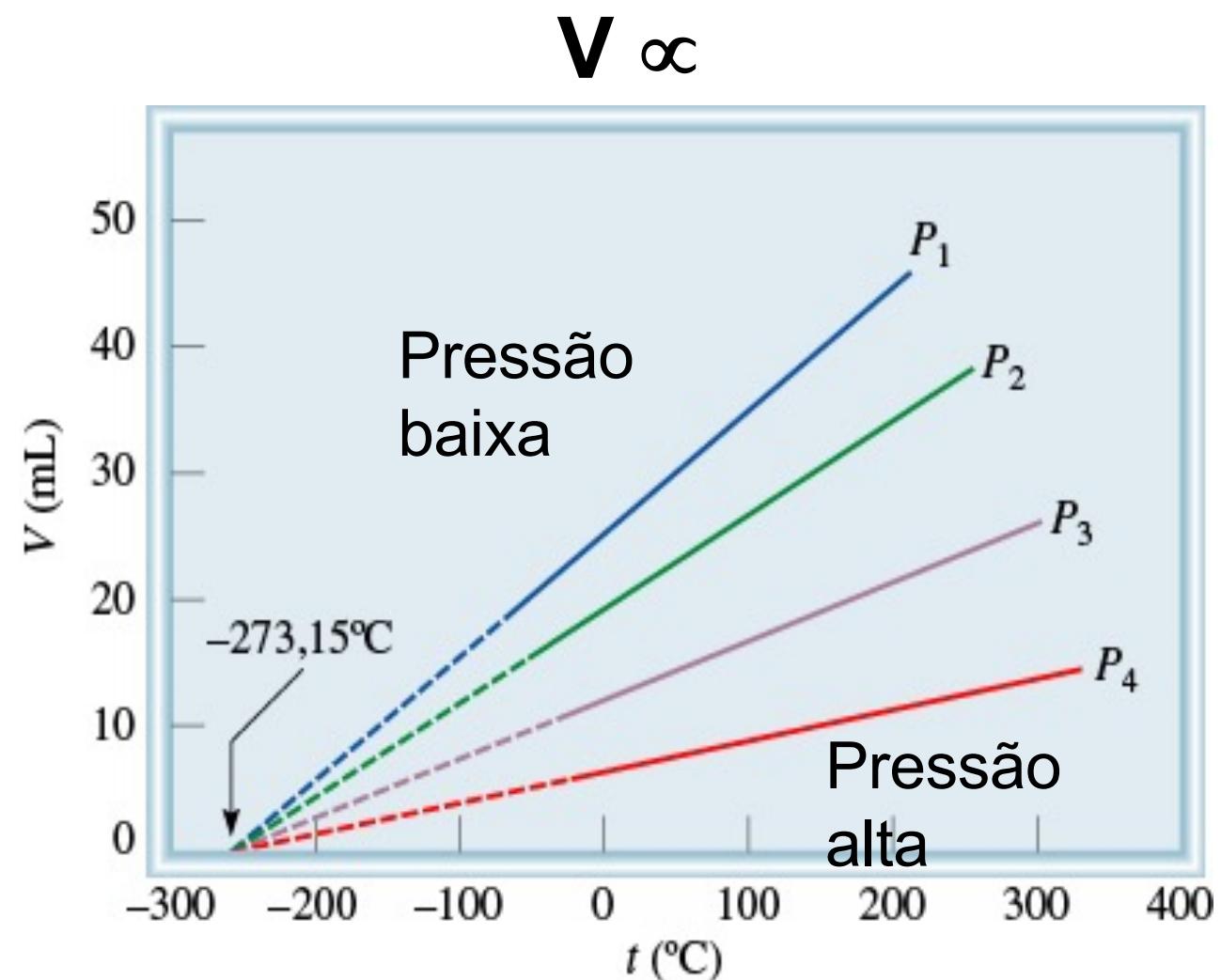
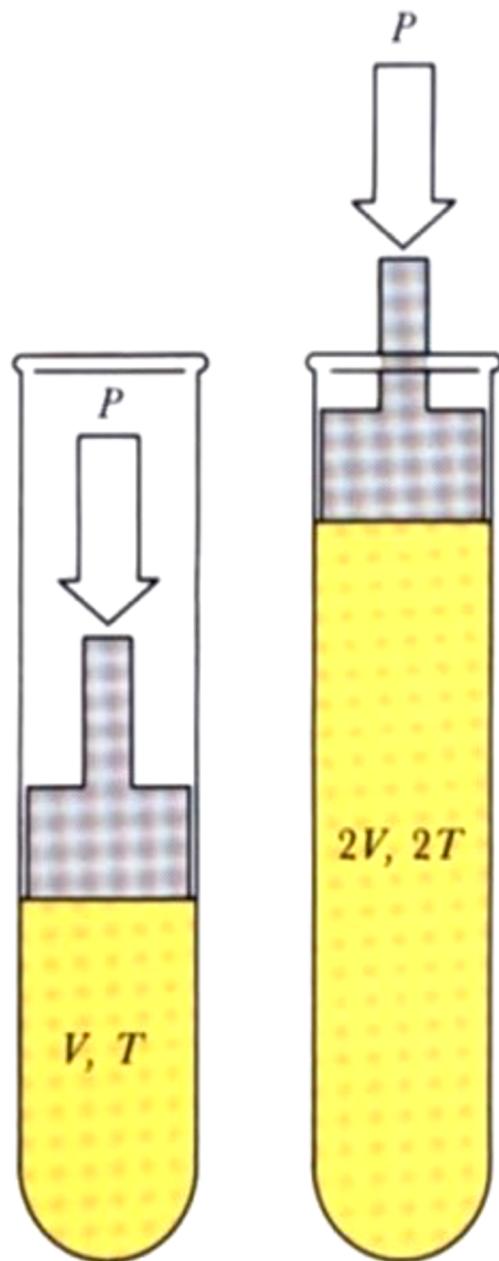
1 atm = 101,325 Pa

# Boyle's law



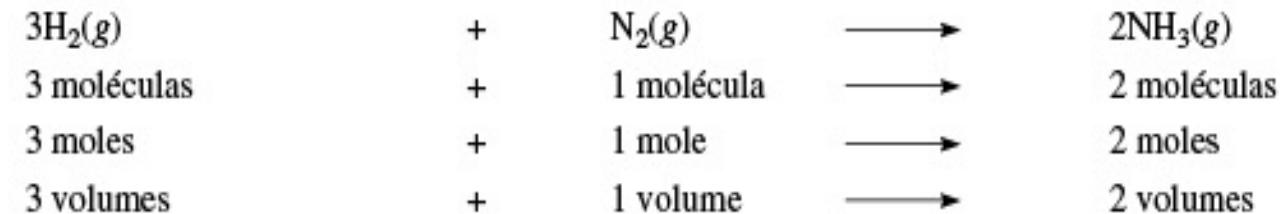
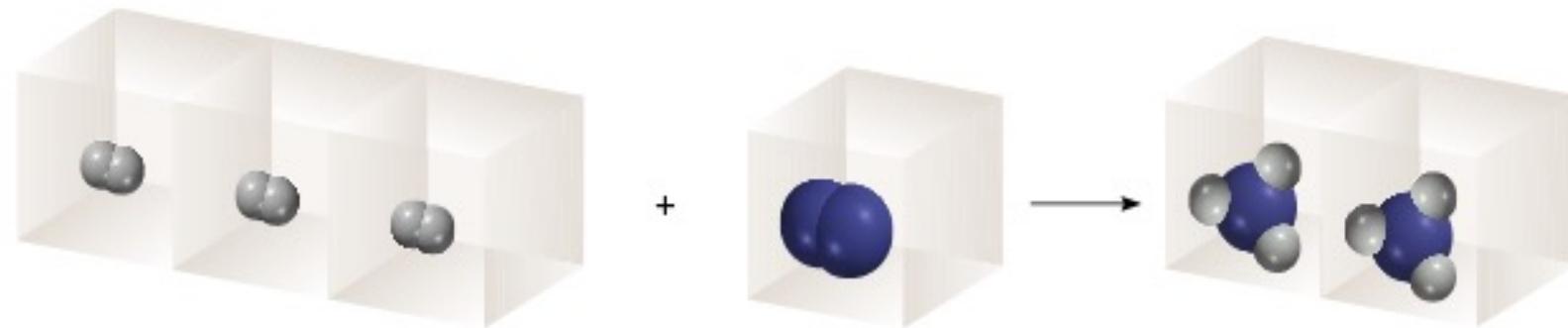
isotherm

# Charles and Gay-Lussac laws

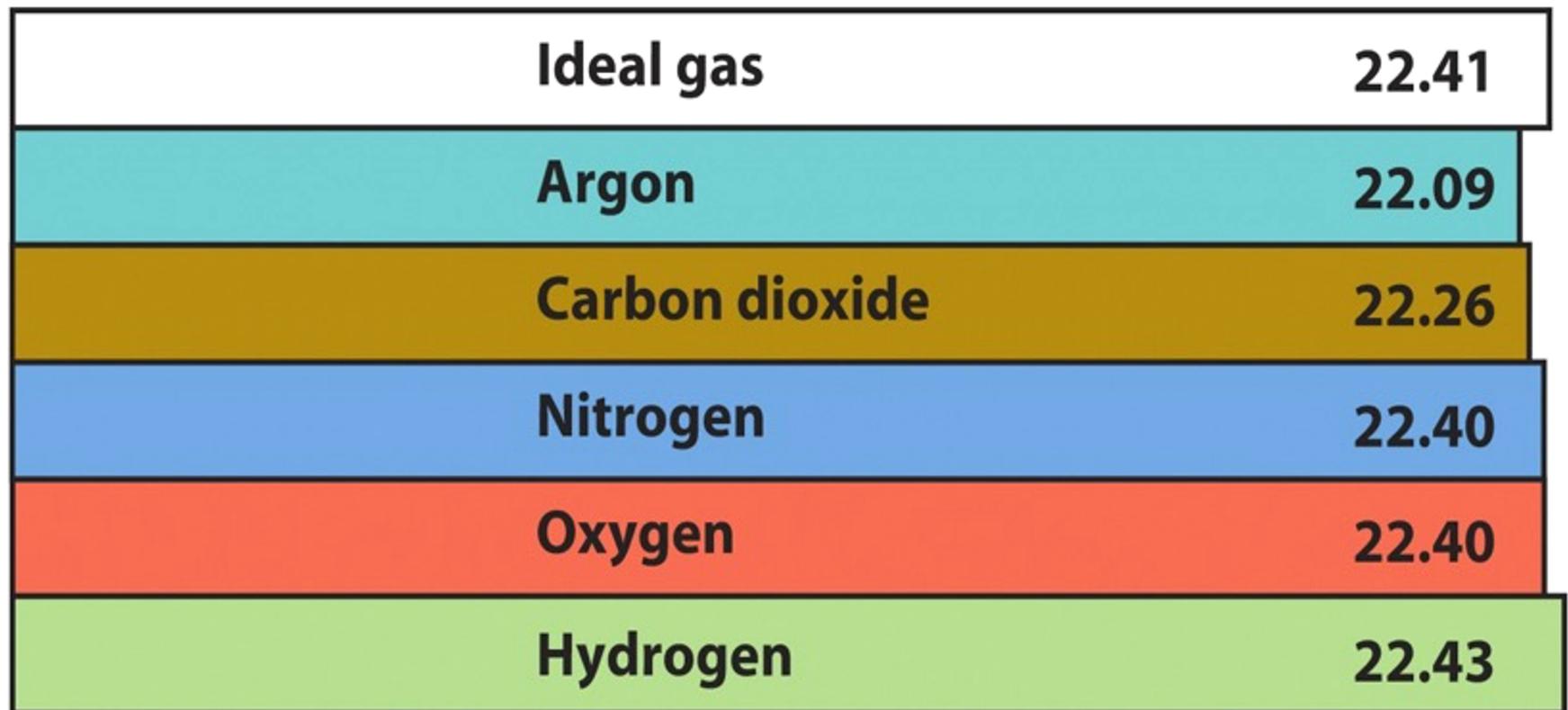


# Avogadro's law

$$V \propto n$$



## Molar volume( $\text{dm}^3 \text{ mol}^{-1}$ ) at 0°C and 1,013 bar



# Ideal gas law

Boyle's law

$$V \propto 1/P$$

Law of Charles and Gay-Lussac

$$V \propto T$$

Avogadro's law

$$V \propto n$$

$$V \propto nT/P$$

$$PV=nRT$$

The ideal gas law is an **Equation of State**

## Constante dos Gases Perfeitos, R

$8.205\ 74 \times 10^{-2}\ \text{L}\cdot\text{atm}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$

$8.314\ 47 \times 10^{-2}\ \text{L}\cdot\text{bar}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$

$8.314\ 47\ \text{L}\cdot\text{kPa}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$

$8.314\ 47\ \text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$

$62.364\ \text{L}\cdot\text{Torr}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$

# Teoria cinética dos gases

Assenta em quatro pressupostos:

- Um gás é composto por um conjunto de moléculas em contínuo movimento aleatório. As moléculas movem-se em linha recta só alterando o percurso aquando de colisões. As colisões são perfeitamente elásticas.
- As moléculas do gás são pontuais, (volume ocupado desprezável).
- Não existem forças repulsivas nem atractivas entre as moléculas do gás.
- A energia cinética média das moléculas é proporcional à temperatura do gás, em Kelvin.

$$V_{rms} = (3RT/M)^{1/2}$$

$V_{rms}$  raiz da velocidade média quadrática  
R constante dos gases perfeitos  
T temperatura em Kelvin  
M massa molar do gás

## Termodinâmica

Descreve as propriedades macroscópicas dos sistemas em equilíbrio

Inteiramente empírica

Construída a partir de 4 leis e matemática “simples”

Lei 0  $\Rightarrow$  Define Temperatura (T)

1<sup>a</sup> Lei  $\Rightarrow$  Define Energia (U)

2<sup>a</sup> Lei  $\Rightarrow$  Define Entropia (S)

3<sup>a</sup> Lei  $\Rightarrow$  Atribui um valor numérico à entropia

Estas leis são ***UNIVERSALMENTE VÁLIDAS***

### Definições:

- Sistema: a parte do Universo que é objecto do nosso estudo
- Vizinhança (exterior): o resto do Universo
- Fronteira: A superfície que divide o Sistema da vizinhança

### Sistemas podem ser:

- Abertos: quer a massa quer a energia podem ser trocadas entre o sistema e o exterior
- Fechados: a energia pode ser trocada entre o sistema e o exterior mas a massa não
- Isolado: nem a massa nem a energia podem ser trocadas entre o sistema e o exterior

A definição de um sistema requere:

- Algumas propriedades macroscópicas:  $p$ ,  $T$ ,  $V$ ,  $n$ ,  $m$ , ...
- Saber se o sistema é homogéneo ou heterogéneo
- Saber se o sistema está num estado de equilíbrio
- Conhecer o número de componentes

Existem dois tipos de **propriedades**:

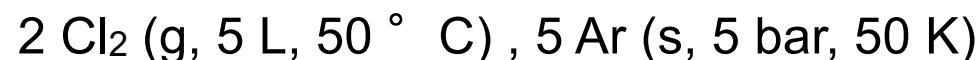
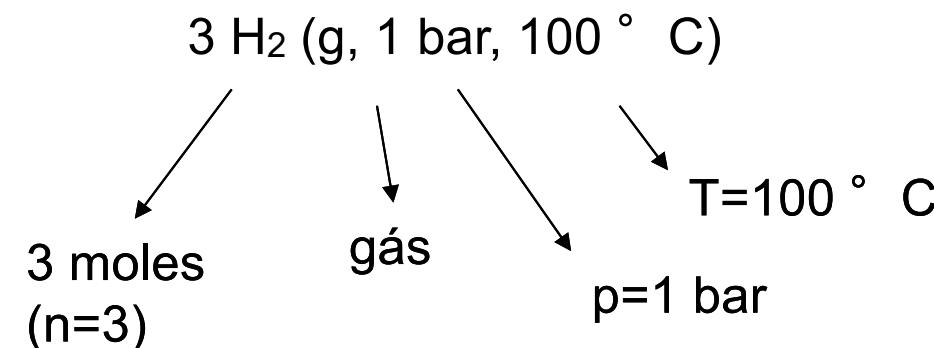
- Extensivas: Dependem do tamanho do sistema ( $n$ ,  $m$ ,  $V$ ,...)
- Intensivas: Independentes do tamanho do sistema ( $T$ ,  $p$ ,  $V_m = V/n$ ,...)

## O estado de um sistema em equilíbrio:

- É definido pelas propriedades macroscópicas que são descritas por funções de estado ( $p$ ,  $n$ ,  $T$ ,  $V$ ,...) - (estas são independentes da história do sistema)
- Para um sistema com um só componente, só é necessário conhecer “ $n$ ” and 2 variáveis. A partir daqui todas as outras propriedades ficam determinadas

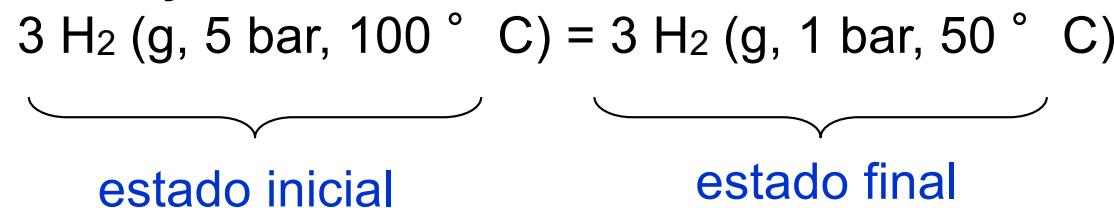
$$V = f(n, p, T) \text{ ou } p = g(n, V, T)$$

- Notação:



## Mudanças de estado: (Transformações)

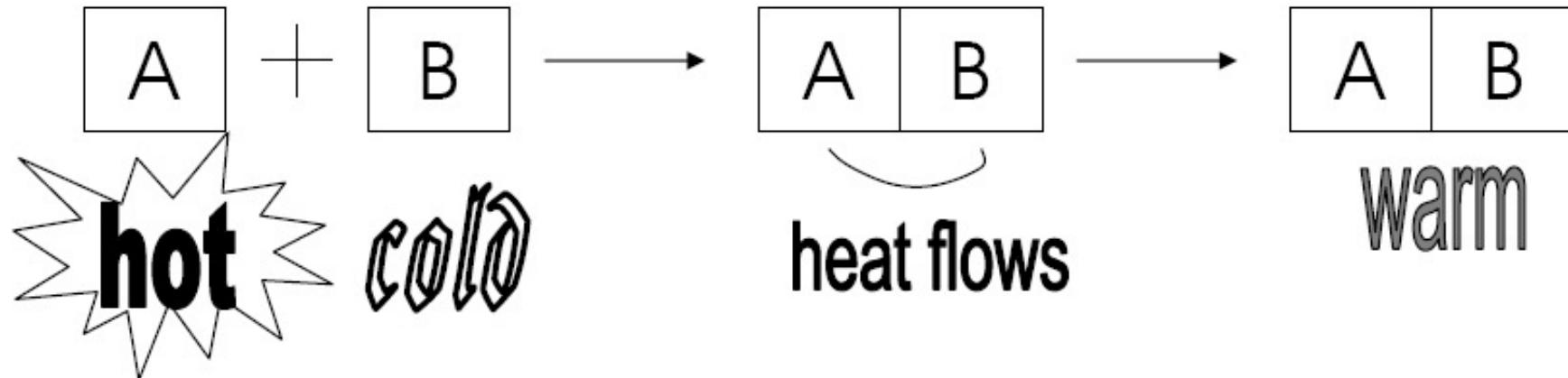
- Notação:



- Trajecto: Sequência de estados intermediários

- Processo: Descreve o trajecto
  - Reversível (sempre em equilíbrio)
  - Irreversível (define a direcção do tempo)
  - Adiabático (não há transferência de calor entre o sistema e o exterior)
  - Isobárico (pressão constante)
  - Isotérmico (temperatura constante)
  - Isocórico (volume constante)
  - 
  - 
  -

## Equilíbrio térmico (não há transferência de calor)



Quando o corpo quente é posto em contacto com um corpo frio, o calor passa espontaneamente do corpo quente para o corpo frio até que fiquem em equilíbrio térmico.

## Lei ZERO da Termodinâmica

Nessa situação os corpos têm a mesma temperatura.

Desenvolvimento de termómetros, escalas de temperatura.

===== ZERO'th LAW of Thermodynamics =====

If  A and  B are in thermal equilibrium and  
 B and  C are in thermal equilibrium,  
then  A and  C are in thermal equilibrium.

Consequence of the zero'th law:

B acts like a thermometer, and  A ,  B , and  C are all  
at the same "temperature".

## Definição operacional de temperatura (T)

É necessário:

- (1) substância
- (2) propriedade que dependa de T
- (3) pontos de referência
- (4) um esquema de interpolação entre pontos de referência.

Exemplo: Termometro do gás ideal com a escala de Celsius.

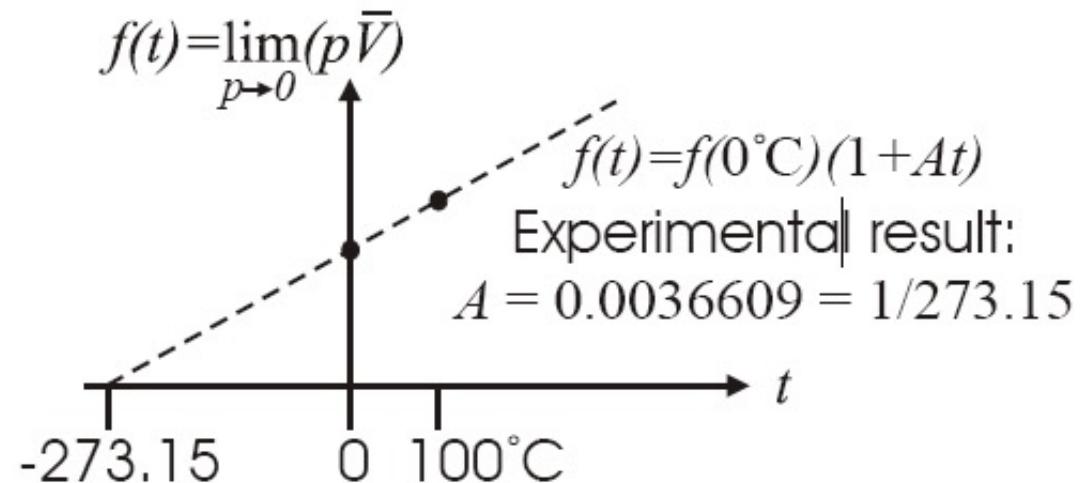
É baseado na lei de Boyle       $\lim(p, V_m)_T = \text{constante} = f(T)$

- a substância é um gás
- $f(T)$  é uma propriedade
- o ponto de ebulação da água ( $100^\circ\text{C}$ ) e o ponto de fusão da água ( $0^\circ\text{C}$ ) são os pontos de referência
- interpolação linear

É baseado na lei de Boyle

$$\lim_{p \rightarrow 0} (p, V_m)_t = \text{constante} = f(t)$$

- a substância é um gás
- $f(t)$  é uma propriedade
- o ponto de ebulação da água ( $100^\circ\text{C}$ ) e o ponto de fusão da água ( $0^\circ\text{C}$ ) são os pontos de referência
- interpolação linear



Nota:  $t = -273.15^\circ\text{C}$  é especial

$t = -273.15^\circ\text{C}$  é designada pelo zero absoluto

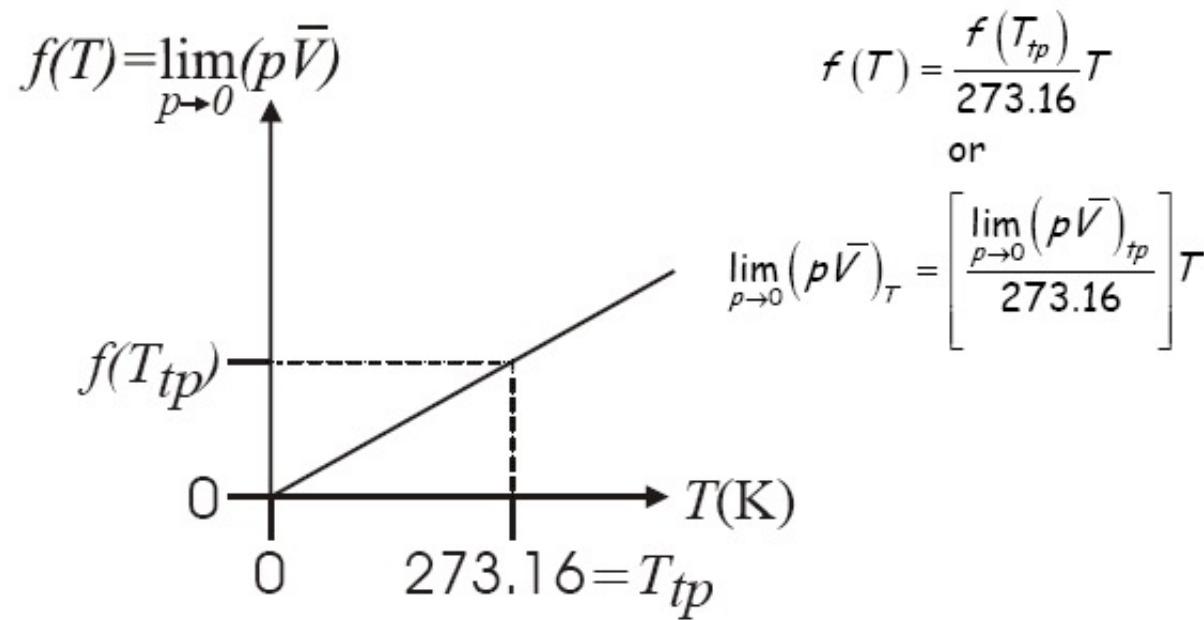
Definir uma nova escala de temperatura (Kelvin)

$$T \text{ (K)} = t \text{ (\textdegree C)} + 273.15 \text{ \textdegree C}$$

Melhores pontos de referência utilizados actualmente na escala de Kelvin

**$T = 0 \text{ K}$  (zero absoluto)**

**$T_{tp} = 273.16 \text{ K}$  (ponto triplo da H<sub>2</sub>O)**



## Gases ideais

Obedecem à Lei de Boyle e à escala de Kelvin

$$\lim_{p \rightarrow 0} (p\bar{V})_T = \left[ \frac{\lim_{p \rightarrow 0} (p\bar{V})_{tp}}{273.16} \right] T \equiv RT$$

define  
the "gas constant"

valid for all gases for  $p \rightarrow 0$

Um gás ideal obedece à equação dos gases perfeitos, qualquer que seja a pressão

$$pV_m = RT$$

( $\Rightarrow$  as moléculas do gás não interactuam)

$$R = \left[ \frac{\lim_{p \rightarrow 0} (p\bar{V})_{tp}}{273.16} \right] = 8.31451 \frac{J}{K \cdot mol^{-1}}$$

Constante dos gases

## Gases ideais

Equação dos gases perfeitos ou Lei dos gases ideais

$$p V_m = R T$$

$$p V = n R T$$

Mistura de gases ideais contendo  $n_i$  moles de cada

$$p_i = \frac{n_i R T}{V} \quad \leftarrow \text{pressão parcial do gás } i$$

$$p = p_{Total} = \sum_i p_i ; \quad X_i = \frac{n_i}{n} \quad \underline{\text{fracção molar do gás } i}$$

$$\boxed{p_i = \frac{n_i}{n} p = y_i p}$$

Lei de Dalton

Uma amostra de gás natural contém 8,24 moles de CH<sub>4</sub>, 0,421 moles de C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> e 0,116 moles de C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>. Se a pressão total dos gases for 1,37 atm, qual é a pressão parcial do propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>)?

$$P_i = Y_i P_T \quad P_T = 1,37 \text{ atm}$$

$$Y_{\text{propano}} = \frac{0,116}{8,24 + 0,421 + 0,116} = 0,0132$$

$$P_{\text{propano}} = 0,0132 \times 1,37 \text{ atm} = 0,0181 \text{ atm}$$
$$0,0183 \text{ bar}$$