

CCM-0124 – Química II

Físico-Química: Estudo dos “porques” da Química

Gases

Termodinâmica

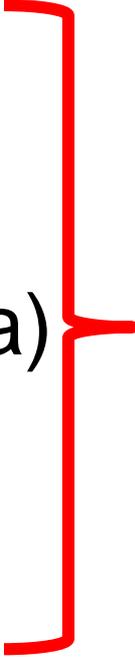
Transformações Físicas

Equilíbrio (Eletroquímica)

Misturas

Diagramas de fases

Cinética Química



Propor um **modelo**,
verificar sua validade
e prever resultados
futuros

Definição de modelo

Modelo: **representação simplificada da realidade**
com uma determinada **finalidade**

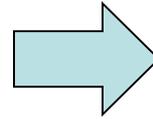
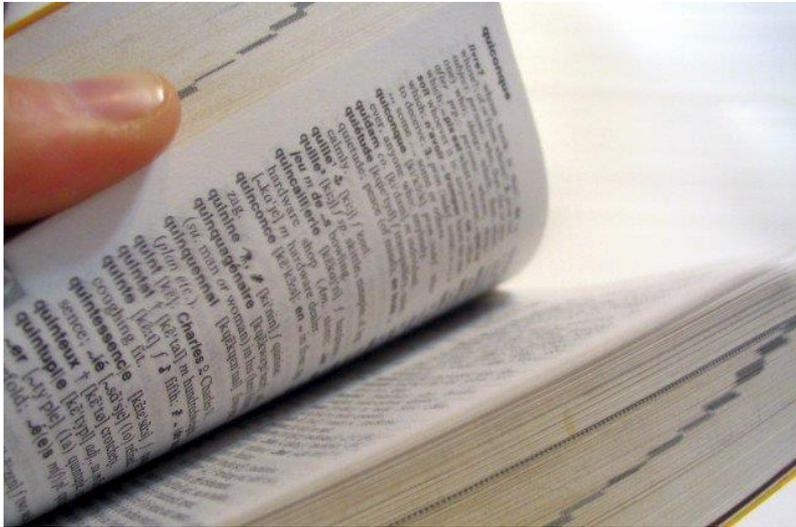


Mesma realidade, finalidades distintas

Qual modelo usamos para átomos, moléculas,
reações?

Definição de modelo

Modelo: **representação simplificada da realidade**
com uma determinada **finalidade**



Mesma realidade, finalidades distintas

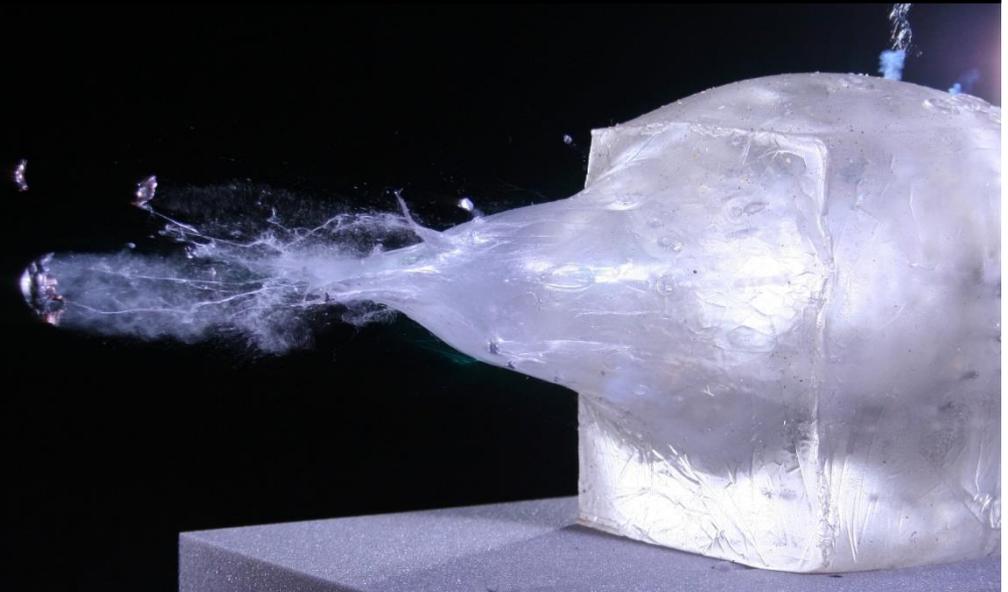
Qual modelo usamos para átomos, moléculas,
reações?

Qual modelo usar?

O que estamos tentando explicar com cada modelo?



Escolha do melhor modelo para determinado uso

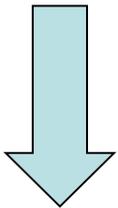


Qualidade do modelo

Karl Popper

Falseabilidade

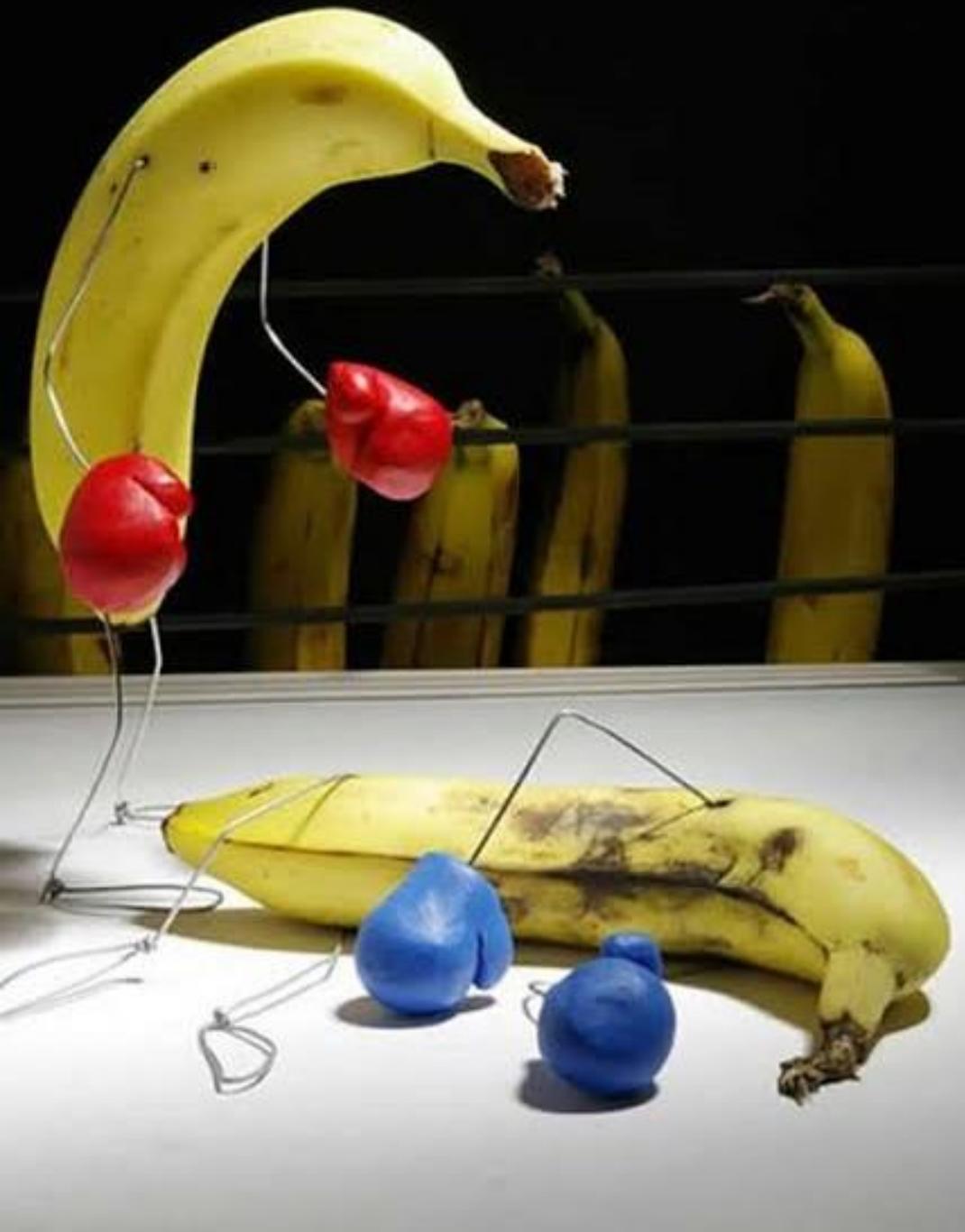
Hipotese: A água e o gelo são a mesma substância



Verificação:
derreter o gelo e
observer o que é
formado

Tese: A água e o gelo são a mesma substância

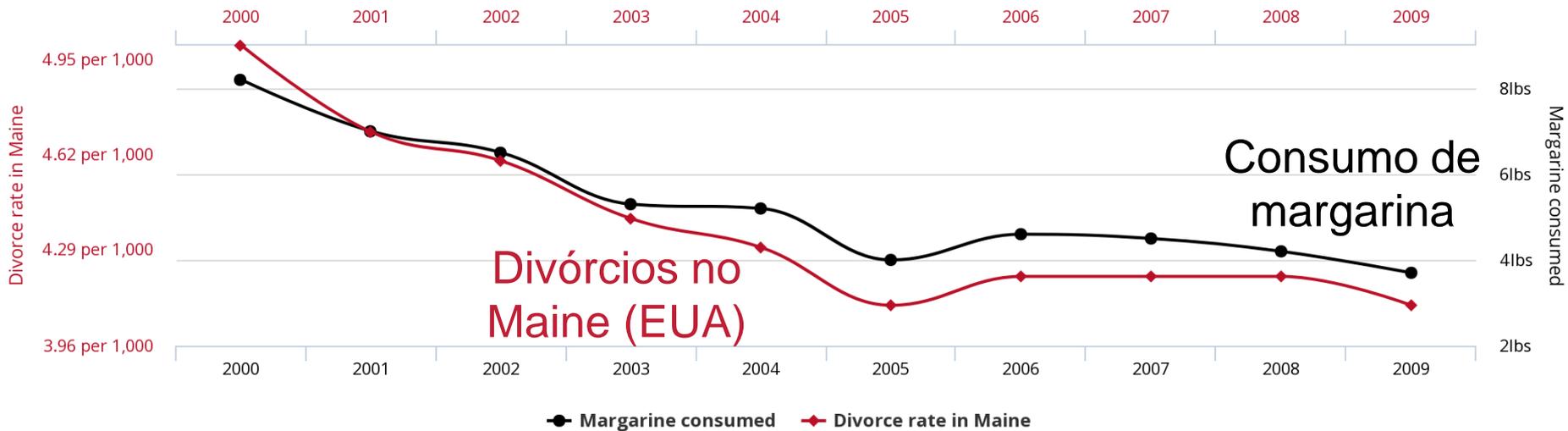




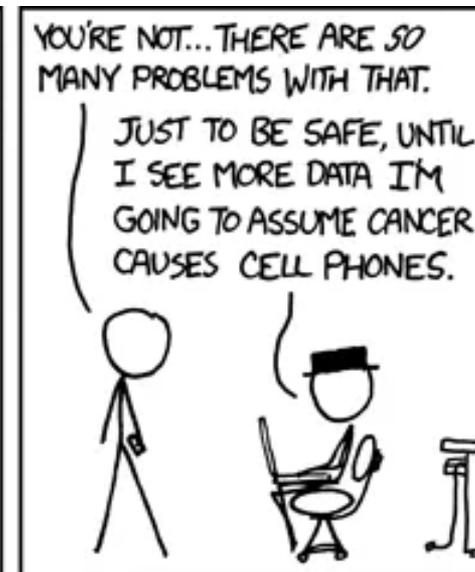
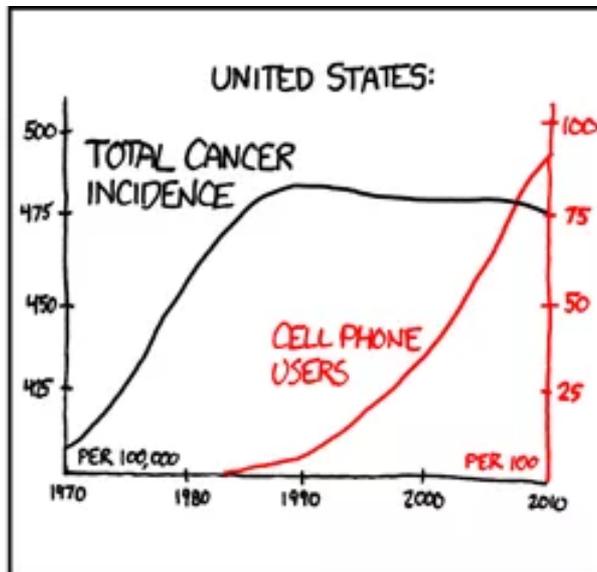
Bananas aparecem manchadas pela manhã pois lutam boxe quando os humanos vão dormir?

Como testar essa hipótese?

Correlação implica causa?



tylervigen.com

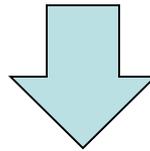


<http://www.tylervigen.com/spurious-correlations>
<http://medium.com/blog/2017/01/19/causation-correlation>

Qual a relação?

Qualidade do modelo

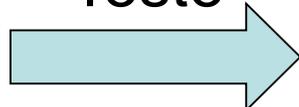
Modelos devem ser
confrontados



Karl Popper - **Falseabilidade**

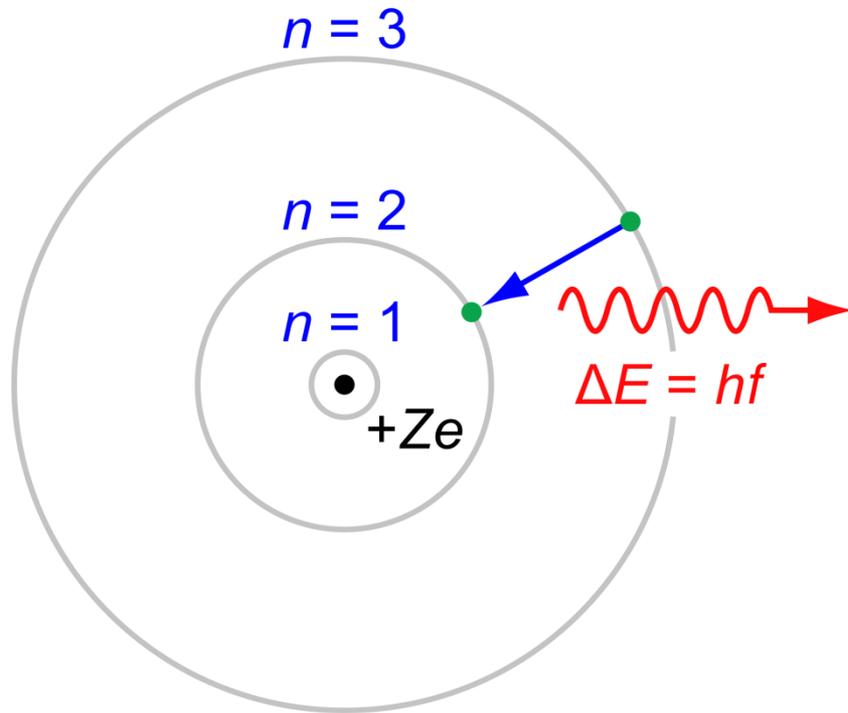
Hipótese 1: átomos são
feitos de partículas com
cargas

Hipótese 2: átomos são
indivisíveis

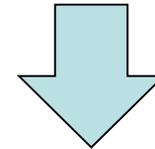
Teste

(Experimento)

Observação:
É possível retirar
partículas carregadas
da matéria.

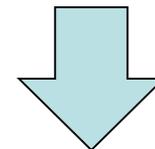
Modelo atômico



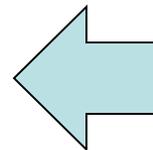
$$H \Psi = E \Psi$$



Sofisticação da modelagem



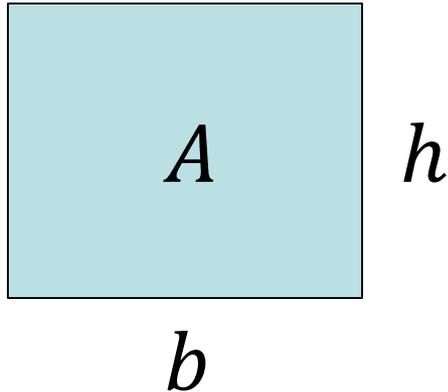
Ferramentas de cálculo



Limites, derivadas parciais, integrais, séries e etc

<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/5/55/Bohr-atom-PAR.svg/2000px-Bohr-atom-PAR.svg.png>

Considerações matemáticas



$$\frac{df(x)}{dx} = D$$

taxa de variação,
 D é a constante de
proporcionalidade

$$A = b \cdot h, b = \text{cte} \quad \frac{dA}{db} = h$$

Se b dobra, A aumenta $2h$

Se b e h são variáveis:

$$\left(\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \right)_y = D_y \quad \left(\frac{\partial A}{\partial b} \right)_h = h$$

taxa de variação com y cte

Considerações matemáticas

$$\left(\frac{\partial A}{\partial b}\right)_h = h \quad \Rightarrow \quad dA = h db$$

Qual valor de ΔA se b varia de b_i para b_f ?

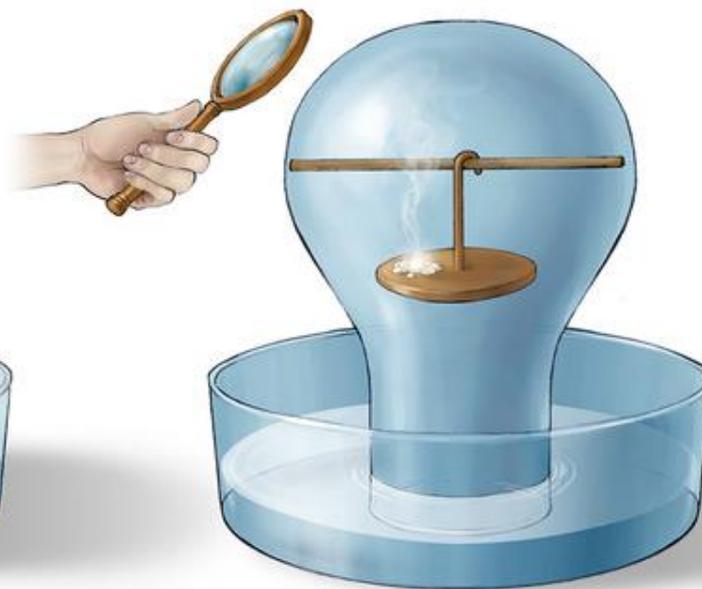
$$dA = h_h db \quad \Rightarrow \quad \int_{A_i}^{A_f} dA = \int_{b_i}^{b_f} h db$$

Derivada total:

$$dA = \left(\frac{\partial A}{\partial b}\right)_h db + \left(\frac{\partial A}{\partial h}\right)_b dh$$

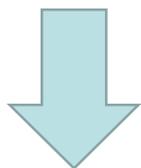
Um simples modelo...

O gás ideal!



Propriedades do ar

- Parte composta por algo que sustenta a chama (vida)
- Outra parte é “inerte”
- Após a chama, nível da água é elevado e ela se torna ácida
- É possível comprimir o ar



- Ar é composto de outras espécies!

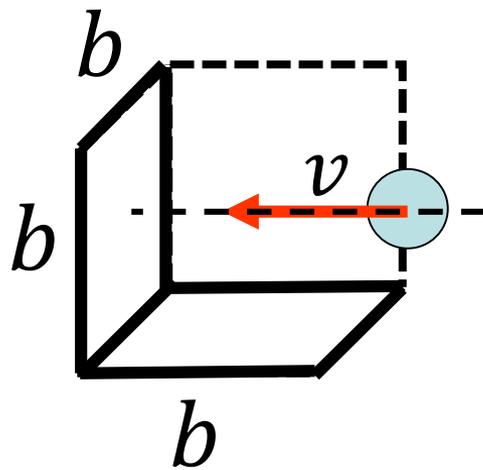


Gases ideais

Variáveis de estado:

Pressão, Volume, **Temperatura** e quantidade
(de matéria)

Correlacionado com energia translacional



Hipotese:

- Partículas pontuais em movimento aleatório
- Partículas e paredes só interagem durante o choque
- Aumento de temperatura causa aumento da velocidade das partículas do gás

Gases ideais

Variáveis de estado:

Pressão, Volume, **Temperatura** e quantidade
(de matéria)

$$P = \frac{mv^2}{V} \rightarrow \text{Correlacionado com energia translacional}$$

Se a hipótese utilizada estiver correta:

$$PV \propto T \quad \rightarrow \quad \left. \begin{array}{l} PV = \mathcal{C} T \\ PV/T = \mathcal{C} \end{array} \right\} \text{ Basta verificar para um gás ideal}$$

Proporcional

Constante de proporcionalidade