

## PROGRAMA DE DISCIPLINA

<b>Código:</b> PEQ-5002	<b>Disciplina:</b> Termodinâmica Química
<b>Créditos:</b> 04	<b>Carga Horária:</b> 60 horas
<b>Linha(s) de Pesquisa:</b> Comum a todas as linhas de pesquisa do Programa.	
<b>Prof. Responsável:</b> Osvaldo Chiavone Filho	

### 1. EMENTA

Conceitos Básicos; Propriedades Termodinâmicas de Componentes Puros; Propriedades Termodinâmicas de Substâncias Puras Reais; Propriedades Termodinâmicas de Misturas; Equilíbrio Químico.

### 2. OBJETIVO

Visa ensinar os alunos os princípios e conceitos de termodinâmica química com vista a oferecer uma base e um formalismo para os fenômenos e processos na área de Engenharia Química.

### 3. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

#### 1. Conceitos Básicos

- 1.1. Introdução (Termodinâmica Clássica/Estatística/Molecular do Equilíbrio; Importância Industrial, e.g. Processos de Separação; Termodinâmica Molecular uma Ferramenta de Representação das Propriedades de Interesse, e.g. Equilíbrio de Fases e Químico)
- 1.2. Grandezas Fundamentais (Sensoriais) e Definidas (Derivadas)
- 1.3. Experiência de Joule (Trabalho/Calor/Energia Interna/1ª lei)
- 1.4. Sistema (Aberto/Fechado; Homogêneo/Heterogêneo; Substância Pura/Multicomponente; Processo)
- 1.5. Variáveis Intensivas e Extensivas
- 1.6. Estado Termodinâmico e Funções de Estado
- 1.7. Entalpia
- 1.8. Processo de Fluxo Permanente ( $\Delta H=Q-W$ )
- 1.9. Equilíbrio/Regra das Fases (ilustrações)
- 1.10. Processos Reversíveis versus Irreversíveis
- 1.11. Capacidade Calorífica ( $C_p/C_v$ ) / Efeitos Térmicos

- 1.12. Entropia (2ª Lei/Máquina Térmica/Eficiência/Escala Termodinâmica de Temperatura/Enunciado Matemático da 2ª Lei/Termodinâmica Estatística/3ª Lei)
  - 1.13. Relações Matemáticas entre as Propriedades Termodinâmicas (Equações Fundamentais/Relações de Identidade e de Maxwell)
  - 1.14. Introdução à Análise Termodinâmica de Processos
  - 1.15. Potencial Químico (Gibbs, 1875)
  - 1.16. Propriedade Parcial Molar/Teorema de Euler/Equação de Gibbs-Duhem
  - 1.17. Fugacidade (Lewis, 1901) - Coef. de Fugacidade / Atividade - Coef. de Atividade
  - 1.18. Aplicação da Lei de Raoult para o Equilíbrio Líquido-Vapor
  - 1.19. Métodos Experimentais para Determinar o Equilíbrio de Fases
2. Propriedades Termodinâmicas de Componentes Puros
    - 2.1. Comportamento  $PvT$  das Substâncias Puras (Diagramas  $PT$  e  $Pv$ )
    - 2.2. Propriedades Críticas (Bancos Eletrônicos de Propriedades Termodinâmicas)
    - 2.3. Propriedades Termodinâmicas para Gases Ideais ( $\Delta S_{gi}$ ,  $\Delta H_{gi}$  e  $C_{vgi}/C_{pgi}$ )
    - 2.4. Equação de Estado do Virial (Fator de Compressibilidade/Potenciais Intermoleculares)
    - 2.5. Equações de Estado Cúbicas, i.e., van der Waals, Soave-Redlich-Kwong, Peng-Robinson (Prática Computacional)
    - 2.6. Fator Acêntrico, Correlações Generalizadas (Princípio dos Estados Correspondentes)
    - 2.7. Propriedades Residuais (Cálculo de Propriedades Termodinâmicas a Partir de Equações de Estado;  $G$  função geradora); Diagramas Termodinâmicos ( $TS$ ,  $PH$  e  $HS$ )
    - 2.8. Métodos de Estimação de Densidades de Líquidos Saturados e Comprimidos (Teórico-Computacional)
    - 2.9. Correlação de Dados de Pressão de Vapor (Antoine/DIPPR - Teórico-Computacional)
    - 2.10. Métodos de Estimação do Calor de Vaporização (Reid et al., 1987 - Teórico-Computacional)
    - 2.11 Propriedades Termodinâmicas de Substâncias Puras Reais
3. Propriedades Termodinâmicas de Misturas
    - 3.1. Mistura de Gases Ideais/Solução Ideal/Cálculo Flash L-V (mistura ideal)
    - 3.2. Propriedades de Excesso e Residuais
    - 3.3. Coeficientes de Atividade ( $\gamma_i$ )/Estado Padrão (normalização)/ $G^E$
    - 3.4. Correlação/Cálculo de Dados de Equilíbrio Líquido-Vapor pelo Tratamento  $\gamma$
    - 3.5. Aplicação da Equação de Gibbs-Duhem - Teste de Consistência Termodinâmica (Teórico-Computacional)
    - 3.6. Teoria das Soluções (Modelos para  $\gamma_i$ : van Laar, Scatchard-Hildebrand, Lattice, Flory-Huggins, Wilson-Composição Local, Teoria dos Dois Líquidos e Teoria Química)
    - 3.7. Modelo UNIQUAC/UNIFAC (Contribuição de Grupos, Aplicações/Limitações)
    - 3.8. Correlação/Predição de Dados de Equilíbrio Líquido-Vapor com UNIQUAC/UNIFAC (Método da  $P$  Total/Ponto de Bolha/Flash; Teórico-Computacional)

- 3.9. Aplicação de Equações de Estado (EDE) para Misturas (Prática Computacional)
- 3.10. Cálculo de Dados de Equilíbrio Líquido-Vapor pelo Tratamento  $\phi$ , i.e. com EDE (Ponto de Bolha/Flash; Teórico-Computacional)
- 3.11. Solubilidade de Sólidos/Líquidos/Gases em Líquidos
- 4. Equilíbrio Químico
  - 4.1. Coordenada de Reação
  - 4.2. Critério de Equilíbrio nas Reações Químicas
  - 4.3. Energia Livre de Gibbs Padrão de Reação e a Constante de Equilíbrio
  - 4.4. Relações para a Constante de Equilíbrio com a Composição
  - 4.5. Cálculo da Conversão no Equilíbrio
  - 4.6. Efeito da Temperatura, Pressão e Composição sobre a Constante de Equilíbrio de Sistemas com Reação

#### 4. PROCEDIMENTOS DE ENSINO

Aulas expositivas, trabalhos de pesquisa e práticas computacionais. Os conceitos da termodinâmica são abstratos e tem sido observado que os cálculos ilustram a ferramenta de termodinâmica molecular do equilíbrio, que não é a microscópica, ou estatística, nem a macroscópica ou clássica. É também oferecido ao aluno a oportunidade de escrever um trabalho na forma de um artigo científico usando os dados experimentais da literatura e métodos de cálculo ministrados na disciplina, i.e. uma modelagem termodinâmica. Este trabalho é apresentado de forma oral, simulando um evento científico com debate.

#### 5. FORMAS E CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO

Atividade	Peso na Avaliação (%)
1ª Prova - Capítulos 1 e 2 (metade do semestre)	25
2ª Prova - Capítulos 3 e 4 (final do semestre)	25
"Paper Work" com Apresentação Escrita e Oral	25
Trabalhos ou Práticas Computacionais	25

#### 6. BIBLIOGRAFIA

- AZEVEDO, E.G. *Termodinâmica aplicada*. Escolar Editora, Lisboa. 1995.
- CALEN, H.B. *Thermodynamics*. John Wiley, 1960.
- CHIAVONE-FILHO, O. *Práticas computacionais de termodinâmica do equilíbrio*. I Workshop sobre metodologias de ensino. Anais – Digitalizado, UFFRJ, 1996.
- KYLE, B.G. *Chemical and process thermodynamics*. Prentice-Hall, Inc. 1992.
- MODELL, M.; REID, R.C. *Thermodynamics and Its applications*. Prentice-Hall, Inc. 1983.

PITZER, K.S. *Thermodynamics*. 3. ed., New York: McGraw-Hill. 1995.

PRAUSNITZ, J.M.; ECKERT, Orye; O'CONNELL. *Computer calculations for multicomponent vapor-liquid equilibria*. Prentice-Hall, Inc. 1980.

PRAUSNITZ, J.M.; LICHTENTHALER, R.N.; AZEVÊDO, E.G. *Molecular thermodynamics of fluid-phase equilibria*. 1999 (3. ed.), 1986 (2. ed.), 1969 (1. ed.), Prentice-Hall, Inc.

REID, R.C.; PRAUSNITZ, J.M.; POLING, B.E. *Properties of gases and liquids*. 1987 (4. ed.), 1977 (3. ed.), McGraw-Hill.

ROWLINSON, J.S.; SWINTON, F.L. *Liquid and liquid mixtures*. Butterworth, 1982.

SANDLER, S.I. *Chemical, biochemical and engineering thermodynamics*. 4. ed., John Wiley & Sons, 2006.

SMITH, J.M.; VAN NESS, H.C.; ABBOTT, M.M. *Introduction to chemical engineering thermodynamics*. 5. ed., New York: McGraw-Hill, 1996.

WALAS, S.M. *Phase equilibria in chemical engineering*. Butterworth-Heinemann, 1985.