



Plano de Ensino

Universidade Federal do Espírito Santo

Campus de São Mateus

Curso: Engenharia Química - São Mateus

Departamento Responsável: Departamento de Engenharia e Tecnologia

Data de Aprovação (Art. nº 91): 21/07/2023

DOCENTE PRINCIPAL : YURI NASCIMENTO NARIYOSHI

Matrícula: 2339586

Qualificação / link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/2655730779144916>

Disciplina: TERMODINÂMICA II

Código: DET11741

Período: 2023 / 2

Turma: 36.1

Pré-requisito:

Carga Horária Semestral: 60

Disciplina: DET11566 - TERMODINÂMICA I

Distribuição da Carga Horária Semestral

| Créditos: 3 | Teórica | Exercício | Laboratório |
|--------------------|----------------|------------------|--------------------|
| | 45 | 0 | 15 |

Ementa:

Princípios do equilíbrio de fases; equilíbrio líquido/vapor; diagramas de fase PV, TS, HS e Hx; Teoria das misturas; Misturas de Gases Ideais, Soluções Ideais; Princípios do Equilíbrio de Fases; A Formulação Gama Phi do Equilíbrio de Fases; Fugacidade; Coeficiente de Fugacidade; Atividade, Coeficiente de atividade; Equilíbrio Químico; Ordem de Reação e a Constante de Equilíbrio; Reações Homogêneas e Reações Heterogêneas.

Objetivos Específicos:

Compreender a formulação do problema de equilíbrio de fases abordado pela Termodinâmica II; Especificar uma propriedade termodinâmica para determinar o equilíbrio de fases; Verificar os papéis da energia e da entropia no equilíbrio de fases.

Conteúdo Programático:

- Equilíbrio de Fases:

A natureza do equilíbrio. A regra de fases e o teorema de Duhem. A Energia de Gibbs como critério para o Equilíbrio de Fases. Papéis da Energia e da Entropia no Equilíbrio de Fases. A equação de Clapeyron e de Clausius-Clapeyron. Propriedades parciais molares. Equação de Gibbs-Duhem. Propriedades de mistura. Relações entre grandezas parciais molares. Potencial químico e sua dependência com a temperatura e pressão.

- Fugacidade:

Definição de fugacidade. Critérios para o equilíbrio em termos da fugacidade. Determinação da fugacidade e do coeficiente de fugacidade para gases puros e mistura de gases. A regra de Lewis da fugacidade. Propriedades de misturas de gases ideais. Solução ideal. Fugacidade na fase líquida. Estados de referência para a fase líquida. Propriedades em excesso. Propriedades de Mistura incluindo propriedades em excesso. Relações termodinâmicas entre coeficientes de atividade. Modelos para coeficiente de atividade baseados em energia de Gibbs em excesso. Abordagem da equação de estado para a fase líquida. Fugacidade na fase sólida.

- Diagrama de fases:

Comportamento qualitativo do ELV. Modelos simples para ELV. Lei de Raoult (gás ideal/solução ideal). Correlações para valores de K. Lei de Raoult modificada. A formulação gama/phi do ELV: Problemas Bolha T, Bolha P, Orvalho T, Orvalho P. Cálculo flash isotérmico. ELV (gás real, solução real). Azeótropos. Ajuste de modelos de coeficiente de atividade com dados ELV. ELV a partir de equações cúbicas. Equilíbrio e Estabilidade. Equilíbrio Líquido-Líquido. Equilíbrio Líquido-Líquido-Vapor (ELLV). Equilíbrio Sólido-Líquido. Equilíbrio Sólido-Sólido. Propriedades Coligativas.

Equilíbrio de reações químicas:

Reação Química e Energia de Gibbs. Equilíbrio com uma única reação. Cálculo de K a partir de dados termodinâmicos. Cálculo de K por meio da energia de Gibbs de formação. Dependência de K com a temperatura. Relação da constante de equilíbrio e a concentração das substâncias que participam da reação (em fase gasosa, líquida e heterogênea). Estudo de múltiplas reações. Solução de Equilíbrios de Várias Reações por Minimização da Energia de Gibbs.

Metodologia:

Aula dialogada; leitura e pesquisa; pesquisa e atividades on-line; trabalhos e projetos; e atividades em grupo.

Critérios / Processo de avaliação da Aprendizagem :

As duas notas semestrais P1 e P2 serão compostas por avaliações somativas, em que serão utilizados provas escritas e/ou seminários como instrumentos de avaliação após o ensino de determinados conteúdos. Os alunos com média parcial do semestre (MP) igual ou superior a 7,0 (sete) e com frequência regimental mínima de 75% serão aprovados. A MP contemplará a média aritmética das notas semestrais, conforme: $MP=(P1+P2)/2$. A prova final (PF) constará em uma avaliação somativa também e abrangerá todo o conteúdo da disciplina para verificação dos objetivos alcançados. Após a realização da PF, os alunos com média final (MF) igual ou superior a 5,0 (cinco) serão aprovados. A MF será calculada conforme: $MF=(MP+PF)/2$.

Bibliografia básica:

1. SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química, 3ª ed., Editora Guanabara Dois S.A., 1980.
2. SANDLER, S. I. Chemical and Engineering Thermodynamics, 2ª ed., John Wiley & Sons, 1989.
3. GMEHLING, J. ; KOLBE, B. Thermodynamic, 1ª ed., Georg Thieme verlag, 1988.
4. VAN NESS, H. C.; SMITH, J. M.; ABBOTT, M. M. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química. LTC, 1996.
5. CALLEN H.B. Thermodynamics And An Introduction To Thermostatistics. 2ed. Wiley, 1985.

Bibliografia complementar:

1. KORETSKY, M. D. Termodinâmica para Engenharia Química, 1ª Ed., Rio de Janeiro : LTC, 2007
2. SANDLER, S. I. Chemical and Engineering Thermodynamics, 2ª ed., John Wiley & Sons, 1989.
3. ÇENGEL, Y. A.; BOLES, M.A. Termodinâmica, 7 Ed., AMGH Editora Ltda, 2013
4. GMEHLING, J. ; KOLBE, B. Thermodynamic, 1st ed., Georg Thieme verlag, 1988.
5. LEVENSPIEL, O. Termodinâmica Amistosa para Engenheiros. Edgard Blucher.

Cronograma:

| Aula | Data | Descrição | Exercícios | Observações |
|------|------------|---|------------|-------------|
| 01 | 14/08/2023 | Apresentação do plano de ensino | | |
| 02 | 16/08/2023 | Introdução ao Equilíbrio de Fases - Regra de Fases de Gibbs e Teorema de Duhem | | |
| 03 | 21/08/2023 | Critério para Equilíbrio de Fases a T e P ctes - O equilíbrio de fases de uma substância pura no diagrama PT | | |
| 04 | 23/08/2023 | Os papéis de H e S no Eq. De Fases de um sistema a T e P ctes - As Eqs de Clapeyron e Clausius-Clapeyron | | |
| 05 | 28/08/2023 | Determinação da H de vaporização por Clausius-Clapeyron - Termodinâmica das Misturas: Propriedades Parciais Molares | | |
| 06 | 30/08/2023 | Significado Físico das Propriedades Parciais Molares - A Eq. De Gibbs-Duhem | | |
| 07 | 04/09/2023 | Determinação Gráfica de Propriedades Parciais Molares - Determinação Analítica de Propriedades Parciais Molares | | |
| 08 | 06/09/2023 | Simulador Wolfram - Propriedades de Misturas | | |
| 09 | 11/09/2023 | O potencial químico como critério de equilíbrio - Mistura de Gases Ideais | | |
| 10 | 13/09/2023 | Exercício de Mistura de GI a T e P ctes - Exercício de Mistura Não | | |

| Aula | Data | Descrição | Exercícios | Observações |
|------|------------|--|------------|-------------|
| | | Isotérmica e Isobárica de GI | | |
| 11 | 18/09/2023 | Fugacidade: Definição e Aplicação - Determinação da Fugacidade Usando Tabelas de Vapor | | |
| 12 | 20/09/2023 | Cálculo da Fugacidade de um gás puro usando equações de estado - Determinação da fugacidade usando correlações generalizadas | | |
| 13 | 25/09/2023 | A fugacidade e o coeficiente de fugacidade de compostos em misturas - Cálculo da fugacidade de um vapor puro com Peng-Robinson no XSEOS | | |
| 14 | 27/09/2023 | Cálculo da fugacidade de uma mistura de gases com Peng-Robinson no XSEOS - Solução ideal: definição, Regra de Lewis-Randall e Lei de Henry | | |
| 15 | 02/10/2023 | Cálculo da Fugacidade de um líquido comprimido - Relações termodinâmicas entre o coeficiente de atividade | | |
| 16 | 04/10/2023 | Propriedades em excesso - Teste de consistência termodinâmica de dados de coeficiente de atividade | | |
| 17 | 09/10/2023 | Determinando os coeficientes de atividade do modelo de Margules 1-parâmetro - Modelos de gE: classificação, influência no equilíbrio e obtenção XEOS | | |
| 18 | 11/10/2023 | Aplicações dos modelos de energia de Gibbs em excesso - Relação entre entalpia de solução e entalpia de mistura | | |
| 19 | 16/10/2023 | Entalpia de solução de gases e sólido - Diagrama de entalpia versus concentração | | |
| 20 | 18/10/2023 | Equilíbrio líquido-vapor: a lei de Raoult - Equilíbrio líquido-vapor: a regra da alavanca | | |
| 21 | 23/10/2023 | Simulador Wolfram: regra da alavanca - Os problemas de ELV | | |
| 22 | 25/10/2023 | Comparando os diagramas Pxy e Txy do ELV - Comportamento qualitativo do ELV | | |
| 23 | 30/10/2023 | Flash Isotérmico - Lei de Raoult Modificada | | |
| 24 | 01/11/2023 | Azeótropo no ELV - Quebrando Azeótropos - Resolução de Problemas iterativos do ELV | | |
| 25 | 06/11/2023 | Ajuste de parâmetros de modelos aos dados do ELV - Obtenção de diagramas do ELV p/ sistemas não ideais | | |
| 26 | 08/11/2023 | Solubilidade de Gases em Líquidos - Dependência da Constante de Henry com P e T | | |
| 27 | 13/11/2023 | Equilíbrio Líquido-Líquido | | |
| 28 | 20/11/2023 | Equilíbrio Sólido-Líquido | | |
| 29 | 22/11/2023 | Propriedades Coligativas | | |
| 30 | 27/11/2023 | Introdução ao Equilíbrio Químico | | |

| Aula | Data | Descrição | Exercícios | Observações |
|-------------|-------------|---|-------------------|--------------------|
| 31 | 29/11/2023 | Cálculo da Constante de Equilíbrio | | |
| 32 | 04/12/2023 | Cálculo da Constante de Equilíbrio para Reações Simples e Múltiplas | | |

Observação: