

EQ213 - Modelos Termodinâmicos e Cinéticos

Ementa: Modelos termodinâmicos para cálculo de propriedades. Modelos cinéticos de reações químicas, bioquímicas e eletroquímicas.

Vetor: OF:S-5 T:02 P:01 L:01 O:00 D:00 PE:00 OE:00 HS:04 SL:04 C:04 EX:S

Pré-requisito(s): MA211, MC102 e EQ211

Carga horária total: 60 horas (4 créditos)

Tipo: Obrigatória

Conteúdo Programático

Esta componente curricular pertence ao percurso formativo da **Competência Específica 1** do Projeto Pedagógico do Curso, tendo como semestres ideais o terceiro semestre do curso integral e o quarto semestre do curso noturno.

Objetivos de aprendizagem:

Ao final da disciplina, o aluno deve ser capaz de:

- i) Estimar propriedades termodinâmicas, avaliando a adequação dos modelos e métodos usados
- ii) Determinar cinética de reações químicas, eletroquímicas e bioquímicas
- iii) Desenvolver e propor modelos cinéticos

Proposta pedagógica:

Nesta componente curricular, modelos cinéticos e termodinâmicos serão discutidos. Na parte cinética, além da apresentação dos fundamentos subjacentes às cinéticas química, bioquímica e eletroquímica, é importante que o aluno consiga determinar ou propor um modelo cinético a partir de dados experimentais. Para isso, a execução de um experimento para a determinação do modelo cinético é sugerida. Na parte termodinâmica, o enfoque está na apresentação de modelos para a descrição de fluidos, como equações de estado, que sirvam para a predição ou correlação de propriedades termodinâmicas. Assim, sugere-se a execução de um experimento para a determinação da pressão de vapor de um dado composto. Esta componente curricular deve ser oferecida de forma integrada à disciplina EQ214 - Sistemas Biológicos 2. Assim, trabalhos integrados, por exemplo, na parte de cinética bioquímica que envolvam a resolução numérica de sistemas de equações diferenciais ordinárias.

Conteúdos:

1. Termodinâmica Clássica (Tempo sugerido: 10 horas)

- 1.1 Equação Fundamental da Termodinâmica
- 1.2 Transformada de Legendre, definição de entalpia, energias de Helmholtz e de Gibbs
- 1.3 Relações de Maxwell
- 1.4 Teorema de Euler das Funções Homogêneas e Equação de Gibbs-Duhem
- 1.5 Funções residuais
- 1.6 Grandeza parcial molar e Grandeza de excesso
- 1.7 Descrição de misturas

2. Equações de Estado (Tempo sugerido: 10 horas)

- 2.1 Modelo ideal e equação virial
- 2.2 Equação de van der Waals
- 2.3 Equações de Peng-Robinson e Redlich-Kwong-Soave
- 2.4 Equações para compostos associativos: CPA e SAFT

3. Cálculo de propriedades (Tempo sugerido: 10 horas)

- 3.1 Variações de energia, entalpia e entropia
- 3.2 Cálculo de densidade e pressão de vapor
- 3.3 Cálculo de propriedades derivadas: calor específico, compressibilidade isotérmica, coeficiente de expansão térmica, coeficiente de Joule-Thomson e velocidade do som

4. Cinética química (Tempo sugerido: 22 horas)

- 4.1 Derivando a taxa da reação
- 4.2 Equação de velocidade: Influência da composição
- 4.3 Efeito da Temperatura: Equação de Arrhenius, Teoria cinética dos gases e Teoria do Estado de Transição
- 4.4 Reações não-elementares e seus mecanismos
- 4.5 Modelos de reatores ideais para coleta de dados cinéticos
- 4.6 Análise e interpretação de dados cinéticos: Métodos integral e diferencial de análise; método da pressão total
- 4.7 Reações múltiplas
- 4.8 Reações catalíticas heterogêneas
- 4.9 Adsorção e reação na superfície de catalisadores

5. Cinética bioquímica (Tempo sugerido: 4 horas)

- 5.1 Cinética celular: modelo de Monod e suas extensões
- 5.2 Cinética enzimática: modelo de Michaelis-Menten

6. Modelagem eletroquímica (Tempo sugerido: 4 horas)

- 6.1 Modelos de dupla camada elétrica
- 6.2 Reações de oxirredução
- 6.3 Potencial de eletrodo
- 6.4 Equação de Nernst
- 6.5 Modelo de Butler-Volmer

Bibliografia:

Fogler, H. S.; **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**, 3a edição, LTC Editora, Rio de Janeiro, 2002.

Levenspiel, O.; **Chemical Reaction Engineering**; 3a edição, John Wiley & Sons, New York, 1998.

Poling, B. E.; Prausnitz, J. M.; O'Connell, J. P., **The properties of gases and liquids**, 5 ed, New York: McGraw-Hill, 2001

Hill Jr, C. G.; Root, T. W., **Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design John Wiley & Sons; 2nd ed, 2014**

Schmidell, W.; Lima, U. A.; Aquarone, E.; Borzani, W., **Biotechnologia Industrial** (volumes 1,2 e 3), Editora Edgard Blücher Ltda., São Paulo, 2001.

Tester, J. W.; Modell, M., **Thermodynamics and Its Applications**, 3 ed, Upper Saddle River: Prentice Hall PTR, 1997

Ticianelli, E. A.; Gonzáles, E. R., **Eletroquímica**, 2 ed, São Paulo: Edusp, 2013