

EQ217 - Equilíbrio de fases e Equilíbrio Químico

Ementa: Métodos para o cálculo de equilíbrio de fases e de equilíbrio químico.

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): EQ211, EQ213 e EQ220

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 quinto semestre do curso integral e o sexto semestre do curso noturno.

Objetivos de aprendizagem:

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

- i) Estimar, analisar e julgar propriedades de equilíbrio de fases
- ii) Resolver problemas de equilíbrio de fases e de equilíbrio químico

Proposta pedagógica:

Esta componente curricular é dedicada ao estudo dos equilíbrios de fases e químico, com enfoque na resolução de problemas envolvendo esses conceitos. A disciplina EQ213 - Modelos Cinéticos e Termodinâmicos antecede esta componente curricular. Nessa disciplina, os alunos trabalharão com misturas binárias e multicomponentes.. Sugere-se que a apresentação dos problemas seja sempre motivada por problemas de engenharia química e que os alunos tenham oportunidade de utilizar planilhas e simuladores computacionais para a resolução dos mesmos. Sugere-se também a realização de experimentos para aquisição, tratamento e análise de dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor (ebuliômetro Fischer), equilíbrio líquido-líquido (células de equilíbrio) e equilíbrio sólido-líquido (solubilidade).

Conteúdos:

1. Critérios de Equilíbrio e de Estabilidade (Tempo sugerido: 8 horas)

- 1.1 Equação Fundamental da Termodinâmica
- 1.2 Potencial químico
- 1.3 Critérios de Equilíbrios de Fases
- 1.4 Critérios de Estabilidade

2. Termodinâmica de sistemas ideais e não ideais (Tempo sugerido: 8 horas)

- 2.1 Propriedades parciais molares, propriedades de mistura, grandezas excedentes
- 2.2 Fugacidade de um componente em mistura
- 2.3 Coeficiente de atividade
- 2.4 Modelos moleculares e métodos preditivos para o coeficiente de atividade

3. Equilíbrio líquido-vapor (Tempo sugerido: 14 horas)

- 3.1 Critério da isofugacidade
- 3.2 Abordagem gamma-phi e abordagem phi-phi
- 3.3 Construção de diagramas de equilíbrio
- 3.4 Cálculo flash - ponto de bolha, ponto de orvalho e isotérmico (equação de Rachford-Rice)
- 3.5 Solubilidade de gases em líquidos
- 3.6 Análise de dados experimentais de ELV e teste de consistência termodinâmica
- 3.7 Aplicações

4. Equilíbrio líquido-líquido (Tempo sugerido: 10 horas)

- 4.1 Critério da isofugacidade
- 4.2 Misturas binárias
- 4.3 Minimização da energia de Gibbs do sistema
- 4.4 Misturas ternárias
- 4.5 Critérios para seleção de solventes
- 4.6 Aplicações

5. Equilíbrio sólido-líquido (Tempo sugerido: 10 horas)

- 5.1 Equação do equilíbrio sólido-líquido
- 5.2 Misturas binárias ideais e não ideais
- 5.3 Fase sólida
- 5.4 Aplicações

6. Equilíbrio químico (Tempo sugerido: 10 horas)

- 6.1 Critério de equilíbrio
- 6.2 Constante de equilíbrio
- 6.3 Reações químicas independentes e graus de avanço
- 6.4 Cálculo da composição de equilíbrio - minimização da energia de Gibbs
- 6.5 Aplicações

Bibliografia:

KORETZKY, M.D. Engineering and Chemical Thermodynamics, 2a. Edição, 2013.

Michelsen, M. L.; Mollerup, J. M., **Thermodynamic models: Fundamentals & Computational Aspects**, 2 ed, Tie-Line Publications, 2007.

SANDLER, S.I. - Chemical, Biochemical and Engineering Thermodynamics – John Wiley, 4a. edição, 2006.

SANDLER, S.I. – Using Aspen Plus in Thermodynamics Instruction – A Step-by-step guide, Wiley, 2015

Elliot e Lyra