

Termodinâmica Química

Ocorrência: 3º Semestre

Carga horária: T 30,0h; TP 22,5h; OT 7,5h

Área disciplinar: Química

Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):

A unidade curricular tem por objetivo que os alunos adquiram conhecimentos e ferramentas de trabalho nas áreas da Termodinâmica aplicada às Tecnologias do Petróleo.

Pretende-se que os alunos compreendam e saibam utilizar as propriedades físicas dos gases ideais e reais, saibam aplicar as três leis da termodinâmica a reações, conseguindo determinar trocas de energia sobre a forma de calor e/ou trabalho, variações de entropia e espontaneidade dos processos.

É essencial que os estudantes consigam interpretar os diagramas de fases de substâncias puras, compreendendo os conceitos de pontos triplo e crítico, bem como interpretar os diagramas de fases de diferentes misturas, compreendendo-os e reconhecendo-os como fundamentais para vários processos de separação.

É ainda necessário que os alunos entendam as diferenças entre misturas líquidas reais e ideais, compreendendo o conceito de coeficiente de atividade, permitindo-lhes controlar as variáveis que afetam os equilíbrios.

Conteúdos programáticos:

1. Breve revisão a alguns conceitos fundamentais da Física
2. Gases: Gases perfeitos. Teoria cinética dos gases. Gases reais – Equações de estado (abreviado).
3. 1ª Lei da termodinâmica: Definições. Trabalho e calor. Energia interna e entalpia.
4. Termoquímica: Entalpias de transição. Tipos de entalpias. Efeito da temperatura.
5. 2ª Lei da termodinâmica: Entropia e a 2ª lei. Entropias absolutas e 3ª lei. Espontaneidade e energia de Gibbs - propriedades.

6. Equilíbrio das fases: Termodinâmica das transições. Variação da energia de Gibbs com a pressão e com a temperatura. Diagramas de fases – interpretação e exemplos. Estrutura molecular dos líquidos.

7. Misturas: Introdução. Soluções ideais. Soluções reais e atividades. Propriedades coligativas. Diagramas de fase de misturas - líquidos voláteis e não voláteis e sólido-líquido.

8. Equilíbrio químico: Termodinâmica. Energia de Gibbs padrão. Composição e constante de equilíbrio. Princípio de Le Chatelier. Equação de Van't Hoff.

Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular:

O objetivo da UC é os alunos adquirirem conhecimentos básicos da termodinâmica aplicada à Tecnologias do Petróleo.

O 2ºcap. refere-se às propriedades dos gases, sendo essencial para o controlo de sistemas homogêneos ou heterógenos em condições ideais ou reais que envolvam sistemas gasosos.

Os 3º, 4ºe 5ºcap. são referentes às leis da termodinâmica e à termoquímica, sendo fundamentais para o estudo de fluxos de energia, especialmente calor, que ocorrem nos permutadores de calor, fornos, colunas de arrefecimento, etc

Os 6º e 7ºcap. são referentes ao estudo de diagramas de fases e de soluções ideais/reais, são muito importantes para o dimensionamento e controle de processos envolvendo mudança de fases, tais como destiladores, vaporizadores, entre outros, e os processos que envolvem a formação de precipitados ou de soluções.

Finalmente, o 8ºcap. refere-se ao equilíbrio sendo essencial para processos em reatores, na qual o equilíbrio pode ser utilizado para controlar o sistema.

Bibliografia:

1. Physical Chemistry, Peter Atkins and Julio de Paula, OUP Oxford; 9th edition, ISBN-10: 0199543372, 2009

2. Elements of Physical Chemistry: Peter Atkins and Julio de Paula, OUP Oxford; 5th edition, ISBN-10: 0199226725, 2009

3. Termodinâmica Aplicada, Edmundo Gomes de Azevedo, 3ª Edição, Escolar Editora, ISBN-10: 9789725923153, 2011

4. Introduction to Modern Thermodynamics, Dilip Kondepudi, John Wiley & Sons, ISBN-10: 0470015993, 2008
5. Thermodynamics (SI units): An Engineering Approach, Yunus A. Cengel and Michael A. Boles, McGraw-Hill Higher Education; 6th edition, ISBN-10: 0071257713, 2007
6. Engineering Thermodynamics: Work and Heat Transfer, Gordon Rogers and Yon Mayhew, Longman Scientific; 4th edition, ISBN-10: 0582045665, 1992