

Unidade Curricular	Termodinâmica Química II	Área Científica	Termodinâmica e Fenómenos de Transferência
Licenciatura em	Engenharia Química	Escola	Escola Superior de Tecnologia e de Gestão de Bragança
Ano Letivo	2022/2023	Ano Curricular	2
Nível	1-2	Créditos ECTS	6.0
Tipo	Semestral	Semestre	2
Código	9125-755-2205-00-22		
Horas totais de trabalho	162	Horas de Contacto	T 30 TP - PL 30 TC - S - E - OT - O -

T - Ensino Teórico; TP - Teórico Prático; PL - Prático e Laboratorial; TC - Trabalho de Campo; S - Seminário; E - Estágio; OT - Orientação Tutoria; O - Outra

Nome(s) do(s) docente(s) Simão Pedro de Almeida Pinho

### Resultados da aprendizagem e competências

No fim da unidade curricular o aluno deve ser capaz de:

1. Reconhecer e compreender o formalismo para a descrição termodinâmica de sistemas multicomponente.
2. Adquirir e aplicar os conceitos de propriedades molares parciais, de potencial químico, fugacidade, coeficiente de fugacidade e coeficiente de atividade.
3. Efetuar cálculos de equilíbrios de fases: equilíbrio líquido-vapor, líquido-líquido, líquido-líquido-vapor, sólido-líquido e sólido-vapor.
4. Conhecer e compreender diferentes tipos de diagramas de fase.
5. Analisar gráfica e numericamente a estabilidade de sistemas.
6. Efetuar estudos de equilíbrio químico em sistemas reativos simples e com reações múltiplas.
7. Utilizar e conhecer métodos experimentais para a determinação de propriedades termodinâmicas de misturas bem como do equilíbrio de fases.
8. Aplicar informação experimental para a descrição termodinâmica de uma mistura em condições não disponíveis experimentalmente. Usar bases de dados e métodos de estimação de propriedades termodinâmicas.

### Pré-requisitos

Antes da unidade curricular o aluno deve ser capaz de:

1. Aplicar conceitos matemáticos, em particular, de cálculo diferencial e integral.
2. Utilização de ferramentas informáticas como MATLAB ou MS Excel.

### Conteúdo da unidade curricular

Teoria da Termodinâmica de Soluções. Aplicações da Teoria Termodinâmica de Soluções. Equilíbrio Líquido-Vapor a Pressões Moderadas. Equações de Estado no Cálculo de Propriedades Termodinâmicas e ELV. Tópicos no Estudo de Equilíbrio de Fases. Equilíbrio Químico.

### Conteúdo da unidade curricular (versão detalhada)

1. Teoria da Termodinâmica de Soluções
  - Equações fundamentais da termodinâmica de soluções.
  - Potencial químico e sua relação com estados de equilíbrio. Definição de propriedade parcial.
  - A variação do potencial químico com a pressão e a temperatura. Equação de Gibbs-Duhem.
  - Mistura gasosa ideal e teorema de Gibbs. Fugacidade e coeficiente de fugacidade de uma espécie pura.
  - Cálculo do coeficiente de fugacidade de uma substância pura e da fugacidade de um líquido saturado.
  - Coeficiente de fugacidade de uma espécie em solução. A fugacidade como critério de equilíbrio.
  - Correlações generalizadas para o coeficiente de fugacidade: Lee-Kesler e Pitzer.
  - O modelo de solução ideal. Regra de Lewis-Randall. Propriedades em excesso.
  - O coeficiente de atividade de uma espécie em solução e influência da pressão e da temperatura.
2. Aplicações da Teoria Termodinâmica de Soluções
  - A regra das fases de Gibbs e o teorema de Duhem. Equações do ELV. Lei de Raoult.
  - Regra de Lewis-Randall e lei de Henry. Desvios positivos e negativos à idealidade.
  - Coeficientes de atividade a diluição infinita e constante de Henry.
  - Modelos de energia de Gibbs em excesso. Expansão de Redlich-Kister e inversa de Redlich-Kister.
  - Equações de Margules e van Laar. A teoria das soluções regulares de Scatchard-Hildebrand.
  - Modelos de composição local: Wilson, NRTL e UNIQUAC. Método de contribuição de grupo UNIFAC.
  - Obtenção de parâmetros dos modelos através do ajuste da energia de Gibbs em excesso.
  - Coeficientes de atividade a diluição infinita e comportamento azeotrópico. Propriedades de mistura.
3. Equilíbrio Líquido-Vapor a Pressões Moderadas
  - O comportamento qualitativo do ELV.
  - Diagramas de ELV de um sistema binário: P-composição, T-composição e composição-composição.
  - Desvios positivos e negativos à lei de Raoult. Sistemas azeotrópicos positivos e negativos.
  - Cálculos ELV: pressões de saturação, coeficientes de fugacidade e coeficientes de atividade.
  - Diferentes cálculos ELV.
  - Ponto de orvalho (pressão ou temperatura), ponto de bolha (pressão ou temperatura) e cálculos flash.
4. Equações de Estado no Cálculo de Propriedades Termodinâmicas e ELV
  - Equações fundamentais para o cálculo de propriedades residuais através de equações de estado.
  - A equação virial e a equação de Redlich-Kwong.
  - EoS cúbicas no cálculo de ELV: pressão de saturação de uma substância pura.
  - Equações de estado de Soave-Redlich-Kwong e Peng-Robinson no cálculo dos coeficientes de fugacidade.
  - ELV por correlações da constante de equilíbrio. Diagramas de DePriester para hidrocarbonetos leves.
5. Tópicos no Estudo de Equilíbrio de Fases
  - Equilíbrio e estabilidade. Minimização da energia livre de Gibbs total do sistema.
  - Interpretação gráfica do critério de estabilidade. Diferentes critérios de estabilidade.
  - ELL. Diferentes diagramas de equilíbrio de sistemas binários: temperaturas críticas de mistura.
  - ELL em diagramas triangulares. Regra da alavanca e coeficiente de distribuição. Critérios de ELL.
  - ELLV: diferentes tipos de representação gráfica e sua interpretação.
  - Equações termodinâmicas da representação do ELLV. Sistemas binários totalmente imiscíveis.
  - ESL: equação de equilíbrio em termos de propriedades termodinâmicas do sólido.
  - Teoria das soluções regulares e UNIFAC. ESV.
6. Equilíbrio Químico
  - A coordenada de reação.
  - Critério de equilíbrio em reações químicas: minimização da energia de Gibbs e do potencial químico.
  - Constante de equilíbrio e variação da energia de Gibbs padrão de reação.
  - Efeito da temperatura na constante de equilíbrio.
  - Variação da energia de Gibbs padrão de reação em função da temperatura.
  - Relação entre as constantes de equilíbrio e a composição. Reações em fase gasosa e líquida.
  - Diferentes estados de agregação e sua relação com os estados padrão.
  - Regra das fases e teorema de Duhem em sistemas reativos. Estudo de reações múltiplas.

**Bibliografia recomendada**

1. J. M. Smith; H. C. Van Ness; M. M. Abbott; M. T. Swihart, Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, 9th Edition, McGraw-Hill, 2022.
2. S. P. Pinho, Manual da Disciplina de Termodinâmica Química II, Escola Superior de Tecnologia e de Gestão, Bragança, 2016.
3. J. M. Prausnitz; R. N Lichtenthaler e E. G. Azevedo, Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria, 3rd edition, Prentice-Hall, 1999.
4. E. G. Azevedo, Termodinâmica Aplicada, 4ª Edição, Escolar Editora, 2018.
5. S. I. Sandler, Chemical, Biochemical and Engineering Thermodynamics, 5th edition, John Wiley & Sons, 2017.

**Métodos de ensino e de aprendizagem**

Exposição teórica dos conceitos e ferramentas fundamentais para a compreensão, aplicação, análise e cálculo na área da termodinâmica. Apresentação de exemplos práticos e resolução de exercícios. Resolução de exercícios de aplicação acompanhada com a análise crítica dos resultados. Apreciação de exercícios propostos para trabalho de casa. Desenvolvimento de projetos de aplicação.

**Alternativas de avaliação**

1. Alternativa 1 - (Ordinário, Trabalhador) (Final)
  - Projetos - 20% (Desenvolvimento de exercícios de aplicação e sua análise crítica.)
  - Prova Intercalar Escrita - 40% (Teste contemplando a matéria entretanto lecionada. Nota mínima: 6.)
  - Exame Final Escrito - 40% (Teste contemplando a segunda parte da matéria lecionada.)
2. Alternativa 2 - (Ordinário, Trabalhador) (Final, Recurso, Especial)
  - Exame Final Escrito - 100% (Teste contemplando toda a matéria lecionada.)

**Língua em que é ministrada**

Inglês

**Validação Eletrónica**

Simão Pedro de Almeida Pinho	Hélder Teixeira Gomes	Ramiro José Espinheira Martins	José Carlos Rufino Amaro
19-02-2023	21-03-2023	21-03-2023	25-03-2023