

Introdução à Termodinâmica Química

Capítulo 1

There are ancient cathedrals, which, apart from their consecrated purpose, inspire solemnity and awe.... Science has its cathedrals, built by the efforts of a few architects and of many workers... the fascination of a growing science lies in the work of the pioneers at the very borderland of the unknown, but to reach this frontier, one must pass over well-traveled roads; of these one of the safest and surest is the broad highway of Thermodynamics.¹

Aqui são apresentadas as bases da Termodinâmica. O que é Termodinâmica Química. Relação entre Matemática, Física, Termodinâmica Química e Engenharia Química. Conceitos iniciais (Sistemas, Processos, Propriedades Termodinâmicas etc.). Relações fundamentais da Termodinâmica. Exercícios propostos e resolvidos. Nomenclatura e referências bibliográficas.

¹ “Há catedrais antigas que, à parte do seu propósito sagrado, inspiram solenidade e temor... A ciência tem suas catedrais construídas pelo esforço de alguns poucos arquitetos e pelo trabalho de um número muito maior de simples operários... a fascinação de um ramo recente da ciência está no trabalho pioneiro realizado na região que bordeja o desconhecido, mas para alcançar esta fronteira, a pessoa tem que passar por estradas bem conhecidas; destas, uma das vias mais seguras e certas é a larga rodovia da Termodinâmica”. Trechos dos prefácios de Lewis e Randall, 1923, 1961.

Sumário

1. Introdução à Termodinâmica Química.....	1
1.1. A Termodinâmica, a Física e a Matemática	3
1.2. Os objetivos da Termodinâmica e da Termodinâmica Química	4
1.3. A Termodinâmica Química e a Engenharia Química	4
1.4. Conceitos básicos da Termodinâmica e da Termodinâmica Química.....	6
1.4.1. Sistema, fronteira, meio ambiente e processo	6
1.4.2. Propriedades de sistemas e processos	7
1.5. Energia e primeira lei da Termodinâmica.....	8
1.5.1. Formas de energia e seu relacionamento.....	8
1.5.2. Capacidade térmica (ou capacidade calorífica) e calor específico....	9
1.5.3. Calor e trabalho	10
1.6. Segunda lei da Termodinâmica	11
1.6.1. Reversibilidade.....	11
1.6.2. Função trabalho total, energia livre e entropia.....	11
1.7. Relações termodinâmicas	12
1.8. Sumário condensado das relações termodinâmicas	13
1.9. Extensão do estudo	14
1.9.1. Literatura recomendada	14
1.9.2. Roteiro de estudo	15
1.10. Nomenclatura.....	17
1.11. Referências bibliográficas.....	17
1.12. Exercícios	18
1.13. Exercícios resolvidos.....	19

Lista de figuras

Figura 1.1. Esquema das etapas da modelagem matemática de fenômenos físicos	3
Figura 1.2. Interdependência entre a Termodinâmica Química e as várias disciplinas que formam a Engenharia Química.....	4
Figura 1.3. Processo de uma indústria química e seus componentes.....	5
Figura 1.4. Sistema, meio, fronteira e processo	6
Figura 1.5. Efeito do processo sobre o sistema, em termos de suas propriedades.....	7
Figura 1.6. Troca de calor entre um fluido quente e um frio, separados por uma parede condutora de calor	10
Figura 1.7. Expansão de um gás encerrado em um cilindro.	11
Figura 1.8. Esquema dos gráficos das relações tratadas no exercício 1.13.2.	21

Lista de tabelas

Tabela 1.1. Formas de energia.....	8
Tabela 1.2. Relações fundamentais da energia.....	12
Tabela 1.3. Fórmulas matemáticas gerais (Hougen et al., 1959).....	12
Tabela 1.4. Relações termodinâmicas (Hougen et al., 1959).	13
Tabela 1.5. Sumário condensado das relações termodinâmicas (Hougen et al., 1959).	14

1.1. A Termodinâmica, a Física e a Matemática

Vivemos em um universo regido por leis que provocam fenômenos. O ser humano vem procurando, por meio de estudos e pesquisas, conhecer e aproveitar, em benefício próprio, a atuação dessas leis e o domínio dos fenômenos. As ciências exatas (Física, Química etc.) procuram organizar uma parte desses conhecimentos. Um dos objetivos da Física, então, é estudar algumas dessas leis, explicar os fenômenos decorrentes e representá-los por modelos abstratos. Quem fornece as ferramentas para essa última atividade é a Matemática. Assim, devido ao desenvolvimento que vem experimentando, a abstração é uma das características atuais da ciência moderna.

Explicando melhor: pela descrição de um problema real e complexo, em termos matemáticos, é, em alguns casos, possível obter-se uma solução simples; não em termos de quantidades físicas, mas em termos de quantidades matemáticas, provenientes de uma descrição abstrata do problema real. Isso pode ser representado pelo esquema mostrado na Figura 1.1, originariamente montado para simbolizar um problema específico (Prausnitz et al., 1986), e generalizado para ilustrar as idéias aqui expostas.

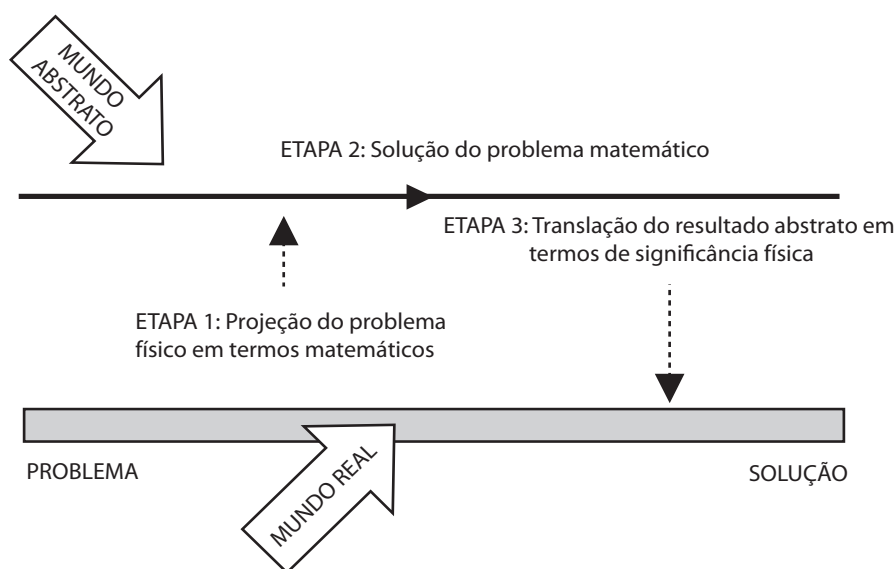


Figura 1.1. Esquema das etapas da modelagem matemática de fenômenos físicos.

Segundo o esquema em questão, mundo e problema reais são representados pela linha inferior, enquanto a linha superior simboliza o mundo da abstração. A aplicação dos conhecimentos da física e da matemática para resolução de um problema real segue três etapas:

- **elaboração do modelo matemático** (tradução do problema em termos abstratos): em vez de ser analisado no universo real, com variáveis fisicamente realistas, o problema, por um processo intelectual indireto, é projetado para o mundo abstrato, com variáveis traduzidas para linguagem abstrata;
- **resolução do problema usando o modelo desenvolvido**: procura-se a solução do problema no mundo abstrato, para as condições desejadas, definidas pelas variáveis abstratas;
- **interpretação dos resultados obtidos com o modelo matemático**: a solução, quando alcançada, é traduzida em linguagem física e real.

Esse esquema genérico pode ser aplicado para os vários ramos da ciência e da técnica, incluindo, é claro, as engenharias.

Existe hoje, na Engenharia Química, um grande avanço nas áreas de desenvolvimento, modelagem, simulação e otimização de processos químicos, fortemente apoiado pela informática, para o qual a Termodinâmica fornece as ferramentas mais importantes para as três etapas descritas. Isto será discutido em detalhes.