

Propriedades físicas e termodinâmicas das substâncias: fontes de dados, abordagens de obtenção e métodos estimativos

Capítulo 2

Que alívio. Só de saber que, se quiser, poderei recordar, esqueço num minuto. (Eco, U. O pêndulo de Foucault. Trad. Ivo Barroso. Rio de Janeiro: Record, 1988.)

Este capítulo trata de propriedades das substâncias, principalmente das fontes de dados (impressas, eletrônicas e virtuais) e dos métodos estimativos (técnicas de obtenção dos métodos, seleção etc.). É dada ênfase aos novos recursos da Internet, tais como banco de dados (pagos ou gratuitos) e *sites* que possibilitam cálculos *on-line*. São comentados alguns *softwares* para estimativa de propriedades das substâncias. Exercícios propostos e resolvidos. Nomenclatura e referências bibliográficas.

Sumário

2. Propriedades físicas e termodinâmicas das substâncias: fontes de dados, abordagens de obtenção, métodos estimativos.....	23
2.1. As propriedades das substâncias nas atividades do engenheiro químico...	26
2.2. Como obter dados de propriedades das substâncias?	26
2.3. Dados de propriedades das substâncias – fontes de informações impressas	27
2.4. Dados de propriedades das substâncias – fontes de informações na Internet	29
2.4.1. A Internet como fonte de informações sobre Engenharia Química, Termodinâmica e propriedades das substâncias.....	29
2.4.2. Bancos de dados <i>on-line</i> de propriedades das substâncias – produtos comercializados	32
2.4.3. Bancos de dados de propriedades das substâncias – produtos de acesso livre	32
2.5. Estimativa de propriedades	32
2.5.1. Importância dos métodos estimativos de propriedades das substâncias para os engenheiros químicos	32
2.5.2. Literatura especializada em métodos estimativos de propriedades das substâncias	36
2.5.3. Visão geral dos métodos para estimativa de propriedades das substâncias	37
2.5.4. Comentários acerca das abordagens e dos métodos.....	41
2.5.5. Critérios para a escolha de um método.....	41
2.5.6. Estudo de caso: a escolha de um método para a estimativa da capacidade calorífica de gases ideais	42
2.5.6.1. Comentários adicionais e comparações entre os métodos e sua seleção.....	45
2.5.7. Programas para a estimativa de propriedades das substâncias.....	45
2.5.8. Recomendações finais acerca da estimativa de propriedades das substâncias	47
2.6. Nomenclatura	47
2.7. Referências bibliográficas	47
2.7.1. Livros e artigos de revistas.....	47
2.7.2. <i>Sites</i> da Internet (pesquisados em 2/2008)	50
2.8. Exercícios.....	52
2.9. Exercícios resolvidos	53

Lista de figuras

Figura 2.1. Relação entre a temperatura normal de fusão (T_f) e a massa molecular (MW) dos alcanos.....	59
Figura 2.2. Relação entre a temperatura normal de ebulição (T_b) e a massa molecular (MW) dos alcanos.....	59
Figura 2.3. Relação entre a temperatura crítica (T_c) e a massa molecular (MW) dos alcanos.....	60
Figura 2.4. Relação entre a temperatura crítica (T_c) e a temperatura normal de ebulição (T_b) dos alcanos.....	60

Lista de tabelas

Tabela 2.1.	Principais obras, compilações e banco de dados de propriedades das substâncias encontradas sob a forma impressa	28
Tabela 2.2.	Resultado de pesquisa em mecanismos de busca (efetuada em 2/2008)	30
Tabela 2.3.	Resultado de pesquisa em mecanismos de metabusca (efetuada em 2/2008)	31
Tabela 2.4.	Alguns mecanismos de busca especializados em Engenharia Química	32
Tabela 2.5.	Provedores comerciais de informações relacionadas com propriedades das substâncias e dados correlatos (pesquisado em 2/2008)	33
Tabela 2.6.	Exemplos de dois bancos de dados de propriedades das substâncias <i>on-line</i> disponíveis no mercado (pesquisado em 2/2008).....	33
Tabela 2.7.	Recursos da Internet, <i>on-line</i> e gratuitos, relacionados com propriedades das substâncias e Termodinâmica Química em geral (pesquisado em 2/2008)	34
Tabela 2.8.	Principais obras, compilações e manuais sobre métodos estimativos de propriedades das substâncias.....	37
Tabela 2.9.	Fontes bibliográficas usadas na coleta dos métodos	43
Tabela 2.10.	Métodos usuais para a estimativa de C_p^*	43
Tabela 2.11.	Alguns programas para cálculo de propriedades das substâncias disponíveis no mercado (pesquisado em 2/2008).....	46
Tabela 2.12.	Alguns <i>sites</i> que oferecem recursos gratuitos para cálculo <i>on-line</i> de propriedades das substâncias disponíveis na Internet (pesquisado em 2/2008).	46
Tabela 2.13.	Dados do argônio, tetracloreto de carbono, metilamina e água (Daubert, 1985).	54
Tabela 2.14.	Propriedades do brometo de lítio (LiBr) coletados na Tabela 3.1 (Physical Properties of the Elements and Inorganic Compounds) de Perry e Chilton, 1974.	56
Tabela 2.15.	Propriedades do ácido benzóico ($C_6H_5CO_2H$) coletadas na Tabela 3.2 (Physical Properties of Organic Compounds) de Perry e Chilton, 1974.	57
Tabela 2.16.	Propriedades dos alcanos (massa molecular, MW, temperatura normal de fusão, T_f , temperatura normal de ebulição, T_b , e temperatura crítica, T_c)	58

2.1. As propriedades das substâncias nas atividades do engenheiro químico

As leis da Termodinâmica, apresentadas no Capítulo 1, envolvem alguns termos que são, na verdade, o que chamamos de propriedades termodinâmicas. Quando vistas as relações termodinâmicas, apresentadas nas Tabelas 1.4 e 1.5, isso também acontece. O mesmo pode ser dito sobre as outras matérias que constituem as bases da Engenharia Química (fenômenos de transporte, operações unitárias, cinética química, cálculo de reatores. Ver item 1.3 e Figura 1.2). Ou seja, para usarmos conceitos termodinâmicos em qualquer aplicação, são necessárias as tais propriedades: entalpia, capacidade calorífica, densidades etc. (rever o que foi dito acerca das propriedades no item 1.4.2). Desse modo, o profissional estará sempre necessitando de informações sobre os materiais envolvidos nos processos químicos, e essas informações são suas propriedades na elaboração de balanços de massa ou de energia, no dimensionamento de equipamentos, nas fases mais avançadas de projetos (técnicos e econômicos) de plantas industriais, nas considerações envolvendo controle de qualidade dos produtos ou tratamento de efluentes.

Boa parte do tempo dispensado em todas as tarefas citadas é consumida em conseguir valores das propriedades de matérias-primas, produtos, efluentes e substâncias intermediárias do processo nas condições de pressão, temperatura e concentração requeridas pelo processo industrial. Sem tais dados, seria impossível realizar análises e cálculos necessários e a aplicação das leis, modelos matemáticos e métodos que originariam os resultados desejados para as atividades comentadas.

Outro ponto relevante: para o bom entendimento de conceitos e aplicações dos próximos capítulos deste livro (incluindo exercícios resolvidos e resolução dos propostos), será necessário saber muito sobre as propriedades das substâncias: o que são, quais são, onde obter dados e como usá-las. Já foi possível perceber, então, o assunto deste capítulo ser de vital importância para compor a base de conhecimentos de um bom profissional que trabalhará com os amplos e diversos aspectos da Engenharia Química.

Daí fica a pergunta: em que ponto do livro seria mais conveniente localizar um capítulo que trate de propriedades das substâncias? Se colocado no início do livro, algumas propriedades não foram, ainda, definidas, e o leitor poderia ficar um pouco perdido e inseguro. Se, ao contrário, for um dos últimos capítulos (como em algumas obras), perde-se a oportunidade de ressaltar a importância do tema e corre-se o risco de o leitor não saber onde encontrar informações necessárias para a compreensão de muitos aspectos importantes da Termodinâmica Química e de suas aplicações na Engenharia Química. Como resolver isso? Opta-se por abordar esse assunto no segundo capítulo (logo depois da breve introdução que foi o primeiro capítulo, no qual foram revisadas as bases da Termodinâmica). Para sanar dúvidas, quando necessário, as propriedades são brevemente comentadas e, na medida do possível, há indicação de onde e quando serão apresentadas com maior desenvoltura.

2.2. Como obter dados de propriedades das substâncias

As propriedades das substâncias, necessárias para realização das atividades ligadas à Engenharia Química, podem ser obtidas por medições experimentais, experiência profissional, intuição, pesquisa na literatura, ou calculadas por métodos estimativos.¹

Apesar de ser mais interessante, o uso de um valor experimental da propriedade nas condições requeridas nem sempre é possível, pois seriam necessários tempo, mão-de-obra e infra-estrutura nem sempre existentes ou disponíveis. Em alguns casos, as condições de um determinado processo são tais que não existem equipamentos adequados para obtenção de dados das propriedades naquelas condições. Além disso, muitas vezes é difícil, principalmente em algumas fases de projetos, o conhecimento prévio de quais propriedades dos materiais envolvidos serão necessárias nas possíveis condições ótimas de pressão, temperatura e composição dos processos considerados.

¹ Método estimativo é aquele usado no cálculo de uma determinada propriedade de certa substância. Existem métodos para substâncias puras e para misturas. Podem ser analíticos ou gráficos e originados por diversos tipos de abordagens (teóricas ou empíricas). Mais informações sobre esse assunto serão vistas no item 2.5.