

Sumário

Prefácio vii

Primeira Parte: As Bases

Capítulo 1 Introdução à Termodinâmica Química..... 1

Capítulo 2 Propriedades físicas e termodinâmicas das substâncias: fontes de dados, abordagens de obtenção e métodos estimativos..... 23

Segunda Parte: As Ferramentas

Capítulo 3 Gases e líquidos, estados, propriedades PVT e equações de estado.. 61

Capítulo 4 Equações de estado para líquidos.. 219

Capítulo 5 Exercícios e outras práticas sobre as aplicações da Termodinâmica Química – 1ª parte. 272

Terceira Parte: As Aplicações

Capítulo 6 Do ideal ao real I: propriedades termodinâmicas de sistemas não ideais. 330

Capítulo 7 Do ideal ao real II: propriedades de misturas e soluções. 368

Capítulo 8 Propriedades do equilíbrio líquido-vapor de substâncias puras. 463

Capítulo 9 Propriedades do equilíbrio líquido-vapor de misturas de não-eletrólitos. 521

Capítulo 10 Algumas aplicações da Termodinâmica Química. 599

Capítulo 11 Exercícios e outras práticas sobre as aplicações da Termodinâmica Química – 2ª parte. 660

Quarta Parte: Os Acessórios

Apêndice 1 Conversão de unidades — Valores da constante universal dos gases. 737

Apêndice 2 Banco de dados de propriedades das substâncias. 743

Apêndice 3 Dados e parâmetros de equações de estado. 774

Apêndice 4 Parâmetros das equações de estado para líquidos. 795

Apêndice 5	Forças intermoleculares e funções de energia intermolecular potencial.	798
Apêndice 6	Função objetiva e método de otimização de Fibonacci.	806
Apêndice 7	Parâmetros da equação UNIFAC.	808
Apêndice 8	Fatos relevantes para o desenvolvimento da Termodinâmica. Mini-biografias de alguns pesquisadores importantes para o desenvolvimento desses assuntos.	816
	Índice remissivo.	830

Quinta Parte: Os Auxiliares - Conteúdo do CD-ROM

Pasta 01_DBPRS

Nesta pasta encontram-se os arquivos relativos ao programa DBPRS. Este programa é um banco de dados informatizado que permite ao usuário realizar consultas de valores de propriedades das substâncias (massa molecular, propriedades críticas, fator acêntrico, dados de propriedades calóricas e energéticas do gás ideal, etc.) e de parâmetros de equações empíricas para calcular propriedades dependentes da temperatura (pressão de vapor, densidade de líquidos, etc.). Existem opções para serem realizados os cálculos das propriedades com as equações empíricas citadas e o traçado dos gráficos dessas propriedades em função da temperatura. Estão cadastrados no banco mais de 1.000 substâncias para as quais estão dispostos 47 itens (entre propriedades constantes e parâmetros de equações empíricas).

O conteúdo da pasta é o seguinte:

- Dois arquivos contendo instruções sendo um deles o manual de uso do programa DBPRS: (1) Manual_DBPRS_sec.pdf; (2) Readme_1st.txt.
- Arquivos de instalação do programa DBPRS: (1) Dbprs_1.CAB; (2) Dbprs_10.CAB; (3) Dbprs_2.CAB; (4) Dbprs_3.CAB; (5) Dbprs_4.CAB; (6) Dbprs_5.CAB; (7) Dbprs_6.CAB; (8) Dbprs_7.CAB; (9) Dbprs_8.CAB; (10) Dbprs_9.CAB; (11) setup.exe; (12) SETUP.LST; (13) VBRUN60.EXE.

Pasta 02_Bancos de Dados de Propriedades

Foi disposta nesta pasta uma planilha de cálculo criada no programa Excell®. O conteúdo dessa planilha é idêntico ao do banco de dados do Programa DBPRS. Existem as mesmas propriedades e parâmetros (das equações empíricas) das mesmas substâncias. Esse arquivo foi anexado para auxiliar a professores e alunos a realização de vários tipos de atividades didáticas tais como resolução de exercícios (mais elaborados do que os existentes nos Capítulos 5 e 11) e no desenvolvimento de programas de computador.

O conteúdo da pasta é o seguinte: Banco de Dados.xls

Pasta 03_C1C2C3-Mathias-Copeman

Aqui está um arquivo PDF contendo tríades de constantes da equação de Mathias e Copeman (Mathias, P. M.; Copeman, T. W. Extension of the Peng-Robinson EoS to Complex Mixtures: Evaluation of the Various Forms of the Local Composition Concept, Fluid Phase Equilibria, 13: 91-108, 1983) para as equações de estado de van der Waals e Peng-Robinson. Esse arquivo é um material adicional ao artigo: Chiavone-Filho, O.; Amaral Filho, P. G.; Silva, D. N.; Terron, L. R. a function for a series of hydrocarbons to Peng-Robinson and van der Waals equations of state, Ind. Eng. Chem. Res., 40 (26): 6240-6244, 2001. Para ler o arquivo PDF em questão, deve-se usar o programa Acrobat Reader® o qual pode ser obtido gratuitamente no site:

<http://www.brasil.adobe.com/products/acrobat/readstep2.html> (pesquisado em 5/10/2005).

O conteúdo da pasta é o seguinte: ie001134o_s.pdf

Pasta 04_Coeficientes Binários

Descrição do conteúdo: Existem nesta pasta 2 arquivos contendo coeficientes binários para regras de mistura de várias equações de estado. Os dados são provenientes de Knapp, H.; Doring, R.; Oellrich, L.; Ploker, U.; Prausnitz, J. M. Vapor-liquid equilibria for mixtures of low boiling substances. Chemistry Data Series, DECHEMA, vol. VI, 1981. O conteúdo dos dois arquivos é o mesmo, porém a forma é diferente: um é um arquivo PDF (veja Descrição do conteúdo da pasta 03) e o outro é uma planilha de cálculo criada no programa Excell®. Essas duas versões auxiliam em atividades diversas.

O conteúdo da pasta é o seguinte: (1) Cij_Knapp.pdf; (2) Cij_Knapp.xls