

## **Termodinâmica para Engenharia Química e Biológica**

Prof. Susana Barreiros

Prof. José Silva Lopes

Trabalho Prático em Ambiente Computacional – Diagramas de Fases

### **Introdução**

Pretende-se com este trabalho que os estudantes da Licenciatura em Engenharia Química e Biológica utilizem conceitos adquiridos nas aulas com vista à aplicação prática daqueles em problemas de Engenharia, nos quais os conhecimentos de Termodinâmica Química são indispensáveis. Para esse efeito, o trabalho prático será dedicado ao estudo de Diagramas de Fases (muito importante em Engenharia Química e Biológica, por exemplo no dimensionamento e implementação de processos de separação) e recorrendo a um software open source, o ChemSep. Este é bastante útil na pesquisa e recolha de dados de componentes puros, na modelação e simulação de propriedades termodinâmicas de sistemas binários e ternários, e isso permite-nos esquematizar os diagramas de fases de misturas binárias quando não temos acesso a equipamentos para determinar os dados experimentalmente, ou quando estes não estão presentes na literatura, ou ainda facilmente acessíveis.

### **Objectivos do Trabalho Prático**

- Utilizar um software/aplicação com vista a pesquisar e recolher propriedades de grandezas termodinâmicas;
- Esquematizar e prever diagramas de fases de substâncias puras e respectivas curvas de pressão-temperatura;
- Esquematizar e prever diagramas de fases de misturas binárias com base em dados dos componentes puros;
- Simular diagramas de fase de misturas binárias com dados teóricos e/ou de modelos de ajuste (os quais utilizam as respectivas propriedades termodinâmicas dos componentes puros).

Para o efeito deste trabalho, vamos considerar duas partes a realizar em momentos distintos. Na 1ª parte iremos estudar as propriedades de componentes puros e seus diagramas de fase. Na segunda parte, pretende-se estudar diagramas de fases de misturas líquidas binárias, com vista à sua separação. O estudo de sistemas binário, do ponto de vista termodinâmico, permite definir melhor o dimensionamento e análise do processo de separação.

Vamos utilizar o programa ChemSep, um programa que possui uma base de dados de propriedades termodinâmicas e permite prever, a partir de modelos termodinâmicos e da base de dados, diagramas de fase de sistemas binários. Esse programa será a base do trabalho a desenvolver nas questões em baixo enumeradas e descritas. Deverá ter instalado no seu computador o ChemSep. Pode fazê-lo neste link [https://www.cocosimulator.org/index\\_download.html](https://www.cocosimulator.org/index_download.html), devendo escolher instalar o ChemSep para além do CofeSimulator (ver ficheiro explicativo no Moodle, caso seja necessário).

Os alunos deverão formar grupos de 2 em contexto de sala de aula e deverão trazer um computador portátil com acesso à internet, para que possam realizar as atividades práticas

### 1ª PARTE (19 e 20 de Outubro de 2022)

Responda sequencialmente a cada uma das questões colocadas, colocando todos os dados numéricos, gráficos e registos escritos no ficheiro Excel adjacente a este enunciado, colocado no Moodle como TPTEQBParte1, de modo a completar e fundamentar as respostas. O ficheiro está organizado por folhas de cálculo, cada uma correspondente a cada questão. Na primeira página, devem ser colocados obrigatoriamente os nomes e números de aluno dos elementos de cada grupo. O trabalho será considerado entregue para frequência quando o ficheiro for carregado no Moodle (ver tarefa no Tópico de entrada da página da unidade curricular). Deverá ser renomeado com um dos números de aluno de um elemento de cada grupo antes da submissão (Ex: TPTEQB5555).

1- Esquematize graficamente os diagramas pressão-temperatura para as duas substâncias indicadas pelo professor, utilizando para isso as equações das curvas de fusão, vaporização e sublimação.

Indique, em cada gráfico, o ponto triplo, e esboce aquelas 3 curvas numa zona de intervalos de pressão e temperatura junto ao ponto triplo (no intervalo de temperaturas 20 K acima e abaixo da temperatura do ponto triplo).

Procure na base de dados do ChemSep (no PCD Manager) as propriedades termodinâmicas necessárias para elaborar os gráficos. Quando considerar necessário ou apropriado, utilize um valor médio para as grandezas termodinâmicas que dependem da temperatura, necessárias à esquematização das curvas acima mencionadas.

2-Determine igualmente um valor aproximado da expansividade a pressão constante para um dos compostos (só um à escolha), quando este se encontra na fase líquida. Relembre que a expansividade a pressão constante,  $\alpha_p$ , define-se por

$$\alpha_p = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$$

Utilize 4 valores do volume numa gama de valores de temperatura à sua escolha e calcule o valor de  $\alpha_p$  para esses 4 valores diferentes, em função da temperatura. Sugestão: faça um ajuste aos dados de volume molar em função da temperatura, a partir dos dados presentes no ChemSep.

