



## **Disciplina: IQ475-Tópicos em Sistemas Químicos**

---

**Responsável:** José Vicente Hallak DAngelo ([dangelo@unicamp.br](mailto:dangelo@unicamp.br))

**Período:** 2 semestre de 2022

**Estrutura:** Aulas teóricas, aulas práticas (computacionais), seminários e discussões

**Avaliação:** Seminários, trabalhos individuais e em grupo, prova escrita

### **Programa:**

#### **UNIDADE I: Equilíbrio Químico (6 horas)**

- - Introdução: importância e aplicações do equilíbrio químico para o engenheiro químico
- - Aspectos termodinâmicos e cinéticos
- - Reações químicas: forma geral e classificação das reações
- - Grau de avanço e conversão
- - Constante de equilíbrio, lei do equilíbrio químico e Princípio de Le Châtelier

#### **UNIDADE II: Efeitos de temperatura, pressão e composição sobre o equilíbrio químico (12 horas)**

- - Efeito da temperatura, pressão e composição sobre o equilíbrio químico
- - Critérios termodinâmicos do equilíbrio químico
- - Efeito da temperatura sobre a constante de equilíbrio
- - Avaliação das constantes de equilíbrio

#### **UNIDADE III: Conversão de equilíbrio em sistemas de reações simples e múltiplas (18 horas)**

- - Conversões de equilíbrio em reações isoladas
- - Regra das fases e Teorema de Duhem
- - Equilíbrio multireacional com aplicações de métodos numéricos
- - Método de Newton
- - Método da Relaxação
- - Método dos Multiplicadores de Lagrange

#### **UNIDADE IV: Otimização de sistemas envolvendo equilíbrio químico (9 horas)**

- Estudo de caso: processo industrial de reforma de hidrocarbonetos

### **Referências:**

- Smith, J.M.; Van Ness, H.C.; Abbott, M.M.; "Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química", 7ª edição, Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro, 2007.
- Sandler, S.I.; "Chemical and Engineering Thermodynamics", 2ª edição, John Wiley, 1989.
- Kyle, B.G.; "Chemical and Process Thermodynamics", 1ª edição, Prentice-Hall, 1984.
- Denbigh, K.; "The Principles of Chemical Equilibrium", 4ª edição, Cambridge University Press, 2002.