



# **PMT 3205**

## **Físico-Química para Metalurgia e Materiais I**

- Em relação à reação  $\text{CH}_4 + \text{CO}_2 = 2\text{CO} + 2\text{H}_2$ , pergunta-se: [25]
  - Em que direção o equilíbrio se desloca quando a temperatura é aumentada;
  - e quando a pressão total do sistema é aumentada?
- Um gás contendo 10%CO, 20%CO<sub>2</sub>, 20% H<sub>2</sub>, 40%H<sub>2</sub>O e 10% N<sub>2</sub> é colocado num forno a 900°C. Qual é a composição de equilíbrio? [26]

- Um mol de uma mistura gasosa constituída de 50% CO, 25% CO<sub>2</sub> e 25% H<sub>2</sub> é introduzida em um forno a 800°C e 1 atm. Determinar a composição de equilíbrio em %.[27]
- Calcular a composição de equilíbrio de uma mistura gasosa ideal de H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO e CO<sub>2</sub> a 1600°C, sabendo que inicialmente havia no sistema 10 moles de CO e 10 moles de H<sub>2</sub>O.[28]

# FUNÇÕES TERMODINÂMICAS

$$\bullet c_p = m_3 + m_4 T + m_5 T^{-2} + m_6 T^2$$

$$\bullet H = m_1 + m_3 T + \frac{m_4}{2} T^2 - m_5 T^{-1} + \frac{m_6}{3} T^3$$

$$\bullet S = m_2 + m_3 \ln T + m_4 T - \frac{m_5}{2} T^{-2} + \frac{m_6}{2} T^2$$

$$\bullet G = m_1 - m_2 T + m_3 T(1 - \ln T) - \frac{m_4}{2} T^2 - \frac{m_5}{2} T^{-1} - \frac{m_6}{6} T^3$$

**G(Fe\_L, Fe; 0)** 2.98150E+02 +F9449T+15644.6-8.97347268\*T;  
6.00000E+03 N REF4361 !

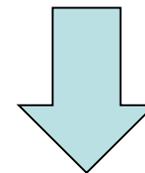
**FUNCTION F9449T** 2.98150E+02 +1225.73315+124.13367\*T-23.5143\*T\*LN(T)  
-.00439752\*T\*\*2-5.89269E-08\*T\*\*3+77358.5\*T\*\*(-1); 1.18480E+03 Y  
-1249.64059+133.270634\*T-24.6643\*T\*LN(T)-.00375752\*T\*\*2  
-5.89269E-08\*T\*\*3+77358.5\*T\*\*(-1); 1.66750E+03 Y  
-613.084238+125.483902\*T-23.5143\*T\*LN(T)-.00439752\*T\*\*2  
-5.89269E-08\*T\*\*3+77358.5\*T\*\*(-1); 1.81100E+03 Y  
-25628.1275+299.878719\*T-46\*T\*LN(T); 6.00000E+03 N !

# EQUILÍBRIO CONSIDERANDO A COMPOSIÇÃO QUÍMICA

$$\left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,P,n,\dots} = \mu_i = \text{potencial químico} = \bar{G}_i$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,P,n,\dots} = \bar{G}_i = \textit{energia livre molar parcial}$$

$$dG = -S.dT + V.dP + \sum_{i=1}^{i=n} \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,P,n,\dots} . dn_i$$



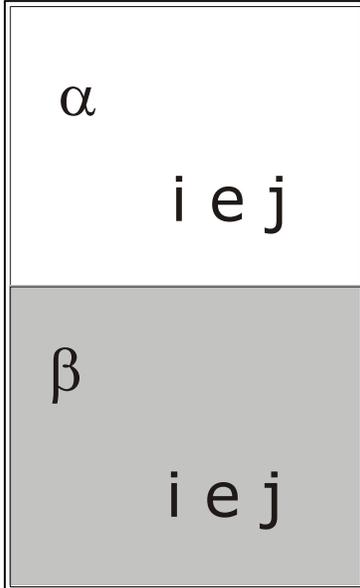
**TRABALHO QUÍMICO**

$$dG = -S.dT + V.dP + \sum_{i=1}^{i=n} \mu_i . dn_i$$

Para P e T constantes

$$dG = \sum_{i=1}^{i=n} \mu_i . dn_i = \sum_{i=1}^{i=n} \bar{G}_i . dn_i$$

# Termodinâmica



$$G_{\text{sistema}} = G^{\alpha} + G^{\beta}$$

ou

$$dG_{\text{sistema}} = dG^{\alpha} + dG^{\beta}$$

$$dG_{\text{sistema}} = dG_i^{\alpha} + dG_i^{\beta} = \mu_i^{\alpha} \cdot dn_i^{\alpha} + \mu_i^{\beta} \cdot dn_i^{\beta}$$

no equilíbrio  $dG_{\text{sistema}} = 0$

$$\mu_i^{\alpha} = \mu_i^{\beta}$$

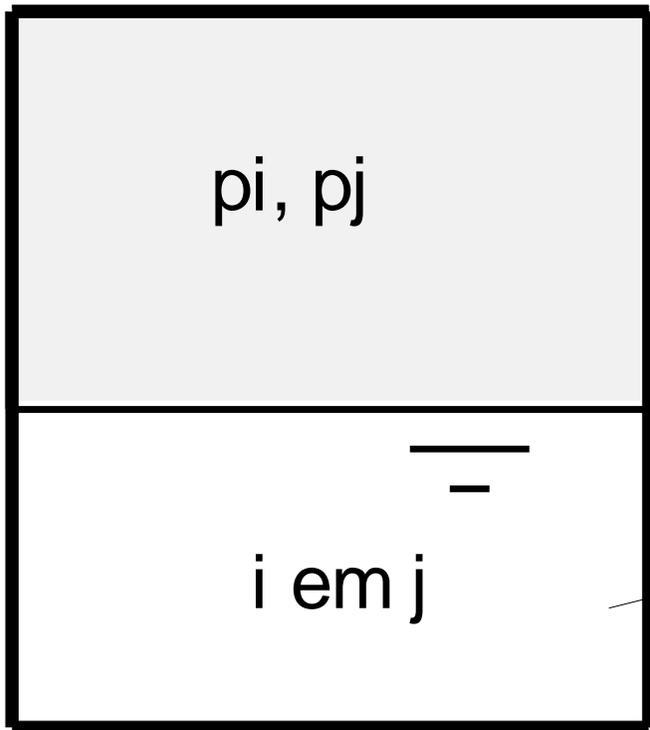
**No equilíbrio químico:** os potenciais químicos da espécie química i devem ser iguais em todas as fases do sistema.



# TERMODINÂMICA DAS FASES CONDENSADAS

$$\bar{G}_{i,\text{gás}} - G_{i,\text{gás}}^{\circ} = R.T.\ln p_i$$

$$\bar{G}_{i,\text{gás}} = G_{i,\text{gás}}^{\circ} + R.T.\ln p_i = \bar{G}_{i,\text{cond}}$$



$i_{\text{referência}} \rightarrow i_{\text{real}}$

$$\Delta G_i = G_i - G_i^* = R.T.\ln \frac{p_i}{p_i^*}$$

$$\frac{p_i}{p_i^*} = a_i \text{ com uma referência } x_i^*$$

# CONCEITO DE ATIVIDADE

$$a_i = \frac{x_i \cdot P_{\text{Total}}}{x_i^* \cdot P_{\text{Total}}} = \frac{x_i}{x_i^*}$$

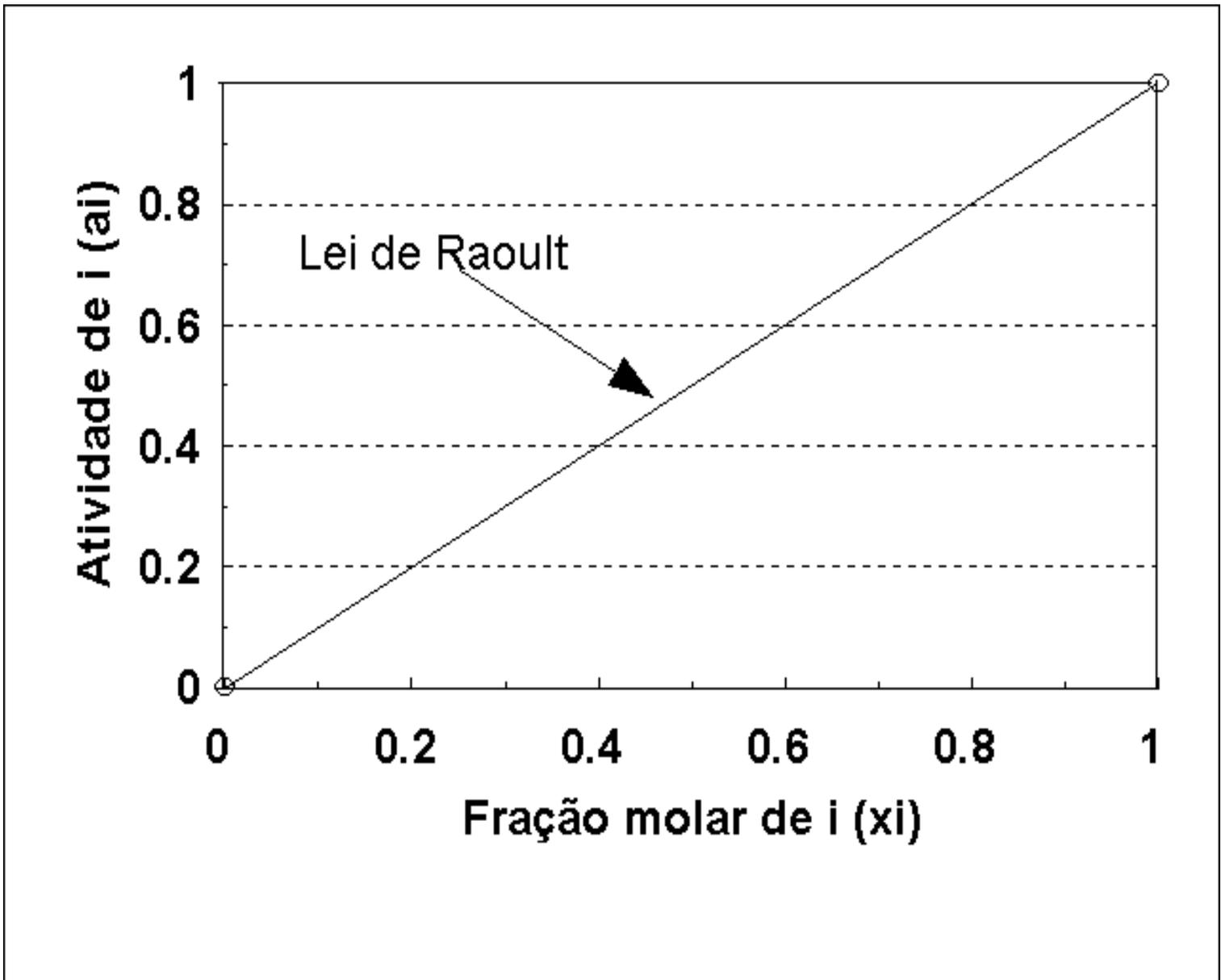
$$a_i = \frac{p_i}{p_i^o} = \frac{x_i}{x_i^o}$$

Para uma referência i puro

$$a_i = x_i$$

Lei de Raoult

# CONCEITO DE ATIVIDADE

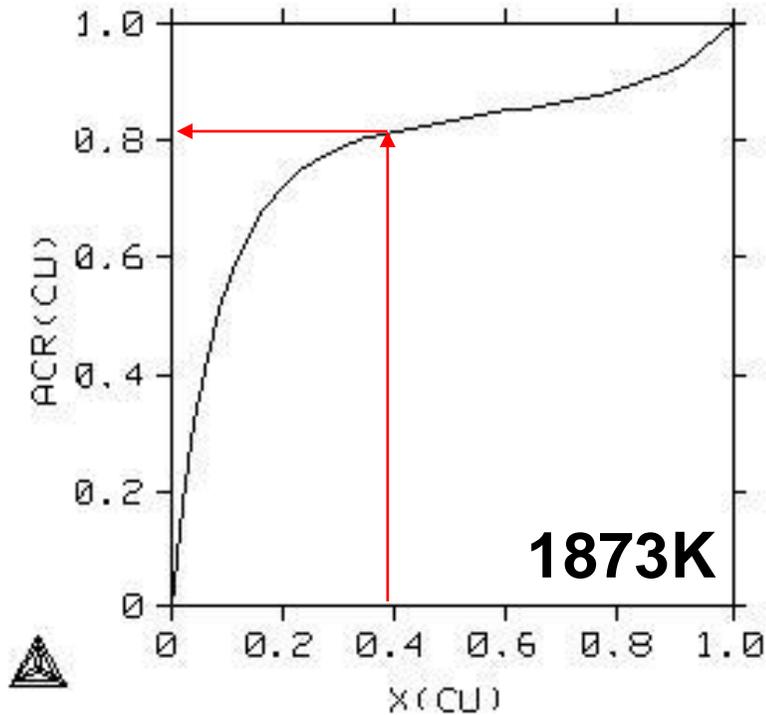


# TIPOS DE SOLUÇÃO

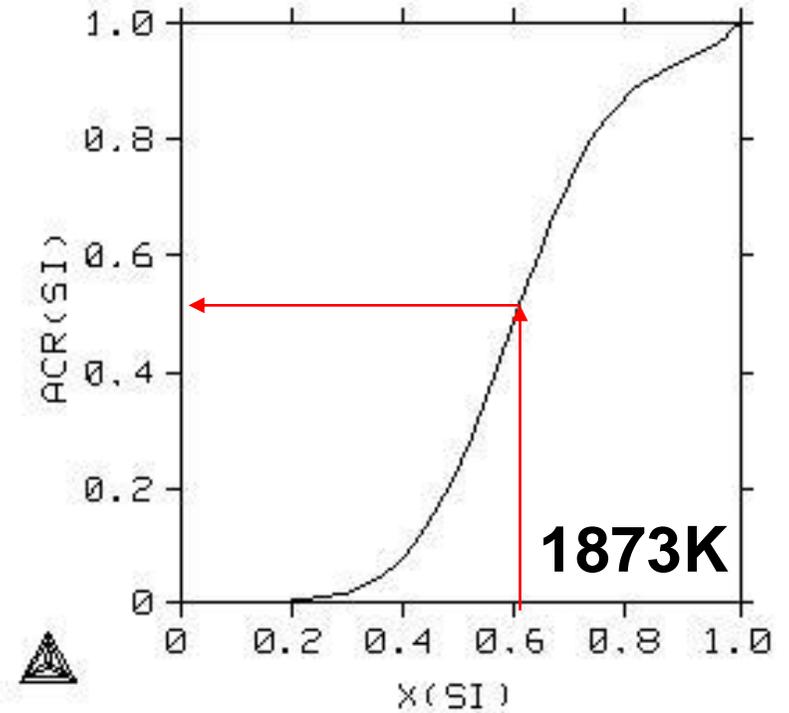
- **ATIVIDADE:** Capacidade de uma espécie química em participar de uma reação química
- **Soluções ideais:** seguem a lei de Raoult
- **Soluções reais:** há desvios

# TIPOS DE SOLUÇÃO

## Solução real



**Desvio Positivo:  $a_i > x_i$**



**Desvio Negativo:  $a_i < x_i$**