

PQI 3221 CINÉTICA QUÍMICA E PROCESSOS AMBIENTAIS
PROGRAMAÇÃO – 1º SEMESTRE 2023

DOCENTE E CONTATOS

Luiz A. Kulay (luiz.kulay@usp.br) - Depto. Engenharia Química (PQI) – Bloco 18 – Sala 2/4s

PROGRAMA DE DISCIPLINA

Aula	Data	Assunto
Semana de Recepção aos Calouros: 13 a 17.03.2023		
01	21/03	Introdução à disciplina – Conteúdo Programático. Mecanismos de Avaliação. Critério de Aprovação. Bibliografia. Fundamentos de balanços de massa: Base de Cálculo. Concentração, fração e razão.
02	23/03	Fundamentos de balanços de massa: Sistema, Fronteira e Vizinhança. Diferença entre vazões e fluxos Estado estacionário e Transiente. Regimes de Operação: Batelada. Semi-batelada. Contínuo. Fluxogramas de Processo: simbologia e critérios de elaboração.
03	28/03	Equação geral de Balanços de Massa. Processos de mistura. Sistemas de separação por destilação. Scale-up. Sistemas com múltiplas unidades.
04	30/03	Balanços de massa sem reação química: Conceitos de nó de entrada e nó de saída. Sistemas com reciclo, by-pass e purga.
Semana Santa: 03 a 08.04.2023		
05	11/04	Balanços de massa com reação química: conceito
06	13/04	Reações químicas: Fundamentos de estequiometria. Reagentes limitante e em excesso. Grau de conversão. Conversão. Rendimento. Seletividade. Combustão e seus elementos.
07	18/04	Combustão e seus elementos. Balanços de massa com reação química: sistemas com reciclo. Aplicações.
08	20/04	Balanços de massa com reação química: sistemas com reciclo: conceitos de conversão global e conversão por passe. Exercícios de aplicação.
09	25/04	Balanços de massa com reação química: sistemas com reciclo: conceitos de conversão global e conversão por passe. Exercícios de aplicação.
10	27/04	Cinética Química: Conceitos preliminares. Velocidade de reação. Variação de concentração com o tempo. Determinação de Leis de Velocidade.
11	02/05	Reações de 1ª e 2ª. Ordem: aspectos gerais. Reação de Ordem Zero. Tempo de meia-vida: conceito. Modelos de colisão. Fatores de orientação.
12	04/05	Energia de Ativação (Ea). Equação de Arrhenius. Correlação: $k = f(T)$
13	09/05	Balanços microscópicos em reatores ideais. Conceitos preliminares: conversão. Concentração molar. Vazão (ou velocidade) molar. Conversão para processos contínuos. Diluição em sistemas contínuos e descontínuos. Exemplos de Caso.
14	11/05	Tipos de reatores ideais: Reatores de batelada (<i>Batch</i>) e de Mistura Completa (<i>CSTR</i>). Balanços Microscópicos em Reatores Ideais <i>Batch</i> e <i>CSTR</i> . Exemplo de fixação.
15 e 16	16 e 18/05	Semana de Provas: P1 (PQI 3221: 17.05.2023 das 15h40-17h40)
17	23/05	Tipos de reatores ideais: Reatores de batelada (<i>Batch</i>) e de Mistura Completa (<i>CSTR</i>). Balanços Microscópicos em Reatores Ideais <i>Batch</i> e <i>CSTR</i> . Exemplo de fixação.
18	25/05	Balanços Microscópicos em Reatores <i>CSTR</i> . Exemplo de fixação. Tipos de reatores ideais: Reatores Tubulares (<i>PFR</i>). Balanços Microscópicos em Reatores <i>PFR</i> . Exemplo de fixação.
19	01/06	Balanços Microscópicos em Reatores <i>CSTR</i> . Exemplo de fixação. Tipos de reatores ideais: Reatores Tubulares (<i>PFR</i>). Balanços Microscópicos em Reatores <i>PFR</i> . Exemplo de fixação.
20	06/06	Balanços Microscópicos em Reatores <i>CSTR</i> . Exemplo de fixação. Tipos de reatores ideais: Reatores Tubulares (<i>PFR</i>). Balanços Microscópicos em Reatores <i>PFR</i> . Exemplo de fixação.
Feriado Corpus Christi: 08.06.2023		
21	13/06	Balanços de massa em sistemas com diluição. Conceito e aplicações.
22	15/06	Etapas e Mecanismos de Reação: conceito. Reação em várias etapas. Catalise.
23	20/06	Enzimas: conceito e comparação com catalisadores químicos. Enzimas e Energia de Ativação. Sítio Ativo. Modelos de ação de enzimas: E. Fischer e D. Koshland.

24	22/06	Cinética Enzimática: conceito, características e objetivos. Relação $v = f(C)$ em sistemas catalisados por enzimas. Sistema Unirreacional Simples: Equação Michaelis-Menten.
25	27/06	Equação Michaelis-Menten: Conceito. Dedução da expressão a partir do mecanismo enzima-substrato. Análise do comportamento da curva. Métodos de Linearização: Lineweaver-Burk, Hanes e Eadie-Scatchard e Briggs & Haldane. Número de Renovação e Constante de Especificidade.
26	29/06	Inibição enzimática: conceito. Classes de inibidores. Inibição Reversível: Competitiva (IRC) e Anticompetitiva (IRAC). Inibição Reversível Mista (IRM). Inibição Irreversível. Modelo de Michaelis-Menten com inibidores. Métodos de linearização.
27 e 28	03 a 07/07	Semana de Provas: P2 (PQI 3221: 07.07.2023 das 10h00-12h00)
29 e 30	10 a 14/07	Semana de Provas: Prova Substitutiva (PQI 3221: 14.07.2023 das 10h00-12h00)
–	17 a 21/07	Prova de Recuperação (PQI 3221: 21.07.2023 das 10h00-12h00)

HORÁRIO E LOCAL DAS AULAS E TOTAL DE CRÉDITOS

Horários/Locais:

3^{as} e 5^{as}. feiras: 09:20 às 11:00 – Sala S 04

Total de créditos: Nominal: 60 (sessenta/semestre) sendo 04 (quatro/semana)

CRITÉRIO DE APROVAÇÃO E FREQUÊNCIA

Cálculo da Média de Aproveitamento (M)

$$M = \left[\frac{(2P_1 + 3P_2)}{5} \right]$$

Onde:

P_i = Notas obtidas nas provas regulares (P_1 e P_2) da disciplina

Média necessária para aprovação: $M \geq 5,0$ (cinco e zero)

Frequência: $F \geq 70\%$ (setenta por cento)

PROVA SUBSTITUTIVA

A Prova Substitutiva (P_s) repõe o resultado de qualquer das provas regulares da disciplina (P_i) usando como critério de substituição o de proporcionar a maior média acumulada de aproveitamento. A (P_s) deverá ocorrer em 14.07.2023 das 10h00-12h00 (ver Programa da Disciplina).

NORMA DE RECUPERAÇÃO

Aplicação de 01 (uma) prova escrita que versa sobre o conteúdo pleno discutido ao longo do semestre, a se realizar em 21.07.2023 das 10h00-12h00 (ver Programa da Disciplina).

OBSERVAÇÕES

Alteração de datas, horários e locais serão comunicadas durante o desenvolvimento do curso.

BIBLIOGRAFIA

Será fornecida ao longo das aulas em função dos conteúdos sob apreciação.