

Reação Química em Meio Contínuo, Uma Introdução.

Alessandro R. L. Nery¹ (PG), Adalberto B. M. S. Bassi¹ (PQ)*

¹Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, C.P. 6154, CEP 13084-971, Campinas, SP, Brasil. Grupo Teoria temporal de Calor.

E-mail: bassi@iqm.unicamp.br

Palavras Chave: Reação Química, Termodinâmica dos Meios Contínuos.

Introdução

A termodinâmica dos meios contínuos considera que a menor parte de um sistema é um ponto, no qual as propriedades intensivas são definidas a cada instante. Por isto, as propriedades extensivas são transformadas em densidades (propriedades intensivas), cujos valores dependem da posição e do tempo. Logo, todas as propriedades são trabalhadas como campos. Há uma teoria de mistura baseada na termodinâmica dos meios contínuos^{1,2} e, também, há uma teoria de reação química em meios contínuos^{2,3} (*Reacting Continuum*). A proposta deste trabalho é mostrar alguns conceitos desenvolvidos para a reação química, utilizando meios contínuos.

Resultados e Discussão

A termodinâmica dos meios contínuos considera que, em cada instante, todos os constituintes da mistura ocupam simultaneamente o mesmo ponto do sistema (ou, em todos os pontos, as densidades mássicas de todos os constituintes não são nulas)². As equações de balanço podem ser locais ou globais, estas últimas para o sistema como um todo, mas o enfoque deste trabalho restringe-se ao balanço local. Em comparação com a termodinâmica de meios contínuos não reativos, para o estudo da reação química são considerados dois novos campos, o campo velocidade de reação química (r) e o campo densidade de quantidade de matéria (w), a qual é suposta contínua⁴.

Note que a velocidade de reação química passa a ser um campo porque, num mesmo instante, o seu valor pode variar de ponto para ponto do sistema. Por outro lado, num mesmo instante a quantidade de matéria em cada ponto pode ser diferente por dois motivos: (1) a densidade mássica varia de ponto para ponto, mesmo sem reação química, portanto a densidade de quantidade de matéria em cada ponto também varia; (2) a reação química não conserva a quantidade de matéria, conserva apenas a massa.

Convém, ainda, esclarecer que: (a) a temperatura de cada constituinte, num mesmo ponto e num mesmo instante, pode ser diferente (a densidade de energia cinética de cada constituinte

pode ser diferente, para um mesmo ponto do sistema, num mesmo instante)²; (b) na equação de balanço de cada campo, somente se conserva a massa total da mistura (vale ressaltar que a massa de cada componente não se conserva).

Para um campo genérico ψ , tem-se a equação de balanço local

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \psi + \text{div} \Phi - \rho S - \rho \Gamma = 0,$$

sendo Φ o fluxo, S o suprimento e Γ a produção da propriedade considerada, devido à ocorrência de reação química. Este balanço pode ser feito para cada constituinte, separadamente. Deve-se notar que, em cada ponto e em cada instante, a concentração de cada constituinte depende tanto da difusão (que existe em qualquer mistura, mesmo sem reação química) como da reação química, o que justifica a equação

$$c = \Delta c + f(c),$$

onde c é a concentração de cada constituinte da mistura, Δc é o termo referente à difusão e $f(c)$ é o termo referente à velocidade da reação.

O tratamento matemático para um meio reacional é, portanto, o mesmo que para uma mistura, mas com a adição de um novo fator no balanço, devido à produção da propriedade considerada. Isto ocorre para qualquer campo, exceto para o campo de densidade mássica total da mistura.

Conclusões

No meio contínuo com reação química deve ser considerado que o único campo que se conserva é o campo densidade mássica total, pois os demais campos não se conservam. Isto traz modificações significativas à equação de Clausius-Duhem⁵, portanto ao balanço local de entropia. De fato, na maioria das aplicações em engenharia a segunda lei é descrita pela equação de Clausius-Duhem, a qual não é utilizável em meios quimicamente ativos.

¹ Atikin, R. J.; Craine, R. E. *Quarterly Jnl. of Mechanics & App. Maths.* **1976**, 29, 209.

² Truesdell, C.A. *Rational Thermodynamics*, Springer: New York, **1984**.

³ Kelly, P. D. *Int. J. Enging. Sci.* **1964**, 2, 129.

⁴ Nery, A. R. L., Bassi, A. B. M. S. *Quím. Nova.* **2009**, 32, 1961.

⁵ Truesdell, C.; Toupin, R. *The Classical Field Theories of Mechanics*, Handbuch der Physik, III, Springer, Berlin, **1960**.