

## A IMPORTÂNCIA DA FÍSICO-QUÍMICA PARA A INDÚSTRIA

Uduvaldo Arcanjo Soares<sup>1</sup>, Magno de Souza Araújo<sup>1</sup>, Winício Alves de Abreu<sup>1</sup>, Rayvglimar Alves dos Santos e Silva<sup>1</sup>, Isanna Menezes Florêncio<sup>1</sup>, Eliane Rolim Florentino<sup>2</sup>, Eliana Marta Nunes de Mesquita<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Graduanda de Química Industrial – Universidade Estadual da Paraíba – Brasil

<sup>2</sup> Departamento de Química – Universidade Estadual da Paraíba - Brasil

**Palavras-chave:** Físico-química, Indústria, Aplicabilidade.

### Introdução

A físico-química é o campo da ciência que aplica as leis da física para elucidar as propriedades das substâncias químicas e esclarecer as características dos fenômenos químicos. O termo físico-química é normalmente aplicado ao estudo das propriedades físicas das substâncias, como a pressão de vapor, tensão superficial, viscosidade, índice de refração, densidade e cristalografia, bem como ao estudo dos então chamados aspectos clássicos do comportamento dos sistemas químicos, como propriedades térmicas, equilíbrio, velocidades de reação, mecanismos de reação e fenômenos de ionização. Em seus mais teóricos, a físico-química se ocupa em explicar propriedades espectrais das substâncias em termos da teoria quântica fundamental, a interação da energia dos elétrons em átomos e moléculas com as propriedades observáveis apresentadas por estes sistemas, e os efeitos mecânicos, elétricos e térmicos dos elétrons e prótons individualmente nos sólidos e líquidos. A fase inicial do desenvolvimento da físico-química como um campo especializado de estudo foi dedicado à investigação do problema das afinidades eletrônicas, ou as grandes variações dos rendimentos e vizes com que várias substâncias reagiam umas com as outras. Exemplos comuns é a fácil corrosão do ferro comparada com a do ouro, e o fato de o oxigênio sustentar a combustão, mas o nitrogênio não. O objetivo principal deste estudo é mostrar de que maneira a química é usada na indústria e também dar uma impressão da faixa de habitantes que podem ser empregadas e indicar a maneira pela qual a compreensão e a aplicação da físico-química ajudam a operação eficiente. Em uma revisão breve é impossível dar uma informação comprehensiva sobre o uso de princípios físico-químicos na prática industrial; poucas áreas foram, portanto, selecionadas para consideração. De maneira direta, argumenta-se que a química dos processos, dentro de toda faixa de pesquisa, de desenvolvimento e de produção, consiste simplesmente na aplicação dos princípios da físico-química. Mas dentro dessa definição, seria necessário admitir que a intenção e o destaque da físico-química envolvida variam enormemente de um ramo a outro da indústria. Em um extremo da faixa está a operação bem experimentada, que se tornou eficiente por causa de um longo processo de tentativa de erro, estabelecendo um modo satisfatório de operação. No outro extremo da faixa está a nova e moderna produção química; a fábrica deve operar eficientemente desde o inicio, porque a escala de operação e investimento financeiro envolvido são tão grandes que não há oportunidade nem para enganos nem para adquirir experiência durante o prolongado período de “colocação em operação”.

### Resultado e Discussão

Através do cálculo das variações de energia livre de reações propostas, é possível evitar a dissipação de esforços experimentais em áreas onde o sucesso é pouco provável por limitações de equilíbrio. Todavia, uma constante de equilíbrio “favorável” de maneira nenhuma garante o aproveitamento lucrativo de uma reação; atenção também deve ser dada à cinética de reação. Qualquer que seja o propósito de uma reação e, especialmente, em química de processos onde um sucesso comercial é a meta final, é essencial que a reação se desenvolva com uma velocidade razoável. Uma velocidade substancial de formação do produto será essencial se o reator não for desordenadamente grande, e uma elevada velocidade, em comparação com aquelas reações competitivas, consecutivas e paralelas, assegura uma mistura de produtos de complexidade controlável.

Em outros aspectos de estudos de mecanismo, várias e recentes técnicas são usadas: a marcação radioativa é largamente empregada, e em reações envolvendo radicais livres, espectroscopia de ressonância do spin do elétron, tem-se demonstrado uma ferramenta muito valiosa, ela própria ajudada pelas instalações de computação moderna para calcular a distribuição de densidade do elétron-spin pelos cálculos dos orbitais moleculares.

O ponto de partida para um novo processo poderia ser uma equação estequiométrica englobando os reagentes disponíveis e produtos desejados. Tal equação seria proposta pelo químico, talvez como

resultado de um estudo no papel das alternativas, possíveis para a obtenção de um produto desejado, seguindo uma observação acidental, feita durante o trabalho, num campo relacionado. Muitas de tais equações podem ser rejeitadas pelo químico nessa fase exploratória: conhecimento anterior de sistemas similares, ausência de um mecanismo de reação aceitável, reações alternativas óbvias e assim por diante. O que resta de útil deve ser submetido a algum outro tipo de exame minucioso, o que pode ser, certamente experimental, mas como, tem sido corretamente afirmado. "Experimentação é trabalho caro e que consome tempo, deve ser utilizada somente quando estivermos seguros de que o resultado é necessário e ainda desconhecido". A termodinâmica pode ser usada pra remover a necessidade para algum trabalho experimental, pelo fornecimento de um valor para constante de equilíbrio da reação. Alguns exemplos são apresentados a seguir.

Sempre que possível, os valores termodinâmicos da literatura devem ser usados. Entretanto, a química é mais especulativa, e pouco provável que valores termodinâmicos tenham sido determinados, devendo, portanto, ser utilizado o recurso de adição de grupos. Tais métodos dependem da generalização do fato de que um grupo molecular particular sempre dar a mesma contribuição ao valor termodinâmico de uma molécula completa, de maneira que esse valor pode ser calculado por uma soma de tais contribuições de grupos.

Os cálculos feitos para avaliar  $\Delta G^\circ$ , muitas vezes fornecem simultaneamente números para as variações de entalpia; estes são, em geral, necessários e, em alguns exemplos, necessitam-se apenas de variações de entalpia. Por exemplo, em um novo processo para produzir acetato de vinila por oxidação de etileno, tornou-se necessário, para o projeto do equipamento para reação em escala maior, estabelecer a ordem de grandeza das variações de calor envolvidas em várias reações.; a complexidade do sistema de reações e a necessidade para provisão desta informação a um estágio preliminar da pesquisa excluíram a possibilidade de determinações experimentais, tornando-se necessários usar métodos de cálculos. Para esses cálculos, era necessário conhecer a entalpia de informação do acetato de vinila, e, por causa da natureza crítica dos cálculos finais, esta entalpia de informação deduzida a partir de quatro fontes diferentes: a) a partir de valores da literatura para a entalpia de hidrogenação de acetato de vinila e a entalpia de formação de acetato de etila; b) a partir do calor de reação de acetileno e ácido acético.

## **Conclusão**

Este estudo mostrou como os princípios da fisico-química são aplicados, desde as primeiras considerações de uma reação possível.

Os tópicos discutidos foram selecionados para ilustrar a diversidade de problemas cujas soluções requerem apreciação da fisico-química. Claramente problemas de tipos tão diferentes necessitam de variedades de técnicas para sua solução, mas, em termos amplos, é possível reconhecer pelo menos dois papéis diferentes que a fisico-química pode desempenhar na indústria.

1-Algumas operações, inegavelmente, demandam técnicas de especialistas: a aplicação útil da espectroscopia de ressonância do spin do elétron ou da cristalografia de raios X deve ser citada como exemplo. Os problemas na indústria, aos quais técnicas podem ser aplicadas, não são menos exatos do que aqueles encontrados em pesquisas nas universidades, sendo que ao especialista eles ofereçam, pelo menos, um grande desafio intelectual.

2- Outras atividades, ainda que não necessitando uma alta concentração de especialistas, requerem igualmente uma aplicação habilidosa dos métodos da fisico-química, que incluindo a avaliação crítica dos resultados, de acordo com as leis dessa disciplina. Embora seja natural que essa divisão em duas áreas deva ser compreendida, deve-se conhecer que a fisico-químico pode mover-se de uma para outra. Esta mobilidade serve, novamente, para dar ênfase ao fato de que a fisico-química usada nas indústrias de processos é exatamente aquela desenvolvida nas universidades e nas pesquisas realizadas em instituições acadêmicas.

## **Referências**

JONES, D.G., Introdução a tecnologia Química, Tradução: Júlio Buschinelli, Editora Edgard Blucher Ltda. São Paulo, 1971.

BARBOSA, A.L., Dicionário de Química. 3<sup>a</sup> Edição. AB Editora. Goiânia, 2004.

LEMBO, A. Química realidade e contexto. 1<sup>a</sup> Ed., 2<sup>a</sup> Impressão. Editora Ática, São Paulo, 2000.