

The background features a blue-to-white gradient with faint white chemical structures and molecular diagrams. In the foreground, a glass dropper is shown dispensing a drop of liquid into a series of test tubes.

O papel fundamental da

# QUÍMICA entre as CIÊNCIAS NATURAIS 2

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
(Organizador)



O papel fundamental da

# QUÍMICA entre as CIÊNCIAS NATURAIS 2

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
(Organizador)



**Atena**  
Editora  
Ano 2022

**Editora chefe**

Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

**Editora executiva**

Natalia Oliveira

**Assistente editorial**

Flávia Roberta Barão

**Bibliotecária**

Janaina Ramos

**Projeto gráfico**

Bruno Oliveira

Camila Alves de Cremo

Daphynny Pamplona

Gabriel Motomu Teshima

Luiza Alves Batista

Natália Sandrini de Azevedo

**Imagens da capa**

iStock

**Edição de arte**

Luiza Alves Batista

2022 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do texto © 2022 Os autores

Copyright da edição © 2022 Atena Editora

Direitos para esta edição cedidos à Atena Editora pelos autores.

Open access publication by Atena Editora



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição Creative Commons. Atribuição-Não-Comercial-Não-Derivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. Permitido o *download* da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Todos os manuscritos foram previamente submetidos à avaliação cega pelos pares, membros do Conselho Editorial desta Editora, tendo sido aprovados para a publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

A Atena Editora é comprometida em garantir a integridade editorial em todas as etapas do processo de publicação, evitando plágio, dados ou resultados fraudulentos e impedindo que interesses financeiros comprometam os padrões éticos da publicação. Situações suspeitas de má conduta científica serão investigadas sob o mais alto padrão de rigor acadêmico e ético.

**Conselho Editorial****Ciências Exatas e da Terra e Engenharias**

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto

Profª Drª Alana Maria Cerqueira de Oliveira – Instituto Federal do Acre

Profª Drª Ana Grasielle Dionísio Corrêa – Universidade Presbiteriana Mackenzie

Profª Drª Ana Paula Florêncio Aires – Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás

Profª Drª Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná



Prof. Dr. Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás  
Prof. Dr. Douglas Gonçalves da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia  
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Profª Drª Érica de Melo Azevedo – Instituto Federal do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará  
Profª Dra. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho  
Prof. Dr. Juliano Bitencourt Campos – Universidade do Extremo Sul Catarinense  
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande  
Profª Drª Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá  
Prof. Dr. Marco Aurélio Kistemann Junior – Universidade Federal de Juiz de Fora  
Prof. Dr. Miguel Adriano Inácio – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais  
Profª Drª Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte  
Profª Drª Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas  
Prof. Dr. Sidney Gonçalo de Lima – Universidade Federal do Piauí  
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista



## O papel fundamental da química entre as ciências naturais 2

**Diagramação:** Daphynny Pamplona  
**Correção:** Maiara Ferreira  
**Indexação:** Amanda Kelly da Costa Veiga  
**Revisão:** Os autores  
**Organizador:** Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

### Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

P214 O papel fundamental da química entre as ciências naturais  
2 / Organizador Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua.  
- Ponta Grossa - PR: Atena, 2022.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-258-0027-1

DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.271220604>

1. Química. I. Paniagua, Cleiseano Emanuel da Silva  
(Organizador). II. Título.

CDD 540

Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos - CRB-8/9166

**Atena Editora**

Ponta Grossa - Paraná - Brasil

Telefone: +55 (42) 3323-5493

[www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)

contato@atenaeditora.com.br



**Atena**  
Editora  
Ano 2022

## DECLARAÇÃO DOS AUTORES

Os autores desta obra: 1. Atestam não possuir qualquer interesse comercial que constitua um conflito de interesses em relação ao artigo científico publicado; 2. Declaram que participaram ativamente da construção dos respectivos manuscritos, preferencialmente na: a) Concepção do estudo, e/ou aquisição de dados, e/ou análise e interpretação de dados; b) Elaboração do artigo ou revisão com vistas a tornar o material intelectualmente relevante; c) Aprovação final do manuscrito para submissão.; 3. Certificam que os artigos científicos publicados estão completamente isentos de dados e/ou resultados fraudulentos; 4. Confirmam a citação e a referência correta de todos os dados e de interpretações de dados de outras pesquisas; 5. Reconhecem terem informado todas as fontes de financiamento recebidas para a consecução da pesquisa; 6. Autorizam a edição da obra, que incluem os registros de ficha catalográfica, ISBN, DOI e demais indexadores, projeto visual e criação de capa, diagramação de miolo, assim como lançamento e divulgação da mesma conforme critérios da Atena Editora.



## DECLARAÇÃO DA EDITORA

A Atena Editora declara, para os devidos fins de direito, que: 1. A presente publicação constitui apenas transferência temporária dos direitos autorais, direito sobre a publicação, inclusive não constitui responsabilidade solidária na criação dos manuscritos publicados, nos termos previstos na Lei sobre direitos autorais (Lei 9610/98), no art. 184 do Código Penal e no art. 927 do Código Civil; 2. Autoriza e incentiva os autores a assinarem contratos com repositórios institucionais, com fins exclusivos de divulgação da obra, desde que com o devido reconhecimento de autoria e edição e sem qualquer finalidade comercial; 3. Todos os e-book são *open access*, *desta forma* não os comercializa em seu site, sites parceiros, plataformas de *e-commerce*, ou qualquer outro meio virtual ou físico, portanto, está isenta de repasses de direitos autorais aos autores; 4. Todos os membros do conselho editorial são doutores e vinculados a instituições de ensino superior públicas, conforme recomendação da CAPES para obtenção do Qualis livro; 5. Não cede, comercializa ou autoriza a utilização dos nomes e e-mails dos autores, bem como nenhum outro dado dos mesmos, para qualquer finalidade que não o escopo da divulgação desta obra.



## APRESENTAÇÃO

O e-book: “O papel fundamental da química entre as ciências naturais 2” é composto por onze capítulos que apresentam trabalhos nas diferentes áreas da química: *i)* teoria e prática no ensino de química; *ii)* química dos produtos naturais; *iii)* química dos materiais; e *iv)* aplicação de novos materiais e biotecnologia para remediação ambiental.

O primeiro capítulo apresenta um trabalho resultante da observação, experiência e desafios enfrentados por discentes do curso de licenciatura em química, frente ao desafio do processo de ensino-aprendizagem de alunos do ensino médio.

O segundo capítulo apresenta um estudo que trata da importância de compostos fenólicos com propriedades antioxidantes, provenientes de frutos que compõem a dieta alimentar de milhares de famílias. Já os capítulos três e quatro apresentam estudos que avaliaram as propriedades físico-químicas de biodiesel provenientes da espécie Ouricuri e das sementes de *Glycine Max* e *Ricinus Communis L.*

Os capítulos de cinco a nove apresentam trabalhos que objetivaram sintetizar, caracterizar e elucidar as inúmeras propriedades de materiais provenientes de fibra de carbono, aminas quirais, fibras de  $\text{TiO}_2$  e de bambu funcionalizadas com óxido de ferro; a fim de se avaliar inúmeras propriedades: *i)* catalíticas; *ii)* semicondutoras e luminescentes; *iii)* novas nanoestruturas pela combinação de duas ou mais substâncias químicas; *iv)* preparo de filmes finos biodegradáveis entre outras propriedades que visem a sua aplicação em larga escala, que leve a proporcionar inúmeros benefícios em forma de tecnologia para a sociedade.

O capítulo 10 apresenta um trabalho de revisão no qual se avaliou a eficiência de  $\text{Ag}_2\text{WO}_4$  como fotocatalisador para a remoção de corantes em matrizes aquosas. Por fim, o capítulo 11 apresenta uma revisão da aplicação da propriedade de bioluminescência da bactéria *Vibrio fischeri* frente à exposição da toxicidade provenientes de inúmeras classes de Contaminantes de Interesse Emergente e seus produtos de transformação provenientes da aplicação de diferentes processos oxidativos avançados em matrizes aquosas.

Diante desta diversidade de trabalhos que abordaram a aplicação de diferentes áreas da química e afins, esta área da ciência demonstra a sua fundamental importância para aperfeiçoar, desenvolver e remediar novos produtos que chegam até o consumo da sociedade e que objetiva melhorar e aumentar a qualidade de vida das pessoas.

Nesta perspectiva, a Atena Editora vem trabalhando de forma a estimular e incentivar cada vez mais pesquisadores do Brasil e de outros países a publicarem seus trabalhos com garantia de qualidade e excelência em forma de livros, capítulos de livros e artigos científicos.




## SUMÁRIO

### **CAPÍTULO 1..... 1**

#### **EXPERIÊNCIAS DE INSERÇÃO PROFISSIONAL NO ENSINO DE QUÍMICA: TEORIA E PRÁTICA**


Alan Stampini Benhame de Castro  
Hauster Maximiler Campos de Paula

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206041>

### **CAPÍTULO 2..... 12**

#### **IMPORTÂNCIA DOS BIOATIVOS FENÓLICOS COMO ANTIOXIDANTES NATURAIS**


Maria Celeste da Silva Sauthier  
Ana Maria Pinto dos Santos  
Walter Nei Lopes dos Santos

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206042>

### **CAPÍTULO 3..... 23**

#### **AVALIAÇÃO DAS PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DAS MISTURAS DE BIODIESEL DE OURICURI E DIESEL DE PETRÓLEO**


Rafaela Gabriel  
João Inácio Soletti  
Sandra Helena Vieira de Carvalho

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206043>

### **CAPÍTULO 4..... 35**

#### **TRANSESTERIFICAÇÃO *IN SITU* MEDIADA POR MICRO-ONDAS PARA PRODUÇÃO DE BIODIESEL A PARTIR DE SEMENTES DE *Glycine max* E *Ricinus communis L.***


Sávio Eduardo Oliveira Miranda  
Sandro Luiz Barbosa dos Santos  
Stanlei Ivair Klein

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206044>

### **CAPÍTULO 5..... 45**

#### **A THERMODYNAMIC APPROACH FOR MICROSTRUCTURES WITHIN CARBON FIBERS PRECURSORY MESOPHASE PITCH BASED ON THE MÜLLER-LIU PROCEDURE**


Caio Cesar Ferreira Florindo

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206045>

### **CAPÍTULO 6..... 53**

#### **RESOLUÇÃO CINÉTICA DINÂMICA DE AMINAS QUIRAIS COM CATALISADOR HETEROGÊNEO DE PALÁDIO SUPORTADO EM DOLOMITA**


Fernanda Amaral de Siqueira  
Renata Costa Zimpeck  
José Carlos Queiroz Arêas  
Larissa Moisés da Silva  
Lívia Yuriko Sawada

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206046>

**CAPÍTULO 7..... 64**

OBSERVAÇÃO DA INFLUÊNCIA DE TUNGSTÊNIO PRESENTE EM FIBRAS DE TiO<sub>2</sub> UTILIZADAS COMO SEMICONDUTORES EM FOTOCATÁLISE HETEROGÊNEA


Luana Góes Soares da Silva  
Annelise Kopp Alves

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206047>

**CAPÍTULO 8..... 75**

SÍNTESE DE SEMICONDUTORES DE DIFERENTES COMPOSIÇÕES E SUA CAPACIDADE DE ABSORÇÃO NA REGIÃO UVA


Luana Góes Soares da Silva  
Annelise Kopp Alves

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206048>

**CAPÍTULO 9..... 85**

PREPARAÇÃO DE FILMES FINOS BIODEGRADÁVEIS A BASE DE BAMBU FUNCIONALIZADOS COM ÓXIDO DE FERRO


Viviane Alencar Marques Araújo do Nascimento  
Marcelo Ramon da Silva Nunes  
William Ferreira Alves  
Anselmo Fortunato Ruiz Rodriguez

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206049>

**CAPÍTULO 10..... 94**

UMA BREVE REVISÃO DO DESEMPENHO DO Ag<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> NA REMOÇÃO DE CORANTES EM SOLUÇÃO AQUOSA POR FOTOCATÁLISE


Francisco das Chagas Marques da Silva  
Germano Pereira dos Santos  
Francisco de Assis Araújo Barros  
Geraldo Eduardo da Luz Júnior

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.27122060410>

**CAPÍTULO 11..... 104**

UTILIZAÇÃO DA BACTÉRIA *Vibrio fischeri* NA INDICAÇÃO DE TOXICIDADE AGUDA PROVENIENTES DE CONTAMINANTES DE INTERESSE EMERGENTE E SEUS PRODUTOS DE DEGRADAÇÃO AVALIADOS EM DIFERENTES MATRIZES AQUOSAS

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
Valdinei de Oliveira Santos

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.27122060411>

**SOBRE O ORGANIZADOR..... 117**

**ÍNDICE REMISSIVO..... 118**

## A THERMODYNAMIC APPROACH FOR MICROSTRUCTURES WITHIN CARBON FIBERS PRECURSORY MESOPHASE PITCH BASED ON THE MÜLLER-LIU PROCEDURE

Data de aceite: 01/03/2022

Data da submissão: 20/01/2022

**Caio Cesar Ferreira Florindo**

Professor Adjunto no departamento de Química, Centro de Estudos Superiores de Tefé, Universidade do Estado do Amazonas – UEA,  
Tefé - Amazonas  
<http://lattes.cnpq.br/5188604740015151>

**ABSTRACT:** In the present work, a continuum thermodynamics approach based on the Müller-Liu mathematical procedure is employed to describe the thermodynamic behavior of microdomains. This investigation is primarily designed to analyze how the microdomains orientation affect the basic thermodynamic properties of the mesophase pitch mixture. The orientation of the microdomain is assumed to agree with its particle's average orientation. A director balance equation is included in the entropy inequality exploration and new generalized thermodynamic relations are deduced. The restrictions on constitutive functions imposed by the second law of thermodynamics are derived by the method of Liu. Possible extensions of this model can be used to describe the mechanical and rheological properties of the carbon fibers.

**KEYWORDS:** Mesoscopic theory, Thermodynamics, Microdomains, Mesophase pitch, Carbon fibers.

DESCRIÇÃO TERMODINÂMICA PARA

MICROESTRUTURAS DENTRO DE FIBRAS DE CARBONO DE PICHE MESOFÁSICO POR MEIO DO PROCEDIMENTO DE MÜLLER-LIU

**RESUMO:** Neste trabalho, a termodinâmica mesoscópica do contínuo baseada no procedimento matemático de Müller-Liu é empregada para descrever o comportamento termodinâmico de microestruturas. Esta investigação é primeiramente designada para analisar como os a orientação das microestruturas, chamadas micro domínios, afetam as propriedades termodinâmicas básicas de uma mistura de piche mesofásico. A orientação do micro domínio é assumida concordar com a orientação média de partículas que o constitui. Uma equação de balanço do diretor é incluída na exploração da desigualdade de entropia de Müller e novas relações termodinâmicas são deduzidas. As restrições impostas pela segunda lei da termodinâmica são derivadas pelo método de Liu. Possíveis extensões deste modelo podem ser usadas para descrever as propriedades mecânicas e reológicas das fibras de carbono.

**PALAVRAS-CHAVE:** Teoria mesoscópica, Termodinâmica, Micro domínios, Piche mesofásico, Fibras de carbono.

### 1 | INTRODUÇÃO

Continuum thermodynamics is built on two main grounds: (1) basic fields, which obey balance laws valid for all bodies regardless of their constitution and (2) specific equations for each body named constitutive laws. Usually,

in thermodynamics one considers only the basic fields mass, linear momentum, angular momentum, energy and entropy, but in special situations, for example, when microscopic characteristics of the system particles are taken into account, other basic fields need to be added. In this case, for materials with a more complicated internal structure than simple materials, other variables need to be added for their unique description. Some examples of such complex materials are steel, shape memory alloys, micro-cracks, liquid crystals, polymer melts, solutions, and others (BLENK, 1991).

In principle, there are two possibilities to include additional quantities into the continuum thermodynamics description: the first one is to introduce additional fields and their balance equations defined on space-time  $(x, t)$ . This approach has a long history in continuum mechanics, starting with the cosserat brothers in the early twentieth century and extending to current days. A second possibility is to introduce the concept of mesoscopic space, which historically stems from the theory of liquid crystals by taking into account the orientation distribution function of the molecules. In this approach, the additional quantities (also called mesoscopic variables) extend space-time to the so-called mesoscopic space. As a result, all other fields along with their respective balance equations are redefined in this new space. Despite that, the balance equations can be easily written down on the mesoscopic space because only the number of dimensions change, in comparison with the usual balances on space-time  $(x, t)$ .

In the present work, a continuum thermodynamics approach based on the müller-liu procedure (liu, 1972; müller, 1985) is employed to describe the thermodynamic behavior of the microdomains (edie, 1989). Basically, this procedure involves incorporating lagrange multipliers to the entropy inequality, in order to take into account all balance equations in the inequality exploitation. That is, all thermodynamic processes for the microdomains obtained as solutions of the balance laws and constitutive model must be consistent with the second law of thermodynamics.

## 2 | THERMODYNAMICS FOUNDATIONS

### 2.1 Basic balance laws

In order to describe the balance laws, one introduce the following quantities:  $\rho$  is the density,  $\mathbf{v}$  the velocity vector,  $\mathbf{T}$  the stress tensor,  $\mathbf{m}$  the momentum supply density by external forces,  $\mathbf{D}$  the strain-rate tensor,  $\varepsilon$  the internal energy,  $\phi$  the heat current,  $r$  the energy supply. The balance laws of mass, momentum and internal energy referred to an inertial frame, are

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla_x \cdot (\mathbf{v}) = 0, \quad (1)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \nabla_x \cdot (\mathbf{T}) = \rho \mathbf{m} \quad (2)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} + \nabla_x \cdot (\boldsymbol{\phi}) = \text{tr}[\mathbf{T} \cdot \mathbf{D}] + \rho r \quad (3)$$

These equations are simple balance laws valid for simple systems. However, in the treatment of complex materials (materials that have a more complicated internal structure than simple ones) other variables need to be added for their unique description. For the mesophase pitch mixture, for example, it is necessary to consider internal variables as well as news balance equations. Some of these variables and their respective balance equations will be discussed in detail in the following sections.

## 2.2 Müller entropy principle

The material behavior of a system must obey the second law of thermodynamics. Thus, all thermodynamic processes obtained as solutions of the balance laws and constitutive model must be consistent with the entropy principle (TRUESDALL, 1984). In macroscopic continuum mechanics, the entropy balance equation for a mixture have the general form

$$\rho \frac{\partial \gamma}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho \gamma \mathbf{v} + \boldsymbol{\mathfrak{E}}) = \rho \zeta + \rho \sigma \quad (4)$$

where  $\gamma$  is the specific entropy,  $\boldsymbol{\mathfrak{E}}$  the entropy flux,  $\zeta$  the specific entropy supply and  $\sigma$  the specific entropy production. As a consequence of the second law of thermodynamics the inequality

$$\sigma \geq 0 \quad (5)$$

must hold for all thermodynamic processes. The generality of Eq. (4) is quite remarkable because it encompasses many entropy inequalities found in the literature of non-relativistic continua mechanics, with few exceptions.

In the endeavor of softening these assumptions, Ingo Müller (1985) proposed a weaker formulation of the entropy inequality in which the entropy flux and supply are considered unspecified constitutive quantities, and the constitutive properties of the material do not depend on external supplies. In fact, Müller approach satisfies all necessary requirements of an irreversibility statement and reads as follows:

- In every material body there exists a quantity, the specific entropy  $\sigma$ , which obeys an Eq. (4) type balance equation.

- The entropy production for each constituent may take any value, but the entropy production of the whole mixture is a non-negative quantity, see Eq. (5).
- Entropy flux and supply are considered unspecified constitutive quantities.
- The nature of the restrictions imposed on the system behavior by the second law of thermodynamics is purely constitutive. Hence, by obtaining these restrictions, the (external) supply terms that appear in all balance equations cannot influence the material behavior, thus they must be omitted.
- There exist special material singular surfaces, the so-called ideal walls between two continua, across which both the normal heat flux and normal entropy flux are continuous.

Aiming to simplify the analytical operations performed with such a principle, Liu (1972) proposed to incorporate Lagrange multipliers to the entropy inequality, making the Müller proposal exploitation simpler than beforehand. In the present work, this method will be employed to impose thermodynamic restrictions on the constitutive responses of the microdomains.

### 2.3 Supplementary field equation

In this work, the microdomains orientation is assumed as an internal orientational degree of freedom defined by the director vector  $\mathbf{n}$ . In this case, the vector  $\mathbf{n}$  is considered an independent variable in the space state and  $\mathbf{w} = d\mathbf{n}/dt$  the change velocity of  $\mathbf{n}$ . By using standard arguments, it is straightforward to derive from the Euclidean transformation rules that  $\mathbf{n}$  is invariant with respect to non-inertial frame changes.

It is customary to work simply with unit vectors in physical space instead of the microscopic director  $\mathbf{n}$ . For example, in the Ericksen-Leslie theory of liquid crystals one employs a macroscopic director  $\mathbf{d}(\mathbf{x}, t)$  for describing the local alignment of a particular molecule or group of molecules in uniaxial nematic liquids. In the present investigation, it is assumed that  $\mathbf{d}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \mathbf{n}$  to avoid complications that may arise from working on the real projective plane. Thus, the dynamics of the macroscopic director  $\mathbf{d}$  for incompressible isothermal conditions is governed by the Ericksen-Leslie equation (ERICKSEN, 1959; LESLIE, 1966).

$$\rho \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = \rho \mathbf{j} + \mathbf{g} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\Omega}. \quad (6)$$

Here the symbol  $\mathbf{q} = d\mathbf{d}/dt$  represents the macroscopic director change velocity, the external director body force,  $\mathbf{g}$  the intrinsic director body force and  $\boldsymbol{\Omega}$  the director stress tensor. It should be noted that Eq. (6) is quite similar to the angular velocity balance equation from Florindo (2017).

The constitutive equations for  $\mathbf{g}$  and  $\boldsymbol{\Omega}$  are given in terms of linear functions of the angular velocity of the director relative to that of the fluid  $\mathbf{N}$  and the strain rate tensor

$\mathbf{D} = (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}^T)/2$ . The Ericksen-Leslie constitutive equations for  $\mathbf{g}$  and  $\mathbf{\Omega}$  are as follows:

$$\begin{aligned}\mathbf{\Omega} &= \beta \mathbf{n} + \frac{\partial Fe}{\partial \nabla \mathbf{n}} \\ \mathbf{g} &= \tau \mathbf{n} - \beta \cdot \nabla \mathbf{n} - \frac{\partial Fe}{\partial \mathbf{n}} - \lambda_1 \mathbf{N} - \lambda_2 \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \\ \mathbf{N} &= \boldsymbol{\rho} - \mathbf{W} \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{n}, \\ \mathbf{W} &= \frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v} - (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v})^T], \\ \lambda_1 &= \alpha_3 - \alpha_2, \\ \lambda_2 &= \alpha_6 - \alpha_5 = \alpha_3 + \alpha_2,\end{aligned}\tag{7}$$

where  $\mathbf{W}$  is the rate of vorticity tensor,  $\mathbf{N}$  the corotational (“Jaumann”) derivative of the director,  $\lambda_1$  is the rotational viscosity,  $\lambda_2$  the irrotational torque coefficient,  $\beta$  a Lagrange multiplier vector,  $\alpha_i = 1, \dots, 6$ , are Leslie viscosity coefficients,  $Fe$  the elastic free energy density and  $\tau$  a reactive scalar parameter.

## 3 I CONSTITUTIVE THERMODYNAMICS MODELLING

### 3.1 Thermodynamics state space

By considering the rule of equipresence and principle of frame indifference, one proposes the state space

$$\mathcal{Z} = (\mathbf{n}, \mathbf{N}, \rho, \mathbf{D}, \theta, \nabla \theta)\tag{9}$$

Due to the principles of objectivity and equipresence, the set of constitutive variables  $\mathcal{C}$

$$\mathcal{C} = (\gamma, \varepsilon, \phi, \mathbf{\Omega}, \mathbf{T}, \mathfrak{C}).\tag{10}$$

must be formulated as functions on the state space  $\mathcal{Z}$ . The tensor  $\mathbf{D}$  is introduced in the set of variables because constitutive functions must be independent on the observers, or in other words, must be objective quantities. Consequently, constitutive functions do not depend on the velocity  $\mathbf{v}$ , but they can depend on the velocity gradient through its symmetric part  $\mathbf{D}$ .

### 3.2 Exploitation of the entropy inequality

The macroscopic entropy inequality (5) must be satisfied subject to the simultaneous satisfaction of the balance laws and evolution equations for the microdomains. In order to create a link between the entropy balance and the remaining balances, and to exploit the restrictions imposed by this inequality, the method of Lagrange multipliers proposed by

Liu (1972) and proven by Muschik (1992) is employed. Thus, the entropy inequality (4), constrained by the balance equations (1), (2), (3) and (6) takes the form

$$\begin{aligned} & \rho \frac{dy}{dt} + \nabla_x \cdot (\mathbf{C}) - \rho \zeta - \Lambda^\rho \left[ \frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla_x \cdot (\mathbf{v}) \right] \\ & - \Lambda^v \cdot \left[ \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \nabla_x \cdot (\mathbf{T}) - \rho \mathbf{m} \right] - \Lambda^n \cdot \left[ \rho \frac{d\mathbf{g}}{dt} - \nabla_x \cdot (\mathbf{\Omega}) - \rho \mathbf{j} - \mathbf{g} \right] \\ & - \Lambda^\varepsilon \left[ \rho \frac{d\varepsilon}{dt} + \nabla_x \cdot (\boldsymbol{\phi}) - \text{tr}[\mathbf{T} \cdot \mathbf{D}] - \boldsymbol{\Omega} : \mathbf{J} - \mathbf{N} \cdot \mathbf{g} - \rho r \right] \geq 0. \end{aligned} \quad (11)$$

In the inequality above,  $\Lambda^\rho$  and  $\Lambda^\varepsilon$  are scalar and  $\Lambda^v$  and  $\Lambda^n$  are vectorial Lagrange multipliers. The Lagrange multipliers are not necessarily objective quantities, but they may be functions of the independent variables from the space state [17]. These parameters are auxiliary constitutive quantities that must be determined along with the exploitation of the inequality. The dot placed after and must be understood as the scalar product.

It is important to note that from the energy balance equation arise additional terms, namely,  $\mathbf{J}$ ,  $\boldsymbol{\Omega}$ ,  $\mathbf{g}$  and  $\mathbf{N}$ . This is because the director's balance equation is taken into account in the mathematical derivation of the new energy balance. The angular velocity balance equation is not included in (11) because one assumes that (6) is sufficient to describe the rotational and orientational character of the microdomains in the pitch. In addition, it is also noted that the director's balance equation (6) is a specification of the angular velocity balance for nematic liquid crystals.

Thus, by substituting the constitutive relations that determine the variables in (10) from those in (9), into inequality (11), and by performing all differentiations with respect to time and space coordinates according to the chain rule, one obtains an inequality similar to

$$\mathbf{Y}(Z) \cdot \mathbf{P} + \mathfrak{F}(Z) \geq 0 \quad (12)$$

where  $\mathbf{Y}(Z)$  and  $\mathfrak{F}(Z)$  are functions of state variables, but not of  $\mathbf{P}$ , and

$$\mathbf{P} \in \left\{ \frac{d\mathbf{n}}{dt}, \frac{d\mathbf{N}}{dt}, \frac{d\rho}{dt}, \frac{d\mathbf{D}}{dt}, \frac{d\theta}{dt}, \frac{d\nabla\theta}{dt}, \nabla\mathbf{N}, \nabla\rho, \nabla(\nabla\theta), \nabla\mathbf{D} \right\}. \quad (13)$$

Note that the inequality (12) is linear in  $\mathbf{P}$ , and the values of  $\mathbf{P}$  can be given independently of the values of  $\mathbf{Y}$  and  $\mathfrak{F}$ . This implies that  $\mathbf{Y}$  must vanish, otherwise, it would be possible to choose some values of  $\mathbf{P}$  such that the inequality was violated. Hence, the inequality (12) must hold for arbitrary values of  $Z$  and  $\mathbf{P}$ . The necessary and sufficient conditions to satisfy this requirement are  $\mathbf{Y}(Z)$  and  $\mathfrak{F}(Z) \geq 0$ . By introducing the notations



$$\begin{aligned}
H_{\Xi} &= \frac{\partial \gamma}{\partial \Xi} - \Lambda^n \cdot \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \Xi} - \Lambda^\varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial \Xi}, \\
L_{\Xi} &= \frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{C}}}{\partial \Xi} - \Lambda^v \cdot \frac{\partial \boldsymbol{T}}{\partial \Xi} + \Lambda^n \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial \Xi} - \Lambda^\varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial \Xi}.
\end{aligned} \tag{14}$$

one obtains the Liu equations

$$\begin{aligned}
H_n &= 0, \quad H_N = 0, \quad H_\rho - \Lambda^\rho = 0, \quad H_\theta = 0, \\
H_D &= 0, \quad H_{\nabla(\theta)} = 0, \quad -\rho \Lambda^v = 0,
\end{aligned} \tag{15}$$

Moreover, the entropy flux conditions are:

$$(\widehat{L_\rho})_{sim} = 0, \quad (\widehat{L_N})_{sim} = 0, \quad (\widehat{L_D})_{sim} = 0, \quad (\widehat{L_{\nabla\theta}})_{sim} = 0, \tag{16}$$

where  $(\ )_{sim}$  is the symmetric part of the expression resulting from the symmetry of the second gradient in  $\boldsymbol{P}$ . Note also that Eq. (11) is linear in  $d\boldsymbol{v}/dt$ , therefore  $\Lambda^v = 0$ , or in other words, the momentum equation does not modify the analysis of the entropy inequality. The residual  $\mathfrak{F}(\mathcal{Z}) \geq 0$  inequality takes the form

$$\widehat{L_\theta} \cdot \nabla \theta - \rho \Lambda^\rho \mathbf{1} \cdot \boldsymbol{D} - \Lambda^n \cdot \boldsymbol{g} + \Lambda^\varepsilon (\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{J} + \boldsymbol{N} \cdot \boldsymbol{g}) + \Lambda^\varepsilon \text{tr}[\boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{D}] \geq 0, \tag{17}$$

## 4 | REMARKS AND CONCLUSION

In this work, a thermodynamic model based on the Müller-Liu procedure is proposed for microdomains in the mesophase pitch mixture. The model presented is quite simple, and it shows the thermodynamic implications of taking into account, as a constraint on the entropy inequality, the orientation balance equation. In order to emphasize the microscopic structure (microdomains) of the mesophase pitch, two internal variables,  $\boldsymbol{n}$  and  $\boldsymbol{N}$ , were introduced in the thermodynamic state space.

It could be showed that additional terms, related to these internal variables, arise in the thermodynamic definitions for the entropy and Helmholtz free energy. All these possible results have already been demonstrated by Florindo (2017). Therefore, for more detailed mathematical results and deductions, it is suggested to read that reference. Future experimental works in this direction are necessary to confirm this assumption.

## REFERENCES

BLENK, S. et al. Statistical foundation of macroscopic balances for liquid crystals in alignment tensor formulation. **Physica A**: Elsevier, v.174, n.1, p.119-138, 1991.

EDIE, D.; DUNHAM, M. Melt spinning pitch-based carbon fibers. **Carbon**: Elsevier, v.27, n.5, p. 647-655, 1989.

ERICKSEN, J.L. Anisotropic Fluids. **Archive for Rational Mechanics and Analysis**: Springer Nature, Berlin, v.4, n.1, p.231, set. 1959. DOI 10.1007/BF00281389.

FLORINDO, C. C. F.; PAPENFUSS, C.; BASSI, A. B. M. S. Mesoscopic continuum thermodynamics for mixtures of particles with orientation. **Journal of Mathematical Chemistry**: Springer Nature, Berlin, v.55, n.10, p. 1985-2003, Nov. 2017.

LESLIE, F. M. Some constitutive equations for Anisotropic Fluids. **The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics**: Oxford, v.19, n.3, p.357-370, jan. 1966. DOI 10.1093/qjmam/19.3.357.

LIU, I-S. Method of lagrange multipliers for exploitation of the entropy principle. **Archive for Rational Mechanics and Analysis**: Springer Nature, v. 46, n. 2, p.131-148, 1972.

MÜLLER, I. **Thermodynamics**. Boston: Pitman Publishing, 1985. 521 p.

MUSCHIK, W.; EHRENTAUT, C.; PAPENFUSS, C. Concepts of mesoscopic continuum physics with application to biaxial liquid crystals. **Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics**: Walter de Gruyter GmbH & Co. KG, v.25, n.2, p.179, jun. 2000. DOI 10.1515/JNETDY.2000.011.

REIS, M. C.; FLORINDO, C. F. F.; BASSI, A. B. M. S. Entropy and its mathematical properties: consequences for thermodynamics. **ChemTexts**: Springer Nature, Berlin, v.1, n.1, p. 1-9, fev. 2015.

TRUESDELL, C. **Rational Thermodynamics**. New York: Springer-Verlag, 1984. 578 p.

## ÍNDICE REMISSIVO

### A

Absorção 73, 75, 76, 83, 92

Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) 23

Alaranjado de metila 64, 65, 67, 70, 71, 73, 75, 77, 78, 79, 80, 83, 94, 96, 98, 99, 100

Aminas quirais 53, 63

Antioxidantes 12, 14, 15, 20, 25

Atividade fitoquímica 13

Azul de metileno 94, 96, 98, 100

### B

Bambu 85, 86, 87, 89, 90, 91, 92

Band gap 65, 67, 72, 73, 77, 80, 83, 95

Bioativos 12, 14, 15, 20

Biodegradável 85, 87, 92

Biodiesel 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 62

### C

Carboximetilcelulose (CMC) 85

Catalisador 24, 27, 35, 36, 39, 42, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 63, 64, 68, 95

Catálise homogênea 36

Combustível 23, 24, 25, 28, 29, 30, 31, 32, 33

Conhecimento químico 1, 10

Corante 64, 65, 67, 68, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 77, 78, 79, 80, 83, 84, 97, 98, 99, 100

### D

Densidade 14, 23, 25, 26, 27, 28, 30, 31, 33

Dióxido de Titânio (TiO<sub>2</sub>) 64

Dolomita 53, 56, 57, 61, 63

### E

Electrospinning 64, 65, 66, 68, 71, 72, 74, 75, 77, 78, 82

Ensino aprendizagem 1

Ensino de química 1

Entropia 45

Estágio supervisionado 1, 2, 6, 11

## F

Fenólicos 12, 13, 14, 15, 16, 18, 19, 20  
Fibras de carbono 45  
Filmes finos 85, 87, 89, 90, 91, 92  
Formação de professores 1, 4  
Fotoatividade 65, 72, 73, 74, 75, 80, 83, 84, 100  
Fotocatálise heterogênea 64, 65, 72, 95  
Fotodegradação 64, 94, 99, 100  
Fotoestável 94, 98  
Fotorreação 95

## L

Luminescência 76, 77, 80, 81  
Luz 15, 18, 67, 68, 71, 73, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 83, 94, 95, 102, 103

## M

Microestruturas 45  
Microscopia Eletrônica de Transmissão (MET) 53, 57  
Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) 64, 69, 70, 75, 79, 92

## N

Nanocompósitos 85, 86, 87, 89, 91  
Nanomateriais 64, 65, 73, 85, 86, 92  
Nanotecnologia 65

## O

Óleo diesel 23, 24, 25  
Óleo vegetal 33, 35, 36, 39, 43  
Ouricuri 23, 24, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34  
Óxido de ferro 85, 86, 87, 89, 90, 91, 92

## P

Paládio 53, 55, 56, 61, 63  
Piche mesofásico 45  
Polietilenoglicol (PEG) 85  
Polímeros 85  
Poluição ambiental 95

Propriedades ópticas 64, 72, 75

Propriedades terapêuticas 12, 20

## **R**

Radiação eletromagnética 76

Reflectância 76

Remediação 95, 97, 98, 99, 117

Resolução cinética dinâmica (RCD) 53, 54

Rodamina B 98, 99

## **S**

Semicondutor 95

## **T**

Teoria mesoscópica 45

Termodinâmica 45

Transesterificação 24, 27, 35, 36, 37, 38, 39, 42, 43, 44

Transmissão 53, 57, 76


Tungstênio 64, 72, 73, 75, 80, 83


## **V**


Viscosidade 23, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 33


O papel fundamental da

# QUÍMICA entre as CIÊNCIAS NATURAIS 2

 [www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)

 [contato@atenaeditora.com.br](mailto:contato@atenaeditora.com.br)

 [@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora)

 [www.facebook.com/atenaeditora.com.br](https://www.facebook.com/atenaeditora.com.br)



  
Atena  
Editora  
Ano 2022

O papel fundamental da

# QUÍMICA entre as CIÊNCIAS NATURAIS 2

🌐 [www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)

✉ [contato@atenaeditora.com.br](mailto:contato@atenaeditora.com.br)

📷 @atenaeditora

📘 [www.facebook.com/atenaeditora.com.br](https://www.facebook.com/atenaeditora.com.br)

