



UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO DE JANEIRO

Campus Regional de Resende

Cálculo de Reatores

Lista de Exercícios 2014-1

1. Em uma indústria química decidiu-se pela produção de um produto A_2B_2 . O chefe, que não é da área específica, decidiu por uma reunião entre os 3 brilhantes engenheiros de produção com ênfase em química do setor, formados pela UERJ, para avaliar o encaminhamento da produção. Iniciou a reunião mostrando que o pessoal da área comercial identificou que a molécula A_2B_2 tem uma grande demanda no mercado e que é preciso importar grandes quantidades. Após avaliar as rotas de síntese disponíveis optou-se pela opção da reação de duas moléculas de A com uma molécula de B_2 em fase gasosa. Deu-se início então a reunião e o chefe abriu a palavra aos demais.

Engenheiro Amoroso Boss: Nosso guru, estou radiante com esta nova porta que se abre em nosso destino. Precisamos saber as energias das ligações entre os átomos destas moléculas, para que seja possível estimar os calores de reação, pois é essencial que tenhamos conhecimento das capacidades caloríficas a pressão constante. De posse destas energias saberemos tudo sobre o assunto, como entalpia, energia de Helmholtz, de Gibbs e demais energias. Então logo chegamos na constante de reação e na conversão.

Engenheiro Clarisbadeu Fedes: Esta reação envolve alguma patente? Conhecemos os ΔH de formação do produto para que possamos calcular o calor a retirar ou remover da reação? E sobre os reagentes? Existem disponível no mercado a um bom preço? Possuem impurezas para que planejem as operações unitárias necessárias? Iremos operar em batelada nosso reator tanque ou em modo contínuo? Alguém já estimou o tempo de setup caso optemos por batelada?

Engenheiro Letsgo Daqui: Pessoal, o problema é sério. Isso não vai dar certo. Esta reação envolve um contração de volume, pois o número de moles de reagentes e produtos é diferente. É preciso utilizar um inerte. Também precisamos conhecer a constante de velocidade na temperatura da reação para calcular a velocidade da reação.

O chefe chorou ao final da reunião. Sublinhe o que acha que pode ser aproveitado do diálogo. Também pode escrever o que achar que faltou.

2. O butadieno reage com etileno em fase gasosa em temperaturas elevadas segundo a reação de Diels-Alder em um reator tanque batelada. Se a alimentação for feita a 450°C e pressão de 1 atm em base equimolecular, calcule o tempo de batelada para uma conversão de 60% em processo isotérmico.

Dado: $k = 0.017 \cdot \exp(-275/RT) \text{ dm}^3 \text{ s}^{-1} \text{ mol}^{-1}$. Despreze a variação de volume.

3. Na hidrogenação do propileno iguais quantidades molares de reagentes são carregadas em um reator batelada a 25°C e a pressão medida foi de 32,0 atm. Rapidamente o reator é aquecido a 235°C e a reação é processada.
 - a. Se a reação ocorrer com conversão total a 235°C , qual será a pressão final ?
 - b. Em determinado momento da reação a pressão estava em 32,73 atm. Qual a conversão do propileno?
4. A reação de butanol e monobutilftalato (MBF) na presença de ácido sulfúrico como catalisador a $3,0 \text{ mol L}^{-1}$ produz dibutilftalato (DBF) e água. A cinética da reação depende apenas de MBF e a constante de velocidade vale $7,4 \times 10^{-2} \text{ L mol}^{-1} \text{ min}^{-1}$. As concentrações disponíveis de butanol e MBF são $0,20 \text{ mol L}^{-1}$. A produção diária de DBF é de 3360 mol para um tempo de setup de 22 min e para uma conversão de MBF de 70%.
 - a. Calcule o tempo de batelada
 - b. Calcule o volume de um reator tanque operando em regime batelada para atingir esta produção.
 - c. Os operadores da fábrica dizem que, baseado na experiência, operar o reator com o volume calculado em (b) em modo batelada a 70% de conversão pode não ser a melhor opção e que uma conversão menor pode ser mais produtivo. Calcule a conversão que maximize a produtividade.
5. O volume morto de um reator tanque ocupa 10 % do reator. Se o volume da mistura reacional ocupar todo o volume do reator a conversão passa a 60 %. Calcular a conversão original.