

Problema A

A reacção de 1ª ordem, na fase líquida, $A \rightarrow B$, é conduzida sobre um catalisador na forma de pellets esféricas. Fizeram-se duas experiências no laboratório, em que a reacção foi conduzida em reactor batch (balão de ensaio) carregado com 150 mL de uma solução 0.1 M em A e 0.1 g de catalisador. Em cada uma das experiências usaram-se “pellets” de diferentes diâmetros. Ambas as experiências foram interrompidas ao fim de 1 hora, sendo as misturas analisadas e as respectivas conversões finais as mostradas na tabela. Assuma ausência de limitações difusionais externas.

| Experiência | diâmetro das pellets (mm) | X (%) |
|-------------|---------------------------|-------|
| 1 | 0.22 | 93.2 |
| 2 | 1.85 | 29.8 |

- Determine, para cada uma das experiências, o valor da constante cinética aparente
- Calcule, para cada uma das experiências, o módulo de Thiele e o factor de efectividade.
- Usando os dados calculados na alínea anterior, determine os valores da constante cinética intrínseca e da difusividade efectiva.
- Determine o valor da constante cinética aparente para o caso de pellets de 2 mm de diâmetro.
- Sabendo que a um reactor de leito fixo constituído por um único tubo de 20 cm de diâmetro de secção recta e 2 m de comprimento, carregado com o mesmo catalisador na forma de pellets esféricas de 5 mm de diâmetro, é alimentada a mesma solução de A, a um caudal volumétrico de 30 L/min, determine a conversão à saída.

$$\text{Use } \phi = R \sqrt{\frac{k' \rho_c}{De}}, \eta = \frac{3}{\phi^2} (\phi \coth \phi - 1) \quad \text{e } \rho_c = 1.2 \text{ g cm}^{-3}$$

Problema B

A reacção elementar $A \rightarrow B$ é conduzida, na fase gasosa, num reactor multitubular de leito fixo, consistindo em 50 tubos de 1 m de comprimento e 2.5 cm de diâmetro da secção recta, cheios com um catalisador sólido, poroso, na forma de *pellets* esféricas de 6 mm de diâmetro. O reagente A é alimentado puro a um caudal de $100 \text{ dm}^3/\text{min}$, à temperatura de 673 K e à pressão de 1 atm, sendo obtida a conversão de 35% à saída do reator.

- Determine o valor da massa de catalisador.
- Calcule o valor da constante cinética observada.
- Calcule o valor da constante cinética que se observaria, no caso de ausência de limitações difusionais externas
- Determine o valor do coeficiente de difusão externo.
- Diga, justificando a resposta, se o reactor se encontra a funcionar em regime cinético, difusional interno, difusional externo ou misto.

Dados:

Massa volúmica do catalisador: $\rho_c = 1.3 \text{ g/cm}^3$; viscosidade cinemática: $\nu = 4 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$; $\epsilon_b = 0.46$;
Difusividade efectiva intraparticular: $D_e = 1,3 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$; constante cinética intrínseca: $k' = 0,018 \text{ dm}^3 \text{ g}_{\text{cat}}^{-1} \text{ min}^{-1}$; $R = 0,082 \text{ atm dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

$$Sh = 1.0 Re^{1/2} Sc^{1/3}; \quad Sh = \frac{k_c d_p}{D_A} \cdot \frac{\epsilon_b}{1 - \epsilon_b}; \quad Re = \frac{u d_p}{\nu(1 - \epsilon_b)}; \quad Sc = \frac{\nu}{D_A}; \quad \phi = R \sqrt{\frac{k' \rho_p}{D_e}}; \quad \eta = \frac{3}{\phi^2} (\phi \coth \phi - 1);$$

Problema C

A reacção elementar $A \rightarrow B$ é conduzida, na fase gasosa, num reactor multitubular de leito fixo, consistindo em 100 tubos de 2 m de comprimento e 2 cm de diâmetro da secção recta, cheios com um catalisador sólido, poroso, na forma de *pellets* esféricas de 5 mm de diâmetro. O reagente A é alimentado puro a um caudal de $100 \text{ dm}^3/\text{min}$, à temperatura de 373 K e à pressão de 6 atm..

- Calcule o valor da constante cinética aparente, que observaria no caso da ausência de limitações difusionais externas.
- Calcule o valor do coeficiente de transferência de massa.
- Calcule o valor da constante cinética realmente observada.
- Diga, justificando a sua resposta, se o reactor se encontra em regime cinético, difusional interno, difusional externo ou misto.
- Calcule a conversão à saída do reactor.
- Determine o valor da concentração de A no centro das *pellets*, à saída do reactor.

Dados:

$\rho_p = 1.3 \text{ g/cm}^3$; Coeficiente de difusão externo: $D_A = 2.7 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$; viscosidade cinemática: $\nu = 4 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$; $\varepsilon_b = 0.45$; Difusividade efectiva intraparticular: $D_e = 1.3 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$; constante cinética intrínseca: $k' = 0.023 \text{ dm}^3 \text{ g}_{\text{cat}}^{-1} \text{ min}^{-1}$; $R = 0.082 \text{ atm dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

$$Sh = 1.0 Re^{1/2} Sc^{1/3}; \quad Sh = \frac{k_c d_p}{D_A} \cdot \frac{\varepsilon_b}{1 - \varepsilon_b}; \quad Re = \frac{u d_p}{\nu(1 - \varepsilon_b)}; \quad Sc = \frac{\nu}{D_A}; \quad \phi = R \sqrt{\frac{k' \rho_p}{D_e}}; \quad \eta = \frac{3}{\phi^2} (\phi \coth \phi - 1);$$

Perfil de concentração na pellet: $\varphi = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\sinh \phi \lambda}{\sinh \phi} \right).$