Introdução à Engenharia Química e Bioquímica

Aula 11
MIEQB
ano lectivo de 2020/2021

Sumário da aula

Balanços materiais a processos com reacção

- Estequiometria de uma reacção
- Reagente limitante e reagente em excesso; percentagem de excesso
- Conversão de uma reacção
- Rendimento e selectividade de uma reacção

4.4

Queima-se metano com ar atmosférico num reactor de combustão contínuo, resultando à saída do reactor uma mistura gasosa de monóxido de carbono, dióxido de carbono e água. As reacções que se desenrolam são:

$$CH_4 + \tfrac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$$
$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$$

A alimentação ao reactor contém 7.8% molar CH_4, 19.4% molar O_2 e 72.8% molar de N_2. A conversão de metano é de 90% e a mistura gasosa que sai do reactor contém 8 moles de CO_2 por mole de CO. Calcule a composição molar da corrente de saída.

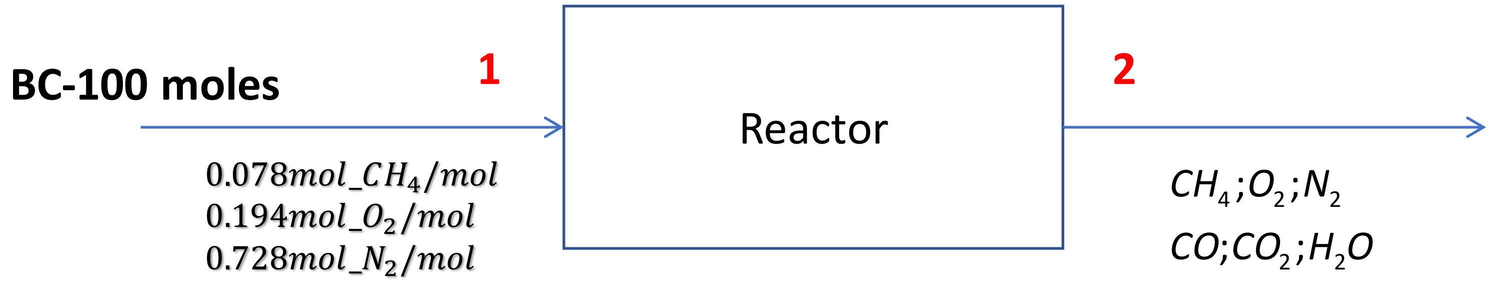
4.4

$$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$$

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$$

$\%\ conversão\ de\ metano = 90\%$

$$\frac{n_{CO_2\_2}}{n_{CO\_2}} = 8$$



moles	1	2
CH4	7.8	
O2	19.4	
CO	0	
CO2	0	
H2O	0	
N2	72.8	
Total	100	

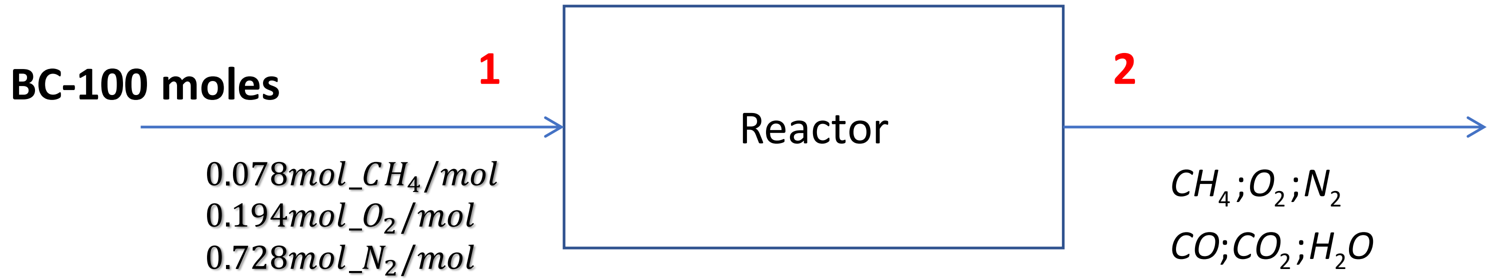
4.4

$$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$$

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$$

$\%\ conversão\ de\ metano = 90\%$

$$\frac{n_{CO_2\_2}}{n_{CO\_2}} = 8$$



Sabe-se que conversão de metano é 90%, logo 10% não reage e passa para corrente 2

$$n_{CH_4 2} = 0.1 \times n_{CH_4 1}$$

$$n_{CH_4 2} = 0.1 \times 0.078 \times 100 = 0.78\ moles$$

moles	1	2
CH4	7.8	0.78
O2	19.4	
CO	0	
CO2	0	
H2O	0	
N2	72.8	
Total	100	

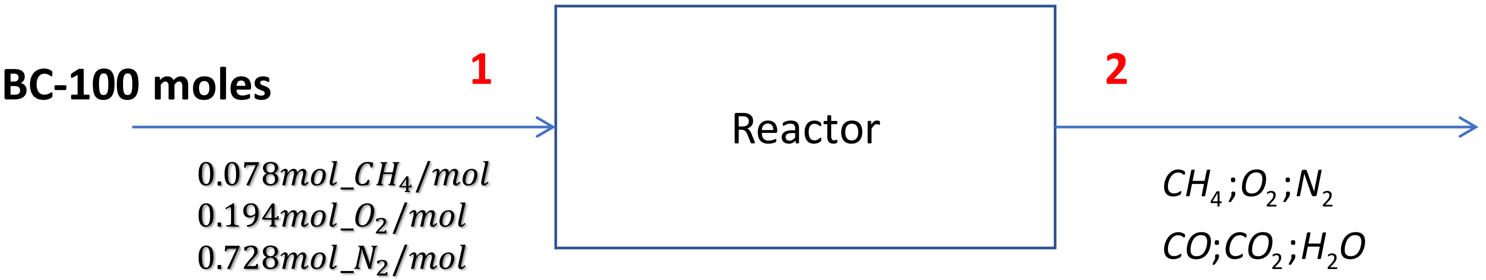
4.4

$$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$$

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$$

$$\%\ conversão\ de\ metano = 90\%$$

$$\frac{n_{CO_2\_2}}{n_{CO\_2}} = 8$$



Sabe-se que conversão de metano é 90%, logo 10% não reage e passa para corrente 2

$$n_{CH_4 2} = 0.1 \times n_{CH_4 1}$$

$$n_{CH_4 2} = 0.1 \times 0.078 \times 100 = 0.78\ moles$$

Fazendo um balanço à espécie não reactiva (inerte):

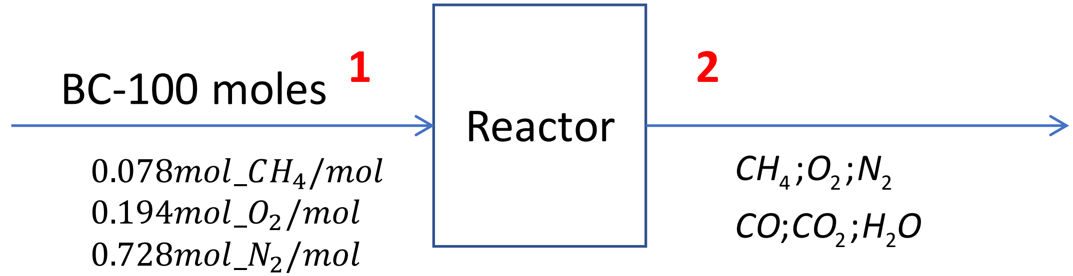
$$n_{N_2 1} = n_{N_2 2} = 72.8\ mol$$

moles	1	2
CH4	7.8	0.78
O2	19.4	
CO	0	
CO2	0	
H2O	0	
N2	72.8	72.8
Total	100	

4.4

$$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$$

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$$



Fazendo agora um balanço ao CH4 (carbono):

$$n_{CH_4 convertidas} = n_{\boldsymbol{CH_4}\ 1} - n_{\boldsymbol{CH_4}\ 2} = 7.8 - 0.78 = 7.02\ moles$$

E também sabemos que:

$$n_{CH_4 convertidas} = n_{\boldsymbol{CO}\_2} + n_{\boldsymbol{CO_2}\_2} = n_{\boldsymbol{CO}\_2} + 8 \times n_{\boldsymbol{CO}\_2} = 7.02\ moles$$

$$\boxed{n_{\boldsymbol{CO_2}\_2} = 8 n_{\boldsymbol{CO}\_2}}$$

$n_{\boldsymbol{CO}\_2} = 0.78$ moles

$$n_{\boldsymbol{CO_2}\_2} = 8 \times 0.78 = 6.24\ moles$$

Para a água:

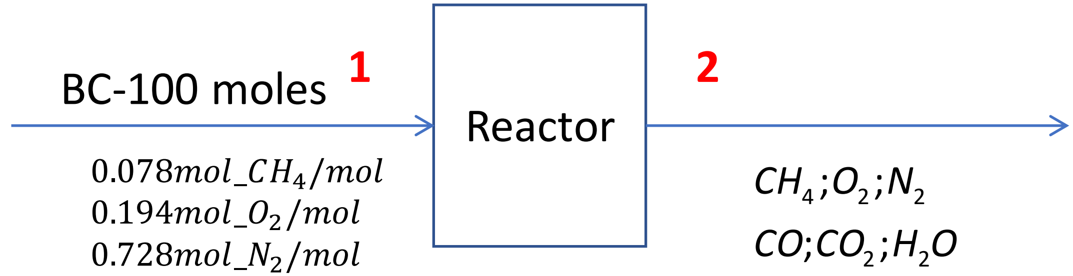
$$n_{\boldsymbol{H_2O}\_2} = 2 \times n_{\boldsymbol{CO_2}\_2} + 2 \times n_{\boldsymbol{CO}\_2} = 14.04\ moles$$

moles	1	2
CH4	7.8	0.78
O2	19.4	
CO	0	0.78
CO2	0	6.24
H2O	0	14.04
N2	72.8	72.8
Total	100	

4.4

$$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$$

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$$



Para o oxigénio:

$$n_{O_2\ convertidas} = \frac{3}{2} \times n_{CO\ 2} + 2 \times n_{CO_2\ 2} = 13.65\ moles$$

$$n_{O_2\ 2} = n_{O_2\ \_iniciais} - n_{O_2\ \_convertidas} = 19.4 - 13.65 = 5.75 \text{ moles}$$

moles	1	2
CH4	7.8	0.78
O2	19.4	5.75
CO	0	0.78
CO2	0	6.24
H2O	0	14.04
N2	72.8	72.8
Total	100	100.4

Prob. 4.5

As seguintes reacções ocorrem num dado reactor:

$2A + B \rightarrow C + D$	% Conversão$_B$ = 19%
$D + B \rightarrow E$	% Conversão$_B$ = 16%
$E + B \rightarrow A$	% Conversão$_B$ = 13%

Suponha que são alimentados 30 mole de A e 50 mole de B ao reactor. Quantas moles saem do reactor e qual a composição molar do efluente reaccional?

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

Prob. 4.5

$$2A + B \rightarrow C + D$$

$$2 \times 9.5 \quad 9.5 \quad 9.5 \quad 9.5$$

$$\%\ \text{Conversão}_B = 19\%$$

$$0.19 \times 50 molB = 9.5$$

moles	Entrada	Saída	
A	30		
B	50		
C	-		
D	-		
E	-		
Total	80		

Prob. 4.5

$$2A + B \rightarrow C + D$$

2×9.5 9.5 9.5 9.5

% Conversão$_B$ = 19%

$$0.19 \times 50molB = 9.5$$

$$D + B \rightarrow E$$

8 8 8

% Conversão$_B$ = 16%

$$0.16 \times 50molB = 8$$

$$E + B \rightarrow A$$

6.5 6.5 6.5

% Conversão$_B$ = 13%

$$0.13 \times 50molB = 6.5$$

moles	Entrada	Saída	
A	30		
B	50		
C	-		
D	-		
E	-		
Total	80		

Prob. 4.5

$$2A + B \rightarrow C + D$$

$2 \times 9.5 \quad 9.5 \quad 9.5 \quad 9.5$

$$\%\ \text{Conversão}_B = 19\%$$

$$0.19 \times 50molB = 9.5$$

$$D + B \rightarrow E$$

$8 \quad 8 \quad 8$

$$\%\ \text{Conversão}_B = 16\%$$

$$0.16 \times 50molB = 8$$

$$E + B \rightarrow A$$

$6.5 \quad 6.5 \quad 6.5$

$$\%\ \text{Conversão}_B = 13\%$$

$$0.13 \times 50molB = 8$$

A: $30 - 2 \times 9.5 + 6.5 = 17.5$

B: $50 - 9.5 - 8 - 6.5 = 26$

C: $0 + 9.5 = 9.5$

D: $0 + 9.5 - 8 = 1.5$

E: $0 + 8 - 6.5 = 1.5$

moles	Entrada	Saída	
A	30	17.5	
B	50	26	
C	-	9.5	
D	-	1.5	
E	-	1.5	
Total	80	**56**	

Prob. 4.5

$$2A + B \rightarrow C + D$$

2×9.5 9.5 9.5 9.5

% Conversão$_B$ = 19%

$$0.19 \times 50molB = 9.5$$

$$D + B \rightarrow E$$

8 8 8

% Conversão$_B$ = 16%

$$0.16 \times 50molB = 8$$

$$E + B \rightarrow A$$

6.5 6.5 6.5

% Conversão$_B$ = 13%

$$0.13 \times 50molB = 8$$

$$A: \quad 30 - 2 \times 9.5 + 6.5 = 17.5$$

$$B: \quad 50 - 9.5 - 8 - 6.5 = 26$$

$$C: \quad 0 + 9.5 = 9.5$$

$$D: \quad 0 + 9.5 - 8 = 1.5$$

$$E: \quad 0 + 8 - 6.5 = 1.5$$

moles	Entrada	Saída	
A	30	17.5	**31.25%**
B	50	26	**46.4%**
C	-	9.5	**16.96%**
D	-	1.5	**2.68%**
E	-	1.5	**2.68%**
Total	80	**56**	

Prob. 4.6

Butano é queimado com um excesso de ar (21% de O_2 e 79% de N_2) segundo a reacção:

$$C_4H_{10} + 13/2\ O_2 \rightarrow 4\ CO_2 + 5\ H_2O$$

Sabendo que a composição molar do gás de saída do reactor é, numa base seca, de 10.63% de CO_2, 5.12% mol de O_2 e 84.25% mol de N_2, calcule:

a) A percentagem de conversão do butano

b) A percentagem de excesso de ar

c) A composição molar do gás de combustão (incluindo a água)

Prob. 4.6

$$C_4H_{10} + 13/2\ O_2 \rightarrow 4\ CO_2 + 5\ H_2O$$

$$x \qquad \frac{13}{2}\,x \qquad 4\,x \qquad 5\,x$$

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

Prob. 4.6

$$C_4H_{10} + 13/2\ O_2 \rightarrow 4\ CO_2 + 5\ H_2O$$

$$x \qquad \frac{13}{2}x \qquad 4x \qquad 5x$$

moles	1	2
C_4H_{10}		-
O_2		**5.12**
N_2		**84.25**
CO_2	-	**10.63**
H_2O	-	13.29

Base seca
BC 100 mol

N_2 é inerte!

$$n_{CO_2\ produzidas} = 10.63\text{moles} = 4x$$

$$4x = 10.63$$

$$x = 2.6575 = n_{C_4H_{10}\ convertido}$$

Prob. 4.6

$$C_4H_{10} + 13/2\ O_2 \rightarrow 4\ CO_2 + 5\ H_2O$$

$$x \qquad \frac{13}{2}x \qquad 4x \qquad 5x$$

moles	1	2
C_4H_{10}	2.6575	-
O_2	22.394	**5.12**
N_2	84.25	**84.25**
CO_2	-	**10.63**
H_2O	-	13.29

Base seca
BC 100 mol

N_2 é inerte!

$$n_{CO_2\ produzidas} = 10.63\text{moles} = 4\text{x}$$

$$4\text{x} = 10.63$$

$$\text{x} = 2.6575 = n_{C_4H_{10}\ convertido}$$

$$n_{H_2O\ \ produzidas} = 5\text{x} = 5\times 2.6575 = 13.29\ moles$$

$$\begin{cases} n_{O_2\ convertidas} = \dfrac{13}{2}\text{x} = 17.274\ moles \\ n_{O_2\ 1} = n_{O_2\ convertidas} + n_{O_2\ 2} = 17.274 + 5.12 = 22.394\ moles \end{cases}$$

a) 100% de conversão de Butano

Não há butano à saída!

b)

$$\%Excesso = \left(\frac{N - N_s}{N_s}\right) \times 100$$

N- número de moles do reagente em excesso inicialmente presentes

$\boldsymbol{N_s}$ - número de moles do reagente em excesso estequiometricamente necessário para converter todo o reagente limitante.

$$\%Excesso\ \boldsymbol{O_2} = \left(\frac{22.394 - 17.274}{17.274}\right) \times 100 = 29.7\%$$

c) Composição molar do efluente

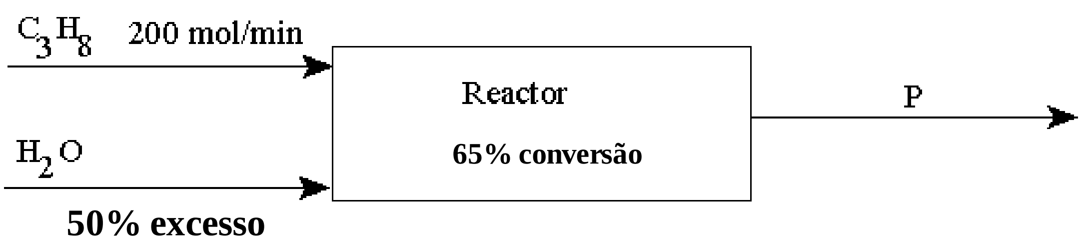
moles	1	2	% 2
C_4H_{10}	2.6575	-	
O_2	22.394	**5.12**	**4.5**
N_2	84.25	**84.25**	**74.4**
CO_2	-	**10.63**	**9.4**
H_2O	-	13.29	11.7
		113.29	

$$\%i = \frac{n_i}{n_{Total}} \times 100$$

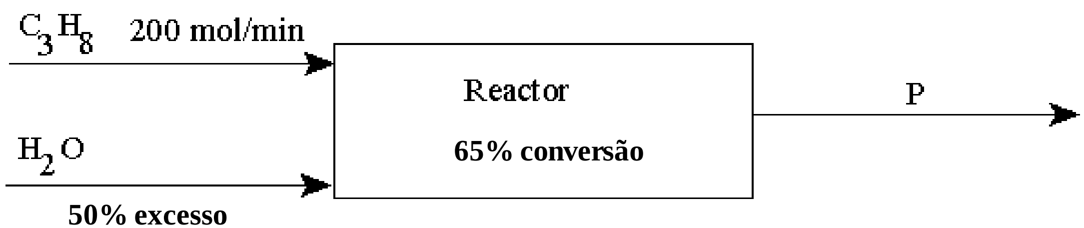
Prob. 4.7

Dimensiona-se um reactor para converter 200 mol/min de propano em CO e H_2 com uma % de conversão de 65%, usando uma % de excesso de 50% de vapor de água. Determine as fracções molares do produto de saída do reactor.

$$C_3H_8 + 3\,H_2O \rightarrow 3\,CO + 7\,H_2$$



Prob. 4.7



$$C_3H_8 + 3\ H_2O \rightarrow 3\ CO + 7\ H_2$$

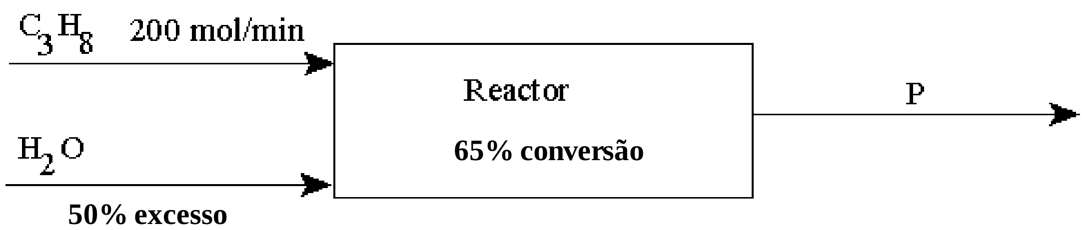
$130 \qquad 3 \times 130 \qquad 3 \times 130 \qquad 7 \times 130$

Conversão=65%

$0.65 \times 200 = 130\ mol$ que reagem

moles	In	Out	% Out
C_3H_8	200		
H_2O			
CO			
H_2			
Total			

Prob. 4.7



$$C_3H_8 + 3\ H_2O \rightarrow 3\ CO + 7\ H_2$$

$$130 \quad 3 \times 130 \quad 3 \times 130 \quad 7 \times 130$$

Conversão=65%

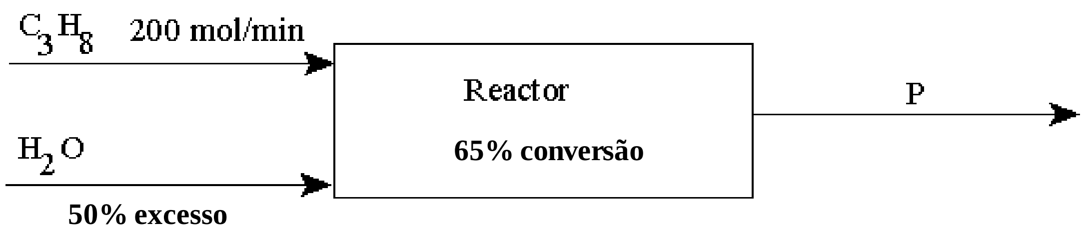
$0.65 \times 200 = 130\ mol$ que reagem

$$\%Excesso\ \boldsymbol{H_2O} = \left(\frac{n_{H2O\ inicial} - 3\times200}{3\times200}\right) \times 100 = 50\%$$

$$n_{H2O\ inicial} = 900 \text{ moles}$$

moles	In	Out	% Out
C_3H_8	200		
H_2O	900		
CO	-		
H_2	-		
Total	1100		

Prob. 4.7



$$C_3H_8 + 3\ H_2O \rightarrow 3\ CO + 7\ H_2$$

$$130 \quad 3 \times 130 \quad 3 \times 130 \quad 7 \times 130$$

Conversão=65%

$0.65 \times 200 = 130\ mol$ que reagem

$$\%Excesso\ \boldsymbol{H_2O} = \left(\frac{n_{H2O\ inicial} - 3\times200}{3\times200}\right) \times 100 = 50\%$$

$$n_{H2O\ inicial} = 900 \text{ moles}$$

moles	In	Out	% Out
C_3H_8	200	70	3.7
H_2O	900	510	27.1
CO	-	390	20.7
H_2	-	910	48.4
Total	1100	1880	

$$n_{C_3H_8\ out} = 200\text{-}130 = 70 \text{ moles}$$

$$n_{\boldsymbol{H2O}\ que\ reagem} = 3\times130 = 390 \text{ moles}$$

$$n_{\boldsymbol{H2O}\ out} = 900 - 390 = \mathbf{510} \text{ moles}$$

$$n_{\boldsymbol{CO}\ obtidos} = 3\times130 = 390 \text{ moles}$$

$$n_{\boldsymbol{H_2}\ obtidos} = 7\times130 = 910 \text{ moles}$$