

Introdução à Engenharia Química e Bioquímica

Aula 4
MIEQB
ano lectivo de 2020/2021

Sumário da aula

Processo e variáveis de um processo

- Massa e volume. Densidade
- Caudal
- Composição química

Processos e Variáveis do processo

Um processo é qualquer série de operações unitárias que ocasiona uma alteração física e/ou química de uma substância pura ou de uma mistura.

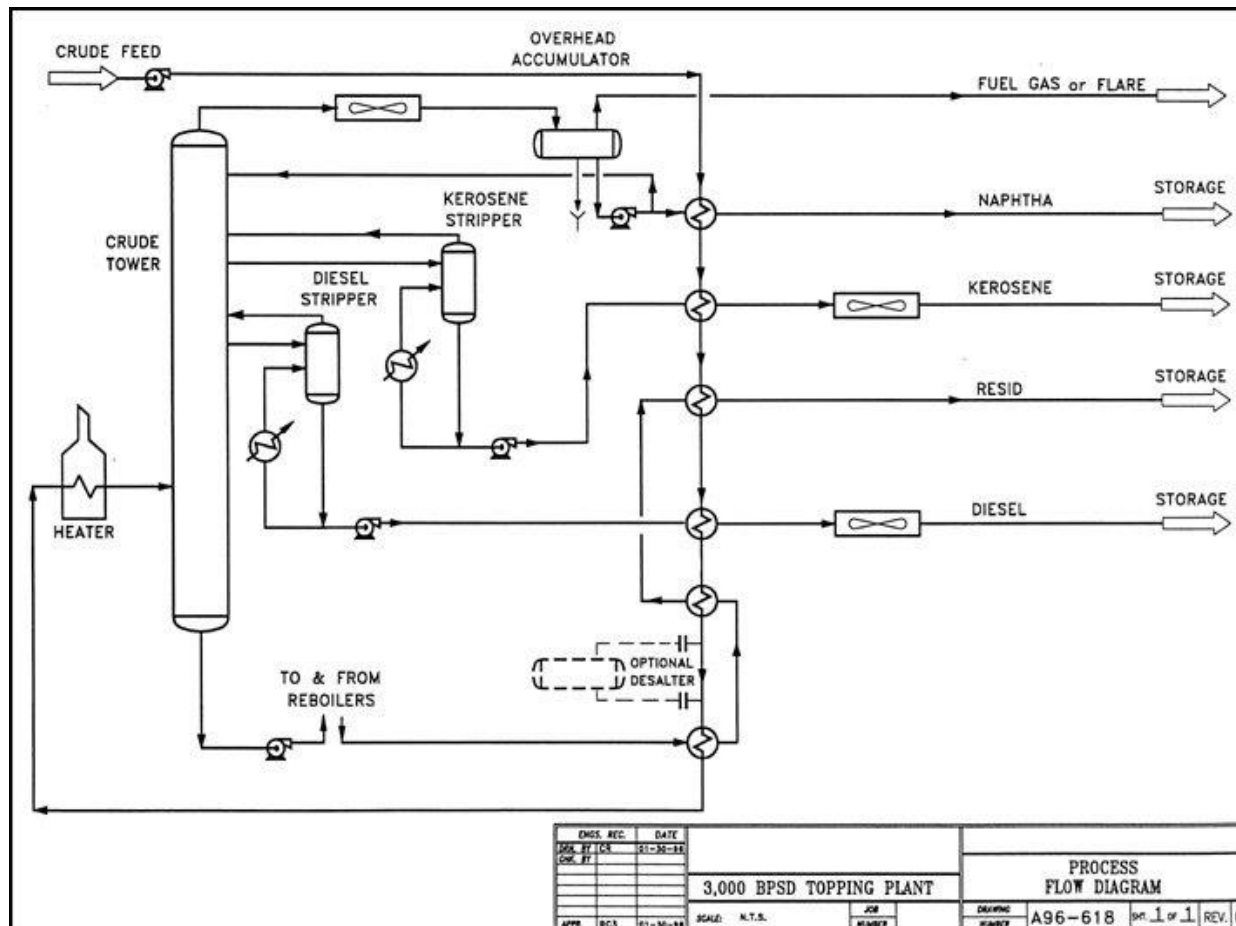
Materiais de entrada no processo ➡ input ou alimentação

Materiais que saem do processo ➡ output ou produto

As operações unitárias estão interligadas entre si pelas correntes ou fluxos

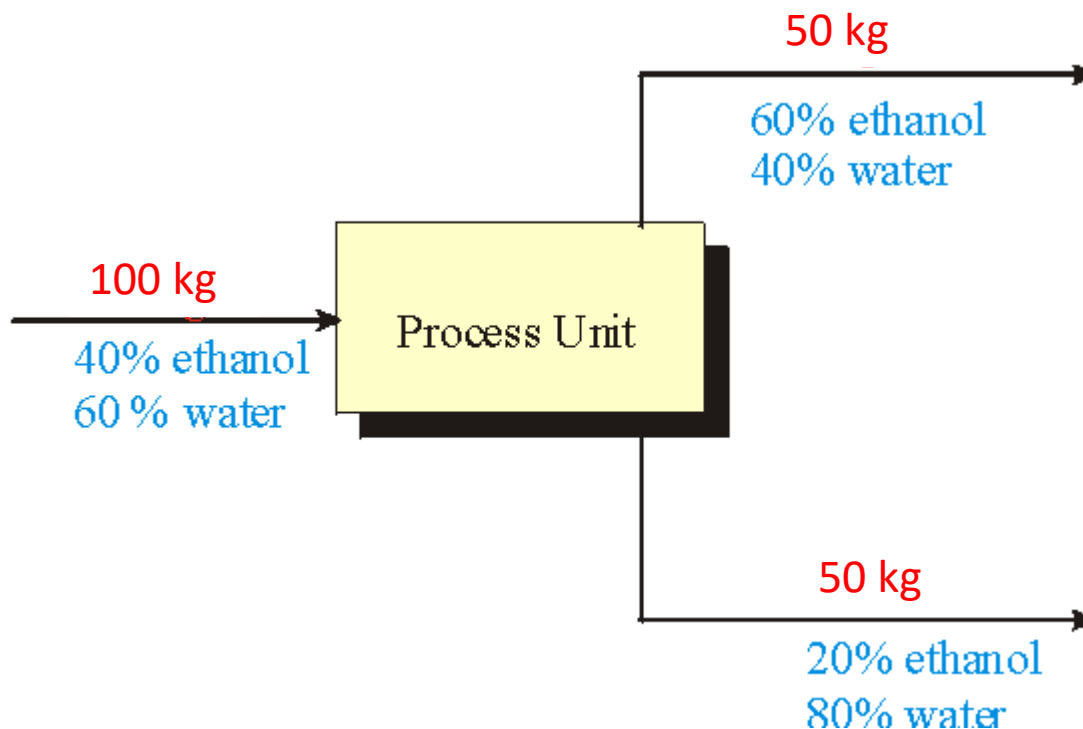
Dimensionar um processo implica conhecer quantidades, composições e condições de cada uma das correntes do processo (as variáveis do processo)

Diagrama de um processo (Flowsheet)



Refinaria de petróleo

Variáveis de um processo



Questão? Como saber se os valores indicados (massas e composições) estão certos?

=> BALANÇO!

MASSA E VOLUME. DENSIDADE

Densidade (ρ) de uma substância é a massa contida numa unidade de volume dessa substância (kg/m^3 , g/cm^3 , lbm/ft^3 ...)

Volume específico é o inverso da densidade...

As densidades dos sólidos e líquidos são essencialmente independentes da pressão e moderadamente dependentes da temperatura

$\rho_{\text{líquidos}} \searrow \text{com } T \nearrow$

Verdade? Alguma exceção?



MASSA E VOLUME. DENSIDADE

Densidade (ρ) de uma substância é a massa contida numa unidade de volume dessa substância (kg/m^3 , g/cm^3 , lbm/ft^3 ...)

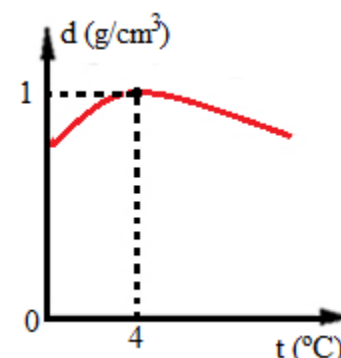
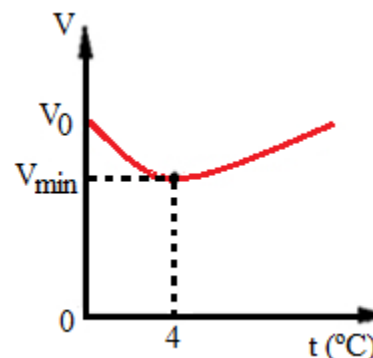
Volume específico é o inverso da densidade...

As densidades dos sólidos e líquidos são essencialmente independentes da pressão e moderadamente dependentes da temperatura

$\rho_{\text{líquidos}} \searrow \text{com } T \nearrow$

Excepção: Água!

$\rho_{\text{água}} = 0.999868 \text{ g/cm}^3 \text{ a } 0^\circ\text{C}$
 $\nearrow 1.00000 \text{ g/cm}^3 \text{ a } 3.98^\circ\text{C}$
 $\searrow 0.95838 \text{ g/cm}^3 \text{ a } 100^\circ\text{C}$



A densidade pode ser usada como factor de conversão entre a massa e o volume de uma substância

Exemplo:

$$\rho_{\text{CCl}_4} = 1.595 \text{ g/cm}^3 \text{ a } 20^\circ\text{C}$$

- A massa de 20 cm^3 de $\text{CCl}_4 \Leftrightarrow (20 \text{ cm}^3) \times (1.595 \text{ g/cm}^3) = 31.9 \text{ g}$
- O volume ocupado por 2815 g de $\text{CCl}_4 \Leftrightarrow (2815 \text{ g}) / (1.595 \text{ g/cm}^3) = 1760 \text{ cm}^3$

A massa específica de uma substância é a razão entre a densidade dessa substância e a densidade da água a 4°C (que serve de referência)

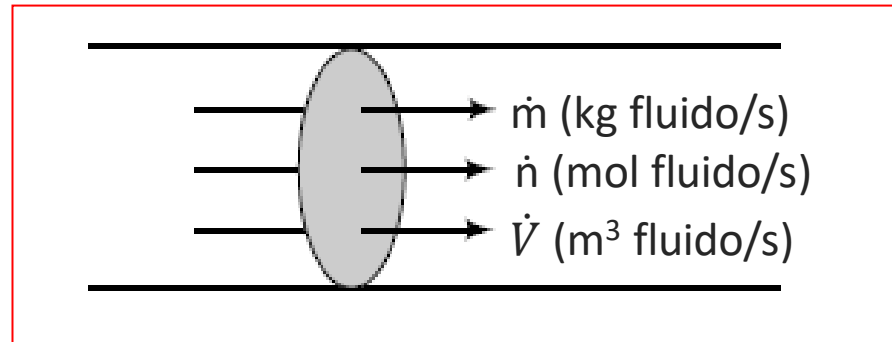
$$SG = \rho / \rho_{ref}$$

$$\rho_{ref} = \rho_{\text{H}_2\text{O}}(4^\circ\text{C}) = 1.000 \text{ g/cm}^3$$

Caudal

A maior parte dos processos envolvem movimento de material de uma etapa para outra

A velocidade à qual esse material é movimentado denomina-se de caudal



$m \equiv$ massa

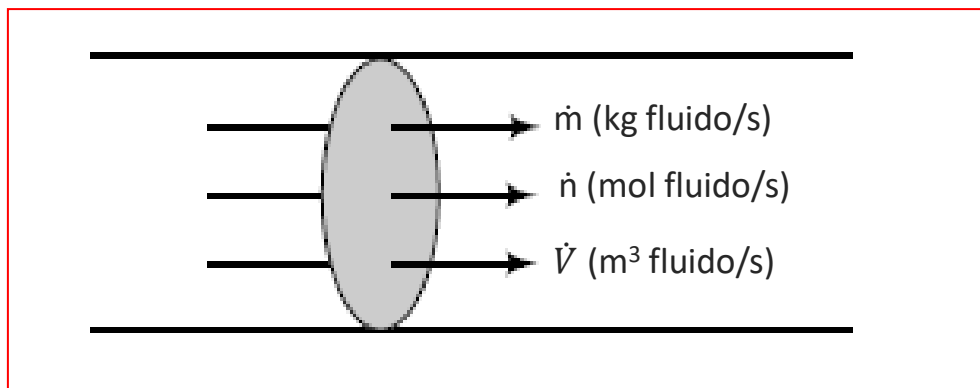
$\dot{m} \equiv$ caudal mássico

$n \equiv$ mole

$\dot{n} \equiv$ caudal molar

$V \equiv$ volume

$\dot{V} \equiv$ caudal volúmico (ou volumétrico)



$$\dot{m} \equiv Q_{\text{mássico}} = \frac{\text{massa de fluido}}{\text{tempo}}$$

$$\dot{n} \equiv Q_{\text{molar}} = \frac{\text{mole de fluido}}{\text{tempo}}$$

$$\dot{V} \equiv Q_{\text{volumétrico}} = \frac{\text{volume de fluido}}{\text{tempo}}$$

$$\rho = \text{densidade} = \frac{\text{massa}}{\text{volume}}$$

$$M = \text{Massa molar} = \frac{\text{massa}}{\text{mole}}$$

$$V_m = \text{Volume molar} = \frac{\text{volume}}{\text{mole}}$$

Problema 2.1) Caudal mássico e caudal volumétrico

O caudal mássico de uma corrente de n-hexano é de 6.59 g.s^{-1} .
Calcule o seu caudal volumétrico sabendo que a densidade do n-hexano é igual a 0.659 g.cm^{-3} .

2.1) Caudal mássico e caudal volumétrico

$$Q_{\text{mássico}} = \frac{\text{massa}}{\text{tempo}}$$

$$Q_{\text{volumétrico}} = \frac{\text{volume}}{\text{tempo}}$$

$$\rho = \text{densidade} = \frac{\text{massa}}{\text{volume}}$$

$$Q_{\text{volumétrico}} = \frac{\text{volume}}{\text{tempo}} = \frac{\text{massa}}{\text{tempo}} * \frac{\text{volume}}{\text{massa}}$$



$$Q_{\text{volumétrico}} = \frac{Q_{\text{mássico}}}{\rho}$$

$$Q_v = 10 \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$$



$$Q_m = 6.59 \text{ g/s}$$

$$\rho = 0.659 \text{ g/cm}^3$$

$$6.59 \frac{\text{g}}{\text{s}} \frac{1 \text{ cm}^3}{0.659 \text{ g}} = 10 \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$$

2.2) Caudal volumétrico e caudal molar

O caudal volumétrico de uma corrente de tetracloreto de carbono é de $100 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$.

Calcule o caudal molar desta corrente considerando que:

- a) O tetracloreto de carbono se encontra líquido a 25°C ;
- b) O tetracloreto de carbono se encontra gasoso a 300°C e 1 atm.

Dados:

Densidade do tetracloreto de carbono líquido a 25°C : $1.595 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$

Massa molar do tetracloreto de carbono: $154 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

$R = 82.05 \text{ cm}^3 \cdot \text{atm} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$

2.2 a) Caudal volumétrico e caudal molar

$$Q_{\text{volumétrico}} = \frac{\text{volume}}{\text{tempo}}$$

$$Q_{\text{molar}} = \frac{\text{moles}}{\text{tempo}} = \frac{\text{volume}}{\text{tempo}} * \frac{\text{massa}}{\text{volume}} * \frac{\text{moles}}{\text{massa}}$$

$$Q_{\text{molar}} = \frac{\text{moles}}{\text{tempo}}$$

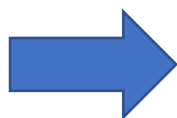


$$Q_{\text{molar}} = \frac{Q_v * \rho}{M}$$

$$Q_v = 100 \text{ ml} / \text{min}$$

$$\rho = 1.595 \text{ g/cm}^3$$

$$M(\text{CCl}_4) = 154 \text{ g} / \text{mol}$$



$$Q_{\text{molar}} = \frac{100 \text{ cm}^3 \times 1.595 \text{ g/cm}^3}{154 \text{ g/mol}} = 1.036 \text{ mol/min}$$

$$100 \frac{\cancel{\text{cm}^3}}{\text{min}} \frac{1.595 \cancel{\text{g}}}{1 \cancel{\text{cm}^3}} \frac{1 \text{ mol}}{154 \cancel{\text{g}}} = 1.036 \text{ mol} \cdot \text{min}^{-1}$$

2.2 b) Caudal volumétrico e caudal molar

$$T = 300^{\circ}\text{C}$$

$$P = 1\text{atm}$$

$$PV = nRT \quad \longrightarrow \quad n = \frac{PV}{RT} \quad \Leftrightarrow \quad \dot{n} = \frac{P\dot{V}}{RT}$$

$$Q_v = 100\text{ml} / \text{min}$$

$$T = 300 + 273 = 573\text{K}$$

$$\dot{n} = \frac{1 \times 100}{82.05 \times 573} = 2.1 \times 10^{-3} \text{mol/min}$$

$$R = 82.05 \text{ cm}^3.\text{atm}.\text{mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

$$Q_{\text{molar}} = 2.1 \times 10^{-3} \text{mol/min}$$

O caudal volumétrico de uma corrente de tetracloreto de carbono é de $100 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$.
Calcule o caudal molar desta corrente considerando que o tetracloreto de carbono se encontra:

a) Líquido a 25°C $\rightarrow Q_{\text{molar}} = 1.036 \text{ mol/min}$

b) Gasoso a 300°C e 1 atm $\rightarrow Q_{\text{molar}} = 2.1 \times 10^{-3} \text{ mol/min}$

DISCUSSÃO: COMPARAR OS VALORES ENTRE SI!

As correntes de processo contêm ocasionalmente uma só substância, mas normalmente consistem em misturas de vários compostos.

Assim é conveniente definir-se:

- **Fracção mássica.** x_A = massa de A / massa total (kg A / kg total)
- **Fracção molar.** y_A = moles de A / moles totais (mol A / mol total)
- A **percentagem mássica** de A é dada por $100 \times x_A$ (%)
- A **percentagem molar** de A é dada por $100 \times y_A$ (%)

A **massa molar média**, \bar{M} , de uma mistura é a razão entre a massa de uma amostra da mistura (m_t) e o número de moles de todas as espécies (n_t) da amostra.

$$\bar{M} = y_1 M_1 + y_2 M_2 + \dots + y_n M_n = \sum_{i=1}^n y_i M_i$$

2.3) Composição mássica e composição molar

Uma mistura de gases tem a seguinte composição mássica: O_2 : 16%; CO: 4%; CO_2 : 17%; N_2 : 63%. Calcule a respectiva composição molar.

Dados: massas molares (g/mol) do O_2 : 32; CO: 28; CO_2 : 44; N_2 : 28.

Calcule também a massa molar média da mistura gasosa.

2.3) Composição mássica e composição molar

$$\%(p / p) \rightarrow \left(\frac{X_g}{100g} \right) \times 100 \longleftrightarrow \text{Base de cálculo: 100 g}$$

M (g/mol)
32
28
44
28

Gas	%(p/p)	m_i (g)	n_i (mol)
O2	16	16	0.5
CO	4	4	0.14
CO2	17	17	0.39
N2	63	63	2.25

Base de cálculo: 100 g $n_i = m_i / M_i$

2.3) Composição mássica e composição molar

Gas	%(p/p)	m_i (g)	n_i (mol)
O ₂	16	16	0.5
CO	4	4	0.14
CO ₂	17	17	0.39
N ₂	63	63	2.25


 Σ 

$$n_t = 3.28 \text{ mol}$$

2.3) Composição mássica e composição molar

Gas	%(p/p)	m_i (g)	n_i (mol)	%(mol/mol)
O2	16	16	0.5	15.2
CO	4	4	0.14	4.3
CO2	17	17	0.39	11.9
N2	63	63	2.25	68.6

$$n_t = 3.28 \text{ mol}$$


$$= (n_i / n_t) \times 100$$

2.3) Composição mássica e composição molar

Gas	%(p/p)	m_i (g)	n_i (mol)	%(mol/mol)
O ₂	16	16	0.5	15.2
CO	4	4	0.14	4.3
CO ₂	17	17	0.39	11.9
N ₂	63	63	2.25	68.6

M (g/mol)
32
28
44
28

DISCUSSÃO:

COMPARAR OS VALORES ENTRE SI!

2.3) Composição mássica e composição molar

Gas	%(p/p)	m_i (g)	n_i (mol)	%(mol/mol)
O ₂	16	16	0.5	15.2
CO	4	4	0.14	4.3
CO ₂	17	17	0.39	11.9
N ₂	63	63	2.25	68.6

M (g/mol)
32
28
44
28

Base de cálculo: 100 g

$n_t = 3.28$ mol

\bar{M} : Massa molar média da mistura gasosa

$$\bar{M} = \frac{100 \text{ g}}{3.28 \text{ mol}} = 30.5 \text{ g/mol}$$

2.3) Composição mássica e composição molar

$$\overline{M} = \sum y_i \cdot M_i$$

y_i = *fracção molar do componente i*

Gas	%(p/p)	M (g/mol)	%(mol/mol)
O2	16	32	15.2
CO	4	28	4.3
CO2	17	44	11.9
N2	63	28	68.6



Gas	y_i	$y_i \cdot M_i$
O2	0.152	4.864
CO	0.043	1.204
CO2	0.119	5.236
N2	0.686	19.208



$$\overline{M} = \sum y_i \cdot M_i = 30.5 \text{ g/mol}$$

2.3) Composição mássica e composição molar

Em casa, provem que:

$$\frac{1}{\bar{M}} = \sum \frac{X_i}{M_i}$$

X_i = fracção mássica do componente i

2.4) Massa molar média do ar

Qual a massa molar média do ar? Considere que o ar é constituído por 21% (v/v) de oxigénio e 79% (v/v) de azoto.

2.4) Massa molar média do ar

21%(v/v) de O₂
79%(v/v) de N₂



Composição volumétrica

$$\frac{\text{volume}_X}{V_{\text{total}}} * 100$$

$$\bar{M} = \sum y_i \cdot M_i$$

y_i = *fracção molar*

$$PV = nRT$$

$$\%molar = \frac{n_i}{n_t} * 100$$




$$\%molar = \frac{\frac{PV_i}{RT}}{\frac{PV_t}{RT}} * 100 = \frac{V_i}{V_t} * 100$$

$$\%molar = \%volumétrica$$


Vi- volume ocupado por ni moles do componente puro i na mistura
de pressão total P a T constante

2.4) Massa molar média do ar

21%(v/v) de O_2
79%(v/v) de N_2  Composição volumétrica = Composição molar

- Temos as fracções molares dos componentes
- Temos as massas molares

2.4) Massa molar média do ar

21%(v/v) de O_2
79%(v/v) de N_2  Composição volumétrica = Composição molar

$$\overline{M} = \sum y_i \cdot M_i$$

$$\overline{M}(ar) = 0.79 * M(N_2) + 0.21 * M(O_2)$$

$$\overline{M}(ar) = 28.84 g/mol$$

2.4) Qual a composição mássica do ar?

Composição Molar = Composição Volumétrica

Composição Mássica



Base de cálculo = 100 moles de Ar

100 moles de Ar = 79 moles de N_2 + 21 moles de O_2

100 moles de Ar \rightarrow 79 mol x 28 g/mol + 21 mol x 32 g/mol

100 moles de Ar \rightarrow 2212 g + 672 g = 2884 g de AR

$$\%(m / m) = \frac{\text{massa}X}{\text{massa_total}} * 100$$



$$\frac{2212}{2884} \times 100 = 76.7 \% N_2$$

$$\frac{672}{2884} \times 100 = 23.3 \% O_2$$