2^a PROVA DE TERMODINÂMICA (EQE-363) Prof. Frederico W. Tavares

Texto para as Questões 1 e 2) Uma mistura contendo 1/3, em mols, de n-octano (1), 1/3 de tetrametilmetano (2) e o restante de um líquido iônico escoa numa tubulação industrial. Sabendo-se que as pressões de vapor dos componentes puros são, respectivamente, $\ln P_1^{SAT}(bar) = 9,32-3120/(T-63,6)$, $\ln P_2^{SAT}(bar) = 9,25-3342/(T-57,6)$, onde T é expresso em Kelvin e que a pressão de vapor do líquido iônico é praticamente zero, responda as questões a seguir.

- a) Calcule os coeficientes de atividade, a entropia e o calor de mistura para uma mistura equimolar dos três componentes a 300 K e 10 bar;
- b) Calcule a menor pressão da tubulação para que a corrente não apresente fase vapor a 400K;
- c) Calcule a pressão para que o sistema apresente 50%, em mols, de vapor a 400K.

Questões 1)(30 Ptos) Considerando o comportamento de mistura ideal, responda os itens (a), (b) e (c).

Questões 2)(30 Ptos) Considerando que o comportamento da fase líquida (sistema ternário) é bem descrito por Margules, dado por: $\frac{G^E}{RT} = 0.0x_1x_2 + \frac{400}{T}x_1x_3 + \frac{400}{T}x_2x_3$ responda os itens (a) e (b).

Questão 3) (40 Ptos) Etanol pode ser produzido via hidrogenação de acetaldeído de acordo com a seguinte reação: CH_3CHO (g) + H_2 (g) == C_2H_5OH (g) . Supondo-se que a alimentação, em fase gasosa, contenha 2mols/s de CH_3CHO , 1mols/s de C_2H_5OH , 3mols/s de H_2 e 4mols/s de N_2 , **calcule a composição de equilíbrio** a 600 K e 3 bar. Os seguintes dados da reação são conhecidos:

 ΔG^{0} (400K, 1 bar, gás ideal) = -200 cal/gmol, ΔH^{0} (400K, 1 bar, gás ideal) = -400 cal/gmol

Algumas fórmulas

$$\begin{aligned} y_{i}P &= x_{i}\gamma_{i}P_{i}^{SAT} \\ \hat{a}_{i} &= \frac{\hat{f}_{i}}{f_{i}^{0}} \\ \hat{f}_{i} &= x_{i} \stackrel{?}{\phi_{i}}P = x_{i}\gamma_{i}f_{i}^{0} \\ \Delta G &= RT(\sum_{i}x_{i}\ln\hat{a}_{i}) \\ \Delta (H + \frac{v^{2}}{2} + gz) &= Q + W_{s} \\ dH &= C_{p}dT + [V - T(\frac{\partial V}{\partial T})_{p}]dP \\ dS &= \left(\frac{C_{p}}{T}\right)dT - \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p}dP \end{aligned} \qquad \begin{aligned} K &= \exp\left(\frac{-\Delta G^{0}}{RT}\right) = \prod_{i}\hat{a}_{i}^{v_{i}} \\ \left(\frac{\partial G/T}{RT}\right) &= -\frac{H}{T^{2}} \\ R &= 1,987cal/(gmolK) = 82,05(atmcm^{3})/(gmolK) \\ \Delta S_{n}^{VAP}(cal/gmolK) &= 8,0 + 1,987 \ln(T_{n}(K)) \end{aligned}$$