

1) (60 Ptos) Uma mistura, contendo 60 mols/min de clorofórmio (1) 30 mols/min de heptano (2) e 20 mols/min de água(3), escoia numa tubulação industrial a 55 °C. Sabendo-se que a fase orgânica líquida é imiscível com água líquida. A fase orgânica líquida (sistema binário) é bem descrito com o modelo de Margules, e que as pressões de vapor dos componentes puros são, respectivamente, $P_1^{SAT} = 82\text{KPa}$, $P_2^{SAT} = 40\text{KPa}$ e $P_3^{SAT} = 16\text{KPa}$, determine:

- para uma mistura equimolar de clorofórmio(1) e heptano(2), a entropia de mistura, sabendo que o calor de mistura é de $-20RT$;
- a pressão da tubulação para que a corrente apresente duas fases líquidas e uma fase vapor infinitesimal. Nestas condições, calcule as composições das fases.
- a pressão da tubulação para que a corrente apresente uma fase vapor e uma fase líquida infinitesimal. Nestas condições, calcule as composições das fases.

Dados:

- modelo de Margules: $\ln \gamma_1 = x_2^2 (A_{12} + 2(A_{21} - A_{12})x_1)$ e $\ln \gamma_2 = x_1^2 (A_{21} + 2(A_{12} - A_{21})x_2)$
- coeficientes de atividade na diluição infinita correspondente à mistura binária de clorofórmio (1) e etanol (2) : $\gamma_1^\infty = 1,5$ e $\gamma_2^\infty = 1,5$

2) (40 Ptos) Etanol pode ser produzido via hidrogenação de acetaldeído de acordo com a seguinte reação: $\text{CH}_3\text{CHO}(\text{g}) + \text{H}_2(\text{g}) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{g})$. Supondo-se que a alimentação, em fase gasosa, entre no reator a 300K contenha 20mols/min de CH_3CHO , 30mols/min de H_2 , 10mols/min de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, 30mols/min de N_2 , calcule: **a)** A composição de equilíbrio a 500 K e 10 atm. **b)** A taxa de calor necessário para operar o reator. Os seguintes dados da reação são conhecidos (notar que o estado de referencia é aquele de gás ideal a 2 atm): $\Delta G^0(300\text{K}, 2 \text{ atm}, \text{ gás ideal}) = -200 \text{ cal/gmol}$; $\Delta H^0(300\text{K}, 2 \text{ atm}, \text{ gás ideal}) = -400 \text{ cal/gmol}$; $\Delta C_p(2 \text{ atm}, \text{ gás ideal}) = 5 \text{ cal/gmol/K}$, $C_p(\text{N}_2) = 10 \text{ cal/gmol/K}$

$$dU = TdS - PdV + \sum_i \mu_i dN_i \quad dH = TdS + VdP + \sum_i \mu_i dN_i \quad dA = -SdT - PdV + \sum_i \mu_i dN_i$$

$$dG = -SdT + VdP + \sum_i \mu_i dN_i \quad d\bar{H} = C_p dT + [\bar{V} - T \left(\frac{\partial \bar{V}}{\partial T} \right)_P] dP \quad d\bar{S} = \left(\frac{C_p}{T} \right) dT - \left(\frac{\partial \bar{V}}{\partial T} \right)_P dP$$

$$\left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)_z \left(\frac{\partial x}{\partial z} \right)_y \left(\frac{\partial z}{\partial y} \right)_x = -1 \quad \Delta \bar{S}_n^{VAP} (\text{cal/gmolK}) = 8,0 + 1,987 \ln(T_n)$$

$$\frac{\Delta H_2^{VAP}}{\Delta H_1^{VAP}} = \left(\frac{T_2 - T_C}{T_1 - T_C} \right)^{0,38} \quad R = 1,987 \text{ cal/(gmolK)} = 82,05 (\text{atmcm}^3)/(\text{gmolK}) = 0,082 (\text{atmL})/(\text{gmolK}) = 8,31 \text{ J/(gmolK)} = 8,31 (\text{LkPa})/(\text{gmolK}) = 0,00831 (\text{M}^3 \text{kPa})/(\text{gmolK})$$

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{SAT} \quad \hat{a}_i = \frac{\hat{f}_i}{f_i^0} \quad \hat{f}_i = x_i \hat{\phi}_i P = x_i \gamma_i f_i^0$$

$$\Delta \bar{G} = RT \left(\sum_i x_i \ln \hat{a}_i \right) \quad K = \exp \left(\frac{-\Delta \bar{G}^0}{RT} \right) = \prod_i \hat{a}_i^{\nu_i} \quad \left(\frac{\partial \bar{G}/T}{\partial T} \right)_P = -\frac{\bar{H}}{T^2}$$

$$\frac{d(mU)_S}{dt} = \sum_j^{\text{entradas}} \dot{m}_j \left(H_j + \frac{v_j^2}{2} + gz_j \right) - \sum_i^{\text{saídas}} \dot{m}_i \left(H_i + \frac{v_i^2}{2} + gz_i \right) + \dot{Q} + \dot{W}$$