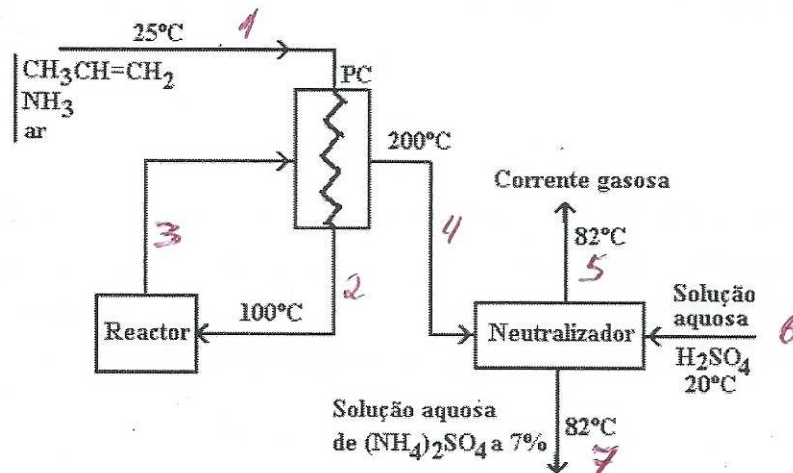
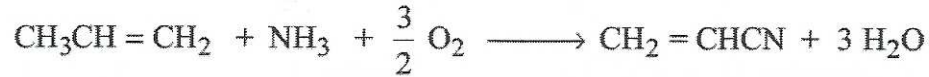


Caso 3.3

Na produção de acrilonitrilo ($\text{CH}_2=\text{CHCN}$), a partir do propileno, a alimentação gasosa do reactor, contendo O_2 , NH_3 e propileno em proporções molares de 1,65 / 1,1 / 1, é pre-aquecida até 100°C . Admita que a reacção de produção do acrilonitrilo é completa:



Seguidamente, o amoníaco não reagido é completamente neutralizado com ácido sulfúrico alimentado em quantidade estequiométrica:



Neste neutralizador obtém-se uma corrente gasosa saturada em vapor de água (que segue para a segunda fase do processo de fabrico) e uma solução aquosa de sulfato de amónio a 7%.

Tendo em atenção os dados da figura, calcular:

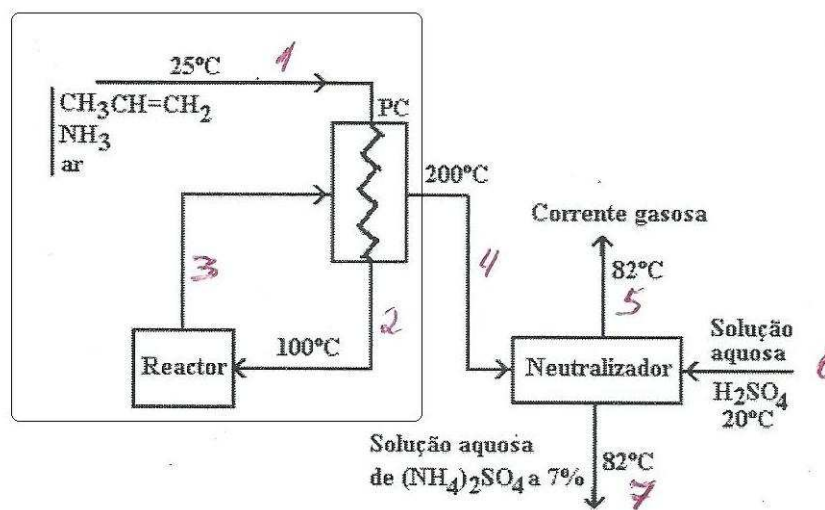
- O valor e o sentido das trocas caloríficas com o exterior verificadas no reactor, por ton. de acrilonitrilo produzido. Admita que as perdas de calor no permutador de calor são desprezáveis. Utilize para o cálculo das entalpias o estado de referência do simulador ASPEN. (R: $\approx 2086 \text{ Mcal/ton}$)
- O valor e sentido das trocas caloríficas com o exterior no neutralizador, por ton. de acrilonitrilo produzido. (R: $\approx 784 \text{ Mcal/ton}$)

Dado: O processo opera à pressão atmosférica.

Segundo o enunciado este problema deve ser resolvido pelo método usado pelo ASPEN. Mas atenção, o objectivo é apenas para perceberem como funciona o ASPEN (e outros softwares semelhantes). Noutros problemas, incluindo em Testes e Exames devem resolver os problemas pelo método habitual.

Composto	ΔH_f° (kcal/mole)
C ₃ H ₆	4,833
O ₂	0
N ₂	0
NH ₃	-11,04
C ₂ H ₃ CN	41,3
H ₂ O (l)	-68,3174
H ₂ O (g)	-57,7979
H ₂ SO ₄	-193,91
(NH ₄) ₂ SO ₄	-281,86

A zona de controle será à volta do reator:



O balanço entálpico vem: $\Delta H_1 = \Delta H_4 + P$

As entalpias serão dadas:

$$\Delta H = \sum n_i \times (C_p \times \Delta T + \Delta H_f^\circ)$$

Corrente (1)

$$\Delta H_1 = (100 \times 4,833 + 110 \times (-11,04)) \times 10^3 = -7,314 \times 10^5 \text{ cal}$$

Corrente (4)

$$\bar{C}_p^{25,200^\circ\text{C}}_{\text{O}_2} = 7,246 \text{ cal/mole K}$$

$$\bar{C}_p^{25,200^\circ\text{C}}_{\text{N}_2} = 7,009 \text{ cal/mole K}$$

$$\bar{C}_p^{25,200^\circ\text{C}}_{\text{H}_2\text{O}} = 8,207 \text{ cal/mole K}$$

$$\bar{C}_p^{25,200^\circ\text{C}}_{\text{NH}_3} = 9,191 \text{ cal/mole K}$$

$$\bar{C}_p^{25,200^\circ\text{C}}_{\text{C}_2\text{H}_3\text{CN}} = 17,814 \text{ cal/mole K}$$

$$\bar{C}_p^{25,82^\circ\text{C}}_{\text{H}_2\text{O}} = 8,090 \text{ cal/mole K}$$

$$\bar{C}_p^{25,82^\circ\text{C}}_{\text{C}_2\text{H}_3\text{CN}} = 16,143 \text{ cal/mole K}$$

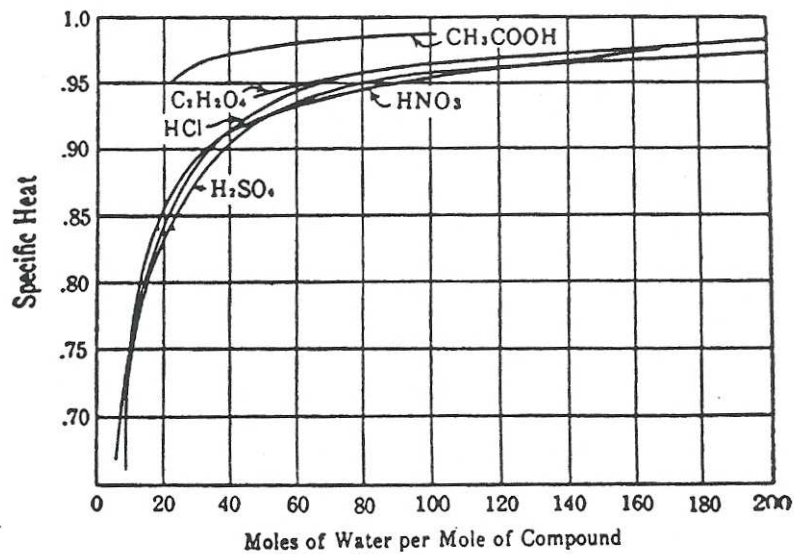
$$\Delta T = 82 - 25 = 57^\circ\text{C}$$

$$\begin{aligned} \Delta H_5 = & 15 \times 7,099 \times 57 + 620,714 \times 6,963 \times 57 + 100 \times (16,143 \times 57 + 41300) + \\ & \text{O}_2 \qquad \qquad \text{N}_2 \qquad \qquad \qquad \text{C}_2\text{H}_3\text{CN} \\ & + 739,556 \times (8,090 \times 57 - 57797,9) = -3,7929 \times 10^7 \text{ cal} \\ & \text{H}_2\text{O (g)} \end{aligned}$$

Nota: Na corrente gasosa (5) não se entra com o ΔH_v da água mas entra-se com o ΔH_f^0 (g) em vez de ΔH_f^0 (l).

Corrente (6)

$$R = \frac{926,699}{5} = 185$$



Do gráfico anterior tira-se

C_p solução $\approx 0,96 \text{ cal/g K}$

(página II.29)

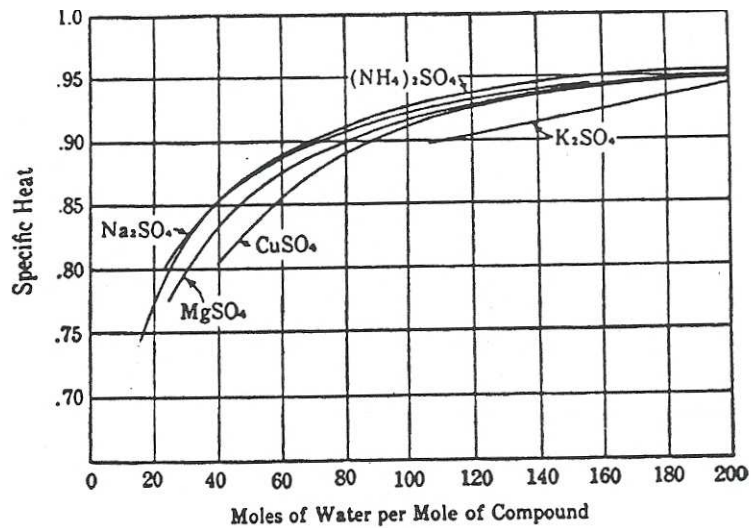
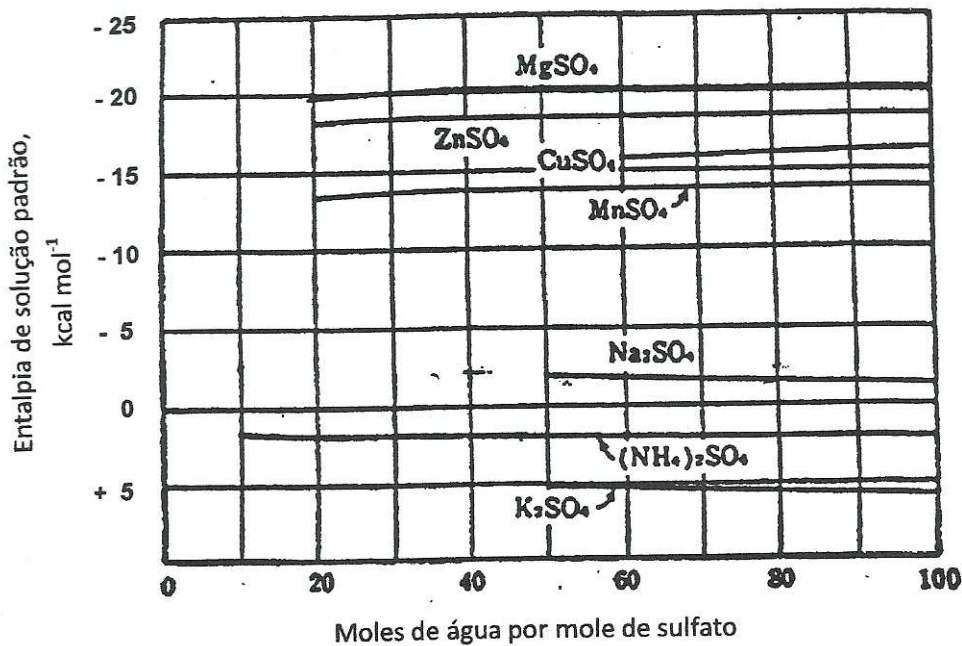


FIG. 70. Specific heats of aqueous solutions of sulfates at 20° C

Pela figura tira-se $C_p \text{ sol} \approx 0,93 \text{ cal/g K}$

(página II.30)



$\Delta H_s \approx 2 \text{ kcal/mole}$

(página II.58)

$$\Delta H_7 = (487,143 \times 18 + 5 \times 132) \times 0,93 \times (82 - 25) + 487,143 \times (-68317,4) +$$

$M C_p \Delta T \text{ da solução} \qquad \qquad \qquad \text{H}_2\text{O (l)}$

$$+ 5 \times (-281860 - 2000) = -3,418 \times 10^7 \text{ cal}$$

$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$

Substituindo-se:

$$-1,1781 \times 10^7 - 6,4477 \times 10^7 = -3,7929 \times 10^7 - 3,418 \times 10^7 + P$$

Vem $P = -4,149 \times 10^7$ cal/100 mole

Como P vem negativo significa que se trata de calor a fornecer

Calor a fornecer = **783 Mcal/ton**