

Caso 5.5

Calcular o tempo necessário para obter 50% de conversão num reactor descontínuo, isotérmico e trabalhando a volume constante, onde ocorre a reacção $2 A \rightarrow B + C$, admitindo que esta é de 2ª ordem em relação a A.



Reactor descontínuo, isotérmico e de volume constante

Equação geral: $E = S + R + A$

Neste caso $0 = 0 + R + A$

Balanço mássico ao reagente A:

$$0 = (-r_A) V + \frac{dN_A}{d\theta}$$

Sendo $(-r_A)$ a equação de velocidade de consumo de A

$$(-r_A) = K C_A^2 = K \frac{N_A^2}{V^2} \quad \text{pois} \quad C_A = \frac{N_A}{V}$$

$$-\frac{dN_A}{d\theta} = K C_A^2 V = K \frac{N_A^2}{V^2} V = K \frac{N_A^2}{V}$$

$$-\frac{dN_A}{d\theta} = K \frac{N_A^2}{V}$$

$$-\int_{N_{A0}}^{N_{A0}/2} \frac{dN_A}{N_A^2} = \int_0^{\theta} \frac{K}{V} d\theta$$

$$\frac{1}{N_{A0}} - \frac{1}{N_{A0}/2} = \frac{-K}{V} \theta$$

Multiplica-se por N_{A0} e vem:
$$\frac{N_{A0}}{N_{A0}} - \frac{N_{A0}}{N_{A0}/2} = \frac{-K N_{A0}}{V} \theta$$

$$1 - 2 = \frac{-K N_{A0}}{V} \theta = -1$$

Vem:
$$\theta = \frac{V}{N_{A0} K} = \frac{1}{C_{A0} K}$$

A expressão obtida denomina-se tempo de meia vida para reacções de 2ª ordem e depende da concentração inicial C_0 .

Não é pedido mas vou calcular o tempo de meia vida para reacções de 1ª ordem.

$$(-r_A) = K C_A = K \frac{N_A}{V}$$

$$-\frac{dN_A}{d\theta} = K C_A V = K \frac{N_A}{V} V = K N_A$$

$$-\frac{dN_A}{d\theta} = K N_A$$

$$-\int_{N_{A0}}^{N_{A0}/2} \frac{dN_A}{N_A} = \int_0^{\theta} K d\theta$$

$$-\ln \frac{N_{A0}/2}{N_{A0}} = K\theta$$

$$\ln \frac{N_{A0}}{N_{A0}/2} = K\theta$$

$$\ln 2 = K\theta$$

$$\theta = \frac{\ln 2}{K}$$

A expressão obtida denomina-se tempo de meia vida para reacções de 1ª ordem e é independente da concentração inicial C_0 .