Caso 5.6

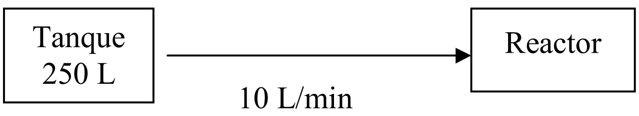
Um tanque contém inicialmente 4375 moles (250 L) de um reagente A. Este composto vai ser descarregado, a um caudal de 10 L/min, para um reactor que inicialmente contém 200 litros (6000 moles) de um reagente B, iniciando-se imediatamente a reacção A+B → C. Esta reacção pode ser considerada de 1ª ordem em relação a A, sendo a constante de velocidade k = 0,3 min^{-1}. Determinar:

a) O tempo necessário para descarregar completamente o tanque *(período de operação do reactor como semi-contínuo)*. (R: 25 min)

b) A fracção do reagente A já convertido no fim desse período. (R: 0,867)

c) O tempo total necessário para que a massa do reagente limitante no reactor se torne praticamente nula. (R: 46 min, para 1 mol residual)

Este problema pode ser descrito pelo esquema abaixo:



Para $\theta = 0$ → Tanque: 2450 L e 4375 moles de A
Reactor: 200 L e 6000 moles de A

Reacção: A + B → C

Equação de velocidade: $(-r_A) = 0,3\,[A]$

Alínea a) Tempo de descarga do tanque

Tempo de descarga do tanque $$\theta_{\mathbf{descarga}} = \frac{\mathbf{V}}{\mathbf{Q}} = \frac{250}{10} = 25\,\text{min}$$

<u>Alínea b) Fracção de A consumido ao fim de 25 min ?</u>

Equação geral: E = S + R + A

$$\mathbf{Q} \times \mathbf{C}_{\mathbf{A}\,\tan\mathbf{que}} = 0 + (-\mathbf{r}_{\mathbf{A}})\mathbf{V} + \frac{\mathbf{d\,N_A}}{\mathbf{d\theta}}$$

$$10 \times \frac{4375}{250} = 0 + \mathbf{K}\frac{\mathbf{N_A}}{\mathbf{V}}\mathbf{V} + \frac{\mathbf{d\,N_A}}{\mathbf{d\theta}}$$

$$175 = 0{,}3\,\mathbf{N_A} + \frac{\mathbf{d\,N_A}}{\mathbf{d\theta}}$$

$$\int_0^{25} \mathbf{d\theta} = \int_0^{N_A} \frac{\mathbf{d\,N_A}}{175 - 0{,}3\,\mathbf{N_A}}$$

$$25 = \frac{1}{-0{,}3}\ln\frac{175 - 0{,}3\mathbf{N_A}}{175}$$

$$\frac{175 - 0{,}3\,\mathbf{N_A}}{175} = \exp(-0{,}3 \times 25) = 0{,}000553$$

Vem N_A = 583,01 mole

$$\textbf{Fracção reagida} = \frac{\mathbf{N_{Ainicial}} - \mathbf{N_{Afinal}}}{\mathbf{N_{Ainicial}}} = \frac{4375 - 583{,}01}{4375} = 0{,}8667$$

<u>Alínea c) Tempo até um valor residual de 1 mole de A</u>

Agora não há entrada no reactor.

$$0 = 0 + \mathbf{K}\frac{\mathbf{N_A}}{\mathbf{V}}\mathbf{V} + \frac{\mathbf{d\,N_A}}{\mathbf{d\theta}}$$

$$-0{,}3\,\mathbf{N_A} = \frac{\mathbf{d\,N_A}}{\mathbf{d\theta}}$$

$$\int_{25}^{\theta}\mathbf{d\theta} = \int_{583{,}01}^{1}\frac{\mathbf{d\,N_A}}{-0{,}3\,\mathbf{N_A}}$$

$$(\theta - 25) = \frac{1}{-0{,}3}\ln\frac{-0{,}3}{-0{,}3\times 583{,}01} = 21{,}23$$

Vem $\theta = 46{,}23$ min