



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Escola de Engenharia de Lorena – EEL
P2 - Cinética Química – EI8 – 13/11/2007

A reação química $A \rightarrow 3R$ ocorre em um reator de paredes móveis a partir de uma mistura de 80 % molar de A e o restante de inertes. A pressão do reator é mantida em 2,5 atm.

A cinética da reação é estudada a partir do acompanhamento do volume total do reator conforme se verifica na tabela abaixo:

t (min)	1	2	3	4	5	6
ΔV (%)	13	27	44	62	82	105

A - Calcule a equação de velocidade desta reação.

B - Quais os tempos de $\frac{1}{4}$ e de $\frac{1}{2}$ desta reação?

B - Qual o tempo aproximadamente para que a reação seja considerada encerrada?

DADOS: Modelos Matemáticos para Reações a Volume Variável

Ordem Zero (n = 0)	Ordem Um (n = 1)	Ordem Dois (n = 2)
$\frac{C_{A_0}}{\varepsilon_A} \ln \frac{V}{V_0} = kt$	$-\ln(1 - X_A) = kt$	$\frac{(1 + \varepsilon_A)X_A}{1 - X_A} + \varepsilon_A \ln(1 - X_A) = k \cdot C_{A_0} \cdot t$

CÁLCULO DA FRAÇÃO DE CONVERSÃO VOLUMÉTRICA

A	+	I	→	3R	
80		20		0	$V_0 = 100$
0		20		240	$V_\infty = 250$

$$\varepsilon_A = \frac{V_{X_A=1} - V_{X_A=0}}{V_{X_A=0}} \Rightarrow \varepsilon_A = \frac{250 - 100}{100} \Rightarrow \boxed{\varepsilon_A = 1,6}$$

CÁLCULO DA FRAÇÃO DE CONVERSÃO VOLUMÉTRICA

Como $\pi_0 = 2,5 \text{ atm}$ (80% A e 20% I), tem-se então que:

$$\boxed{p_{A_0} = 2 \text{ atm}}$$

CÁLCULO DA CONVERSÃO

Por definição: $\Delta V(\%) = 100 \left[\frac{V - V_0}{V_0} \right]$

$$\text{E } \frac{\Delta V(\%)}{100} = \frac{V - V_0}{V_0} \Rightarrow \frac{\Delta V(\%)}{100} = \frac{V}{V_0} - 1 \Rightarrow \boxed{\frac{V}{V_0} = \frac{\Delta V(\%)}{100} + 1}$$

$$\text{Como: } \boxed{V = V_0(1 + \varepsilon_A X_A)} \Rightarrow \frac{V}{V_0} - 1 = \varepsilon_A X_A \Rightarrow X_A = \frac{1}{\varepsilon_A} \left[\frac{V}{V_0} - 1 \right] \Rightarrow X_A = 0,625 \left[\frac{V}{V_0} - 1 \right]$$



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Escola de Engenharia de Lorena – EEL
P2 - Cinética Química – EI8 – 13/11/2007

t (min)	0	1	2	3	4	5	6
ΔV (%)	0	13	27	44	62	82	105
V/V_0	1	1,13	1,27	1,44	1,62	1,82	2,05
X_A	0	0,0812	0,169	0,275	0,388	0,513	0,656

TESTE PARA ORDENS ZERO, UM E DOIS

Para $n = 0 \Rightarrow \frac{2}{1,6} \ln \left[\frac{V}{V_0} \right] = kt \Rightarrow \boxed{1,25 \ln \left[\frac{V}{V_0} \right] = kt}$

Para $n = 1 \Rightarrow \boxed{-\ln(1 - X_A) = kt}$

Para $n = 2 \Rightarrow \frac{2,6X_A}{1 - X_A} + 1,6 \ln(1 - X_A) = 2kt \Rightarrow \boxed{\frac{1,3X_A}{1 - X_A} + 0,8 \ln(1 - X_A) = kt}$

t (min)	0	1	2	3	4	5	6
V/V_0	1	1,13	1,27	1,44	1,62	1,82	2,05
X_A	0	0,0812	0,169	0,275	0,388	0,513	0,656
$k(n=0) \times 10^3$	–	153	149	152	151	150	150
$k(n=1) \times 10^3$	–	84,7	92,6	107	123	144	177
$k(n=2) \times 10^3$	–	46,8	116	236	431	793	1625

A – EQUAÇÃO DE VELOCIDADE DA REAÇÃO: $n = 0 \Rightarrow \boxed{-r_A = 0,151C_A^0 \text{ (atm/min)}}$

B – TEMPOS DE ¼ E ½ DA REAÇÃO

$t_{1/4} \Rightarrow X_A = 0,25 \Rightarrow \frac{V}{V_0} = 1,4 \Rightarrow 1,25 \ln \left[\frac{V}{V_0} \right] = 0,151t_{1/4} \Rightarrow \boxed{t_{1/4} = 2,79 \text{ min}}$

$t_{1/2} \Rightarrow X_A = 0,50 \Rightarrow \frac{V}{V_0} = 1,8 \Rightarrow 1,25 \ln \left[\frac{V}{V_0} \right] = 0,151t_{1/2} \Rightarrow \boxed{t_{1/2} = 4,86 \text{ min}}$

C – TEMPO APROXIMADO PARA CONSIDERAR O FINAL DA REAÇÃO

$t_\infty \Rightarrow X_A = 1 \Rightarrow \frac{V}{V_0} = 2,6 \Rightarrow 1,25 \ln \left[\frac{V}{V_0} \right] = 0,151t_\infty \Rightarrow \boxed{t_\infty = 7,91 \text{ min}}$