



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Escola de Engenharia de Lorena – EEL
P2 - Cinética Química – EBQ6 – 25/11/2008

A reação homogênea em fase gasosa: $A \rightarrow 2R$ ocorre a 100°C e a pressão constante de 1 atm num reator descontínuo ideal. Os dados apresentados abaixo foram obtidos em uma experiência na qual se partiu do reagente A puro.

t (min)	0	1	2	4	6	8	10	12	14
V/V ₀	1,00	1,20	1,35	1,58	1,72	1,82	1,88	1,92	1,95

Calcular:

- A equação de velocidade desta reação
- O tempo que determina o fim da reação. (considere uma conversão de 99,99%)

CÁLCULOS PRELIMINARES

Como: $\left\{ \begin{array}{l} A \longrightarrow 2R \\ A \text{ puro} \end{array} \right\}$ então: $\boxed{\varepsilon_A = 1,0}$

Como: $\frac{V}{V_0} = 1 + \varepsilon_A X_A$ tem-se que: $\frac{V}{V_0} = 1 + X_A \Rightarrow \boxed{X_A = \frac{V}{V_0} - 1}$

TESTE PARA MODELO DE PRIMEIRA ORDEM – VOLUME VARIÁVEL

Para uma reação irreversível de primeira ordem a volume variável, tem-se que: $\boxed{-\ln(1 - X_A) = kt}$

Efetuada-se o cálculo da conversão e em seguida testando-se primeira ordem, tem-se que:

t (min)	0	1	2	4	6	8	10	12	14
V/V ₀	1	1,2	1,35	1,58	1,72	1,82	1,88	1,92	1,95
X _A	0	0,20	0,35	0,58	0,72	0,82	0,88	0,92	0,95
$-\ln(1 - X_A)$	-	0,223	0,431	0,868	1,273	1,715	2,120	2,526	2,996
k	-	0,223	0,215	0,217	0,212	0,214	0,212	0,211	

$$k = 0,2147(\text{min})^{-1}$$

A – EQUAÇÃO DE VELOCIDADE DA REAÇÃO: $\boxed{-r_A = 0,2147 p_A (\text{atm} / \text{min})}$

B – TEMPO AO FINAL DA REAÇÃO

$$\text{C) } -\ln(1 - 0,9999) = 0,2147 t_\infty \Rightarrow \boxed{t_\infty \cong 43 \text{ min}}$$