

Reações Irreversíveis de Volume Variável

$$-r_A = -\frac{1}{V} \frac{dn_A}{dt} = -\frac{1}{V} \frac{d(C_A V)}{dt} = -\frac{1}{V} \cdot \left(V dC_A + C_A dV \right) \quad \text{ou:} \quad \boxed{-r_A = -\frac{dC_A}{dt} + \frac{C_A}{V} \frac{dV}{dt}} \quad (1)$$

Consideração : O volume do sistema reacional varia linearmente com a conversão, ou seja:

$$\boxed{V = V_o(1 + e_A X_A)} \quad (2) \quad \text{onde:} \quad \boxed{e_A = \frac{V_{X_A=1} - V_{X_A=0}}{V_{X_A=0}}} \quad (3)$$

Sabendo-se que: $n_A = n_{A_0}(1 - X_A)$, vem:

$$\boxed{C_A = \frac{n_A}{V} = \frac{n_{A_0}(1 - X_A)}{V_o(1 + e_A X_A)} = C_{A_0} \frac{1 - X_A}{1 + e_A X_A}} \quad (4) \quad \text{ou} \quad \boxed{\frac{C_A}{C_{A_0}} = \frac{1 - X_A}{1 + e_A X_A}} \quad (5) \quad \text{ou} \quad \boxed{X_A = \frac{1 - (C_A / C_{A_0})}{1 + e_A (C_A / C_{A_0})}} \quad (6)$$

Retornando a equação (1), tem-se então que :

$$\boxed{-r_A = \frac{C_{A_0}}{1 + e_A X_A} \frac{dX_A}{dt}} \quad (7)$$

Reações de Ordem Zero

$$\boxed{-r_A = -\frac{1}{V} \frac{dn_A}{dt} = \frac{C_{A_0}}{1 + e_A X_A} \frac{dX_A}{dt} = k} \quad (8) \quad \Rightarrow \quad \boxed{C_{A_0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{1 + e_A X_A} = \frac{C_{A_0}}{e_A} \ln(1 + e_A X_A) = \frac{C_{A_0}}{e_A} \ln \frac{V}{V_o} = kt} \quad (9)$$

Reações de Primeira Ordem

:

$$\boxed{-r_A = -\frac{1}{V} \frac{dn_A}{dt} = kC_A} \quad (10) \quad \text{e} \quad \boxed{-r_A = \frac{C_{A_0}}{1 + e_A X_A} \frac{dX_A}{dt} = k \frac{C_{A_0}(1 - X_A)}{1 + e_A X_A}} \quad (11)$$

$$\boxed{\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{1 - X_A} = -\ln(1 - X_A) = -\ln\left(1 - \frac{\Delta V}{e_A V_o}\right) = kt} \quad (12)$$

Reações de Segunda Ordem

2A → Produtos ou A + B → Produtos, com $C_{A_0} = C_{B_0}$, tem-se:

$$-r_A = kC_A^2 \quad \text{ou} \quad \boxed{-r_A = \frac{C_{A_0}}{1 + e_A X_A} \frac{dX_A}{dt} = k \cdot C_{A_0}^2 \left(\frac{1 - X_A}{1 + e_A X_A} \right)^2} \quad (13)$$

$$\int_0^{X_A} \frac{(1 + e_A X_A)}{(1 - X_A)^2} \cdot dX_A = k \cdot C_{A_0} \int_0^t dt \quad \text{ou} \quad \boxed{\frac{(1 + e_A)X_A}{1 - X_A} + e_A \ln(1 - X_A) = k \cdot C_{A_0} \cdot t} \quad (14)$$