## Engenharia de Reatores Químicos – IQD0048 Semestre 2024/1 – Turma T01 – Prof. Alexandre Umpierre

## Estudo Dirigido 1

## Alguns Mecanismos Reacionais em Reator Batelada a Volume Constante &

## Determinação da Expressão da Taxa de Reação em Retores Batelada

1) Para cada um dos mecanismos reacionais a seguir, determine os perfis de concentração para todas as espécies envolvidas em um reator batelada. Todas as etapas elementares são de primeira ordem. Para fins de cálculo, assuma  $k_1 = 1 \text{ min}^{-1}$ ,  $k_2 = 1,5 \text{ min}^{-1}$ ,  $k_{-1} = 1,3 \text{ min}^{-1}$  e  $k_{-2} = 1,2 \text{ min}^{-1}$ .

a) 
$$A \xrightarrow{k_1} bB$$
   
  $A \xrightarrow{k_2} pP$    
  $bB \xrightarrow{k_{-1}} A$    
  $pP \xrightarrow{k_2} A$ 

b) 
$$A \xrightarrow{k_1} bB$$

$$B \xrightarrow{k_2} pP$$
f)  $A \xrightarrow{k_1} bB$ 

$$bB \xrightarrow{k_{-1}} A$$

c) 
$$A \xrightarrow{k_1} bB$$
  $A \xrightarrow{k_2} pP$   $bB \xrightarrow{k_{-1}} A$   $pP \xrightarrow{k_{-2}} A$ 

d) 
$$A \xrightarrow{k_1} bB$$

$$bB \xrightarrow{k_{-1}} A$$

$$A \xrightarrow{k_2} pP$$

2) A Tabela 1 apresentam a concentração c do reatante na reação  $A \rightarrow B$ , realizada em reator batelada com volume constante entre 27 K e 450 K. A taxa de reação é dada por  $kc^n$  em que k é a constante cinética e n é a ordem de reação de A. Inicialmente, se assume que a constante cinética obedece ao modelo de Arrhenius. Calcule a energia de ativação e o fator pré-exponencial da equação de Arrhenius, e avalie a validade do modelo.

**Tabela 1.** Tempo de reação t e concentração c de A a 27 °C, 57 °C, 97 °C, 147 °C e 197 °C.

| t (h) | c (mol/L) |         |         |          |          |          |
|-------|-----------|---------|---------|----------|----------|----------|
|       | @ 27 °C   | @ 57 °C | @ 97 °C | @ 147 °C | @ 147 °C | @ 197 °C |
| 0     | 889,9     | 889,6   | 889,5   | 890,2    | 890,1    | 889,6    |
| 5     | 625,9     | 589     | 544,9   | 484,2    | 435,4    | 350,9    |
| 10    | 471,6     | 426,8   | 378,7   | 316,8    | 271,5    | 200,8    |
| 15    | 373,3     | 328,6   | 283,4   | 227,8    | 190      | 133,8    |
| 20    | 304,8     | 264,1   | 222,5   | 174,4    | 143,4    | 98       |
| 25    | 255,5     | 218,1   | 180,7   | 139,7    | 112,7    | 76,3     |
| 30    | 217,8     | 184,1   | 150,6   | 115,1    | 91,6     | 61,4     |
| 35    | 189       | 158,3   | 129     | 96,6     | 76,6     | 50,7     |
| 40    | 166,3     | 138,5   | 112     | 83,1     | 65,9     | 42,4     |
| 45    | 148       | 121,9   | 97,9    | 72       | 57       | 37,5     |
| 50    | 132,5     | 108,9   | 86,5    | 64,3     | 49,9     | 32,3     |
| 55    | 120,2     | 97,9    | 77,7    | 56,8     | 44,5     | 28,6     |
| 60    | 109       | 88,5    | 69,9    | 51,2     | 40,4     | 25,2     |