

# LOQ4003 - Cinética Química Aplicada

## Kinetic of Chemistry

Créditos-aula: 4

Créditos-trabalho: 0

Carga horária: 60 h

Ativação: 01/01/2024

Departamento: Engenharia Química

Curso (semestre ideal): EB (6), EQN (7)

## Objetivos

Introduzir o aluno, por meio dos conceitos fundamentais da cinética química aplicada a reatores químicos, na engenharia das reações químicas.

*To introduce the student to the engineering of chemical reactions, through the fundamental concepts of chemical kinetics applied to chemical reactors.*

## Docente(s) Responsável(eis)

5963230 - Leandro Gonçalves de Aguiar

6310316 - Liana Alvares Rodrigues

## Programa resumido

Introdução a cinética. Estequiometria cinética. Reações a volume constante. Reações a volume variável. Introdução a projeto de reatores. Coleta e análise de dados cinéticos. Cinética das reações complexas. Catálise

*Introduction to kinetics. Kinetic stoichiometry. Reactions at constant volume. Reactions at variable volume. Introduction to reactor design. Collection and analysis of kinetic data. Kinetics of complex reactions. Catalysis.*

## Programa

INTRODUÇÃO A CINÉTICA – Tipos de Reações Químicas. Lei de velocidade. Ordem e molecularidade. Constante da velocidade. Tempo de meia-vida e tempo infinito. Influência da temperatura sobre a taxa da reação. Ativação das reações químicas Equação de Arrhenius. Energia de ativação. (4 horas)ESTEQUIOMETRIA CINÉTICA - Conversão. Concentração e sua variação numa transformação química. (4 horas)REAÇÕES A VOLUME CONSTANTE: Reações irreversíveis de ordem um. Reações irreversíveis de ordem dois. Reações irreversíveis de ordem três. Reações irreversíveis de ordem qualquer. Reações reversíveis de primeira e segunda ordem. A dependência da constante de equilíbrio com a temperatura. (12 horas)REAÇÕES A VOLUME VARIÁVEL: Conceitos. Fração de conversão volumétrica. Reações a volume variável de ordem um e dois. (4 horas)INTRODUÇÃO A PROJETO DE REATORES: Introdução. Balanço de massa e coleta de dados em reatores ideais isotérmicos: batelada (BSTR), reator tanque de mistura contínuo (CSTR) e Reator tubular (PFR) (8 horas)COLETA E ANÁLISE DE DADOS CINÉTICOS:Métodos diferencial e integral para o BSTR. Método para o CSTR. Métodos para PFR diferencial e integral. Método das taxas iniciais. Método da meia vida. Método da pressão

total (12 horas)CINÉTICA DAS REAÇÕES COMPLEXAS: Introdução. Mecanismos de reação. A aproximação do estado estacionário (princípio de Bodenstein). A etapa determinante da velocidade da reação. Reações em cadeia em fase gasosa (Radicais, Pirólise de compostos orgânicos (mecanismo de Rice-Herzfeld), Inibidores e iniciadores, Reações em cadeia ramificada) (8 horas)CATÁLISE: Introdução. Catálise homogênea. Catálise heterogênea. Cinética das reações catalíticas heterogêneas. (8 horas)

*INTRODUCTION TO KINETICS - Types of Chemical Reactions. Rate law. Order and molecularity. Rate constant. Half-life and infinite time. Influence of temperature on reaction rate. Activation of chemical reactions. Arrhenius equation. Activation energy. (4 hours)KINETIC STOICHIOMETRY - Conversion. Concentration and its variation in a chemical transformation. (4 hours)REACTIONS AT CONSTANT VOLUME: Irreversible reactions of first order. Irreversible reactions of second order. Irreversible reactions of third order. Irreversible reactions of any order. Reversible reactions of first and second order. Dependence of equilibrium constant on temperature. (12 hours)REACTIONS AT VARIABLE VOLUME: Concepts. Volumetric conversion fraction. Reactions at variable volume of first and second order. (4 hours)INTRODUCTION TO REACTOR DESIGN: Introduction. Mass balance and data collection in ideal isothermal reactors: batch reactor (BSTR), continuous stirred-tank reactor (CSTR), and plug-flow reactor (PFR). (8 hours)COLLECTION AND ANALYSIS OF KINETIC DATA: Differential and integral methods for BSTR. Differential method for CSTR. Differential and integral methods for PFR. Initial rates method. Half-life method. Total pressure method. (12 hours)KINETICS OF COMPLEX REACTIONS: Introduction. Reaction mechanisms. Steady-state approximation (Bodenstein principle). Rate-determining step of the reaction. Chain reactions in gas phase (radicals, pyrolysis of organic compounds - Rice-Herzfeld mechanism, Inhibitors and initiators, branching chain reactions). (8 hours)CATALYSIS: Introduction. Homogeneous catalysis. Heterogeneous catalysis. Kinetics of heterogeneous catalytic reactions. (8 hours)*

## Avaliação

**Método:** Duas provas escritas (P1 e P2) e eventuais trabalhos relacionados à disciplina.

**Critério:** Média da Primeira Avaliação (N) = 50% P1 + 50% P2.Obs: fica a critério de cada docente a inserção de trabalhos no decorrer do curso, bem como a alteração do peso de cada prova em decorrência dos mesmos.

**Norma de recuperação:** Média Final = (N + Prova Recuperação)/2

## Bibliografia

Bibliografia Básica:1- FOGLER, H.S. Elementos de engenharia das reações químicas. 3.ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2009.2- LEVENSPIEL, O. Engenharia Das Reações Químicas, E ed (Blucher, São Paulo, 2000)3- VAN SANTEN, R.A.; Niemantsverdriet, J.W. Chemical kinetics and catalysis. New York: Plenum Press, 1995.Bibliografia Complementar:1- Missen, R.W.; Mims, C.A.; Saville, B.A. Introduction to chemical reaction engineering and kinetics. New York: J. Wiley, 1999.2- Rothenberg, G. Catalysis: concepts and green applications. Weinheim: Wiley-VCH, 2008 Chichester.3- DENISOV, E.T.; Sarkisov, O.M.; Likhtenshtein, G.I. Chemical kinetics: fundamentals and new developments. Amsterdam: Elsevier, 2003.4- Hagen, J. Industrial catalysis: a practical approach. Weinheim: Wiley-VCH, 2006.5- Salmi, T.O.; Mikkola, J.; Warna, J.P. Chemical reaction engineering and reactor technology. Boca Raton: CRC Press/Taylor & Francis, 2011.6- Mortimer, M.; Taylor, P.G. Chemical kinetics and mechanism. Cambridge: Royal

Society of Chemistry, 2002.7- FROMENT, G.F.; BISCHOFF, K.B. Chemical reactor analysis and design. 2nd. Ed. New York: John Wiley & Sons, 1990.8- HILL, C.G. An Introduction to chemical engineering kinetics and reactor design. New York: John Wiley&Sons, 1977.9- SMITH, J.M. Chemical engineering kinetics. 3rd. ed New York: McGraw-Hill,1981.10- DENBIGH, K.; TURNER, R. Introduction to chemical Reaction Design. Cambridge: Cambridge University Press, 1970.11 - AGUIAR, L. G. Problemas de cinética e reatores químicos. Curitiba: Appris Editora, 2023.

### **Requisitos**

LOQ4088 - Termodinâmica Química Aplicada II (Requisito fraco)