



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA "JÚLIO DE MESQUITA FILHO"

FACULDADE DE CIÊNCIAS FARMACÊUTICAS

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE BIOPROCESSOS E BIOTECNOLOGIA

CINÉTICA QUÍMICA

EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

MARCEL OTAVIO CERRI

MARCEL.CERRI@UNESP.BR



REAÇÃO QUÍMICA



Velocidade de
reação



$$r = f(T, \textit{Concentração})$$

$$r = k \cdot C_A \cdot C_B$$

$$r = \left[\frac{\textit{Quantidade de matéria}}{\textit{Volume} \cdot \textit{tempo}} \right]$$

$$C_A = \left[\frac{\textit{Quantidade de matéria}}{\textit{Volume}} \right]$$

EQUAÇÃO DE ARRHENIUS



Svante August Arrhenius
Prêmio Nobel de Química 1903

Temperatura (K)	k (L/mol.s)
280	0.000145
285	0.000268
289	0.000432
297	0.001780
306	0.002849
312	0.005279

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{R \cdot T}}$$

k – Constante de velocidade de reação

A – Fator de Frequência ou constante pré-exponencial

E_a – Energia de ativação

R – Constante dos gases

T - Temperatura

EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

$$\ln(k) = \ln(A) - \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T}$$

numpy.polyfit(*x*, *y*, *deg*)

Least squares polynomial fit.

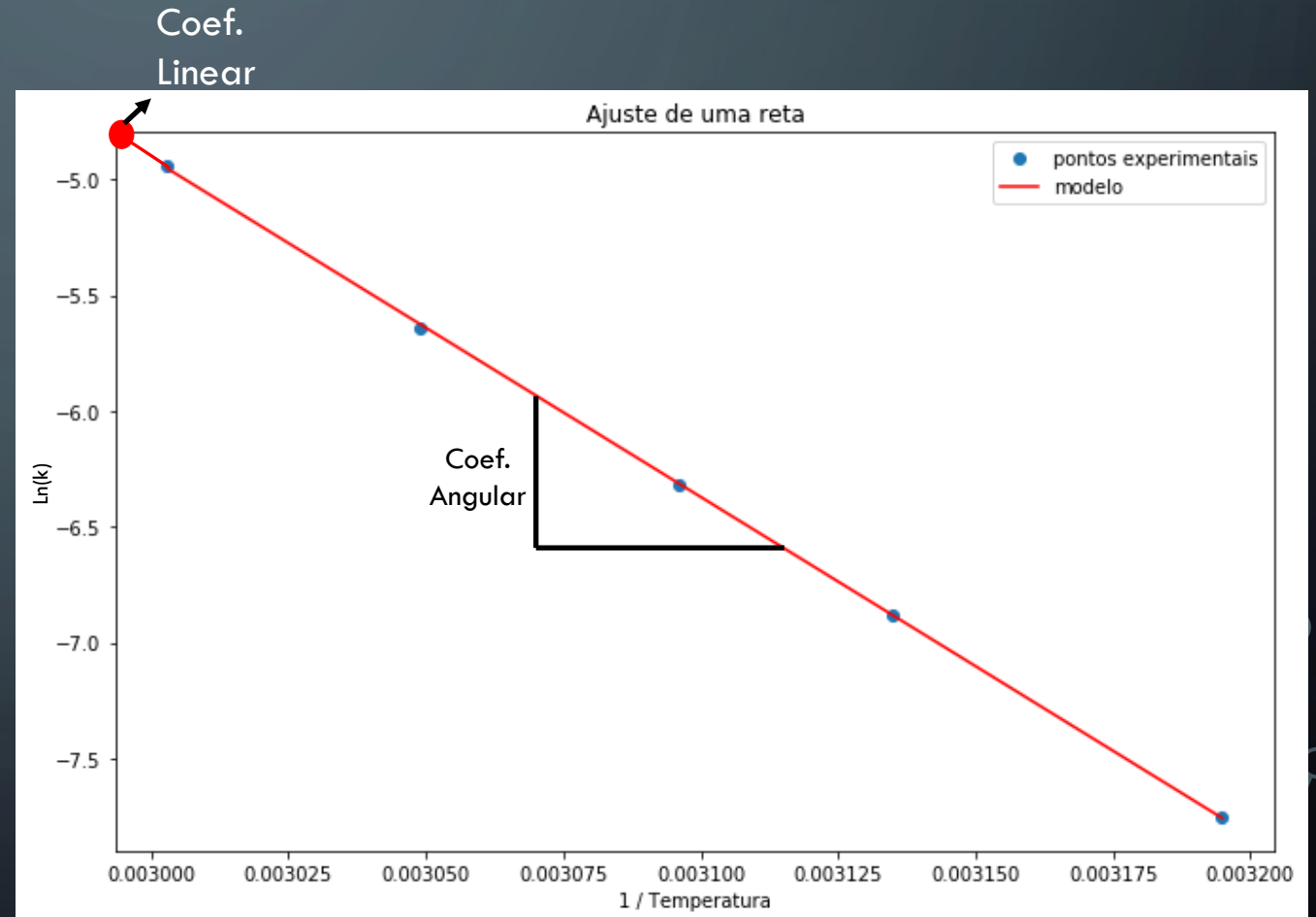
Fit a polynomial $p(x) = p[0] * x^{deg} + \dots + p[deg]$ of degree *deg* to points (*x*, *y*). Returns a vector of coefficients *p* that minimises the squared error in the order *deg*, *deg*-1, ... 0.



EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

Linearização da Equação de Arrhenius

$$\ln(k) = \overset{\substack{\text{Coeficiente} \\ \text{Linear}}}{\uparrow} \ln(A) - \overset{\substack{\text{Coeficiente} \\ \text{Angular}}}{\uparrow} \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T}$$



EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

$$k = A. e^{-\frac{E_a}{R.T}}$$

`scipy.optimize.curve_fit(f, xdata, ydata)`

Use non-linear least squares to fit a function, `f`, to data.

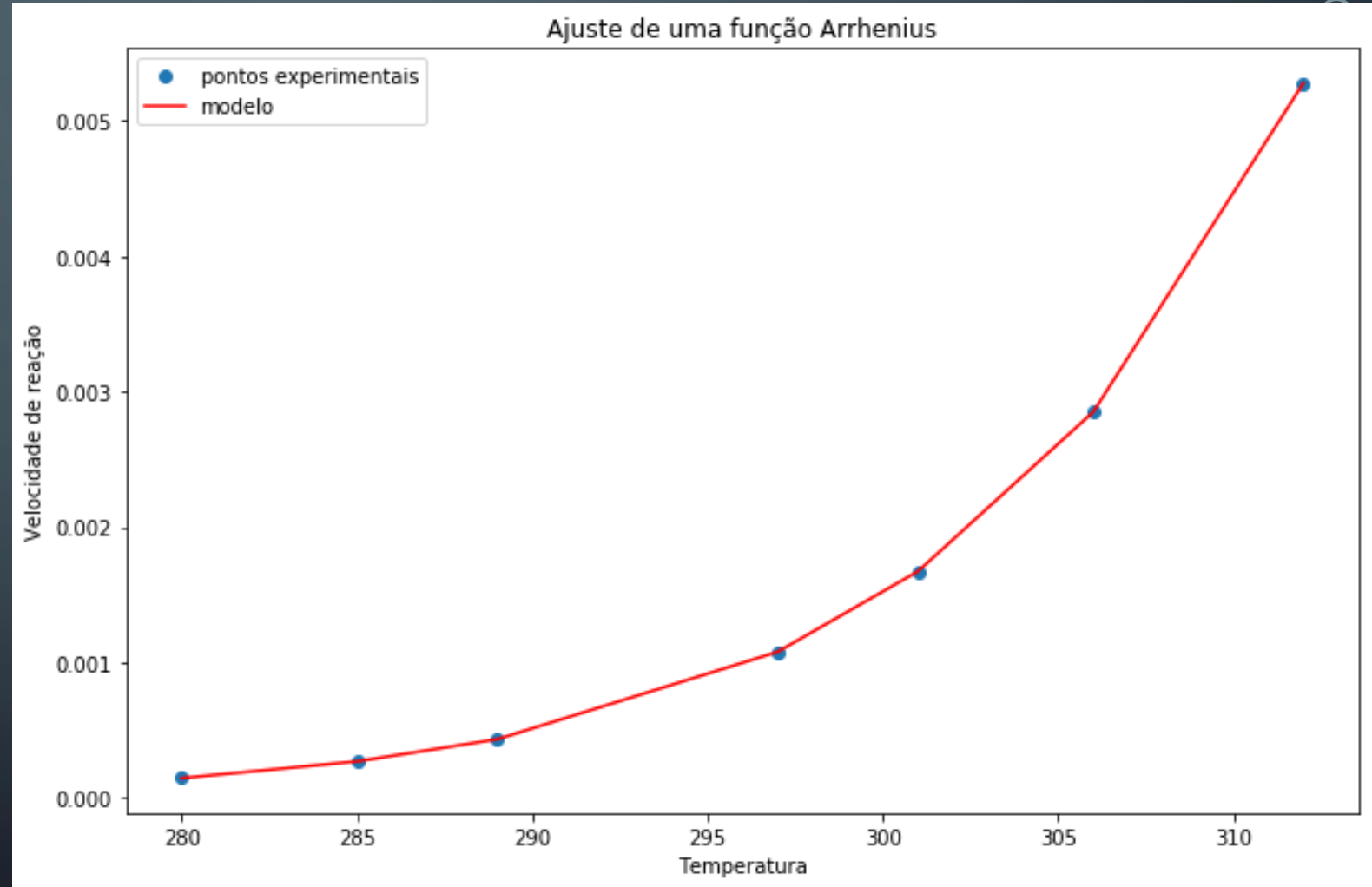
The model function, `f(x, ...)`. It must take the independent variable as the first argument and the parameters to fit as separate remaining arguments.

the algorithm uses the Levenberg-Marquardt



EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{R \cdot T}}$$



REAÇÃO QUÍMICA



Temperatura – 297 K
 $k = 0.001078 \text{ L/mol.s}$

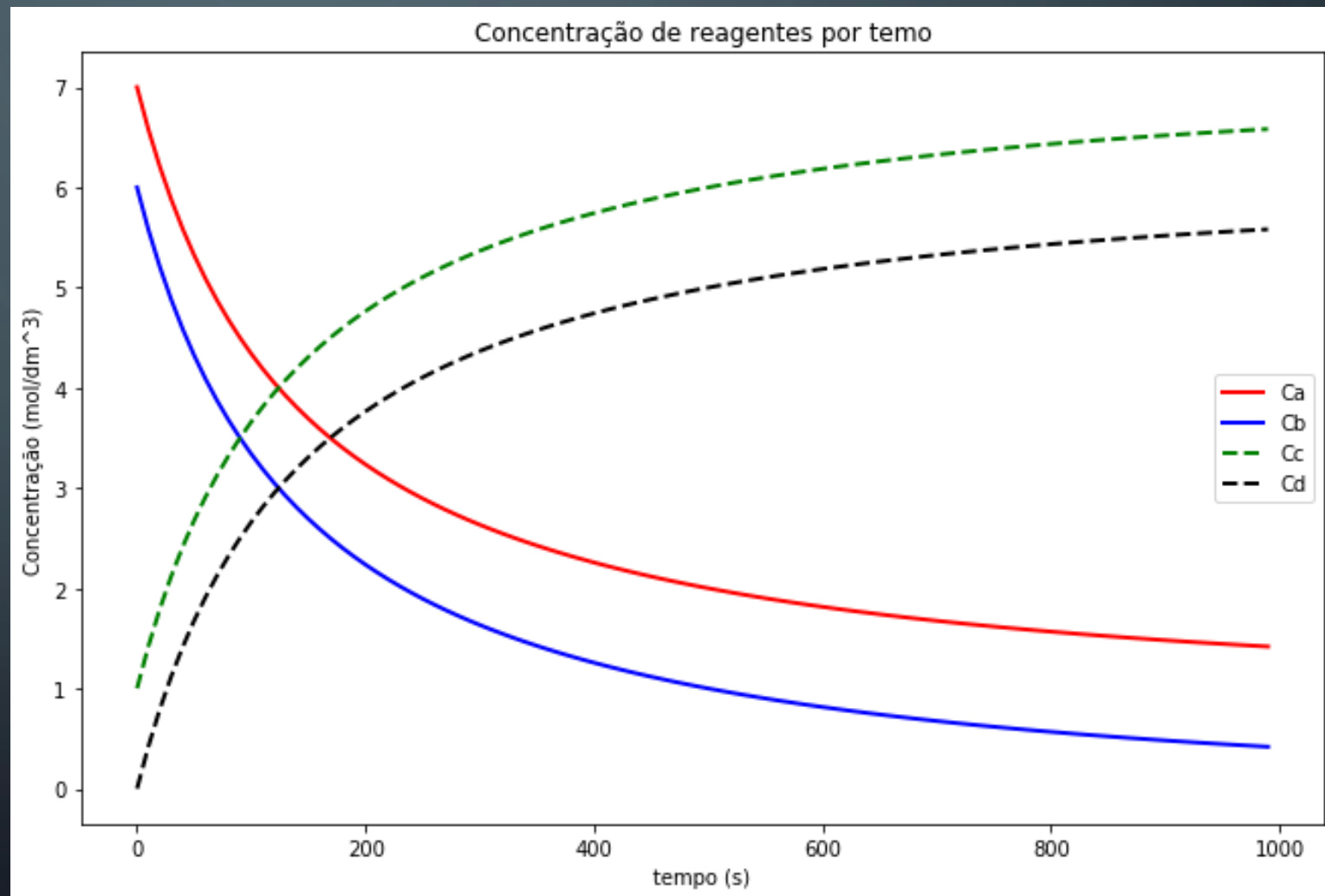
$E_a = 86,6 \text{ KJ/mol}$

Conc A inicial = 7 mols/L

Conc B inicial = 6 mols/L

Conc C inicial = 1 mol/L

Conc D inicial = 0 mol/L



REAÇÃO QUÍMICA



Temperatura – 306 K

$k = 0.002849 \text{ L/mol.s}$

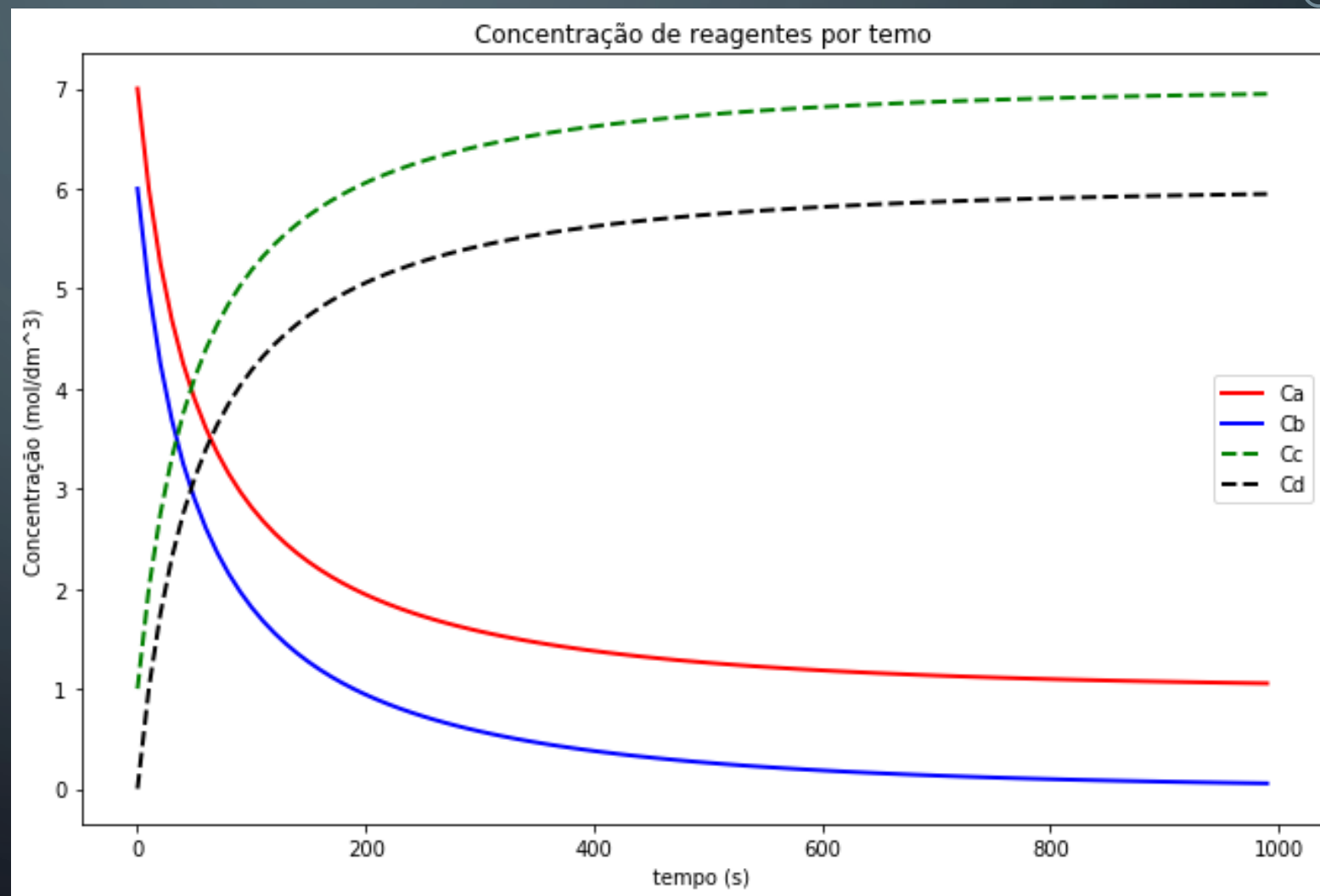
$E_a = 86,6 \text{ KJ/mol}$

Conc A inicial = 7 mols/L

Conc B inicial = 6 mols/L

Conc C inicial = 1 mol/L

Conc D inicial = 0 mol/L

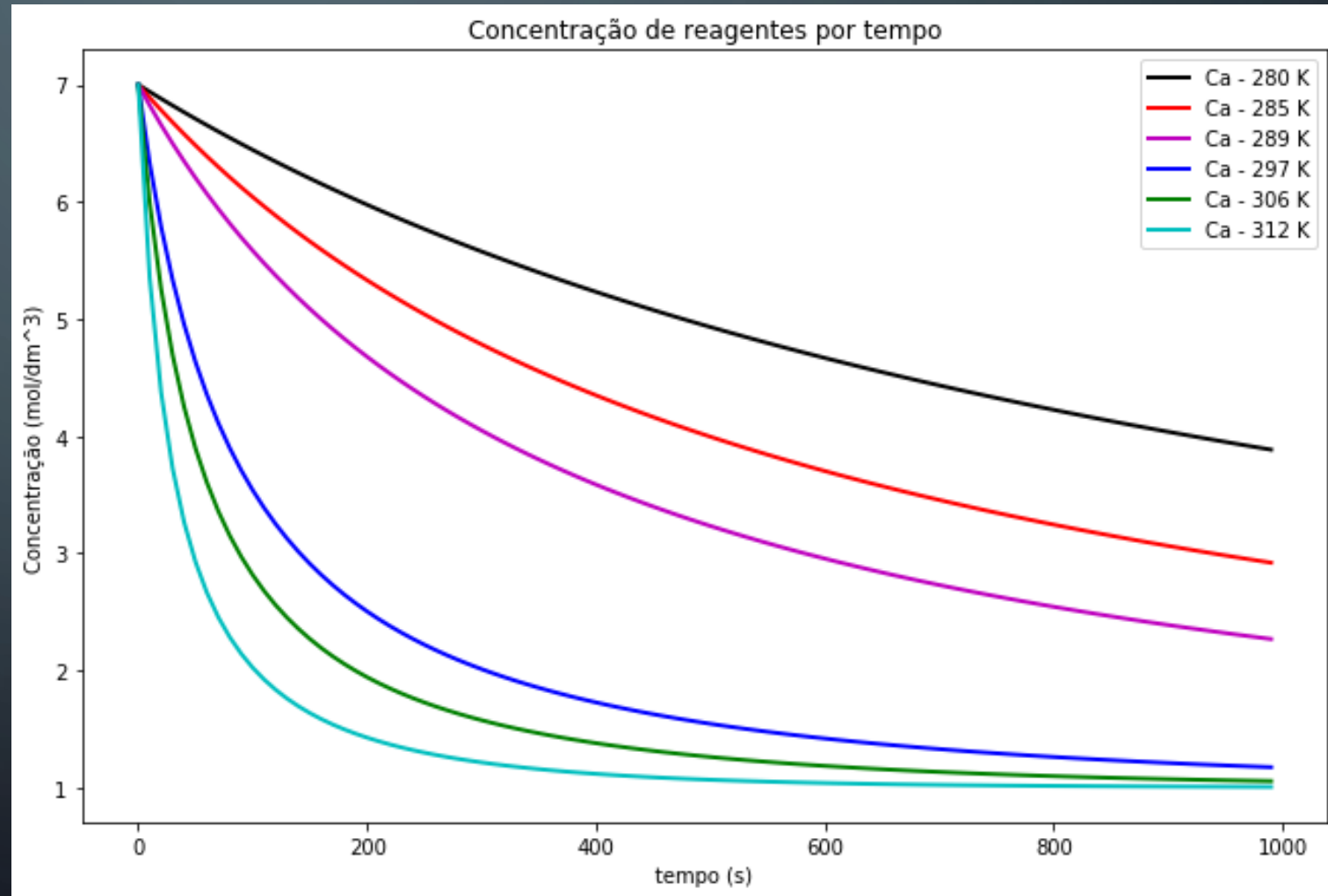


REAÇÃO QUÍMICA



$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{R \cdot T}}$$

Temperatura (K)	k (L/mol.s)
280	0.000145
285	0.000268
289	0.000432
297	0.001780
306	0.002849
312	0.005279

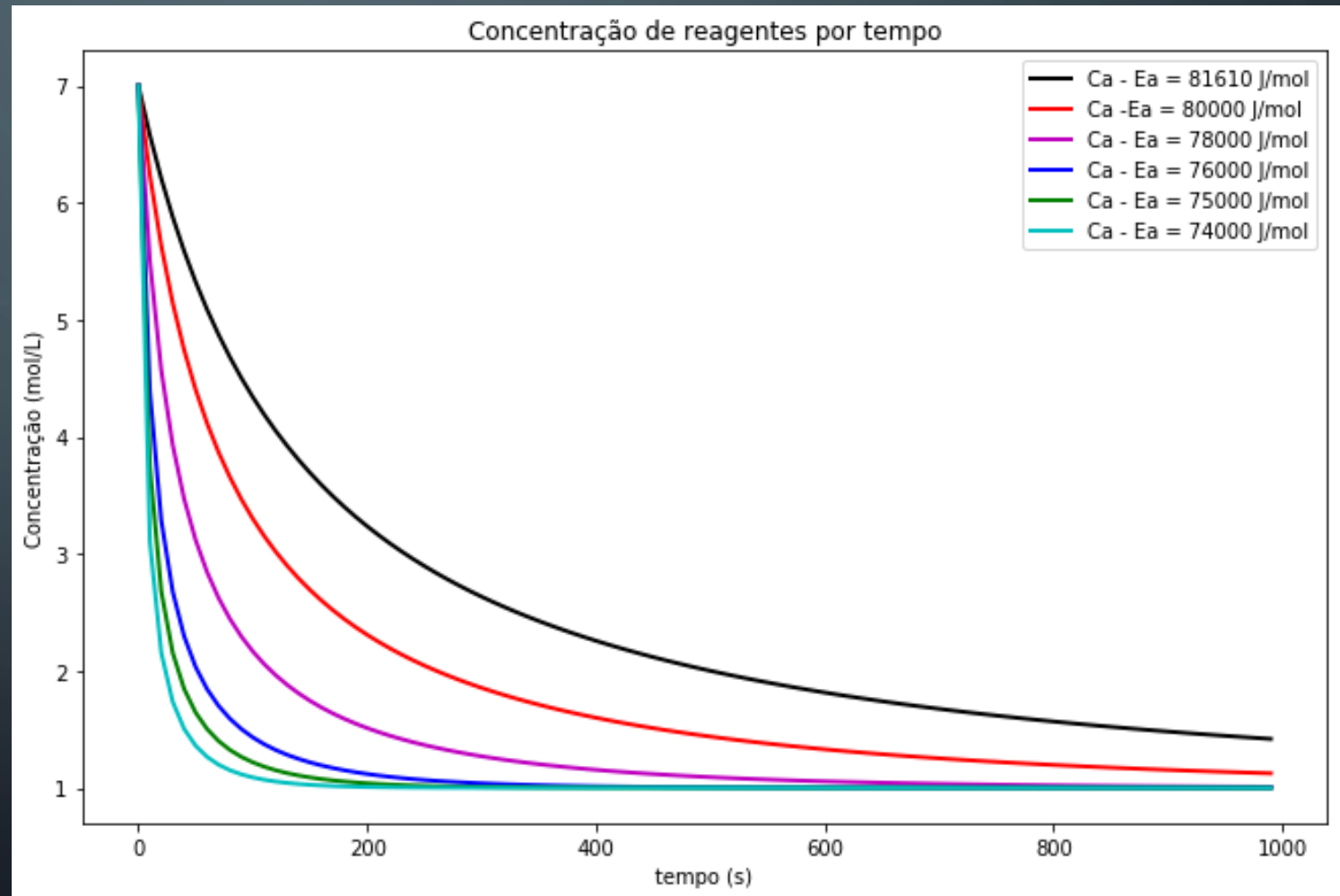


REAÇÃO QUÍMICA



$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{R \cdot T}}$$

Ea (J/mol)	k (L/mol.s)
81610	0.001078
80000	0.002069
78000	0.004651
76000	0.010456
75000	0.015676
74000	0.023503





UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “JÚLIO DE MESQUITA FILHO”

FACULDADE DE CIÊNCIAS FARMACÊUTICAS

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE BIOPROCESSOS E BIOTECNOLOGIA

MATERIAL DA AULA

https://github.com/marcelcerri/Arrhenius_model

MARCEL OTAVIO CERRI

MARCEL.CERRI@UNESP.BR

