

Cinética das reações de combustão e gaseificação

- Capítulo 4 de:
Turns, SR; An Introduction to Combustion: Concepts and applications, McGraw Hill, 2ª ed., 2000



- Qual a probabilidade de 2 moléculas de butano e 13 moléculas de oxigênio colidirem instantaneamente para reagirem e produzirem 8 moléculas de dióxido de carbono e 10 moléculas de água?
- A maior parte das reações de combustão são reações intermediárias bi-moleculares, onde há quebra de 1 ligação atômica e formação de outra nova ligação.
- A velocidade em que isto ocorre pode ser avaliada pela teoria das colisões moleculares.

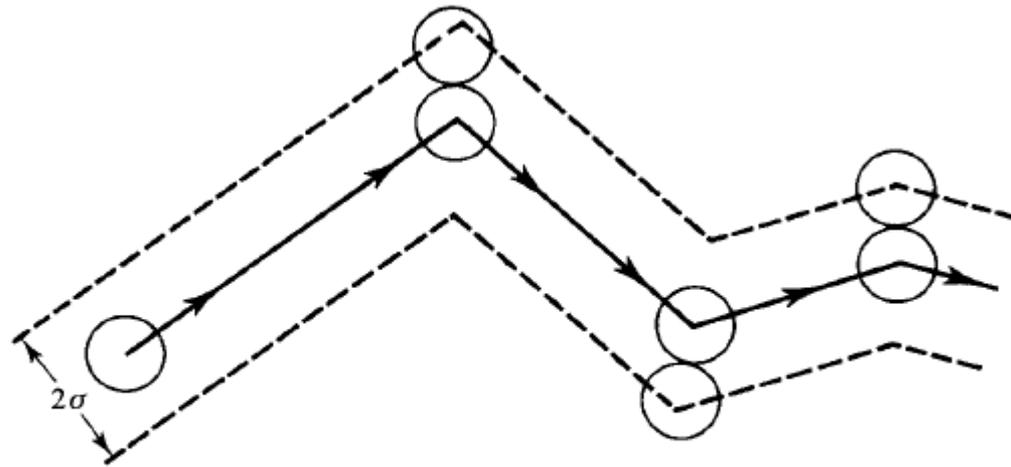
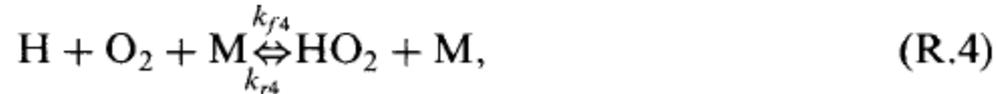


Figure 4.1 Collision volume swept out by a molecule, with diameter σ , striking like molecules.

Exemplo de reações bi-moleculares:



A taxa de reações bi-moleculares podem ser representadas pela equação abaixo.

$$k(T) = AT^b \exp(-E_A/R_u T), \quad (4.19)$$

Esta equação também pode representar a taxa de equações globais, desde que aplicada exclusivamente nas condições em que as constantes experimentais foram obtidas

Table 4.1 Recommended rate coefficients for H₂-O₂ reactions from Ref. [4]

Reaction	A ((cm ³ /gmol) ⁿ⁻¹ /s) ^a	b	E_A (kJ/gmol)	Temperature Range (K)
H + O ₂ → OH + O	1.2 · 10 ¹⁷	-0.91	69.1	300-2,500
OH + O → O ₂ + H	1.8 · 10 ¹³	0	0	300-2,500
O + H ₂ → OH + H	1.5 · 10 ⁷	2.0	31.6	300-2,500
OH + H ₂ → H ₂ O + H	1.5 · 10 ⁸	1.6	13.8	300-2,500
H + H ₂ O → OH + H ₂	4.6 · 10 ⁸	1.6	77.7	300-2,500
O + H ₂ O → OH + OH	1.5 · 10 ¹⁰	1.14	72.2	300-2,500
H + H + M → H ₂ + M				
M = Ar (low <i>P</i>)	6.4 · 10 ¹⁷	-1.0	0	300-5,000
M = H ₂ (low <i>P</i>)	0.7 · 10 ¹⁶	-0.6	0	100-5,000
H ₂ + M → H + H + M				
M = Ar (low <i>P</i>)	2.2 · 10 ¹⁴	0	402	2,500-8,000
M = H ₂ (low <i>P</i>)	8.8 · 10 ¹⁴	0	402	2,500-8,000
H + OH + M → H ₂ O + M				
M = H ₂ O (low <i>P</i>)	1.4 · 10 ²³	-2.0	0	1,000-3,000
H ₂ O + M → H + OH + M				
M = H ₂ O (low <i>P</i>)	1.6 · 10 ¹⁷	0	478	2,000-5,000
O + O + M → O ₂ + M				
M = Ar (low <i>P</i>)	1.0 · 10 ¹⁷	-1.0	0	300-5,000
O ₂ + M → O + O + M				
M = Ar (low <i>P</i>)	1.2 · 10 ¹⁴	0	451	2,000-10,000

^an is the reaction order.

Banco de datos de cinética química

9. National Institute of Standards and Technology, NIST Chemical Kinetics Database, NIST, Gaithersburg, MD, published annually.

<http://kinetics.nist.gov/kinetics/>