



Evento	Salão UFRGS 2024: SIC - XXXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2024
Local	Virtual
Título	Ajuste de dados cinéticos de reações químicas
Autor	ISABELLA VARASCHIN BONELLA
Orientador	ELISA BARBOSA COUTINHO

Ajuste de dados cinéticos de reações químicas

Autor: Isabella Varaschin Bonella

Orientador: Elisa Barbosa Coutinho

Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

A determinação dos parâmetros cinéticos é essencial para entender o comportamento das reações químicas. Este trabalho tem como objetivo calcular os parâmetros conhecidos como ordem de reação (n) e constante de velocidade (k) a partir da análise de dados experimentais da variação de alguma propriedade físico-química do meio reacional em função do tempo, obtidos em laboratório ou de problemas retirados da literatura. As grandezas estudadas foram a concentração de um ou mais componentes, a pressão total do sistema reacional para reações em fase gasosa, a condutividade do meio reacional para reações de compostos iônicos em meio aquoso e o ângulo de desvio do plano da luz polarizada para reações de espécies com isômeros opticamente ativos. O ajuste dos dados experimentais foi feito pelo método não linear, de modo a evitar erros que ocorrem na linearização, para obter resultados mais próximos aos valores reais. Para isso, equações diferenciais que descrevem o comportamento da reação foram desenvolvidas e aplicadas nos softwares de computação numérica *Scilab* e *RStudio*. Os programas feitos nesses aplicativos utilizam funções solucionadoras de equações diferenciais ordinárias e funções minimizadoras da função objetivo de mínimos quadrados, a partir de uma estimativa inicial fornecida, para calcular os parâmetros e construir gráficos com a curva ajustada, os quais permitem a visualização da qualidade do modelo em relação aos pontos experimentais. Após, iniciou-se o estudo de reações químicas heterogêneas, buscando-se determinar a etapa limitante entre adsorção, reação de superfície e dessorção para calcular os parâmetros dessas reações, que correspondem à constante de velocidade e à constante de equilíbrio. A linguagem R é utilizada para modelar os dados e obter os gráficos. Os resultados obtidos auxiliam na compreensão do processamento das reações químicas.