**1° Lista de Exercícios – Cinética Química – Prof. Luiz Claudio**

1) As seguintes reações independentes ocorrem em um reator químico:





Considerando as taxas de consumo de A de 6 mol/min e de C (na segunda reação) de 2 mol min, calcule:

1. as taxas de saída de saída de todos os componentes
2. o grau de avanço para cada reação
3. os rendimentos em termos de A alimentado e A convertido na 1° reação para D
4. a seletividade para F na 2° reação
5. a conversão do reagente limitante na 1° reação

R) a)

; b) 2 e 0,5; c) 1,6 e 2,67; d) 0,57; e) 0,6

2) A reação a seguir ocorre a 900 °F e 75 atm, possuindo constante de equilíbrio 5,62.

CO + H2O ↔ CO2 + H2

Calcule a razão molar H2O/CO que permita 90% de conversão.

R) 2,34

3) A velocidade de decomposição do acetaldeído, numa cinética de 2° ordem, foi medida numa faixa de temperatura de 700 a 1000K. As ctes de velocidade encontradas estão listadas a seguir. Determine a energia de ativação e o fator pré-exponencial.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| T (K) | 700 | 730 | 760 | 790 | 810 | 840 | 910 | 1000 |
| k (L/mol.s) | 0,011 | 0,035 | 0,105 | 0,343 | 0,789 | 2,17 | 20 | 145 |

R) Ea = 188 KJ/mol; k0 (ou A) = 1,08 x 1012 L/mol.s

4) Para uma reação com energia de ativação 50KJ/mol, qual a razão entre as constantes de velocidade para temperaturas de 25°C e 37°C? E se a energia de ativação for 100 KJ/mol?

R) 2,18 (p/ 50 KJ/mol).

5) Mostrar através das equações de Ahrrenius e Van’t Hoff que para uma reação endotérmica a elevação da temperatura favorece a formação de produtos.

6) Hidróxido de sódio e acetato de etila estão sendo continuamente alimentados em um tanque vigorosamente agitado no qual reagem para formar etanol e acetato de sódio em regime permanente. Analise a velocidade de formação de NaOH se usarmos a definição r = dC/dt.

7) A reação exotérmica A + 2B → D é irreversível a baixas temperaturas e a lei de velocidade é –rA = kACA1/2CB. Sugira uma lei de velocidade que seja válida a altas temperaturas, onde a reação é reversível: A + 2B ↔ D.

R) –rA = kA[CA1/2CB – CD/K1/2] , K = cte de equilíbrio.

8) Mostre que para um sistema gasoso isotérmico com densidade cte (= volume cte) :

a) P = P0[1 + єAXA]; yA0.∆n/a = єA

b) PA=PA0(1-XA)

c) PA=PA0/ єAP0[P0(єA+1) - P)

d) ) PA=PA0 + a/∆n(P – P0)

Considere a reação hipotética aA + bB → rR + sS, ∆n = r + s – a – b

9) A reação ½ N2 + 3/2 H2 → NH3 ocorre a 16,4 atm e 1727 °C em reator isobárico e isotérmico. No início temos uma mistura equimolar (= n° de mols).Se a conversão do H2 for 60%, calcule a concentração de todas as espécies presentes. Se o N2 fosse tomado como base de cálculo, poderia haver conversão de 60%?

R) 0,025 mol/l (H2 e NH3)

10) Calcule a conversão de equilíbrio e as concentrações para a reação em fase líquida A + B ↔ C com CA0 = CB0 = 2 mol/L e K = 10 dm3mol-1.

R) X = 80%, CA = CB = 0,4 mol/L e CC = 1,6 mol/L

11) Mostre que a velocidade de reação a volume cte pode ser expressa por r = d(ξ/V)/dt = 1/υi(dCi/dt), onde ξ é o grau de avanço, υ o coeficiente estequiométrico e i um dos componentes.

12) A reação entre P e Q é de ordem 3/2 para P e -1para Q. Determine a equação da velocidade e as unidades de k ( no SI e também considerando o tempo em minutos e o volume em litros).

R) unidade de k = mol1/2.L-3/2.min-1.

13) A reação N2 + O2 → 2 NO envolve as etapas elementares:

O\* + N2 → NO + N\* (k1)

N\* + O2 → NO + O\* (k2)

Escreva uma equação global para – rO\* e –rN\*. Assumindo que CO\* e CN\* = M (cte), derive uma expressão para +rNO em função de M, CN2 e CO2.

Obs: C = concentração.

R) +rNO = (2k1k2M CO2. CN2)/(k1CN2+ k2CO2).