

# Exercícios CQCR 1

## Semana 3

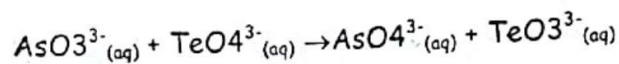
Inac Miranda Comargos

RA: 2018.1048.4

### # Exercício 1:

- 1) Uma solução contendo tiliurato de sódio 50mM e arsenito de sódio 24,7mM foi mantida por 4 hs a 89,6°C e posteriormente foi rapidamente resfriada para bloquear a reação. Após este procedimento encontrou-se que 74,2% de arsenito tinham se transformado em arseniato.

a) Determine o valor de K para a reação:



Assuma que a reação é de primeira ordem em relação a ambos os reagentes

- Analisando: ( $\text{AsO}_3^{3-} \Rightarrow A$  ;  $\text{TeO}_4^{3-} \Rightarrow B$ )

•  $-R_o = K C_{\text{AsO}_3} C_{\text{TeO}_4}$       •  $-R_o = K C_A C_B$

Elemento	Inicial	Reação	Final
A	$C_{A0}$	$-C_{A0} X_A$	$C_{A0} (1 - X_A)$
B	$C_{B0}$	$-C_{A0} X_A$	$C_{A0} (\theta_B - X_A)$
⋮			

- a) I valor de  $K$  é:

$$\bullet - R_0 = K (C_{A0}^2 (1 - X_A) (\Theta_B - X_A))$$

$$\bullet - \frac{dC_A}{dt} = C_{A0}^2 K (1 - X_A) (\Theta_B - X_A)$$

$$\bullet \Theta_B = 2,024$$

$$\bullet C_{A0} = 0,0247 \text{ mol/L}$$

$$\bullet - \frac{d(C_{A0} - dC_{A0} X_A)}{dt} = C_{A0}^2 K (1 - X_A) (\Theta_B - X_A)$$

$$\bullet C_{A0} \frac{dX_A}{dt} = C_{A0}^2 K (1 - X_A) (\Theta_B - X_A)$$

$$\bullet \frac{1}{(1 - X_A)(\Theta_B - X_A)} dX_A = C_{A0} K dt$$

$$\bullet \int_0^{0,742} \frac{1}{(1 - X_A)(\Theta_B - X_A)} dX_A = \int_0^{14400} C_{A0} K dt$$

$$\bullet 0,8769 = 14400 \cdot (0,0247 \text{ mol/L}) \cdot K$$

$$\bullet K = 2,465 \cdot 10^{-3} \text{ L/mol} \cdot \text{s}$$

b) Se houvesse variação de temperatura nesse sistema, o valor do K iria alterar? Justifique

- Pela equação de Arrhenius o valor da constante cinética (K) varia exclusivamente em função da temperatura, respitando a equação:

$$K = A \cdot e^{\frac{-E_a}{RT}}$$

- Então sim, se houvesse variação de temperatura o valor de K iria alterar.

c) Se a sua resposta da letra b foi afirmativa, encontre o valor do k para as temperaturas abaixo:

c.1) 120°C

c.2) 250°C

c.3) 330°C

Considere:  $E_a = 50 \text{ KJ/mol}$

$$K_1 = 2,465 \cdot 10^{-3} \text{ L/mol.s} \quad T_1 = 362,75 \text{ K}$$

- c.1) Respondendo:

$$K_2 = A e^{\frac{-E_a}{RT_2}}$$

$$\ln K_2 = \ln A - \frac{E_a}{RT_2}$$

$$K_1 = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT_1}}$$

$$\ln K_1 = \ln A - \frac{E_a}{RT_1}$$

$$\ln A = \ln K_1 + \frac{E_a}{RT_1}$$

- Então:

$$R = 8,314 \text{ J/mol.K}$$

$$\ln K_2 = \ln K_1 + \frac{E_a}{RT_1} - \frac{E_a}{RT_2}$$

$$K_2 = K_1 \cdot e^{\frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)}$$

- Encontrando  $K_2$  ( $T_2 = 393,15 \text{ K}$ ):

$$K_2 = 2,465 \cdot 10^{-3} \cdot 3,6036$$

$$K_2 = 8,882 \cdot 10^{-3} \text{ L/mol.v}$$

- c.2) Encontrando  $K_3$  ( $T_3 = 523,15 \text{ K}$ ):

$$K_3 = K_1 e^{\frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_3} \right)}$$

$$K_3 = 3,975 \cdot 10^{-1} \text{ L/mol.v}$$

- c. 3) Encontrando  $K_4$  ( $T_4 = 603,15 \text{ K}$ ):

$$\bullet K_4 = K_1 e^{\frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_4} \right)}$$

$$K_4 = 1,8263 \quad \text{L/mol}\cdot\text{s}$$