Lista 01 – Não elementares/Lei de Velocidade

1. Um processo para hidrodesalquilação de tolueno para produzir benzeno e metano foi desenvolvido, ocorre na fase gasosa a temperatura elevada e envolve radical livre.

Acredita-se que o mecanismo seja:

$$H_{2} \xrightarrow{k_{1}} 2H^{*}$$

$$H^{*} + C_{6}H_{5}CH_{3} \xrightarrow{k_{2}} C_{6}H_{5}^{*} + CH_{4}$$

$$C_{6}H_{5}^{*} + H_{2} \xrightarrow{k_{3}} C_{6}H_{6} + H^{*}$$

$$2H^{*} \xrightarrow{k_{4}} H_{2}$$

Derive a lei de velocidade para a taxa de formação de benzeno baseado neste mecanismo. Observações experimentais mostraram que a reação é de ½ ordem em H₂ e 1° ordem em tolueno.

2. Radicais hidrogênio são importantes para sustentar reações de combustão. Consequentemente, se compostos químicos que sequestram os radicais hidrogênio forem introduzidos as chamas podem ser apagadas. Ainda que muitas reações ocorram durante o processo de combustão, escolheremos as chamas de CO como modelo para ilustrar o processo.

Na ausência de inibidores:

$$O_2 \xrightarrow{k_1} 0^* + 0^*$$

$$H_2O + 0^* \xrightarrow{k_2} 2OH^*$$

$$CO + OH^* \xrightarrow{k_3} CO_2 + H^*$$

$$H^* + O_2 \xrightarrow{k_4} OH^* + O^*$$

Assuma que todas as reações são elementares e que a HEPE seja válida para os radicais O* e OH*. Deduza a lei de velocidade para o consumo de CO. Observações experimentais mostraram que a lei de velocidade de consumo de CO é de primeira ordem em relação ao O2.

3. Acredita-se que a pirólise do acetaldeído ocorra de acordo com o seguinte esquema:

$$CH_3 CHO \xrightarrow{k_1} CH_3^* + CHO^*$$

$$CH_3^* + CH_3 CHO \xrightarrow{k_2} CH_3^* + CO + CH_4$$

$$CHO^* + CH_3 CHO \xrightarrow{k_3} CH_3^* + 2CO + H_2$$

$$2CH_3^* \xrightarrow{k_4} C_2H_6$$

 $2C{H_3}^* \stackrel{k_4}{\to} C_2H_6$ Deduza a expressão da velocidade de reação para o desaparecimento do acetaldeído, -r_{AC}.

Universidade Federal de Santa Maria - UFSM