

INSTITUTO POLITÉCNICO DE TOMAR
ESCOLA SUPERIOR DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA INDUSTRIAL

QUÍMICA-FÍSICA I

PROBLEMAS DE CINÉTICA QUÍMICA

1. A velocidade inicial de uma determinada reacção depende da concentração de um reagente J da seguinte forma:

$[J]/10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$	5.0	8.2	17	30
$v_0/10^{-7} \text{ molL}^{-1}\text{s}^{-1}$	3.6	9.6	41	130

Calcular a ordem de reacção relativamente a J e a respectiva constante de velocidade.

2. Determinar os parâmetros da equação de Arrhenius a partir dos seguintes dados:

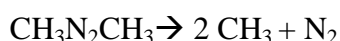
T/K	300	350	400	450	500
$k/\text{mol}^{-1}\text{Ls}^{-1}$	7.9×10^6	3.7×10^7	7.9×10^7	1.7×10^8	3.2×10^8

3. A composição da fase líquida de uma reacção $2A \rightarrow B$ foi seguida espectrofotometricamente com os seguintes resultados:

t/min	0	10	20	30	40	∞
$[B]/\text{mol L}^{-1}$	0	0.089	0.153	0.20	0.23	0.312

Determinar a ordem de reacção e a constante de velocidade.

4. Na decomposição do Azometano



à pressão de 2.18×10^4 Pa e à temperatura de 576 K foram determinadas as seguintes concentrações de Azometano (Az) em função do tempo:

t/min	0	30	60	90	120	150	180
$[\text{Az}]/10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$	8.70	6.52	4.89	3.67	2.75	2.06	1.55

- a) determinar a ordem de reacção e a respectiva constante de velocidade a esta temperatura
- b) determinar a constante de velocidade usando o método do tempo de meia vida e comparar com o resultado anterior.
5. A constante de velocidade de uma reacção a 30 °C é o dobro da constante de velocidade a 20 °C. Calcular a energia de activação.

6. Recorrendo à teoria das colisões faça uma estimativa do factor de eficiência P para a reacção seguinte:



A 628 K, sabendo que o factor pré-exponencial de Arrhenius é $1.24 \times 10^6 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$.

Dados:

secção recta eficaz de colisão para o H_2 : $\sigma(\text{H}_2) = 0.27 \text{ nm}^2$

secção recta eficaz de colisão para a molécula de C_2H_4 : $\sigma(\text{C}_2\text{H}_4) = 0.64 \text{ nm}^2$.

$M(\text{H}_2) = 2.016 \text{ g/mol}$

$M(\text{C}_2\text{H}_4) = 28.05 \text{ g/mol}$

Constante de Boltzmann, $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$.

7. Use a Teoria do Estado de Transição para calcular a constante de velocidade da reacção



a 450 K. Compare com o valor experimental ($9 \times 10^6 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$).

Dados:

Energia de activação clássica: $\epsilon_0 = 9.61 \text{ kcal/mol}$

$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$

$k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

$M(\text{H}) = 1.008 \text{ g/mol}$

$M(\text{D}) = 2.015 \text{ g/mol}$

Molécula de H_2 :

distância internuclear $d(\text{H-H}) = 0.741 \text{ \AA}$

vibração de extensão: $\nu = 4400 \text{ cm}^{-1}$

Complexo activado $\text{DH}_2(\text{linear})$:

distâncias internucleares $d^\ddagger(\text{H}\dots\text{H}) = d^\ddagger(\text{H}\dots\text{D}) = 0.930 \text{ \AA}$

números de onda correspondentes às vibrações:

extensão simétrica $\nu = 1764 \text{ cm}^{-1}$

deformação (duplamente degenerada) : $\nu = 870 \text{ cm}^{-1}$

8. Calcule a entropia de activação, a entalpia de activação e a energia de Gibbs de activação para a reacção de hidrogenação do etileno a $355 \text{ }^\circ\text{C}$ (de 2ª ordem global)

Dados:

Factor pré-exponencial de Arrhenius $A = 1.24 \times 10^6 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$

Energia de activação experimental : $E_a = 180 \text{ kJmol}^{-1}$.