



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Escola de Engenharia de Lorena – EEL
P2 - Cinética Química – EBQ6 – 07/10/2008

A reação $A \Rightarrow 2R + \frac{1}{2}S$ foi estudada a temperatura ambiente (25°C) e os valores encontrados de sua concentração em função do tempo estão apresentados na tabela abaixo.

t (min)	0	1	2	4	6	8	12	15	20
C _A (M)	1,2	0,779	0,577	0,380	0,283	0,226	0,160	0,132	0,102

A - Determine a equação de velocidade desta reação.

B – Sabendo-se que a 40°C a velocidade da reação é três vezes maior do que a 25°C, qual a energia de ativação desta reação?

C - Qual a concentração de R na temperatura de 10°C após 20 minutos de reação?

A – EQUAÇÃO DE VELOCIDADE DA REAÇÃO

O passo inicial é testar os modelos matemáticos de primeira e segunda ordem para os dados coletados.

Ordem	Equação de Velocidade	Modelo Matemático
1	$-r_A = kC_A$	$-\ln \frac{C_A}{C_{A_0}} = kt$
2	$-r_A = kC_A^2$	$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A_0}} = kt$

Teste para ordem um (1)

t (min)	0	1	2	4	6	8	12	15	20
C _A (M)	1,2	0,779	0,577	0,380	0,283	0,226	0,160	0,132	0,102
$-\ln(C_A/C_{A_0})$	0	0,432	0,732	1,150	1,445	1,670	2,015	2,207	2,465
k	----	0,432	0,366	0,287	0,241	0,209	0,168	0,147	0,123

Teste para ordem dois (2)

t (min)	0	1	2	4	6	8	12	15	20
C _A (M)	1,2	0,779	0,577	0,380	0,283	0,226	0,160	0,132	0,102
$1/C_A - 1/C_{A_0}$	0	0,450	0,900	1,798	2,700	3,591	5,417	6,742	8,971
C _A (M)	----	0,450	0,450	0,450	0,450	0,449	0,451	0,449	0,449

CONCLUSÃO: Reação de Segunda Ordem: $k = 0,450 \text{ (L/mol}\cdot\text{min)}$ e $-r_A = 0,450C_A^2 \text{ (mol/L}\cdot\text{min)}$

B– ENERGIA DE ATIVAÇÃO

$$k_{40} = 3k_{25} \quad \Rightarrow \quad k_{40} = 1,35 \text{ (L/mol}\cdot\text{min)}$$

$$\ln \frac{1,35}{0,45} = \frac{E}{1,99} \left[\frac{1}{298} - \frac{1}{313} \right] \quad \Rightarrow \quad E \cong 13.593 \text{ cal/mol}$$



C- C_R Após 20 min a T=10°C

$$\ln \frac{k_{283}}{0,45} = \frac{13593}{1,99} \left[\frac{1}{298} - \frac{1}{213} \right] \quad \rightarrow \quad \boxed{k_{283} = 0,1335(L/\text{min} \cdot \text{mol})}$$

$$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} = kt \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{C_A} - \frac{1}{1,2} = 0,1335 \times 20 \quad \Rightarrow \quad \boxed{C_A = 0,285M}$$

$$\text{Como } \frac{\Delta C_A}{1} = \frac{\Delta C_R}{2} \quad \Rightarrow \quad C_R = 2(C_{A0} - C_A) \quad \Rightarrow \quad C_R = 2(1,2 - 0,285)$$

$$\text{Então: } \boxed{C_R = 1,83M}$$