



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
Escola de Engenharia de Lorena – EEL  
P2 - Cinética Química – EI8 – 25/11/2008

A reação química  $A + B \rightleftharpoons 2R$  foi estudada a 25°C, partir de uma concentração inicial de A de 2.0 mol/litro. A tabela abaixo apresenta as concentrações do produto R formado.

t (min)	0	1	2	4	8	16	30	45	$\infty$
$C_R$ (M)	0	0,33	0,61	1,05	1,64	2,24	2,63	2,75	2,8

Determinar:

A - a equação de velocidade desta reação

B - a concentração de B após 1 hora de reação

C - o tempo necessário para que ocorra 50% de conversão na reação.

Etapa Inicial: Cálculo da  $X_A$  a partir da Concentração do produto R

Considerando que a reação ocorre em fase líquida, estabelece-se a proporção estequiométrica entre as concentrações.

$$\Delta C_A = \frac{\Delta C_R}{2} \Rightarrow C_{A0} - C_A = \frac{C_R}{2} \Rightarrow C_{A0} X_A = \frac{C_R}{2} \Rightarrow \boxed{X_A = \frac{C_R}{4}}$$

Teste Cinético para Reação de Segunda Ordem Reversível

A estequiometria da reação:  $A + B \rightleftharpoons 2R$  permite propor e testar um modelo cinético de segunda ordem reversível. A equação matemática deste modelo é:

$$\ln \left[ \frac{X_{Ae} - (2X_{Ae} - 1)X_A}{X_{Ae} - X_A} \right] = 2k_1 \left[ \frac{1}{X_{Ae}} - 1 \right] C_{A0} t$$

Para aplicação do modelo é preciso calcular a conversão do reagente A no equilíbrio químico. ( $t = \infty$ ).

$$\text{No } t=\infty \Rightarrow C_R=2,8M \Rightarrow C_{Ae}=0,6M \Rightarrow \boxed{X_{Ae}=0,70}$$

Aplicando o modelo cinético, tem-se que:

$$\ln \left[ \frac{0,70 - (140 - 1)X_A}{0,70 - X_A} \right] = 2k_1 \left[ \frac{1}{0,70} - 1 \right] \times 2 \times t \Rightarrow \boxed{\ln \left[ \frac{0,70 - 0,40X_A}{0,70 - X_A} \right] = 1,714k_1 t}$$

$X_A$	0	0,0825	0,153	0,263	0,410	0,560	0,658	0,688	0,700
y	0	0,0768	0,154	0,307	0,614	1,224	2,330	3,526	-
$m \times 10^4$	-	768	771	767	768	765	777	783	-

$$m_{\text{médio}} = 0,07713 = 1714k_1 \Rightarrow \boxed{k_1 = 0,045(L/mol \cdot \text{min})}$$

$$-r_A = k_1 C_A C_B - k_2 C_R^2 \quad \therefore \quad \text{mas como } 1A \equiv 1B \text{ e } C_{A0} = C_{B0}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -r_A = k_1 C_A^2 - k_2 C_R^2 \\ 0 = k_1 C_{Ae}^2 - k_2 C_{Re}^2 \end{array} \right\} \Rightarrow k_2 = k_1 \left( \frac{C_{Ae}}{C_{Re}} \right)^2 = 0,045 \left( \frac{0,6}{2,8} \right)^2$$

A)  $\boxed{k_2 = 0,00207(L/mol \cdot \text{min})}$

$$\boxed{-r_A = 0,045 C_A C_B - 0,00207 C_R^2}$$



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
Escola de Engenharia de Lorena – EEL  
P2 - Cinética Química – EI8 – 25/11/2008

B)  $C_A=C_B$  após 1 hora de Reação

$$\ln \left[ \frac{0,7 - 0,4X_A}{0,7 - X_A} \right] = 1,714 \times 0,045 \times 60$$

$$\ln \left[ \frac{0,7 - 0,4X_A}{0,7 - X_A} \right] = 4,6278 \quad \Rightarrow \quad \frac{0,7 - 0,4X_A}{0,7 - X_A} = 102,29$$

$$0,7 - 0,4X_A = 71,60 - 102,29X_A \quad \Rightarrow \quad 101,89X_A = 70,9 \quad \Rightarrow \quad X_A = 0,6958 = X_B$$

$$C_B = C_{B_0}(1 - X_B) = 2(1 - 0,6958) \quad \Rightarrow \quad \boxed{C_B = 0,6084M}$$

4

C) t para  $X_A=0,50$

$$\ln \left[ \frac{0,7 - 0,4 \times 0,5}{0,7 - 0,5} \right] = 1,714 \times 0,045 \times t \quad \Rightarrow \quad \boxed{t = 11,88 \text{ min}}$$