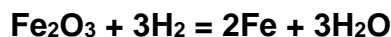


**PMT3206 – FÍSICO QUÍMICA PARA METALURGIA E MATERIAIS II****3ª PROVA DE 2016**

1.

Portanto,  $b=1/3$ BC: 100 moles de gás (ideal):  $V_{\text{gás}}=2240\text{NL}$  ou  $2,24 \times 10^6 \text{Ncm}^3$ Para um gás ideal:  $V_{\text{H}_2}=n_{\text{H}_2}=62\text{moles}$ Pela lei de Charles:  $V_{1173\text{K}}=2,24 \times 10^6 \times 1173/273 = 9,625 \times 10^6 \text{cm}^3$  $C_{\text{H}_2} = 62/9,625 \times 10^6 = 6,442 \times 10^{-6} \text{mol/cm}^3$  $\rho_{\text{MB}} = 2,5/160 = 1,563 \times 10^{-2} \text{mol/cm}^3$ 

$$k_{\text{cin}} = \frac{6 \times \left(\frac{1}{3}\right) \times 3 \times 6,442 \times 10^{-6}}{1,563 \times 10^{-2} \times 1^2} = 2,473 \times 10^{-3} \text{s}^{-1}$$

$$g(\alpha) = 1 - 3\alpha(1-\alpha)^{2/3} + 2\alpha(1-\alpha)$$

Para  $\alpha = 0,6$ ,  $g(\alpha)=0,1713=k_{\text{cin}} \times t$ . Portanto,  **$t=69,27 \text{ s}$** Para  $\alpha = 1$ ,  $g(\alpha)=1=k_{\text{cin}} \times t$ . Portanto,  **$t=404,4 \text{ s}$** 

2.

(a) e (b)

$$r_{\text{FeO}} = -\frac{dc_{\text{FeO}}}{dt} = k \cdot C_{\text{C}} \cdot C_{\text{FeO}} = k_{\text{obs}} \cdot C_{\text{FeO}}$$

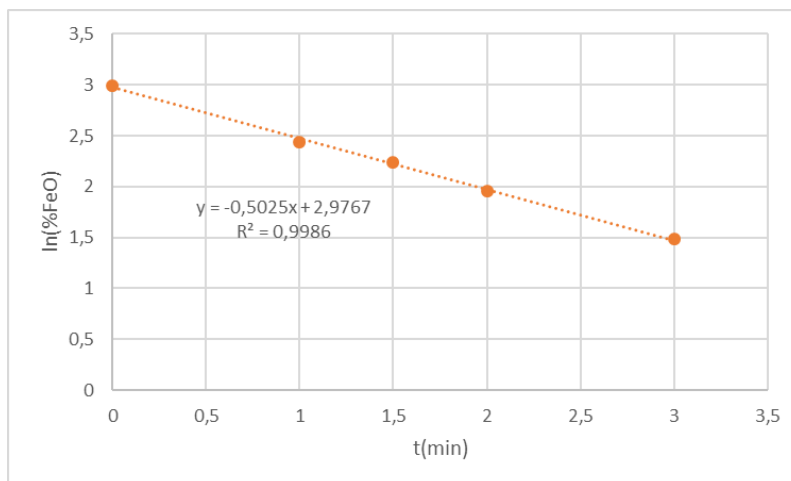
$$\int_{C_{\text{FeO}}^0}^{C_{\text{FeO}}^t} \left(-\frac{dc_{\text{FeO}}}{dt}\right) = \int_0^t k_{\text{obs}} \cdot dt$$

$$\ln \frac{C_{\text{FeO}}^0}{C_{\text{FeO}}} = k_{\text{obs}} \cdot t$$

$$k_{\text{obs}} = \frac{1}{t} \cdot \ln \frac{C_{\text{FeO}}^0}{C_{\text{FeO}}}$$

$$k_{\text{obs}} = 5,53 \times 10^{-1}; 5,07 \times 10^{-1}; 5,18 \times 10^{-1}; 5,05 \times 10^{-1}; \text{média} = 0,521 \text{min}^{-1}$$

Fazendo por regressão linear:  $k_{\text{obs}} = 0,5025 \text{min}^{-1}$ .

**3ª PROVA DE 2016**

$k_{\text{obs}} = 5,53 \times 10^{-1}; 5,07 \times 10^{-1}; 5,18 \times 10^{-1}; 5,05 \times 10^{-1}$ ; média =  $5,21 \times 10^{-1} \text{ min}^{-1}$ , ou seja, valores muito semelhantes e, portanto, obedece uma cinética de 1ª ordem com um  $k_{\text{obs}} = 0,5 \text{ min}^{-1}$

(c)  **$c_{\text{FeO}} = 19,62 \cdot \exp(-0,5025 \cdot t)$**   
 **$c_{\text{FeO}}$  em (%)**  
**t em min**

(d) para 7 min de reação tem-se:

**$c_{\text{FeO}} = 0,6\%$**

(e)  $r = k \cdot C_C \cdot C_{\text{FeO}} \dots$

$$r (\% \text{FeO} / \text{min}) = k (\% \text{C}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}) \cdot (\% \text{C}) \cdot (\% \text{FeO})$$

$$k_{\text{obs}} = k \cdot C_C$$

$$k = k_{\text{obs}} / C_C$$

$$k = 5,025 \times 10^{-1} / 4,5$$

**$k = 1,117 \times 10^{-1} (\% \text{C}^{-1} \cdot \text{min}^{-1})$**

3.

a.

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{A \cdot e^{-E/RT_1}}{A \cdot e^{-E/RT_2}} \Rightarrow \frac{k_1}{2k_1} = \frac{A \cdot e^{-E/RT_1}}{A \cdot e^{-E/RT_2}} \Rightarrow \frac{1}{2} = \frac{e^{-E/RT_1}}{e^{-E/RT_2}} = e^{-E/RT_1 + E/RT_2}$$

$$\ln \frac{1}{2} = -E/RT_1 + E/RT_2 = \frac{E}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$-0,69 = \frac{10000}{1,987} \left( \frac{1}{xT_1} - \frac{1}{T_1} \right) = \frac{10000}{1,987} \left( \frac{1-x}{xT_1} \right)$$

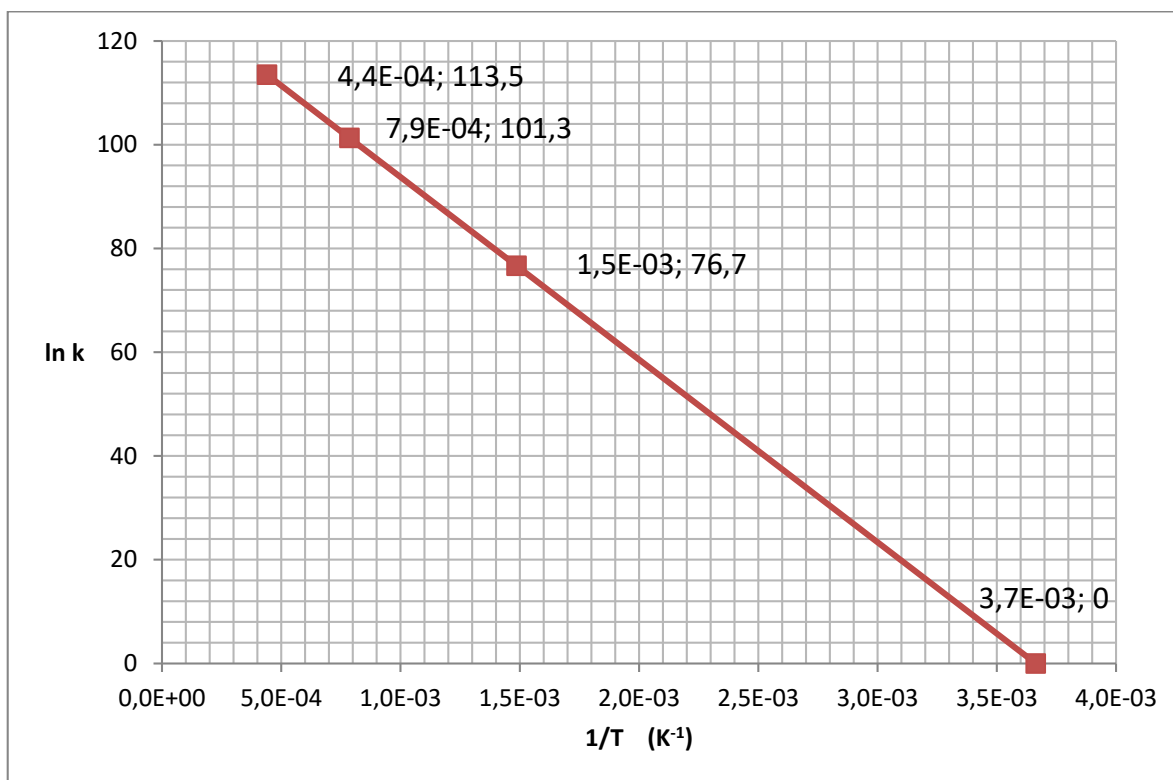
$$-1,38 \cdot 10^{-4} = \left( \frac{1-x}{xT_1} \right)$$

$$-1,38 \cdot 10^{-4} \cdot x \cdot T_1 = 1 - x$$

$$-1,38 \cdot 10^{-4} \cdot x \cdot 673 + x = 1 \Rightarrow x = 1,10 \Rightarrow T_2 = 741,75 \text{K} = 468^\circ \text{C}$$

**PMT3206 – FÍSICO QUÍMICA PARA METALURGIA E MATERIAIS II****3ª PROVA DE 2016**

b.



$$\ln k = \ln A - E/RT$$

$$-E/R = (113,5 - 0) / (4,4 \times 10^{-4} - 3,7 \times 10^{-3}) = 3,48 \times 10^4$$

$$E = 6,92 \times 10^4 \dots = 69200 \text{ cal/mol}$$

No item a a cinética é controlada por um processo físico ( $E_a < 10 \text{ kcal/mol}$ ) e no item b a cinética é controlada por um mecanismo misto ( $10 < E_a < 100 \text{ kcal/mol}$ )

4.

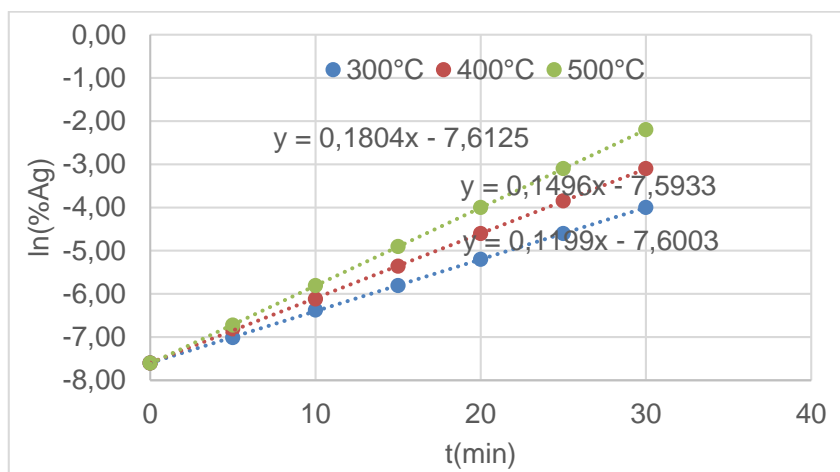
| Tempo (min) | Temperatura(°C) |        |        |
|-------------|-----------------|--------|--------|
|             | 300             | 400    | 500    |
| 0           | 0,0005          | 0,0005 | 0,0005 |
| 5           | 0,0009          | 0,0011 | 0,0012 |
| 10          | 0,0017          | 0,0022 | 0,0030 |
| 15          | 0,0030          | 0,0047 | 0,0074 |
| 20          | 0,0055          | 0,0100 | 0,0183 |
| 25          | 0,0100          | 0,0213 | 0,0450 |
| 30          | 0,0183          | 0,0450 | 0,1107 |

a)

Para uma cinética de 1ª ordem tem-se:

**PMT3206 – FÍSICO QUÍMICA PARA METALURGIA E MATERIAIS II****3ª PROVA DE 2016**

| Tempo (min) | ln(%Ag) |       |       |
|-------------|---------|-------|-------|
| 0           | -7,60   | -7,60 | -7,60 |
| 5           | -7,01   | -6,81 | -6,73 |
| 10          | -6,38   | -6,12 | -5,81 |
| 15          | -5,81   | -5,36 | -4,91 |
| 20          | -5,20   | -4,61 | -4,00 |
| 25          | -4,61   | -3,85 | -3,10 |
| 30          | -4,00   | -3,10 | -2,20 |

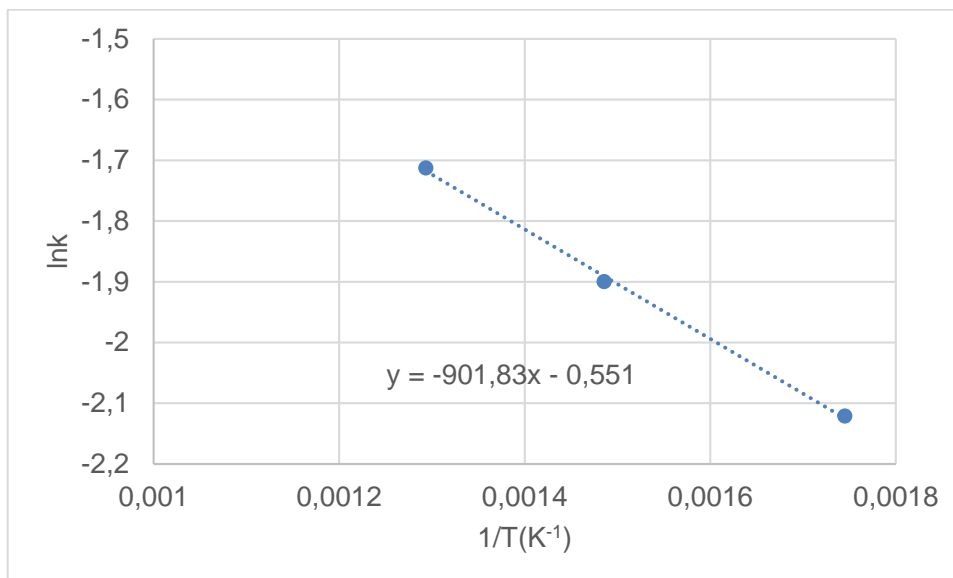


A 400°C,  $k=0,1496 \text{ min}^{-1}$ , ou seja:

$$0,1496 = \beta \cdot \frac{S}{V} = \beta \cdot \frac{\pi \cdot 1,5^2 + 2 \cdot \pi \cdot 1,5 \cdot 3}{\pi \cdot 1,5^2 \cdot 3} \Rightarrow \beta = 0,1496/1,67 \Rightarrow \beta = 0,0896 \text{ cm/min}$$

b)

| T(°C) | T(K) | 1/T (K <sup>-1</sup> ) | k (min <sup>-1</sup> ) | lnk      |
|-------|------|------------------------|------------------------|----------|
| 300   | 573  | 0,001745               | 0,1199                 | -2,1211  |
| 400   | 673  | 0,001486               | 0,1496                 | -1,89979 |
| 500   | 773  | 0,001294               | 0,1804                 | -1,71258 |

**PMT3206 – FÍSICO QUÍMICA PARA METALURGIA E MATERIAIS II****3ª PROVA DE 2016**

$$\text{Portanto, } -\frac{E_a}{R} = -901,83 \Rightarrow E_a = 1791,94 \frac{\text{cal}}{\text{mol}} = 1,79 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$$

**Como  $E_a < 10$  kcal/mol, o processo é controlado por um fenômeno físico.**

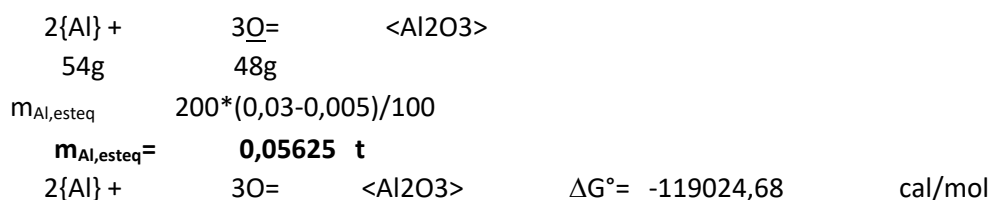
c)

$$k = \beta \cdot \frac{S}{V} = \beta \cdot \frac{\pi \cdot 1^2 + 2 \cdot \pi \cdot 1 \cdot 3}{\pi \cdot 1^2 \cdot 3} = 0,0869 \cdot 2,33 \Rightarrow k = 0,209 \text{ min}^{-1}$$

$$\ln C_t - \ln 0,0005 = 0,209 \times 30 \Rightarrow C_t = 0,262\%$$

Portanto, **não é possível já que a concentração de Ag após 30 min é superior a 0,01%**

5.



$$K = \frac{1}{f_{\text{Al}}^2 \cdot f_{\text{O}}^3 \cdot \% \text{Al}^2 \cdot \% \text{O}^3} \quad K = 7,75301\text{E}+13$$

**%Al = 0,001038**

$$m_{\text{Al,term}} = 0,002076 \text{ t}$$

$$m_{\text{Al,total}} = 0,058326 \text{ t}$$