PROVA 1 GABARITO

① Seja $(CH_3O)_2O \equiv A$; $CH_3CHO = B$

a) Eqs de velocidade:

$$-\frac{d[A]}{dt} = k_1[A] \qquad [A](0) = A_0$$

$$-\frac{d[B]}{dt} = k_2 M[B] - k_1[A]$$

MODELO SEQUENCIAL COM 1º e PSEUDO 1º ORDEM

$$k_1 = 0{,}012\ min^{-1} \qquad k_2 M = 2\ \cancel{L}\ \cancel{mol^{-1}}\ min^{-1}\ 0{,}01\ \cancel{mol}\ \cancel{L^{-1}}$$

$$k_2 M = k_2' = 0{,}02\ min^{-1}$$

$$t_{max} = \frac{1}{(k_1 - k_2')} \ln\left(\frac{k_1}{k_2'}\right) = -(0{,}008)^{-1} \ln 0{,}6$$

$$\underline{\underline{t_{max} \cong 64\ min}}$$

$$[B]_{max} = A_0 \left(\frac{k_2'}{k_1}\right)^{k_2'/(k_1 - k_2')} = A_0 \left(\frac{0{,}020}{0{,}012}\right) e^{-0{,}02/0{,}008}$$

$$[B]_{max} \simeq 0{,}28\ A_0$$

(2) (a) A reação de hidratação em meio ácido pode ser considerado um processo de primeira-ordem visto $[H_2O]$ e $[H_3O^+]$ permanecem constantes. Assumindo cinética de 1ª ordem, e o volume como propriedade aditiva temos

$$\ln \frac{P_0 - P_\infty}{P_t - P_\infty} = k_1 t \qquad P_0 = V_0 \quad P_\infty = V_\infty$$

$$P_t = V(t)$$

$$k_1 = 0{,}0135 \text{ min}^{-1}$$

(2) (b) tempo de meia vida $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k_1}$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{0{,}0135\ \text{min}^{-1}} = \underline{51{,}3 \text{ minutos}}$$

(c) Tempo no qual ter-butanol atinge 80 % formação

corresponde 20 % reagente

[ISOBUTENO] = 0,2 [ISOBUTENO] (0)

$$\frac{[\text{ISOBUTENO}]}{[\text{ISOBUTENO}]_0} = e^{-k_1 t} \quad \text{ou}$$

$$k_1 t_{20\%} = \ln \frac{\cancel{[\text{ISOBUTENO}]}(0)}{0{,}2\,\cancel{[\text{ISOBUTENO}]}(0)} = \ln 5$$

$$t_{20\%} = \frac{\ln 5}{k_1} = \underline{119{,}2 \text{ minutos}}$$

3

$$A \xrightarrow{k_1} B \quad ; \quad B \xrightarrow{k_2} 2P \quad ; \quad B \xrightarrow{k_3} Q$$

$$-\frac{dA}{dt} = k_1 A \quad ; \quad -\frac{dB}{dt} = (k_2 + k_3) B - k_1 A$$

$$\frac{dP}{dt} = 2 k_2 B \quad ; \quad \frac{dQ}{dt} = k_3 B$$

(b) ESTADO ESTACIONÁRIO $\frac{dB}{dt} \simeq 0$

CASO $(k_2 + k_3) \gg k_1$

$$B \simeq \frac{k_1 A}{(k_2 + k_3)} \qquad A(t) = A_0 e^{-k_1 t}$$

ASSIM:

$$\frac{dP}{dt} = 2 k_2 B \simeq \frac{2 k_2 k_1}{(k_2 + k_3)} A_0 e^{-k_1 t}$$

$$\frac{dQ}{dt} = k_3 B \simeq \frac{k_3 k_1}{(k_2 + k_3)} A_0 e^{-k_1 t}$$

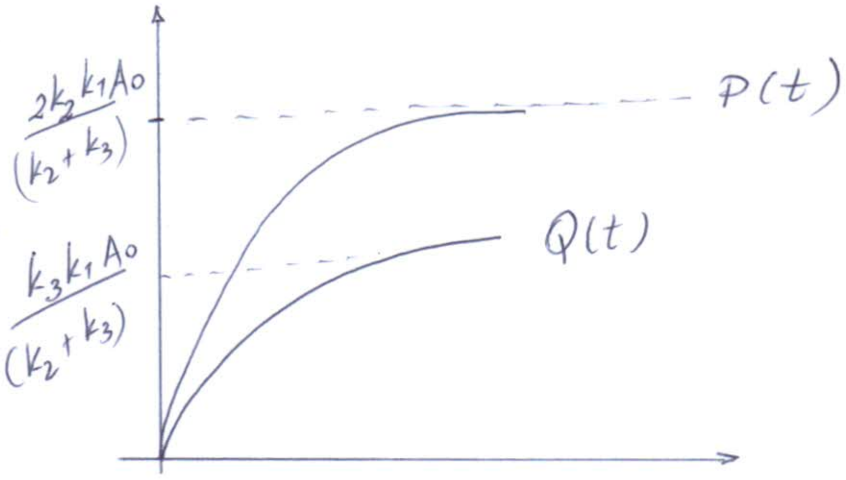
INTEGRANDO TEMOS $P(0) = 0$; $Q(0) = 0$

$$P(t) = \frac{2k_2k_1}{(k_2+k_3)} \cancel{A_0} \left(1 - e^{-k_1 t}\right)$$

$$Q(t) = \frac{k_3k_1}{(k_2+k_3)} \cancel{A_0} \left(1 - e^{-k_1 t}\right)$$

ASSIM:

$k_2 \simeq k_3$



$$\frac{P(t)}{Q(t)} = \frac{2k_2}{k_3} \quad (\text{independent de } t)$$

(4) $$-\frac{d[CH_3CHO]}{dt} = k_1 [CH_3CHO]^{3/2}$$

$$[CH_3CHO](0) = A_0$$

Separando e integrando

$$-\int_{A_0}^{[CH_3CHO]} \frac{d[CH_3CHO]}{[CH_3CHO]^{3/2}} = k_1 \int_0^t dt$$

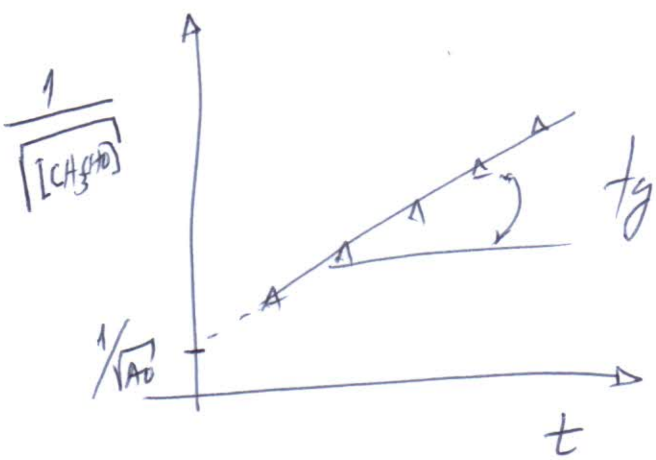
$$\left(\frac{1}{2}\right)^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{[CH_3CHO]}} - \frac{1}{\sqrt{A_0}} \right) = k_1 t$$

ou $$\frac{1}{\sqrt{[CH_3CHO]}} - \frac{1}{\sqrt{A_0}} = \frac{1}{2} k_1 t$$

MESMA COISA QUE CINÉTICA ORDEM $n \neq 1$

$$\frac{1}{[A]^{n-1}} - \frac{1}{[A_0]^{n-1}} = (n-1) k_n t \qquad n = 3/2$$

GRÁFICO p/ DETERMINAR k



$$tg\theta = \frac{1}{2} k$$