

## Equilíbrio Químico – Exercícios

1. Uma mistura equimolar de  $H_2$  e  $CO$  é obtida pela reação de vapor de água com carvão. Para aumentar o teor de  $H_2$ , vapor de água adicionado à mistura e submetido a um catalisador à  $550^\circ C$  e 1 bar de modo a converter  $CO$  em  $CO_2$  pela reação:  $H_2O + CO \rightleftharpoons H_2 + CO_2$ . Calcule as composições de equilíbrio nestas condições com base em uma alimentação equimolar de  $H_2$ ,  $CO$  e  $H_2O$ , dados à  $550^\circ C$ :

	$\Delta G_f^\circ$ (kJ/gmol)
$H_2O$	-202.25
$CO$	-184.47
$CO_2$	-395.56

2. A reação na fase vapor de metano com vapor de água para produzir gás de síntese é descrita pela seguinte equação:  $CH_4 + H_2O \rightleftharpoons CO + H_2$ . Uma reação secundária relevante que ocorre neste caso é a dada na Questão 1. Dadas as energias de Gibbs e entalpias para o problema na tabela abaixo em kJ/mol, calcule as composições de equilíbrio para uma alimentação 1:1 à 600K, 1300K, 1 bar e 100 bar.

	$\Delta H_f^\circ$ (600 K)	$\Delta H_f^\circ$ (1300 K)	$\Delta G_f^\circ$ (600 K)	$\Delta G_f^\circ$ (1300 K)
$CH_4$	-83.22	-91.71	-22.97	52.30
$H_2O$	-244.72	-249.45	-214.01	-175.81
$CO$	-110.16	-113.85	-164.68	-226.94
$CO_2$	-393.80	-395.22	-395.14	-396.14

3. Para a reação de craqueamento descrita pela equação abaixo, as conversões de equilíbrio são negligenciáveis em temperatura ambiente. Entretanto, começam a se tornar relevantes em temperaturas acima de 500K. Para uma pressão de 1 bar, determine a temperatura da reação para uma conversão de 75%, dados:  $\Delta G_{\text{reação}, 298,15K} = 42270$  J/mol;  $\Delta H_{\text{reação}, 298,15K} = 82,2964$  kJ/mol;  $C_3H_{8(g)} \rightleftharpoons C_2H_{4(g)} + CH_{4(g)}$ .

4. Calcário ( $CaCO_3$ ) é decomposto ao ser aquecido em  $CaO$  e dióxido de carbono. A qual temperatura esta decomposição ocorre na pressão de 1 bar?

Dados:  $\Delta H_{\text{reação}, 298K} = 178,320$  kJ/mol;  $K^\circ_{298K} = 1,3984 \times 10^{-23}$ .

5. À  $450^\circ C$  e 300 bar, a constante de equilíbrio da reação  $N_2(g) + 3H_2(g) = 2NH_3(g)$  é  $K^\circ = 4,6 \times 10^{-5}$ . Considerando esta mistura gasosa como não-ideal, utilize os seguintes valores de coeficiente de fugacidade para encontrar a composição de equilíbrio desta reação com alimentação de 1.0 mol de  $N_2$  e 3.00 mols de  $H_2$ . ( $\phi_{N_2} = 1,14$ ;  $\phi_{H_2} = 1,09$ ;  $\phi_{NH_3} = 0,91$ ).