

QF 531

Exercícios em classe 23/03/2006

1) Utilizando <http://mc2.cchem.berkeley.edu/Java/Gibbs/Gibbs.html>, preencha as colunas em branco, indicando a faixa de temperaturas em que a reação é espontânea ou não.

Reação	$\Delta S^\circ(\text{J/molK})$	Faixa de T (K) na qual a reação é espontânea	$\Delta H^\circ(\text{kJ/mol})$
1	1158,3		585,2
2	1071,8		-896,8
3	-1734,8		-301
4	-32		744,8
5	96,9		296,4
6	135,4		448,4
7	30		152
8	-73,8		-152
9	-2271,7		-311,6
10	-135,4		-448,4

2) A constante de equilíbrio da reação $2 \text{C}_3\text{H}_6(\text{g}) \leftrightarrow \text{C}_2\text{H}_4(\text{g}) + \text{C}_4\text{H}_8(\text{g})$ ajusta-se à expressão

$$\ln K = -2,04 - \frac{1176}{T/K} + \frac{1,51 \times 10^5}{(T/K)^2}$$

entre 400K e 600K. a) Calcule a entalpia padrão da reação; b) Calcule a entalpia padrão da reação a 400K, 286K, 712K, 813K, 54K e 155K; c) O etileno pode ser obtido do álcool etílico e o buteno pode ser obtido do etileno ou do butanol, que é um sub-produto da fabricação do álcool. Você acha viável fazer propeno usando o álcool como matéria-prima básica? (Neste exercício leia-se T/K como: Temperatura em Kelvin)

3) Calcule a energia de Gibbs da reação $\text{N}_2(\text{g}) + 3 \text{H}_2(\text{g}) \rightarrow 2 \text{NH}_3(\text{g})$, quando as pressões parciais do N_2 , H_2 e NH_3 são:

- a) 1,0 ; 4,2 ; 6,3
- b) 2,1 ; 4,1 ; 4,5
- c) 3,2 ; 1,7 ; 2,3
- d) 6,5 ; 3,2 ; 1,7
- e) 4,3 ; 7,6 ; 2,1

bar, respectivamente, e a temperatura é 400K. Para esta reação, $K = 41$ a 400K. Indique em cada caso, se a mistura de reação é favorável à formação de reagente, de produto ou está em equilíbrio.