

Gabarito lista 3

1 -

- a) Taxa de recobrimento de uma superfície

Resposta:

$$\theta = \frac{\text{número de sítios de adsorção ocupados}}{\text{número de sítios de adsorção disponíveis}}$$

- b) Velocidade de adsorção

Resposta:

$$\frac{d\theta}{dt} \quad \text{depende de T, p (ou C) e da natureza do adsorvente/adsorvato}$$

- c) Quimissorção e fisissorção

Resposta:

Quimissorção: formação de ligações químicas, geralmente exotérmica, nem sempre é reversível, $-100 \text{ kJ mol}^{-1} < \Delta H < -400 \text{ kJ mol}^{-1}$, monocamada.

Fisissorção: forças secundárias, reversível em sólidos não porosos, $\Delta H < -40 \text{ kJ mol}^{-1}$, monocamada.

- d) Isoterma de adsorção

Resposta: condições isotérmicas - mostram a variação de p ou C do adsorvato mostrando o mecanismo de adsorção.

2 -

a)

$$V_a \rightarrow \frac{d\theta}{dt} = k_a p_A N(1 - \theta_A)$$

$$V_d \rightarrow \frac{d\theta}{dt} = k_d N(\theta_A)$$

b)

$$V_a = k_a p_A [N(1 - \theta_A)]^2$$

$$V_d = k_d (N\theta_A)^2$$

$$3 - n = 1,762 \text{ e } k = 7,132 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ mmHg}^{-0,568}$$

4 - Sim, pois a regressão linear de p/V em função de p dá um $R^2 = 0,999$ com $V_\infty = 35,84 \text{ cm}^3$ e $\alpha = 7,18 \times 10^{-3} \text{ mmHg}^{-1}$.

5 -

$$\theta = \frac{(\alpha p)^{1/2}}{1 + (\alpha p)^{1/2}}$$

6 -

Resposta: Se a camada adsorvida inicialmente puder operar como substrato para adsorção de outras camadas (por exemplo, adsorção física), é de esperar que, em lugar de a isoterma exibir saturação a uma pressão elevada, a quantidade de adsorvente aumente indefinidamente.

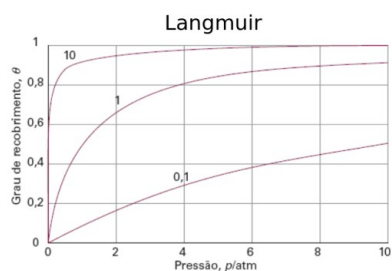
V_{mon} é o volume correspondente à cobertura do adsorvente pela monocamada do adsorvato.

C é uma constante que é grande quando a entalpia de dessorção da monocamada é grande diante da entalpia de vaporização do adsorvato líquido

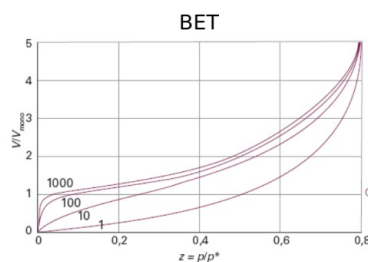
$$c = e^{(\Delta_{des} H^0 - \Delta_{vap} H^0) / RT}$$

7 -

Resposta:



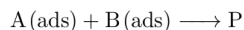
Na isoterma de Langmuir os sítios são considerados todos iguais e a adsorção não pode ir além de uma monocamada. Isso implica em uma saturação no grau de recobrimento.



Na isoterma BET a adsorção ocorre em multicamadas e ocorre condensação nos poros. Consequentemente as curvas elevam-se indefinidamente com o aumento de pressão, pois não há limite para a quantidade de material que pode ser condensado na adsorção em multicamadas.

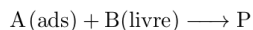
Lindemann-Hinshelwood X Eley-Rideal

No mecanismo de Langmuir-Hinshelwood (mecanismo LH) de reações catalisadas na superfície, a reação ocorre pelos encontros entre os fragmentos moleculares adsorvidos e átomos também adsorvidos na superfície. Por isso, a velocidade deve ser a de um processo de segunda ordem no recobrimento da superfície:



$$v = k_r \theta_A \theta_B$$

No mecanismo de Eley-Rideal (mecanismo ER) para a reação catalisada na superfície, uma molécula da fase gasosa colide com outra molécula, já adsorvida na superfície. A velocidade de formação dos produtos é então, por hipótese, proporcional à pressão parcial p_B do gás B não adsorvido e ao grau de recobrimento da superfície pelo gás adsorvido A, θ_A . Conclui-se então que a lei da cinética do processo deve ser



$$v = k_r p_B \theta_A$$

8 – $12,7 \text{ m}^2$

9 – $20,55 \text{ cm}^3$

10 – $E_{\text{des}} = 611 \text{ kJ}$ e $A = 9,36 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$

11 – a) $0,21 \text{ kPa}$ b) $22,35 \text{ kPa}$

12 – $8,88 \times 10^{21} \text{ fótons}$

13 – $0,036 \text{ mol dm}^{-3}$