



CICLO IME 2 - QUÍMICA

TURMA IME-ITA

2022



DADOS

Elementos

Elemento Químico	Número Atômico	Massa Molar (g mol ⁻¹)	Elemento Químico	Número Atômico	Massa Molar (g mol ⁻¹)
H	1	1,01	Cl	17	35,45
He	2	4,00	Ar	18	39,95
C	6	12,01	K	19	39,10
N	7	14,01	Ca	20	40,08
O	8	16,00	Cr	24	52,00
F	9	19,00	Fe	26	55,84
Ne	10	20,18	Cu	29	63,55
Na	11	22,99	Zn	30	65,38
Mg	12	24,31	Br	35	79,90
S	16	32,06	I	53	126,90

1ª QUESTÃO

Para um processo industrial, é necessário preparar ácido sulfúrico 50 %. Para isso, dispõe-se de:

1. Solução aquosa 20 % em H₂SO₄ a 25 °C
2. Solução aquosa 80 % em H₂SO₄ a 25 °C
3. Gelo a 0 °C

Os dados termodinâmicos para o sistema H₂SO₄-água a 25 °C, sendo o estado de referência para entalpia a água líquida a 25 °C, são apresentados a seguir.

$m_{\text{H}_2\text{SO}_4}/m$	Entalpia
20%	4 kJ mol ⁻¹
50%	15 kJ mol ⁻¹
80%	40 kJ mol ⁻¹

Determine o volume de cada solução que deve ser utilizado para preparar 1000 kg de ácido sulfúrico 50 % com temperatura final 25 °C.

Dados

- Capacidade calorífica do H₂O $C_P(\text{H}_2\text{O}, l) = 75,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Entalpia de fusão do H₂O $\Delta H_{\text{fus}}^\circ(\text{H}_2\text{O}) = 6,0 \text{ kJ mol}^{-1}$

Gabarito

Inicialmente, devemos escrever a equação que representa a mistura da massa de gelo e de ambas as soluções para chegar na solução final:

$$m_1(H_2SO_4(20\%)) + m_2(H_2SO_4(80\%)) + m_2(gelo) = 1000$$

A próxima equação é relacionada a massa total de ácido sulfúrico:

$$0,2m_1 + 0,8m_2 = 500$$

E a última equação é relacionada ao processo termodinâmico do processo. Nesse caso, o raciocínio utilizado deve ser que a entalpia referente a mistura das soluções é a responsável por derreter e esquentar o gelo até a temperatura de equilíbrio:

$$\frac{m_3(6000 + 25.75)}{18} = \frac{10^3(500.40 - 0,2.m_1.4 - 0,8.m_2.15)}{98}$$

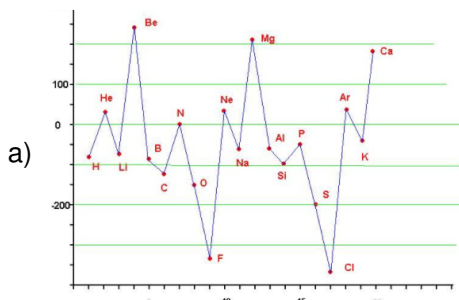
resolvendo o sistema, temos: $m_1 = 104,148$ $m_2 = 598,963$ $m_3 = 296,889$ Resposta: 104,15g da solução 1 e 598,96g da solução 2.

2ª QUESTÃO

Os elementos do segundo e terceiro períodos da tabela periódica apresentam desvios da tendência em suas curvas de afinidade eletrônica em função do número atômico.

- Esboce** qualitativamente o gráfico da afinidade eletrônica em função do número atômico para o segundo e terceiro períodos da tabela periódica.
- Explique** a ocorrência dos desvios.

Gabarito



- Os desvios ocorrem devido a existência de simetria esférica e semiesférica, que geram o efeito de blindagem do núcleo fazendo com que a carga efetiva sentida pelo elétron que se aproxima do átomo seja menor. A simetria esférica ocorre no Berílio e no Magnésio enquanto a simetria semiesférica ocorre no Nitrogênio e no Fósforo devidos as suas distribuições eletrônicas.

3ª QUESTÃO

A um calorímetro, 1 mol de tolueno líquido e ar atmosférico em excesso são adicionados a 27 °C. A mistura é aquecida até 117 °C, entrando em combustão. A temperatura no interior do calorímetro é mantida constante em 117 °C por uma jaqueta contendo 1 L de água líquida. Considere os dados termodinâmicos a 300 K.

- Determine** a variação de temperatura da água na jaqueta.
- Determine** a variação de entropia do sistema.
- Determine** a variação de entropia da água na jaqueta.

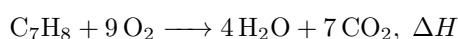
Considere: $\ln(1,30) = 0,26$ $\ln(1,24) = 0,22$ $\ln(1,05) = 0,05$

Dados

- Capacidade calorífica do CO₂ $C_P(\text{CO}_2, \text{g}) = 37,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Capacidade calorífica do H₂O $C_P(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = 75,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Capacidade calorífica do H₂O $C_P(\text{H}_2\text{O}, \text{g}) = 34,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Capacidade calorífica do tolueno $C_P(\text{tolueno}, \text{l}) = 160,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Entalpia de formação do CO₂ $\Delta H_f^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = -390,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entalpia de formação do H₂O $\Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = -290,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entalpia de formação do H₂O $\Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{g}) = -240,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entalpia de formação do tolueno $\Delta H_f^\circ(\text{tolueno}, \text{l}) = 12,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entropia do CO₂ $S^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = 210,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Entropia do H₂O $S^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = 70,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Entropia do tolueno $S^\circ(\text{tolueno}, \text{l}) = 220,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Gabarito

a) A combustão do tolueno :



Teremos:

$$\begin{aligned} \Delta H &= 7 \Delta H_f^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) + 4 \Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{g}) - \Delta H_f^\circ(\text{C}_7\text{H}_8, \text{l}) + \Delta C_p \\ &\cdot \Delta T \\ \Delta C_p &= 7 \cdot 37 + 4 \cdot 34 - 160 = 135 \text{ J/mol.K} \end{aligned}$$

Para um mmol de tolueno , teremos:

$$\Delta H = 3723,15 \text{ J}$$

Para a água na jaqueta:

$$Q = nC_p\Delta T \rightarrow 3723,15 = \frac{1000}{18} \cdot 75 \cdot \Delta T \rightarrow \Delta T = 0,89 \text{ K}$$

c) Calculando a variação de entropia para a água na jaqueta:

$$\Delta S = nC_p \ln\left(\frac{T_f}{T_i}\right)$$

$$\Delta S = \frac{1000}{18} \cdot 75 \cdot \ln\left(\frac{300,89}{300}\right) = 4166,66 \cdot \ln\left(\frac{300,89}{300}\right) J/K$$

Mas como $\Delta T \ll T$, podemos usar a aproximação : $\ln\left(\frac{T_f}{T_i}\right) = \frac{\Delta T}{T}$
Assim,

$$\Delta S = 4166,66 \cdot 0,89/300 = 12,35 J/K$$

Agora resta calcular a variação de entropia do calorímetro:

$$\begin{aligned} \Delta S_{cal} &= 4 S^{\circ}_{390}(H_2O,g) + 7 S^{\circ}_{390}(CO_2,g) - 9 S^{\circ}_{390}(O_2,g) - S^{\circ}_{390}(C_7H_8,l) \\ &\parallel S^{\circ}_{390}(H_2O,g) = S^{\circ}_{300}(H_2O,l) + \Delta S_{300 \rightarrow 373}(H_2O,l) + \Delta S_{(H_2O(l) \rightarrow H_2O(g))} \\ &+ \Delta S_{373 \rightarrow 390}(H_2O,g) \parallel S^{\circ}_{390}(H_2O,g) = 70 + C_{p,H_2O(l)} \ln\left(\frac{373}{300}\right) + \\ &\frac{\Delta H_{vap}}{373} + C_{p,H_2O(g)} \ln\left(\frac{390}{373}\right) \parallel \Delta H_{vap} = \Delta H^{\circ}_{300}(H_2O,g) - \\ &\Delta H^{\circ}_{300}(H_2O,l) + (C_{p,H_2O(g)} - C_{p,H_2O(l)}) \Delta T \parallel \Delta H_{vap} = -240 \cdot 10^3 + 290 \cdot 10^3 - \\ &3690 = 46310 J \parallel S^{\circ}_{390}(H_2O,g) = 70 + 16,5 + 124,15 + 1,7 = 212,35 J/mol.K \parallel S^{\circ}_{390}(CO_2,g) \\ &= S^{\circ}_{300}(CO_2,g) + 37 \cdot 0,26 = 219,62 J/mol.K \parallel S^{\circ}_{390}(O_2,g) = S^{\circ}_{300}(O_2,g) + 7/2 \cdot R \cdot 0,26 \\ &= 212,57 J/mol.K \parallel S^{\circ}_{390}(C_7H_8,l) = S^{\circ}_{300}(C_7H_8,l) + 160 \cdot 0,26 = 261,6 J/mol.K \parallel \Delta S_{cal} = \\ &4 \cdot 212,35 + 7 \cdot 219,62 - 9 \cdot 212,57 - 261,6 = 212 J/mol.K \end{aligned}$$

Multiplicando pelo número de mols:

$$\begin{aligned} \Delta S_{cal} &= 0,212 J/K \parallel \Delta S_{sist} = \Delta S_{cal} + \Delta S_{jaq} = 0,212 + 12,35 = \\ &12,47 J/K \end{aligned}$$

4ª QUESTÃO

Considere desprezível a variação da entropia e da energia interna com a pressão.

- Esboce** o diagrama de fases para o carbono, indicando as fases líquida, gasosa, grafite e diamante.
- Determine** a pressão necessária para que a conversão de grafite em diamante seja termodinamicamente viável a 27 °C.
- Explique** por que não se verifica a conversão de diamante em grafite a 27 °C.

Dados

- Densidade do C $\rho(C, \text{diamante}) = 2,40 \text{ g cm}^{-3}$
- Densidade do C $\rho(C, \text{grafite}) = 4,00 \text{ g cm}^{-3}$
- Entalpia de formação do C $\Delta H_f^{\circ}(C, \text{diamante}) = 1,9 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entropia do C $S^{\circ}(C, \text{diamante}) = 2,4 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Entropia do C $S^{\circ}(C, \text{grafite}) = 5,7 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Gabarito

a) b) Temos que: $\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$, e que $\Delta H = \Delta U + \Delta PV$

Assim, reescrevendo : $\Delta G = \Delta U + P\Delta V - T\Delta S$ para uma determinada pressão.

$$\Delta G^\circ = \Delta U^\circ + P^\circ \Delta V - T\Delta S^\circ$$

$$\Delta G = \Delta U + P\Delta V - T\Delta S$$

Considerando que a energia interna e a entropia não variam com a pressão, teremos :

$$\Delta G^\circ - \Delta G = P^\circ \Delta V - P\Delta V$$

Trabalhando com a pressão externa :

$$\Delta G^\circ - \Delta G = P\Delta V - P^\circ \Delta V$$

Para determinar a pressão a partir da qual a conversão se torna termodinamicamente viável,

$$\Delta G = 0$$

Assim,

$$\Delta G^\circ = (P - P^\circ)\Delta V$$

Sendo $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ = 2890 \text{ J}$ Para um mol, $\Delta V = \frac{12}{2,4} - \frac{12}{4} = 2 \text{ cm}^3$

$$2890 = (P - P^\circ)2 \cdot 10^{-6}$$

$$P - P^\circ = 1445 \cdot 10^6 \text{ Pa}$$

Com isso, $P=14451 \text{ atm}$.

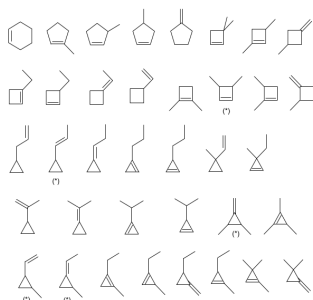
c) Apesar da conversão ser viável à 300K, ela ocorre com velocidade extremamente baixa, portanto não é observada.

5ª QUESTÃO

Apresente a estrutura de todos os compostos monocíclicos com fórmula molecular C_6H_{10} .

Gabarito

As possíveis estruturas são



Os compostos marcados com asterisco possuem enantiômeros.

Observação: Ciclopropenos substituídos são instáveis e podem ser omitidos.

6ª QUESTÃO

Uma mistura gasosa, apresentando comportamento ideal, é formada por oxigênio, dióxido de enxofre e trióxido de enxofre. A mistura apresenta 25% em massa e 25% em volume de dióxido de enxofre.

- a) **Determine** a fração mássica de trióxido de enxofre na mistura.
- b) **Determine** a densidade da mistura.
- c) **Determine** a massa teórica de ácido sulfúrico puro que poderia ser obtida a partir de $1,00 \text{ m}^3$ da mistura em CNTP admitindo 60% de conversão de dióxido em trióxido de enxofre quando a mistura passa por um leito catalítico contendo pentóxido de vanádio.

Gabarito

Gabarito a) A mistura citada na questão é composta de:

$$\text{massa de } O_{2(g)} = m_1$$

$$\text{massa de } SO_{2(g)} = m_2$$

$$\text{massa de } SO_{3(g)} = m_3$$

Pelo enunciado sabemos que:

$$m_2 = 0,25 * (m_1 + m_2 + m_3)$$

$$3m_2 = m_1 + m_3 \rightarrow m_1 = 3m_2 - m_3$$

Como os gases possuem comportamento ideal, a fração volumétrica será a mesma que a fração molar. Assim:

$$n_2 = 0,25 * (n_1 + n_2 + n_3)$$

$$3n_2 = n_1 + n_3$$

Passando a equação para massa:

$$15m_2 = 10m_1 + 4m_3 \Rightarrow m_2 = \frac{2m_3}{5} \Rightarrow m_1 = \frac{m_3}{5}$$

Como queremos a fração mássica do $SO_{3(g)}$:

$$\text{Fração mássica de } SO_{3(g)} = \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3}$$

Substituindo os valores encontrados

$$\text{Fração mássica de } SO_{3(g)} = \boxed{0,625}$$

b)

$$m_1 = 0,125m \quad m_2 = 0,25m \quad m_3 = 0,625m$$

Para calcular a densidade nas CNTP:

$$d = \frac{P \cdot MM}{R \cdot T}$$

$$MM_{\text{mistura}} = x_1 \cdot MM_1 + x_2 \cdot MM_2 + x_3 \cdot MM_3$$

$$MM_{\text{mistura}} = 64 \text{ g/mol}$$

$$d = \frac{1 \cdot 64}{0,082 \cdot 273} = \boxed{2,86 \text{ g/L}}$$

c) Todo o ácido sulfúrico é formado a partir do $SO_{3(g)}$. A massa total da mistura nas condições do enunciado será:

$$d = \frac{massa}{volume} \rightarrow 2,86 g/L = \frac{massa}{1000 L} \Rightarrow massa = 2860 g$$

Sendo n o número de mols de ácido formado, temos que:

$$n = n_3 + 0,6n_2 \frac{m_{H_2SO_4}}{MM_{H_2SO_4}} = \frac{0,625 \cdot 2860}{80} + \frac{0,6 \cdot 0,25 \cdot 2860}{64} = 22,34 + 6,70$$

Finalmente:

$$m_{H_2SO_4} = 29,04 \cdot 98 = \boxed{2845,92 \text{ g}}$$

7ª QUESTÃO

O gás de síntese, composto por monóxido de carbono e hidrogênio, é produzido pela reação entre metano e vapor d'água. Em um reator, 10 L de metano com excesso de água em CNTP são convertidos em gás de síntese com rendimento de 80%.

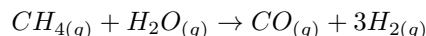
- Determine** a variação de entalpia da reação.
- Determine** a variação de entropia da reação.
- Determine** a temperatura mínima para que a reação de formação do gás de síntese seja espontânea em condições padrão.

Dados

- Entalpia de formação do CH_4 $\Delta H_f^\circ(CH_4, g) = -75,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entalpia de formação do CO $\Delta H_f^\circ(CO, g) = -110,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entalpia de formação do H_2O $\Delta H_f^\circ(H_2O, g) = -240,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entropia do CH_4 $S^\circ(CH_4, g) = 190,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Entropia do CO $S^\circ(CO, g) = 200,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Entropia do H_2O $S^\circ(H_2O, g) = 190,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Gabarito

Gabarito A reação em questão é:



a)

$$\Delta H = -110 - (-75 - 240) = \boxed{205 \text{ kJ/mol}}$$

Como o metano será o reagente limitante e se encontra em CNTP, o número de mols de reação será:

$$n = \frac{10}{22,4} \text{ mols}$$

Logo a energia liberada levará em conta o quanto de metano reagiu, além do rendimento da reação:

$$Energia = \frac{10}{22,4} \cdot 0,8 \cdot 205 = \boxed{73,21kJ}$$

b)

$$\Delta S = 200 + 3 \cdot 131 - (190 + 190) = 213J/molK$$

de maneira análoga ao item (a) temos que:

$$213 \cdot 0,8 \cdot \frac{10}{22,4} = \boxed{76,07J/K}$$

c) Para que a reação seja espontânea sabemos que

$$\Delta G < 0$$

Mas:

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S < 0$$

$$T > \frac{\Delta H}{\Delta S}$$

$$\boxed{T > 962,44K}$$

8ª QUESTÃO

Um engenheiro químico foi encarregado da unidade de destilação de água em uma barragem, altamente contaminada com acetona de efluentes industriais. O objetivo é obter água a partir de uma mistura de acetona e água contendo 60% de massa em água. A mistura entra na unidade de destilação com uma vazão de 700 kg/h. O produto de fundo da destilação sai com vazão de 270 kg/h e contém 80% de água, em massa.

- Determine** a composição do produto de topo.
- Determine** a vazão molar de água no produto de fundo.
- Proponha** um processo para aumentar a pureza da água no produto de fundo.

Gabarito

Vamos tomar uma base de cálculo de 1 hora, portanto em 1 hora teremos 700kg de uma mistura 60% massa de água entrando na unidade de destilação, sendo que 270kg de uma mistura 80% massa de água sai como produto de fundo e os outros 430kg saem como produto de topo. Para determinar a composição do produto de topo basta conservar a massa de água:

$$m_o = m_1 + m_2 \quad (I)$$

Sendo: * m_o massa de água inicial * m_1 massa de água no produto de fundo * m_2 massa de água no produto de topo

Cálculo de m_o :

$$m_o = m_t \cdot f_{H_2O}^{m_o}$$

onde $f_{H_2O}^{m_o}$ é a fração mássica inicial de água

$$m_o = 700 \cdot 0,6$$

$$m_o = 420kg$$

Cálculo de m_1 :

$$m_1 = m_{t1} \cdot f_{H_2O}^{m_1}$$

Analogamente:

$$m_1 = 270 \cdot 0,8$$

$$m_1 = 216kg$$

Cálculo de m_2 : Por (I):

$$420 = 216 + m_2$$

$$m_2 = 204kg$$

Por fim basta relacionar essa massa de água com a massa total do produto de topo. A fração mássica de água no produto de topo será:

$$f_{H_2O}^{m_2} = \frac{204}{430} \approx 47,4\%$$

* Portanto a composição do produto de topo será: 47,4% de **água** e 52,6% de **acetona** em massa.

Para calcular a vazão molar basta converter a vazão em massa de água no produto de fundo. Cálculo da vazão molar de água no produto de fundo: Sendo: * V_m a vazão molar de água no produto de fundo:

$$V_m = \frac{V_{mass}}{MM_{H_2O}} = \frac{V_{total} \cdot f_{H_2O}^{m_1}}{MM_{H_2O}}$$

$$V_m = \frac{270 \cdot 0,8}{18} = \boxed{12 \text{ kmol/h}}$$

- a) Para aumentar a pureza da água basta usar o processo de **refluxo**, o qual consiste em pegar essa corrente de água mais purificada e jogá-la novamente na unidade de destilação.

9ª QUESTÃO

Considere o elemento **X**, de número atômico $Z = 82$.

- Determine** a configuração eletrônica do estado fundamental de **X**.
- Determine** os números quânticos do elétron mais energético de **X**.
- Apresente** a fórmula molecular do cloreto mais estável de **X**.

Gabarito

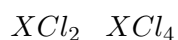
- a) Fazendo a distribuição eletrônica temos:

$$\boxed{1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^2}$$

- b) Pela distribuição, o elétron será o do $6p^2$, portanto seus números quânticos serão:

$$\boxed{n = 6 \quad l = 1 \quad m = 0 \quad s = -\frac{1}{2}}$$

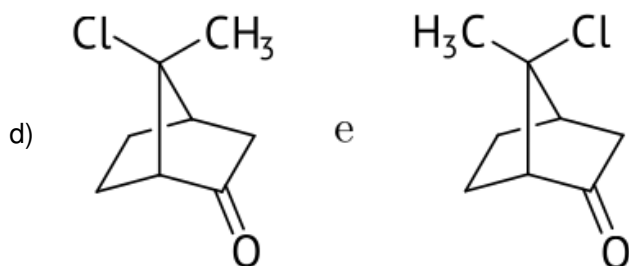
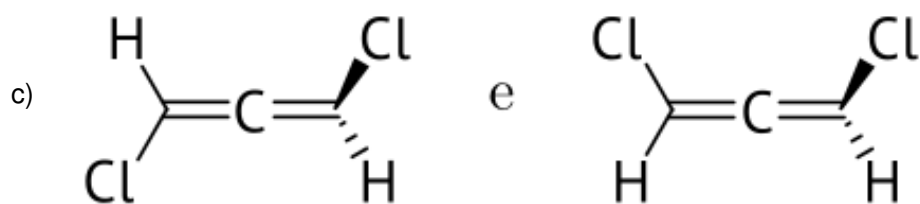
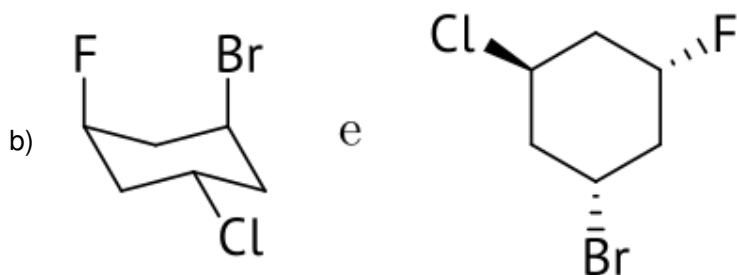
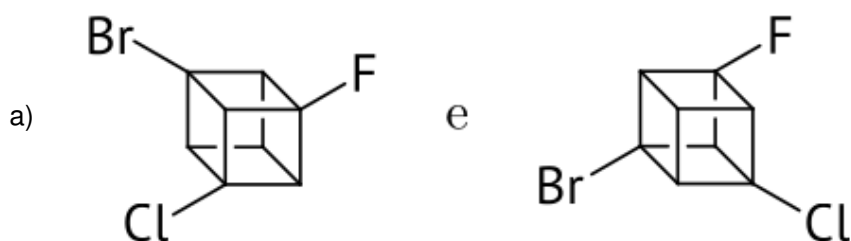
- c) Temos 2 possibilidades de cloreto, uma envolvendo apenas os elétrons do $6p^2$ e outro envolvendo esses mais os elétrons do $6s^2$. Portanto temos 2 possibilidades:

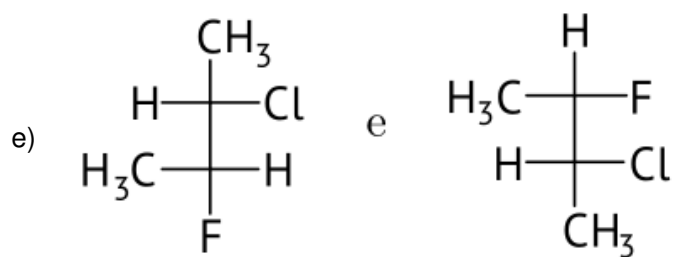


Porém pelo efeito do par inerte, os elétrons do $6s^2$ recebem uma péssima blindagem dos orbitais d e f , dessa forma o par $6s^2$ sente uma forte atração do núcleo, de modo a dificultar a interação desse par com os íons cloreto, por isso o cloreto mais estável será o XCl_2 .

10ª QUESTÃO

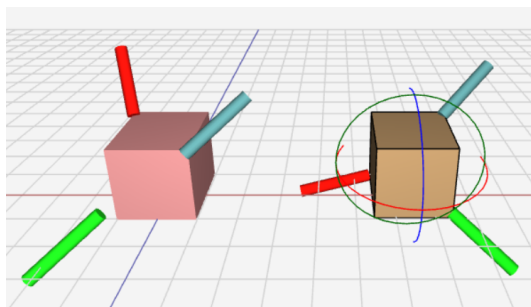
Estabeleça a relação entre as estruturas de cada par abaixo, identificando-as como enantiômeros, diastereoisômeros, isômeros constitucionais ou representações diferentes de um mesmo composto.



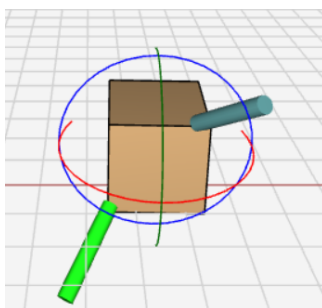


Gabarito

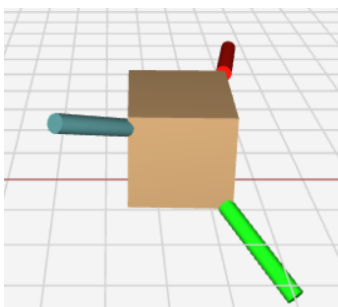
a) Enantiômeros



Girando o segundo cubo 90 graus no eixo vermelho temos:

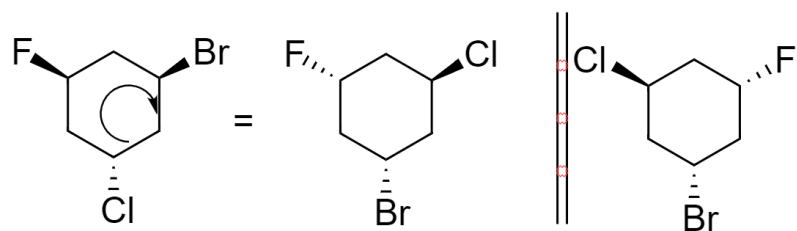


Girando 90 graus no eixo azul temos:

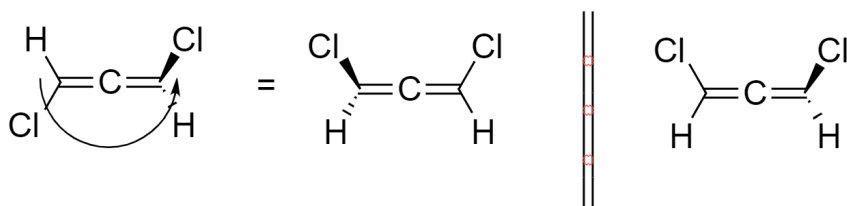


Veja que o resultado final é a imagem especular do primeiro cubo.

a) Enantiômeros Passando para a visão plana e rodando 180 graus saindo do plano do papel:



a) Enantiômeros Rotação no plano do papel:



- a) Diastereoisômeros Basta ver que a parte de cima é espelhada e a parte de baixo é igual, portanto não são o mesmo composto, nem enantiômeros, sendo assim diastereoisômeros
- b) Diastereoisômeros Girando 180 graus no plano do papel percebemos q um dos carbonos é imagem especular do outro enquanto os outros carbonos não são, portanto são diastereoisômeros.