



## CICLO IME 2 - QUÍMICA

TURMA IME-ITA

2022



### DADOS

#### Elementos

Elemento Químico	Número Atômico	Massa Molar (g mol <sup>-1</sup> )	Elemento Químico	Número Atômico	Massa Molar (g mol <sup>-1</sup> )
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 H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> a 25 °C
2. Solução aquosa 80 % em H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> a 25 °C
3. Gelo a 0 °C

Os dados termodinâmicos para o sistema H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-água a 25 °C, sendo o estado de referência para entalpia a água líquida a 25 °C, são apresentados a seguir.

() m <sub>H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub></sub> /m	Entalpia
( ) 20%	4 kJ mol <sup>-1</sup>
50%	15 kJ mol <sup>-1</sup>
80%	40 kJ mol <sup>-1</sup>
( )	

**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 H<sub>2</sub>O  $C_P(\text{H}_2\text{O}, l) = 75,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Entalpia de fusão do H<sub>2</sub>O  $\Delta H_{\text{fus}}^\circ(\text{H}_2\text{O}) = 6,0 \text{ kJ mol}^{-1}$

## 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:

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

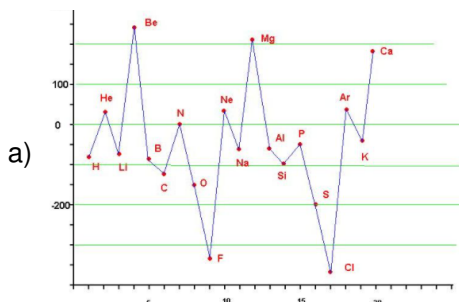
resolvendo o sistema, temos:  $m_1 = 104,148$   $m_2 = 598,963$   $m_3 = 296,889$  Resposta: 104,15g da solução 1 e 598,96g da solução 2.

## 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.

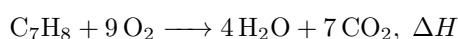
**Considere:**  $\ln(1,30) = 0,26$     $\ln(1,24) = 0,22$     $\ln(1,05) = 0,05$

#### Dados

- Capacidade calorífica do CO<sub>2</sub>  $C_P(\text{CO}_2, \text{g}) = 37,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Capacidade calorífica do H<sub>2</sub>O  $C_P(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = 75,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Capacidade calorífica do H<sub>2</sub>O  $C_P(\text{H}_2\text{O}, \text{g}) = 34,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Capacidade calorífica do tolueno  $C_P(\text{tolueno}, \text{l}) = 160,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Entalpia de formação do CO<sub>2</sub>  $\Delta H_f^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = -390,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entalpia de formação do H<sub>2</sub>O  $\Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = -290,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entalpia de formação do H<sub>2</sub>O  $\Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{g}) = -240,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entalpia de formação do tolueno  $\Delta H_f^\circ(\text{tolueno}, \text{l}) = 12,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
- Entropia do CO<sub>2</sub>  $S^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = 210,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Entropia do H<sub>2</sub>O  $S^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = 70,0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- 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:

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

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:

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

Multiplicando pelo número de mols:

$$\Delta S_{cal} = 0,212 J/K \quad \Delta S_{sist} = \Delta S_{cal} + \Delta S_{jaq} = 0,212 + 12,35 = 12,47 J/K$$

#### 4ª QUESTÃO

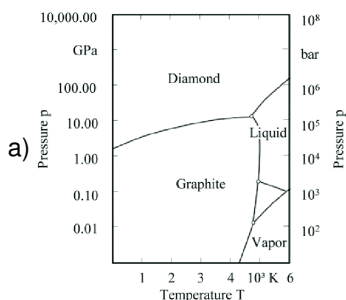
Considere desprezível a variação da entropia e da energia interna com a pressão.

- 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  $27^\circ C$ .
- Explique** por que não se verifica a conversão de diamante em grafite a  $27^\circ C$ .

#### 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



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.

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

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

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

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

Trabalhando com a pressão externa :

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

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

$$\Delta G = 0$$

Assim,

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

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

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

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

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

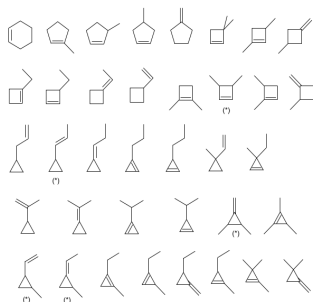
c) Apesar da conversão ser viável à 300K, ela ocorre com velocidade extremamente baixa, portanto não é observada.

## 5ª QUESTÃO

**Apresente** a estrutura de todos os compostos monocíclicos com fórmula molecular  $\text{C}_6\text{H}_{10}$ .

## 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.

- Determine** a fração mássica de trióxido de enxofre na mistura.
- Determine** a densidade da mistura.
- 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:

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

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)**

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

Para calcular a densidade nas CNTP:

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

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

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

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

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

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

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%.

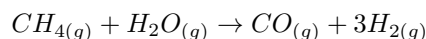
- Determine** a variação de entalpia da reação.
- Determine** a variação de entropia da reação.
- Determine** a temperatura mínima para que a reação de formação do gás de síntese seja espontânea em condições padrão.

### 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:

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

b)

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

de maneira análoga ao item (a) temos que:

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

c) Para que a reação seja espontânea sabemos que

$$\Delta G < 0$$

Mas:

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

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

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

## 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.

- a) **Determine** a composição do produto de topo.
- b) **Determine** a vazão molar de água no produto de fundo.
- c) **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.

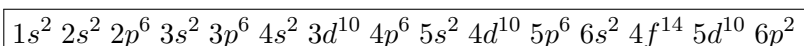
### 9ª QUESTÃO

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

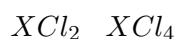
- a) Fazendo a distribuição eletrônica temos:



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

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

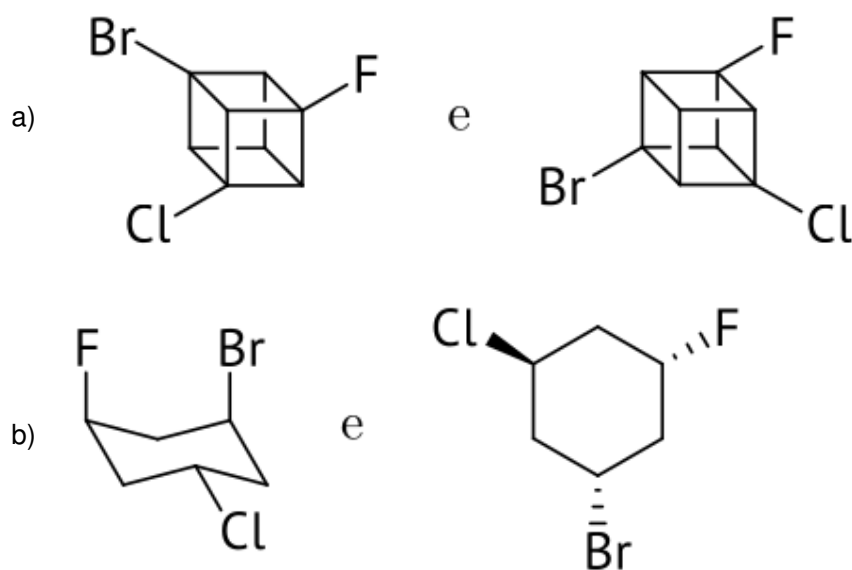
- c) Temos 2 possibilidades de cloreto, uma envolvendo apenas os elétrons do  $6p^2$  e outro envolvendo esses mais os elétrons do  $6s^2$ . Portanto temos 2 possibilidades:

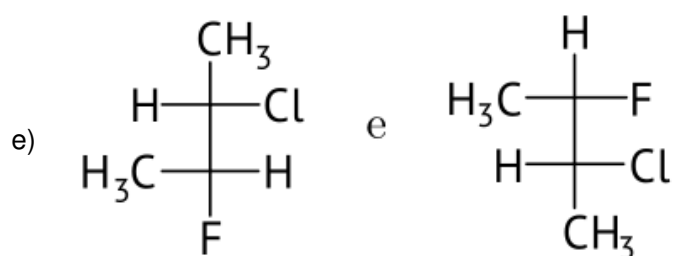
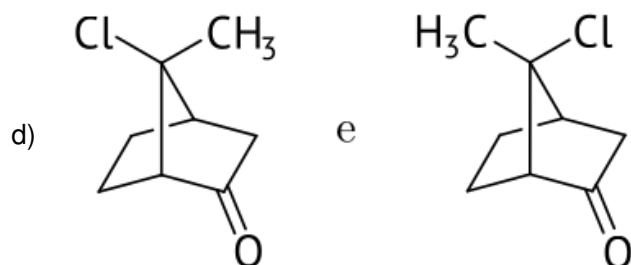
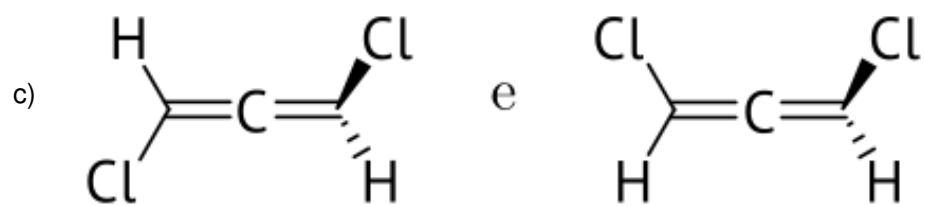


Porém pelo efeito do par inerte, os elétrons do  $6s^2$  recebem uma péssima blindagem dos orbitais  $d$  e  $f$ , dessa forma o par  $6s^2$  sente uma forte atração do núcleo, de modo a dificultar a interação desse par com os íons cloreto, por isso o cloreto mais estável será o  $XCl_2$ .

### 10ª QUESTÃO

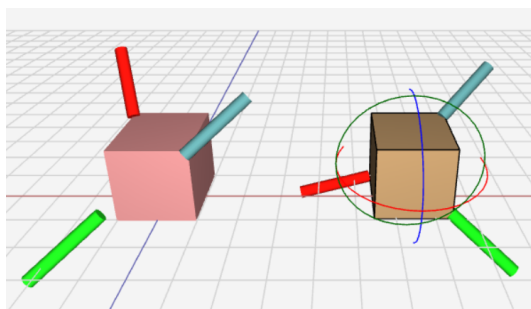
**Estabeleça** a relação entre as estruturas de cada par abaixo, identificando-as como enantiômeros, diastereoisômeros, isômeros constitucionais ou representações diferentes de um mesmo composto.



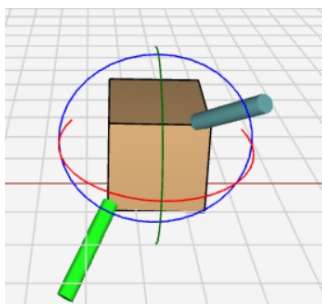


## Gabarito

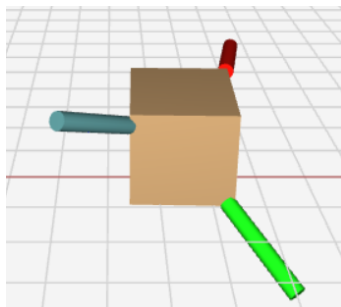
a) Enantiômeros



Girando o segundo cubo 90 graus no eixo vermelho temos:

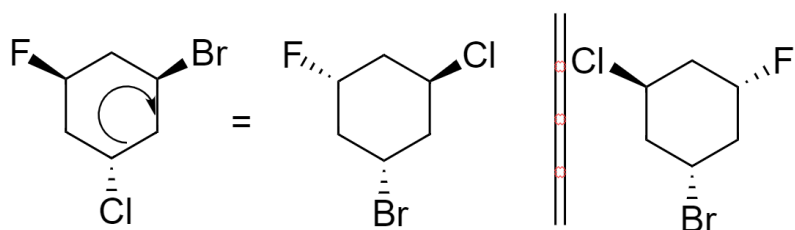


Girando 90 graus no eixo azul temos:

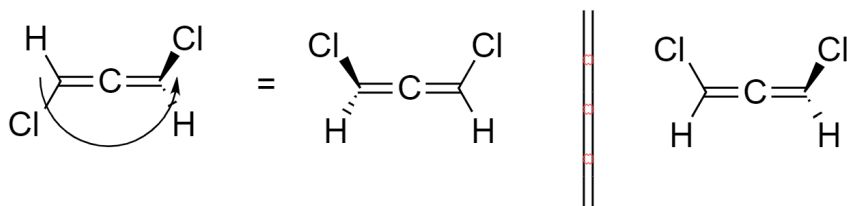


Veja que o resultado final é a imagem especular do primeiro cubo.

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.