

QUI016 (T01) - Química Geral: P2 (Módulos 6, 7 e 9)		Pontuação ↓
Data: 14/07/2025	Questões: 3	Pontos totais: 8
Matrícula: Nome:		

Questão	Pontos	Nota
1	3	
2	2	
3	3	
Total:	8	

Instruções:

1. Justifique todas as suas respostas e entregue as repostas com essa folha anexa.

2. Equações relevantes ($R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$):

(a) **Energia de Gibbs:** $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ e $\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln Q$.

(b) **Equação de Arrhenius:** $k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$.

(c) **Lei de Van't Hoff:** $\ln \frac{K_2}{K_1} = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right) \frac{\Delta H^\circ}{R}$.

1. (3 pontos) O iodeto de hidrogênio ($\text{HI}(\text{g})$) pode ser obtido pela reação entre o hidrogênio ($\text{H}_2(\text{g})$) e iodo ($\text{I}_2(\text{g})$) moleculares. Essa reação estabelece um equilíbrio químico (**Equação 1**). Os valores de entalpia molar padrão de formação e entropia molar padrão – $\Delta_f H_m^\circ$ e S_m° , respectivamente – dos compostos envolvidos estão dispostos na **Tabela 1**.



Tabela 1: Valores de entalpia molar padrão de formação ($\Delta_f H_m^\circ/\text{kJ mol}^{-1}$) e entropia molar padrão ($S_m^\circ/\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$) do $\text{H}_2(\text{g})$, $\text{I}_2(\text{g})$ e $\text{HI}(\text{g})$. Todos os valores foram determinados à 298,15 K.

Composto	$\Delta_f H_m^\circ$ (kJ mol ⁻¹)	S_m° (J K ⁻¹ mol ⁻¹)
$\text{H}_2(\text{g})$	0	130,7
$\text{I}_2(\text{g})$	62,4	260,7
$\text{HI}(\text{g})$	26,5	206,6

- (a) Considerando uma temperatura de 298,15 K e condições-padrão, qual dos dois sentidos da reação é favorecido no equilíbrio químico?

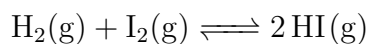
- (b) Visando aumentar o rendimento da reação, um funcionário leigo sugeriu aumentar a temperatura para 500 K, para que a concentração de HI(g) no equilíbrio aumentasse. A afirmação desse funcionário é válida? Qual o valor da nova constante de equilíbrio após o aquecimento?

Resposta:

Na letra (a), deve-se calcular a constante de equilíbrio, K , a partir dos dados termodinâmicos. O valor de K é obtido por uma adaptação da equação **a**, $\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln Q$.

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln Q. \quad \text{No equilíbrio, } \Delta G = 0 \text{ e } Q = K, \text{ logo, } \Delta G^\circ = -RT \ln K$$

O ΔG° é calculado utilizando $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$. Os valores de ΔH° e ΔS° são obtidos pela lei de Hess a partir dos valores na **Tabela 1**. Para tal, é importante balancear a equação química:



$$\Delta_r H^\circ = \sum n \times \Delta_f H^\circ (\text{produtos}) - \sum n \times \Delta_f H^\circ (\text{reagentes})$$

$$\Delta_r H^\circ = [2 \times (26,5 \times 10^3)] - [(1 \times 0) + (1 \times 62,4 \times 10^3)] = -9,4 \times 10^3 \text{ J mol}^{-1}$$

$$\Delta_r S^\circ = \sum n \times S^\circ (\text{produtos}) - \sum n \times S^\circ (\text{reagentes})$$

$$\Delta_r S^\circ = [2 \times (206,6)] - [(1 \times 260,7) + (1 \times 130,7)] = 21,8 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

Então, a equação $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$, à 298,15 K, se torna

$$\Delta G^\circ = (-9,4 \times 10^3) - (298,15)(21,8) = -15,90 \times 10^3 \text{ J mol}^{-1} = -15,90 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Sendo assim, é possível calcular a constante de equilíbrio à 298,15 K:

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K \therefore K = \exp \left(-\frac{\Delta G^\circ}{RT} \right) = \exp \left(-\frac{(-15,90 \times 10^3)}{(8,314)(298,15)} \right) = \exp (6,41) = 610,5$$

Como $K > 1$ à 298,15, o equilíbrio tende à formação dos produtos nessa temperatura.

Na letra (b), é necessário usar a Lei de Van't Hoff para verificar se a constante de equilíbrio irá aumentar ou diminuir após o aumento da temperatura. Para tal, é necessário calcular o $\Delta_r H^\circ$, que foi obtido no item anterior ($-9,4 \text{ kJ mol}^{-1}$). Então, tem-se que

$$\ln \frac{K_2}{K_1} = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \frac{\Delta_r H^\circ}{R}$$

$$\ln \frac{K_2}{(610,5)} = \left(\frac{1}{(298,15)} - \frac{1}{(500)} \right) \frac{(-9,4 \times 10^3)}{(8,314)} = -1,53 \therefore K_2 = 610,5 \times \exp (-1,53) = 132,1$$

Como $K_2 = 132,1 < K_1$, o novo equilíbrio tende menos à formação de produtos. Então, a afirmação do funcionário não é válida. Isso poderia ser previsto, qualitativamente, pelo fato da reação ser exotérmica ($\Delta_r H^\circ < 0$).

2. (2 pontos) A cinética da reação de decomposição do iodeto de hidrogênio (HI(g)) em hidrogênio ($\text{H}_2\text{(g)}$) e iodo ($\text{I}_2\text{(g)}$) moleculares (**Equação 2**) foi analisada à 580 K, visando entender melhor como o processo funciona. Os dados obtidos estão dispostos na **Tabela 2**.



Tabela 2: Dados de pressão parcial de HI(g) ($p(\text{HI(g)})/\text{bar}$) adquirida em diferentes instantes da reação (t/s) de decomposição em $\text{H}_2\text{(g)}$ e $\text{I}_2\text{(g)}$.

t/s	0	$1,0 \times 10^3$	$2,0 \times 10^3$	$3,0 \times 10^3$	$4,0 \times 10^3$
$p(\text{HI(g)})/\text{bar}$	1,0	0,11	0,061	0,041	0,031

Em posse desses dados, você decidiu verificar o comportamento de $p(\text{HI(g)})$ em função do tempo de três modos diferentes, gerando os gráficos dispostos na **Figura 1**.

Sendo assim, mostre a (i) lei de velocidade de reação, (ii) a ordem global da reação e (iii) a constante de velocidade, k .

Resposta:

Os gráficos fornecidos mostram a variação da pressão parcial do HI ($p(\text{HI})$) e valores relacionados ao longo do tempo. Percebe-se que o único gráfico cujos pontos obtidos geram uma reta é o C. Isso é perceptível pelo R^2 ser o mais próximo de 1. Logo, como esse gráfico gerou uma reta e ele relaciona $1/p(\text{HI})$ com t , percebe-se que a reação é de segunda ordem.

Isso se deve pela lei de velocidade integrada, que pode ser deduzida por

$$v = k[\text{A}]^2 = -\frac{d[\text{A}]}{dt} \therefore \frac{1}{[\text{A}]^2} d[\text{A}] = -k dt$$

Para se obter a concentração de A em qualquer tempo t , integra-se em ambos os lados da igualdade:

$$\begin{aligned} \int_{[\text{A}]_0}^{[\text{A}]_t} \frac{1}{[\text{A}]^2} d[\text{A}] &= -k \int_0^t dt \\ -\frac{1}{[\text{A}]} \Big|_{[\text{A}]_0}^{[\text{A}]_t} &= -k t \Big|_0^t \\ \left(\frac{1}{[\text{A}]_0} - \frac{1}{[\text{A}]_t} \right) &= -kt \therefore \frac{1}{[\text{A}]_t} = kt + \frac{1}{[\text{A}]_0} \end{aligned}$$

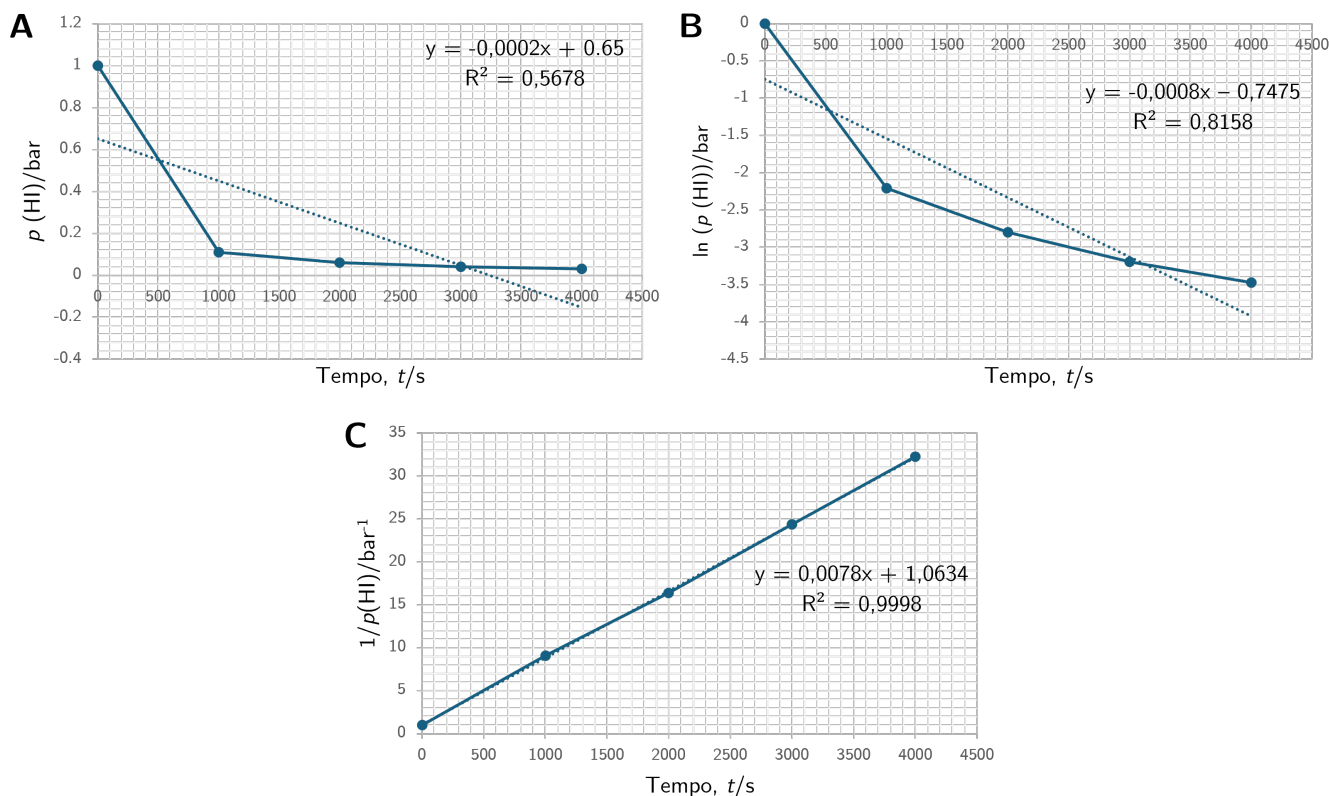


Figura 1: Gráficos de cinética de reação para a decomposição do HI(g). **A** mostra o comportamento de $p(\text{HI})$, **B**, de $\ln(p(\text{HI}))$, e **C**, de $1/p(\text{HI})$ em função do tempo (t/s). Cada gráfico é acompanhado de sua regressão linear, mostrando a equação da reta correspondente e o coeficiente R^2 .

Então, tem-se que, para uma reação com cinética global de ordem 2, o gráfico $1/[A]_t \times t$ dará uma reta crescente com coeficiente angular k . Além disso, pode-se dizer que a lei de velocidade de reação, cuja forma geral é $v = k[A]^2$, assume a forma

$$v = k[\text{HI}]^2$$

Por fim, como o k é o coeficiente angular da reta, ele é igual a 0,0078. A unidade para o k de uma reação de segunda ordem pode ser obtido pela relação $v = k[A]^2$. Como v é sempre dada em $\text{mol L}^{-1} \text{s}^{-1}$ e a concentração, em mol L^{-1} , tem-se que

$$\frac{\text{mol}}{\text{L s}} = k \left(\frac{\text{mol}}{\text{L}} \right)^2 \therefore k = \frac{\text{L}}{\text{mol s}}$$

Ou seja, $k = 0,0078 \text{ L mol}^{-1} \text{s}^{-1}$.

3. (3 pontos) Em uma determinada reação química, que ocorre em uma única etapa, verificou-se que a energia de ativação é igual a 125 kJ mol^{-1} à $298,15 \text{ K}$. Após algumas reuniões com o setor

de P&D, um catalisador foi proposto para a reação e uma fonte confiável apontou uma redução da energia de ativação dessa reação na presença desse catalisador para 75 kJ mol^{-1} à $298,15 \text{ K}$.

Antes de propor a compra desse catalisador para instâncias superiores na empresa, você decidiu verificar se aquecer a reação até 350 K é mais eficiente do que usar o catalisador. De um ponto de vista puramente cinético, é mais eficiente usar o catalisador ou esquentar a reação até 350 K ?

Resposta:

O catalisador, como esperado, diminui a energia de ativação, E_a em uma dada temperatura. Para verificar o impacto dessa diminuição na velocidade da reação, pode-se usar a equação de Arrhenius, $k = \exp(-E_a/RT)$, para descobrir a relação k_2/k_1 :

$$\begin{aligned}\ln k_1 &= -\frac{E_a(1)}{RT} \text{ e } \ln k_2 = -\frac{E_a(2)}{RT} \\ \ln k_2 - \ln k_1 &= \ln \frac{k_2}{k_1} = \left(-\frac{E_a(2)}{RT}\right) - \left(-\frac{E_a(1)}{RT}\right) = \frac{1}{RT} (E_a(1) - E_a(2)) \\ \ln \frac{k_2}{k_1} &= \frac{1}{(8,314)(298,15)} (125 \times 10^3 - 75 \times 10^3) = 20,17 \\ \frac{k_2}{k_1} &= \exp(20,17) = 5,76 \times 10^8\end{aligned}$$

Logo, percebe-se que o uso do catalisador acelera a reação em, aproximadamente, $5,76 \times 10^8$ vezes. Para saber se é mais eficiente usar o catalisador ou esquentar a reação, basta calcular a mesma reação k_2/k_1 para o aquecimento:

$$\begin{aligned}\ln k_1 &= -\frac{E_a}{RT_1} \text{ e } \ln k_2 = -\frac{E_a}{RT_2} \\ \ln k_2 - \ln k_1 &= \ln \frac{k_2}{k_1} = \left(-\frac{E_a}{RT_2}\right) - \left(-\frac{E_a}{RT_1}\right) = \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right) \\ \ln \frac{k_2}{k_1} &= \frac{(125 \times 10^3)}{8,314} \left(\frac{1}{(298,15)} - \frac{1}{(350)}\right) = 7,47 \\ \frac{k_2}{k_1} &= \exp(7,47) = 1,76 \times 10^3\end{aligned}$$

Como a fração k_2/k_1 para o catalisador é, aproximadamente, $3,28 \times 10^5$ vezes maior que para o aquecimento, é mais vantajoso promover a reação catalisada, nesse caso.

Tabela Periódica dos Elementos

18 V III A

1

1.0079

H

Hidrogénio

2

4.0025

He

Hélio

3

6.941

Li

Lítio

4

9.0122

Be

Berílio

5

12.0098

Na

Sódio

6

19.3384

Mg

Magnésio

7

26.9815

Al

Alumínio

8

39.0982

Si

Silício

9

50.9415

P

Fósforo

10

69.723

S

Enxofre

11

72.64

Cl

Cloro

12

79.904

Ar

Argônio

13

83.8

K

Potássio

14

87.62

Ca

Cálcio

15

88.906

Sc

Escândio

16

89.904

Y

Ítrio

17

89.904

Zr

Zircónio

18

91.224

Nb

Nióbio

19

92.906

Mo

Molibdénio

20

95.94

Tc

Tecnécio

21

98.906

Ru

Ruténio

22

101.07

Rh

Ródio

23

102.91

Pd

Paládio

24

106.42

Ag

Prata

25

107.87

Cu

Cobre

26

112.41

Zn

Zinco

27

114.82

Ga

Gálio

28

118.71

Ge

Germanio

29

121.76

As

Arsénio

30

126.9

Se

Selénio

31

127.6

Br

Bromo

32

129.904

Kr

Kriptónio

33

131.29

Xe

Xenónio

34

132.91

Cs

Césio

35

137.33

Ba

Bário

36

138.905

La

Lantânio

37

139.905

Ce

Cério

38

140.12

Pr

Praseodímio

39

140.91

Nd

Neodímio

40

143.91

Pm

Promécio

41

150.92

Sm

Samário

42

151.96

Eu

Európio

43

157.25

Gd

Gadolínio

44

158.93

Tb

Térbio

45

162.50

Dy

Disprósio

46

164.93

Ho

Hólmio

47

167.26

Er

Érbio

48

168.93

Tm

Túlio

49

173.04

Yb

Ítérbio

50

174.97

Lu

Lutécio

51

223

Fr

Frâncio

52

226

Ra

Rádio

53

227

Ac

Actínio

54

232.04

Th

Tório

55

238.03

Pa

Protacténio

56

238.03

U

Urânio

57

238.03

Np

Netúnio

58

244

Pu

Plutónio

59

247

Bk

Berquélio

60

251

Cf

Califórnio

61

252

Es

Ensénio

62

257

Fm

Férmio

63

258

Md

Mendelévio

64

259

No

Nobélio

65

262

Lr

Laurêncio

1

1.0079

H

Hidrogénio

2

4.0025

He

Hélio

3

6.941

Li

Lítio

4

9.0122

Be

Berílio

5

12.0098

Na

Sódio

6

19.3384

Mg

Magnésio

7

26.9815

Al

Alumínio

8

39.0982

Si

Silício

9

50.9415

P

Fósforo

10

69.723

S

Enxofre

11

72.64

Cl

Cloro

12

79.904

Ar

Argônio

13

83.8

K

Potássio

14

87.62

Ca

Cálcio

15

88.906

Sc

Escândio

16

89.904

Y

Ítrio

17

89.904

Zr

Zircónio

18

91.224

Nb

Nióbio

19

92.906

Mo

Molibdénio

20

95.94

Tc

Tecnécio

21

98.906

Ru

Ruténio

22

101.07

Rh

Ródio

23

102.91

Pd

Paládio

24

106.42

Ag

Prata

25

107.87

Cu

Cobre

26

112.41

Zn

Zinco

27

114.82

Ga

Gálio

28

118.71

Ge

Germanio

29

121.76

As

Arsénio

30

126.9

Se

Selénio

31

127.6

Br

Bromo

32

129.904

Kr

Kriptónio

33

131.29

Xe

Xenónio

34

132.91

Cs

Césio

35

137.33

Ba

Bário

36

138.905

La

Lantânio

37

139.905

Ce

Cério

38

140.12

Pr

Praseodímio

39

140.91

Nd

Neodímio

40

143.91

Pm

Promécio

41

150.92

Sm

Samário

42

151.96

Eu

Európio

43

157.25

Gd

Gadolínio

44

158.93

Tb

Térbio

45

162.50

Dy

Disprósio

46

164.93

Ho

Hólmio

47

167.26

Er

Érbio

48

168.93

Tm

Túlio

49

173.04

Yb

Ítérbio

50

174.97

Lu

Lutécio

51

223

Fr

Frâncio

52