QUI016 (T01) - Química Geral: P1 (Módulos 1 a 4)			Pontuação ↓
Data: 08/05/2024	Questões: 4	Pontos totais: 8	
Matrícula:	Nome:		

Questão	Pontos	Nota
1	2	
2	2	
3	2	
4	2	
Total:	8	

Instruções:

- 1. Justifique todas as suas respostas e entregue as repostas manuscritas com essa folha anexa.
- 2. Equações relevantes:
 - (a) Equação dos gases ideais: pV = nRT e $R = 0.082\,057$ L atm K⁻¹ mol⁻¹, $R = 8.314\,462$ J K⁻¹ mol⁻¹ e $R = 0.083\,145$ L bar K⁻¹ mol⁻¹.
- 1. (2 pontos) O diagrama de orbitais moleculares do O_2 (oxigênio molecular ou gás oxigênio) é mostrado na **Figura 1**.

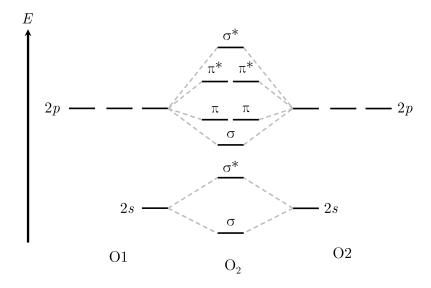
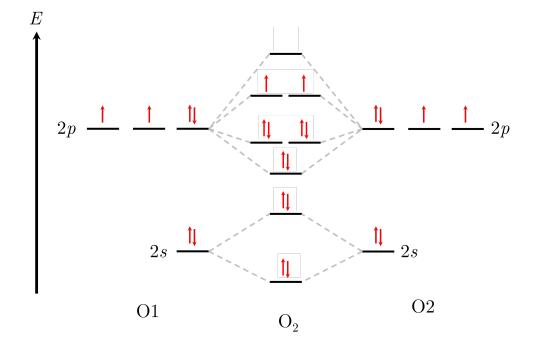


Figura 1: Diagrama de orbitais moleculares do O_2 .

Preencha o diagrama, mostre qual a ordem de ligação do O_2 e determine se o composto é paramagnético ou diamagnético. Essas propriedades poderiam ser previstas pela Teoria de Ligação de Valência (TLV)?

Resposta:

O diagrama preenchido de orbitais moleculares do O₂ está mostrado abaixo.



Como se pode perceber, a configuração eletrônica do O_2 é $1s^22s^22p^4$, pois está na família 16 da Tabela Periódica. Ao todo, são 4 elétrons dos orbitais 2s e 8 elétrons dos orbitais 2p, distribuídos de acordo com o princípio *auf bau* (Regra de Madelung, Regra de Hund e Princípio da Exclusão de Pauli).

De acordo com o diagrama preenchido, os dois orbitais moleculares degenerados π^* são preenchidos, cada um, com um elétron. Isso faz com que a molécula possua elétrons desemparelhados e, portanto, seja paramagnética. Essa propriedade não poderia ser prevista pela TLV, pois não contempla elétrons desemparelhados para espécies que não sejam radicais livres. Além disso, considerando os elétrons em orbitais ligantes e antiligantes, tem-se que

$$OL = \frac{e^- \text{ (ligantes)} - e^- \text{ (antiligantes)}}{2} = \frac{8-4}{2} = 2$$

Ou seja, a ordem de ligação do O₂ é igual a 2, caracterizando uma ligação dupla entre os átomos. Essa propriedade poderia ser prevista, em partes, pela TLV, pois a fórmula de Lewis correta para o composto contém uma ligação O=O. Porém, é válido lembrar que a TLV não contempla orbitais antiligantes.

2. (2 pontos) O comprimento médio da ligação simples entre os átomos de carbono (C) e oxigênio (O), C-O, é igual a 140 pm e da ligação dupla entre eles, C=O, é igual a 120 pm. Experimentalmente, verificou-se que o comprimento das ligações entre o átomo de carbono e os de oxigênio no ânion carbonato (CO₃²⁻) é igual a 128 pm. Mostre a hibridação do átomo de carbono e justifique o comprimento de ligação observado.

Resposta:

A fórmula de Lewis correta para o ânion carbonato (CO₃²⁻) é dada na estrutura abaixo:

Como o átomo central não possui nenhum par de elétrons não ligantes está ligado a três átomos, ele possui geometria trigonal plana e, portanto, hibridação do tipo sp². Além disso, a fórmula de Lewis do ânion carbonato pode ser descrita de três formas diferentes, enumerando os átomos de oxigênio como 1, 2 e 3:

Então, pode-se considerar que essas três estruturas de Lewis são, na verdade, formas canônicas que são representações parciais da estrutura do ânion carbonato, melhor descrita pelo híbrido de ressonância:

Logo, como o híbrido de ressonância mostra que as ligações entre o carbono e qualquer um dos oxigênios é uma ligação dupla parcial, ou seja, com comprimento de ligação intermediário entre dupla e simples, o comprimento experimental, 128 pm, é justificado, pois está entre 120 pm e 140 pm.

3. (2 pontos) A reação de combustão de 75,0 g de cicloexilmetanol ($C_6H_{14}O$) gerou 98,25 L de CO_2 . O volume de CO_2 foi determinado à 27,0 °C e 760 mmHg. Qual é o rendimento percentual ($\eta_{\%}$) da reação de combustão? Considere que a densidade do CO_2 é $\rho = 1,771$ g L⁻¹ à 27,0 °C.

Resposta:

Aplicando a lei geral dos gases, pV=nRT aos dados obtidos para o gás – 98,25 L, 300,15 K e 1 atm (760 mmHg) –, tem-se que:

$$pV = nRT : (1 \text{ atm})(98,25 \text{ L}) = n(0,082057 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1})(300,15 \text{ K})$$

$$n = \frac{(1 \text{ atm})(98,25 \text{ L})}{(0.082057 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1})(300,15 \text{ K})} = 3,989 \text{ mol}$$

Ou seja, 3,989 mol de CO₂ foram produzidos na combustão.

A combustão do cicloexilmetanol $(C_6H_{14}O)$ é equacionada da seguinte forma:

$$C_6H_{14}O(l) + 9O_2(g) \longrightarrow 6CO_2(g) + 7H_2O(l)$$

Ou seja, cada 1 mol de $C_6H_{14}O$ produz 6 mols de CO_2 . Dessa forma, considerando que a massa molar do $C_6H_{14}O$ é 102,1756 g mol⁻¹, tem-se que:

$$M = \frac{m}{n}$$
 : $n = \frac{m}{M} = \frac{(75,0 \text{ g})}{(102,1756 \text{ g mol}^{-1})} = 0,734 \text{ mol}$

$$\eta_{\mathrm{te\'orico}} = 6 \times 0.657 = 4.404 \text{ mol}$$

Dessa forma, tem-se o rendimento teórico – 4,404 mol – e o experimental – 3,989 mol. Então, o rendimento percentual, $\eta_{\%}$, será

$$\eta_{\%} = \frac{\eta_{\text{experimental}}}{\eta_{\text{teórico}}} \times 100 \% = \frac{(3,989 \text{ mol})}{(4,404 \text{ mol})} \times 100 \% = 90,57 \%$$

4. (2 pontos) A **Figura 2** mostra um gráfico que relaciona o fator de compressibilidade (Z) do CO_2 à 325 K e 500 K e de um gás ideal em diferentes pressões (p, atm). Justifique (i) a diferença entre o comportamento do CO_2 nas duas temperaturas e (ii) o desvio do comportamento do CO_2 em relação ao de um gás ideal.

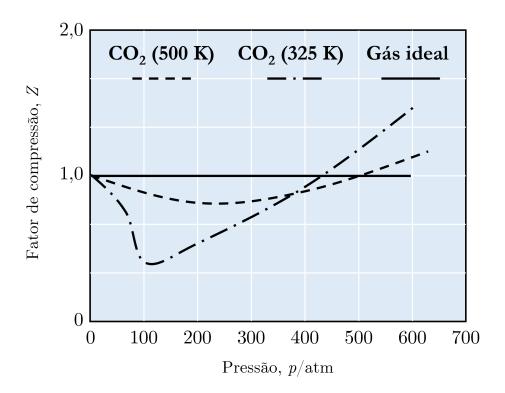


Figura 2: Fator de compressibilidade do CO_2 à 325 K $(-\cdot -)$ e 500 K (---), e de um gás ideal (--) submetidos à diferentes pressões (p, atm).

Resposta:

O gás carbônico (CO₂) possui comportamento claramente diferente de um gás ideal, como mostrado no gráfico, por dois motivos principais: o gás ideal não considera atrações intermoleculares entre as moléculas de gases, diminuindo sua pressão efetiva, e não considera o tamanho individual das partículas, aumentando seu volume individual. Dessa forma, ao tratar o CO₂ como um gás real, a curva do fator de compressão, Z = pV/nT, apresenta um desvio do gás real.

Além disso, percebe-se que o comportamento do CO₂ à 500 K se aproxima mais ao de um gás ideal quando comparado ao comportamento à 325 K. Isso manifesta na maior semelhança entre as curvas apra 500 K. O motivo da maior semelhança do comportamento ideal à altas temperaturas se deve ao fato de, nessa condição, uma maior fração de moléculas de CO₂ possuírem energia cinética elevada a ponto da força das atrações intermoleculares ser menos influente. Então, como a influência das atrações intermoleculares é menor, o comportamento do gás real se assemelha mais ao do gás ideal.

