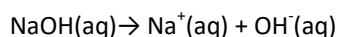


01. Considere a reação entre acetato de etila e hidróxido de sódio em meio aquoso como sendo irreversível. Uma forma simples de estudar a cinética dessa reação é acompanhar, com o uso de um condutivímetro, a condutividade do meio reacional, dada pelo inverso da resistividade e geralmente denotada por Ψ , em $S \cdot cm^{-1}$. Tal condutividade é relacionada, quantitativamente, à concentração das espécies iônicas, Na^+ , OH^- e acetato, em solução, cujas condutividades molares, em $S \cdot L \cdot (cm \cdot mol)^{-1}$, serão denotadas aqui, respectivamente, por λ_N , λ_O e λ_A . A condutividade de um meio é dada, portanto, pela soma dos produtos entre a concentração de cada espécie iônica e sua correspondente condutividade.

Foi preparada uma mistura contendo, inicialmente, $C_0 \text{ mol} \cdot L^{-1}$ de hidróxido de sódio e acetato de etila em ligeiro excesso. Determine uma expressão para a concentração do íon acetato em função de Ψ , λ_N , λ_O , λ_A e C_0 .

Solução:

O hidróxido de sódio presente na solução está completamente dissociado:



Assim, as concentrações iniciais de $Na^+(aq)$, $OH^-(aq)$ e de $CH_3COOCH_2CH_3(aq)$ são iguais a C_0

A reação química pode ser expressa, na forma iônica, por:

Concentrações	$CH_3COOCH_2CH_3(aq)$	$+ OH^-(aq)$	\rightarrow	$CH_3COO^-(aq)$	$+ CH_3CH_2OH(aq)$
Início t=0	C_0	C_0		-	-
Reação	-n	-n		+n	+n
Instante t	$C_0 - n$	$C_0 - n$		+n	+n

Os cátions sódio permanecem na solução e não participam do processo.

Apenas as espécies iônicas contribuem para a condutividade elétrica da solução no instante t.

Assim: $\Psi = C_0 \cdot \lambda_N + (C_0 - n) \cdot \lambda_O + n \cdot \lambda_A$

A concentração do íon acetato, n, num instante qualquer será dada por:

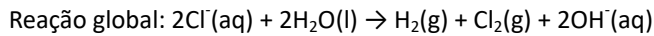
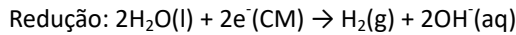
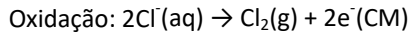
$$\frac{(\Psi - C_0 \cdot \lambda_N - C_0 \cdot \lambda_O)}{\lambda_A - \lambda_O} = n = [CH_3COO^-(aq)]$$

02. Uma célula eletrolítica dotada de eletrodos de platina é preenchida com 1 L de uma solução 4 M de NaCl puro em água bidestilada. Em seguida, faz-se percorrer pela mesma, por 5 horas, 21 minutos e 40 segundos, uma corrente de 5 A, ocorrendo desprendimento de cloro e hidrogênio. Decorrido o tempo mencionado, a corrente é desligada e a solução remanescente é evaporada, obtendo-se um resíduo sólido. Calcule a massa do resíduo obtido.

Solução:

1L da solução inicial contém 4 mols de NaCl.

Durante a eletrólise ocorrem as semirreações a seguir:



Como resultado da liberação dos gases na eletrólise, há formação de NaOH(aq) na fase líquida.

Pela estequiometria da reação, cada mol de elétron que circula no circuito retira 1 mol de $\text{Cl}^-(\text{aq})$ e adiciona 1 mol de $\text{OH}^-(\text{aq})$ na solução.

$$Q = i \cdot \Delta t = 5\text{A} \cdot (5 \cdot 3600 + 21 \cdot 60 + 40)\text{s} = 5 \cdot 19300\text{C} = 96500\text{C}$$

$$\text{O número de mols de elétrons que circulou no circuito é } n_e = Q/F = 19300/96500 = 1,00 \text{ mol}$$

Assim, durante a eletrólise foi retirado 1,00 mol de $\text{Cl}^-(\text{aq})$ e foi adicionado 1,00 mol de $\text{OH}^-(\text{aq})$ na solução.

Houve, portanto, formação de 1,00 mol de NaOH(aq).

A quantidade de NaCl(aq) remanescente na solução é de $4 - 1 \text{ mol} = 3 \text{ mol}$.

Após a evaporação do solvente, haverá no resíduo sólido 3 mol de NaCl(s) e 1 mol de NaOH(s).

$$m_{\text{sólido}} = n_{\text{NaOH}} M_{\text{NaOH}} + n_{\text{NaCl}} M_{\text{NaCl}}$$

$$m_{\text{sólido}} = 1 \cdot 40 + 3 \cdot 58,5 = 215,5\text{g}$$

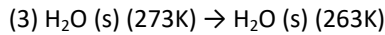
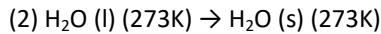
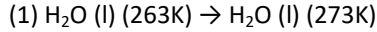
03. Sob determinadas condições, a água pode ser super-resfriada, ou seja, permanecer no estado líquido em temperaturas inferiores ao seu ponto de congelamento, em uma situação termodinamicamente instável. Considere um processo em que 5,0 mol de água super-resfriada a -10°C e 1,0 atm sejam convertidos em gelo à mesma temperatura. Determine a variação de entropia:

- a) do sistema;
- b) na vizinhança; e
- c) do universo.

Solução:

a)

O processo $\text{H}_2\text{O}(\text{l}) (263\text{K}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{s}) (263\text{K})$ pode ser dividido em três etapas:



Etapa 1: $\text{H}_2\text{O}(\text{l}) (263\text{K}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{l}) (273\text{K})$

$$\Delta H_1 = n \cdot C_p(\text{l}) \cdot \Delta T = 5,76 \cdot 10 = +3800\text{J}$$

$$\Delta S_1 = n \cdot C_p(\text{l}) \cdot \ln(T_f/T_i) = +380 \cdot \ln(273/263) \text{ J/k}$$

Etapa 2: $\text{H}_2\text{O}(\text{l}) (273\text{K}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{s}) (273\text{K})$

$$\Delta H_2 = -n \cdot \Delta H_{\text{fusão}} = -5 \cdot 6000 = -30000 \text{ J}$$

$$\Delta S_2 = -n \cdot \Delta H_{\text{fusão}} / T_{\text{fusão}} = -109,89 \text{ J/k}$$

Etapa 3: $\text{H}_2\text{O}(\text{s}) (273\text{K}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{s}) (263\text{K})$

$$\Delta H_3 = n \cdot C_p(\text{s}) \cdot \Delta T = 5,38 \cdot (-10) = -1900\text{J}$$

$$\Delta S_3 = n \cdot C_p(\text{s}) \cdot \ln(T_f/T_i) = 190 \cdot \ln(263/273) \text{ J/k}$$

Então:

$$\Delta H_{\text{sistema}} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 = -28100\text{J}$$

$$\Delta S_{\text{sistema}} = \Delta S_1 + \Delta S_2 + \Delta S_3 = +380 \cdot \ln(273/263) + (-109,89) + 190 \cdot \ln(263/273) = -109,89 + 190 \cdot \ln(273/263) = -102,8\text{J/k}$$

b)

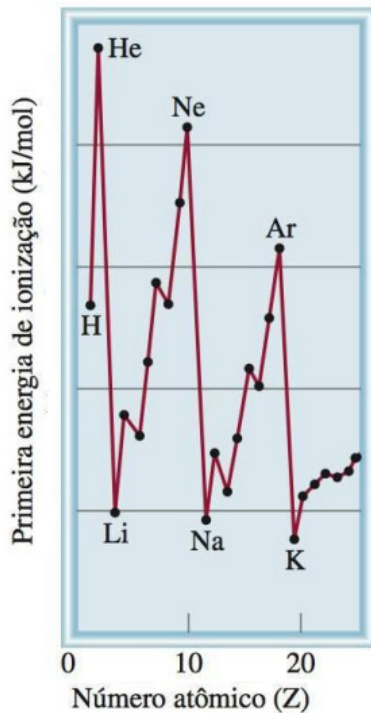
$$\Delta S_{\text{vizinhança}} = Q_{\text{vizinhança}}/T = -\Delta H_{\text{sistema}}/T = 28100/263 = +106,8\text{J/k}$$

$$\text{c) } \Delta S_{\text{universo}} = \Delta S_{\text{vizinhança}} + \Delta S_{\text{sistema}} = +106,8 - 102,8 = +4,0\text{J/k}$$

04. Os elementos do 2º e 3º períodos da tabela periódica apresentam desvios da tendência em suas curvas da energia de ionização em função do número atômico. Com relação a esses elementos:

- esboce qualitativamente o gráfico da energia de ionização em função do número atômico; e
- explique esses desvios de forma sucinta, baseado na estrutura eletrônica e no preenchimento dos orbitais atômicos.

Solução:



Como regra geral, a primeira energia de ionização é inversamente proporcional ao raio atômico e diretamente proporcional à carga nuclear efetiva percebida pelos elétrons da camada de valência do átomo. Assim, quanto menor o raio, maior a energia de ionização e quanto maior a carga nuclear efetiva percebida pelo elétron de valência, maior será a energia de ionização.

Portanto, a primeira energia de ionização de um elemento, localizado no segundo período, de dado grupo da tabela periódica é maior do que a primeira energia de ionização de outro elemento, do mesmo grupo, que está posicionado no terceiro período da tabela periódica.

Comparando elementos do mesmo período na tabela periódica, o aumento da carga nuclear, na sequência da esquerda para a direita, provoca, em regra o aumento da energia de ionização. Entretanto há algumas exceções relacionadas a orbitais completamente preenchidos ou semipreenchidos.

As distribuições terminadas em ns^2 possuem primeira energia de ionização maior do que as distribuições terminadas em $ns^2 np^1$. O fenômeno ocorre porque a distribuição com orbital s totalmente preenchido corresponde a arranjo mais estável para os elétrons. Já a distribuição $ns^2 np^1$ possui elétron no orbital p com maior distância em relação ao núcleo e com boa blindagem nuclear fornecida pelos elétrons anteriormente distribuídos. Assim, a primeira energia de ionização fica menor neste último caso.

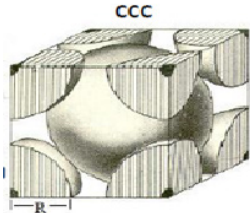
As distribuições terminadas em $ns^2 np^3$ possuem primeira energia de ionização maior do que as distribuições terminadas em $ns^2 np^4$. O fenômeno ocorre porque a distribuição com orbital p semipreenchido corresponde a arranjo mais estável para os elétrons. Já a distribuição $ns^2 np^4$ possui elétron no orbital p spin contrário aos demais, o que aumenta a repulsão eletrônica. Assim, a primeira energia de ionização fica menor para a distribuição terminada em $ns^2 np^4$.

05. Suponha um sólido metálico formado por um único elemento que apresenta uma estrutura de empacotamento cúbica de corpo centrado à pressão atmosférica. Ao ser comprimido, esse sólido adota uma estrutura cúbica de face centrada. Considerando os átomos como esferas rígidas, calcule a razão entre as densidades do sólido antes e depois da compressão.

Solução:

Seja R , o raio do átomo.

Para a estrutura de empacotamento CCC, tem-se que a célula unitária é dada por:



Assim, cada célula possui dois átomos inteiros e a diagonal do cubo é igual a 4 vezes o raio dos átomos.

$$a\sqrt{3} = 4R$$

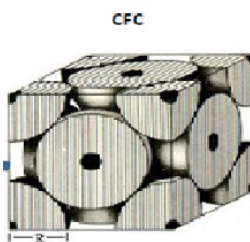
$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

$$V_{CCC} = a^3 = \frac{64R^3}{3\sqrt{3}}$$

A densidade do sólido é dada pela razão entre a massa dos átomos contidos na célula e o volume desta.

$$d_{CCC} = \frac{m_{CCC}}{V_{CCC}} = \frac{2 \cdot m_{\text{átomo}}}{\frac{64R^3}{3\sqrt{3}}}$$

Para a estrutura de empacotamento CFC, tem-se que a célula unitária é dada por:



Assim, cada célula possui quatro átomos inteiros e a diagonal da face é igual a 4 vezes o raio dos átomos.

$$a\sqrt{2} = 4R$$

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$

$$V_{CFC} = a^3 = \frac{64R^3}{2\sqrt{2}}$$

A densidade do sólido é dada pela razão entre a massa dos átomos contidos na célula e o volume desta.

$$d_{CFC} = \frac{m_{CFC}}{V_{CFC}} = \frac{4 \cdot m_{\text{átomo}}}{\frac{64R^3}{2\sqrt{2}}}$$

Então:

$$\frac{d_{CCC}}{d_{CFC}} = \frac{\frac{2 \cdot m_{\text{átomo}}}{\frac{64R^3}{3\sqrt{3}}}}{\frac{4 \cdot m_{\text{átomo}}}{\frac{64R^3}{2\sqrt{2}}}} = \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2}} = \frac{3\sqrt{6}}{8} \cong 0,919$$

- 06.** A intensidade das emissões radioativas pode ser expressa em curie (Ci), unidade definida como $3,7 \times 10^{10}$ desintegrações nucleares por segundo. Considere um tanque que armazena 50.000 L de um rejeito radioativo aquoso desde 1945, o qual contém o isótopo ^{137}Cs , cuja cinética de desintegração radioativa é considerada como de primeira ordem. A meia vida do ^{137}Cs é de 30,1 anos e sua radioatividade específica é de 86,6 Ci/g. Se em 2010 a concentração de ^{137}Cs neste rejeito aquoso era de $1,155 \times 10^{-3}$ g/L, determine:
- a fração percentual em massa de ^{137}Cs que deverá ter decaído para que o nível de radioatividade a ele relacionada seja de $1,0 \times 10^{-3}$ Ci/L; e
 - a concentração em g/L de ^{137}Cs no tanque quando o rejeito foi inicialmente estocado, considerando que o volume do rejeito tenha sido constante ao longo do tempo.

Solução:

No ano de 2010:

$$\text{massa } ^{137}\text{Cs} = 1,155 \cdot 10^{-3} \text{ g/L} \cdot 50000 \text{ L} = 57,75 \text{ g}$$

$$\text{nível de radioatividade } ^{137}\text{Cs} = 1,155 \cdot 10^{-3} \text{ g/L} \cdot 86,6 \text{ Ci/g} = 1,00 \cdot 10^{-1} \text{ Ci/L}$$

a) Para nível de radioatividade atingir $1,0 \cdot 10^{-3}$ Ci/L

O nível de radioatividade residual é 1% do nível presente em 2010.

Assim, deve ter ocorrido decaimento de 99% da amostra presente em 2010.

b) Considerando a informação sobre o tempo de meia-vida do ^{137}Cs :

$$\frac{m_{2010}}{m_{1945}} = 2^{-\frac{\Delta t}{t_{1/2}}}$$

$$m_{2010} \cdot 2^{\frac{\Delta t}{t_{1/2}}} = m_{1945}$$

$$m_{1945} = 57,75 \cdot 2^{\frac{65}{30,1}} = 57,75 \cdot 4,466 = 257,9 \text{ g}$$

Concentração do ^{137}Cs em 1945:

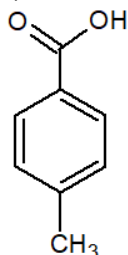
$$C_{1945} = \frac{m_{1945}}{V} = \frac{257,9 \text{ g}}{50000 \text{ L}} = 5,158 \cdot 10^{-3} \text{ g/L}$$

07. Escreva a fórmula estrutural plana do produto majoritário da mononitração, via substituição eletrofílica aromática, para cada reagente indicado abaixo:

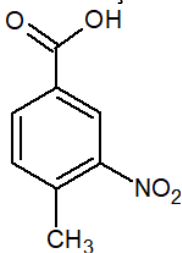
- a) ácido p-toluico (ácido 4-metilbenzoico);
- b) p-cresol (4-metilfenol);
- c) p-tolunitrila (4-metilbenzonitrila);
- d) m-xileno (1,3-dimetilbenzeno); e
- e) 2,6-difluoroacetanilida (N-(2,6-difluorofenil) etanamida);

Solução:

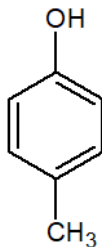
a) Ácido 4-metilbenzoico:



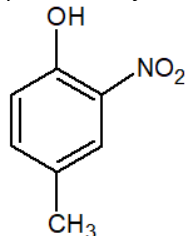
A carboxila é um grupo desativador do anel, enquanto que o grupo metila é ativador. Grupo ativador tem precedência sobre desativador na determinação da posição de substituição. Como o grupo metila é orientador orto-para, o produto majoritário da mononitração é:



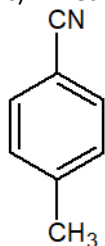
b) 4-metilfenol:



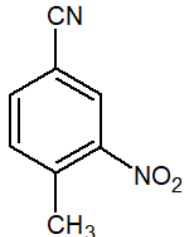
A hidroxila é um ativador forte e o grupo metila é um ativador fraco. Quando dois grupos ativadores diferentes estão presentes no anel benzênico, o grupo ativador mais forte determina o resultado da substituição. Como o grupo hidroxila é orientador orto-para, o produto majoritário da mononitração é:



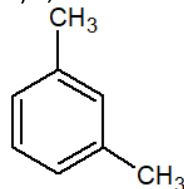
c) 4-metilbenzonitrila:



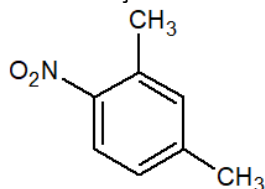
O grupo nitrila é desativador do anel, enquanto que o grupo metila é ativador. Grupo ativador tem precedência sobre desativador na determinação da posição de substituição. Como o grupo metila é orientador orto-para, o produto majoritário da mononitração é:



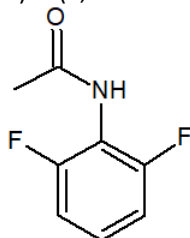
d) 1,3-dimetilbenzeno:



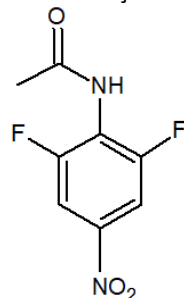
O grupo metila é orientador orto-para. Efeitos estéricos também são importantes em substituições aromáticas. A substituição não ocorre em uma extensão apreciável entre substituintes meta se outra posição está disponível. Logo, o produto majoritário da mononitração é:



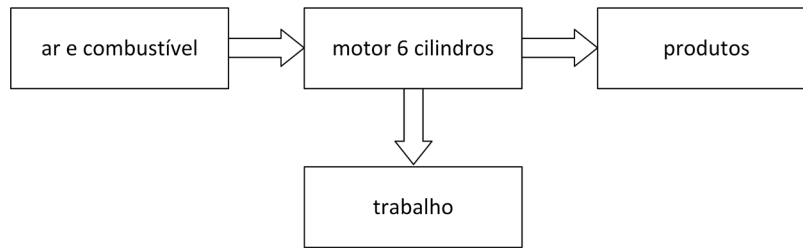
e) N-(2,6-difluorofenil)etanamida:



O grupo amida é ativador do anel, enquanto que o flúor é desativador. Grupo ativador tem precedência sobre desativador na determinação da posição de substituição. Como o grupo amida é orientador orto-para, o produto majoritário da mononitração é:



08. Um motor de 6 cilindros e volume total de 5.700 cm^3 , utilizado em viaturas leves e blindadas, consome $0,5\text{g}$ do combustível gasoso de composição média C_8H_{18} , em cada cilindro, por segundo de operação.



Considerações:

- o ciclo termodinâmico do motor compreende o funcionamento em 4 tempos: admissão, compressão, combustão e exaustão (escape);
- o motor executa 10 ciclos por segundo, ou seja, a mistura de ar e combustível enche os cilindros e depois é comprimida 10 vezes por segundo;
- a mistura ar e combustível é introduzida à temperatura de 100°C , até que a pressão seja de 1atm em cada cilindro;
- $20,0\%$ da quantidade de combustível sofre combustão incompleta, sendo convertida em $\text{CO}(\text{g})$;
- $80,0\%$ da quantidade de combustível sofre combustão completa, sendo convertida em $\text{CO}_2(\text{g})$;
- a mistura de ar e combustível comporta-se como gás ideal;
- as capacidades caloríficas molares são independentes da temperatura; e
- as entalpias de formação a 25°C .

Determine:

- a vazão da entrada de ar no motor, em m^3/s ; e
- a composição percentual molar dos produtos e a temperatura de combustão, em K.

Solução:

A cada segundo de operação do motor, a vazão de combustível consumido é:

$$\dot{m} = 6 \text{ cilindros} \cdot \frac{0,5\text{g s}^{-1}}{\text{cilindro}} = 3,0\text{g s}^{-1}$$

Considerando a massa molar do combustível, a vazão, em mols, é:

$$\dot{n} = \frac{\dot{m}}{M} = \frac{3,0}{114,0} \text{ mol/s} = 2,63 \cdot 10^{-2} \text{ mol/s}$$

O motor realiza 10 ciclos de operação por segundo. Considerando que o volume do motor (6 cilindros) é $5,700\text{L}$, a vazão de mistura ar-combustível admitida é de $5,700 \cdot 10\text{L/s}$. A admissão da mistura ocorre a 100°C e 1atm . Nessas condições, o volume molar de um gás perfeito é $\bar{V} = 30,586\text{L/mol}$.

Vazão de combustível: $P\dot{V}_{comb} = \dot{n}RT$

$$\dot{V}_{comb} = \frac{\dot{n}RT}{P} = \frac{3,0 \cdot 0,082 \cdot 373}{114,0 \cdot 1} = 0,805\text{L/s}$$

Assim a vazão de ar admitida no motor é dada por:

$$\dot{V}_{ar\ total} = \dot{V}_{mistura} - \dot{V}_{comb} = 57,000 - 0,805 = 56,195\text{L/s} = 5,62 \cdot 10^{-2} \text{m}^3/\text{s}$$

Considerando a vazão molar de ar admitida, tem-se:

$$\dot{n}_{ar\ total} = \frac{\dot{V}_{ar\ total}}{\bar{V}} = 1,837 \text{ mol/s}$$

Composição do ar: $79\% \text{N}_2(\text{g})$ e $21\% \text{O}_2(\text{g})$

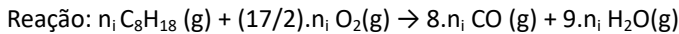
$$\dot{n}_{\text{N}_2\ total} = 0,79 \cdot \dot{n}_{ar\ total} = 1,451 \text{ mol/s}$$

$$\dot{n}_{\text{O}_2\ total} = 0,21 \cdot \dot{n}_{ar\ total} = 0,386 \text{ mol/s}$$

Durante a combustão, o $\text{N}_2(\text{g})$ não é consumido e apenas uma fração do oxigênio admitido é consumida.

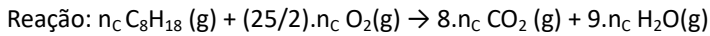
Combustão incompleta (20% do combustível)

$$\dot{n}_i = 0,20 \cdot \dot{n} = 5,26 \cdot 10^{-3} \text{ mol/s}$$

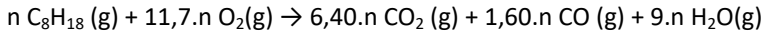


Combustão completa (80%)

$$\dot{n}_c = 0,80 \cdot \dot{n} = 2,11 \cdot 10^{-2} \text{ mol/s}$$



Combinando as duas equações em uma única expressão:



Como resultado da combustão, tem-se que todo o combustível é consumido.

Ocorre formação dos produtos, nas seguintes taxas:

$$n_{\text{CO}_2} = 6,40 \cdot \frac{3,0}{114,0} = +0,168 \text{ mol/s}$$

$$n_{\text{CO}} = 1,60 \cdot \frac{3,0}{114,0} = +0,042 \text{ mol/s}$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = 9,00 \cdot \frac{3,0}{114,0} = +0,237 \text{ mol/s}$$

A quantidade de oxigênio consumida na combustão é:

$$n_{\text{O}_2 \text{ comb}} = 11,7 \cdot \frac{3,0}{114,0} = -0,308 \text{ mol/s}$$

Considerando a quantidade inicial de oxigênio, verifica-se que, ao final da combustão haverá quantidade residual:

$$n_{\text{O}_2 \text{ residual}} = \dot{n}_{\text{O}_2 \text{ total}} - \dot{n}_{\text{O}_2 \text{ comb}} = 0,078 \text{ mol/s}$$

A cada segundo de operação do motor, a mistura gasosa formada ao final da combustão é:

Espécie	n (mol)	Fração molar - $X_i = n_i / \sum n_i$	%
CO ₂	0,168	0,0850	8,50
CO	0,042	0,0213	2,13
H ₂ O	0,237	0,1199	11,99
O ₂ residual	0,078	0,0395	3,95
N ₂ residual	1,451	0,7343	73,43
$\sum n_i$	1,976	1,0000	100,00

Cálculo da temperatura de combustão

Considerando a queima de um mol de combustível nas condições do problema e as entalpias de formação fornecidas:

$$\Delta H = 6,40 \cdot H_f \text{CO}_2 (\text{g}) + 1,60 \cdot H_f \text{CO} (\text{g}) + 9 \cdot H_f \text{H}_2\text{O}(\text{g}) - H_f \text{C}_8\text{H}_{18} (\text{g}) = 6,40 \cdot (-393,51) + 1,60 \cdot (-110,53) + 9 \cdot (-241,82) - 1 \cdot (-208,45)$$

$$\Delta H = -4663,24 \text{ KJ/mol de combustível}$$

$$\Delta H_{\text{reação}} = \dot{n} \cdot \Delta H = -122,72 \text{ KJ/s}$$

O calor liberado na combustão aquece os gases presentes na exaustão do motor:

$$Q = |\Delta H_{\text{reação}}| = \Delta T \cdot (n_{\text{CO}_2} \cdot C_p \text{CO}_2 + n_{\text{CO}} \cdot C_p \text{CO} + n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot C_p \text{H}_2\text{O} + n_{\text{O}_2} \cdot C_p \text{O}_2 + n_{\text{N}_2} \cdot C_p \text{N}_2)$$

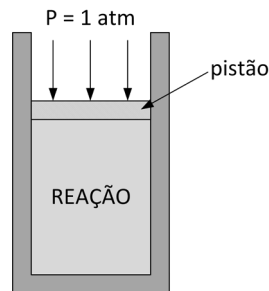
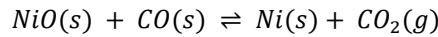
Espécie	n (mol)	Cp (J/mol.K)	n.Cp
CO ₂	0,168	37,11	6,234
CO	0,042	29,14	1,224
H ₂ O	0,237	33,58	7,958
O ₂ residual	0,078	29,36	2,290
N ₂ residual	1,451	29,13	42,268
$\sum n \cdot C_p$			59,975

$$\Delta T = \frac{Q}{\sum n \cdot C_p} = \frac{122,72 \cdot 10^3}{59,975} = 2046 \text{ K}$$

A temperatura da combustão:

$$T_c = T_0 + \Delta T = 373 + 2046 = 2419 \text{ K}$$

09. Na figura abaixo, apresenta-se um conjunto cilindro-pistão, onde o peso do pistão é desprezível, em que ocorre a seguinte reação do óxido de níquel (II) à temperatura constante:



Para a manutenção da temperatura constante até a situação de equilíbrio, devem ser retirados do meio reacional 16,10 kJ de energia por mol de óxido de níquel reagido, na forma de calor. Sabe-se que a constante de equilíbrio para a reação é $K_p = 500$ e que, na temperatura de reação, as entropias padrão são:

- $S_0(\text{NiO}) = 38,10 \text{ J} \cdot (\text{mol} \cdot \text{K})^{-1}$;
- $S_0(\text{Ni}) = 30,56 \text{ J} \cdot (\text{mol} \cdot \text{K})^{-1}$;
- $S_0(\text{CO}) = 251,0 \text{ J} \cdot (\text{mol} \cdot \text{K})^{-1}$; e
- $S_0(\text{CO}_2) = 296,0 \text{ J} \cdot (\text{mol} \cdot \text{K})^{-1}$.

Com base nas informações fornecidas e considerando que os gases se comportam idealmente, determine a temperatura na qual a reação foi conduzida.

Solução:

Dada a reação: $\text{NiO}(s) + \text{CO}(g) \rightleftharpoons \text{Ni}(s) + \text{CO}_2(g)$; $K_p = 500$

Do enunciado: $\Delta H_{\text{reação}} = -16,10 \text{ KJ/mol NiO}(s)$

Cálculo de $\Delta S_{\text{reação}} = S_0(\text{CO}_2) + S_0(\text{Ni}) - S_0(\text{CO}) - S_0(\text{NiO})$

$$\Delta S_{\text{reação}} = 296,0 + 30,56 - 251,0 - 38,10 = 37,46 \text{ J} \cdot (\text{mol} \cdot \text{K})$$

Com os dados acima, é possível calcular a variação de energia livre da reação:

$$\Delta G_{\text{reação}} = \Delta H_{\text{reação}} - T \cdot \Delta S_{\text{reação}} = -16,10 \cdot 10^3 - 37,46 \cdot T$$

Considerando o equilíbrio químico:

$$K_p = e^{\frac{-\Delta G}{RT}}$$

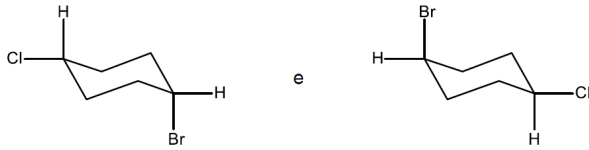
$$\text{Então: } \Delta G_{\text{reação}} = -RT \cdot \ln(K_p) = -8,3 \cdot \ln(500) \cdot T$$

$$\Delta G_{\text{reação}} = -16,10 \cdot 10^3 - 37,46 \cdot T = -8,3 \cdot \ln(500) \cdot T$$

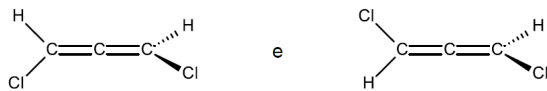
$$T = \frac{\Delta H_{\text{reação}}}{\Delta S_{\text{reação}} - R \cdot \ln(K_p)} = \frac{-16,10 \cdot 10^3}{37,46 - 8,3 \cdot \ln(500)} = 1150 \text{ K}$$

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

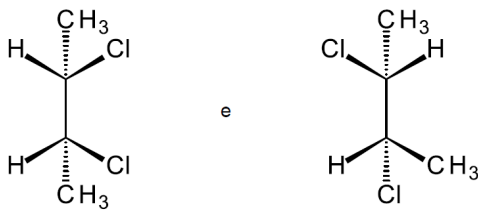
a)



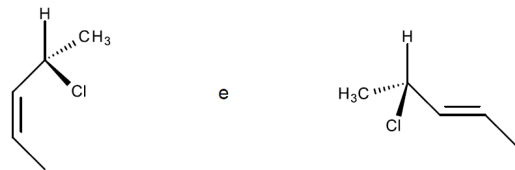
b)



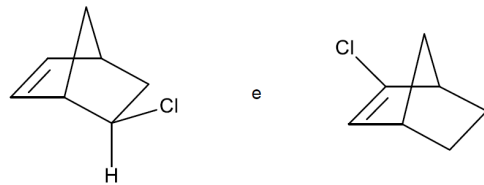
c)



d)



e)

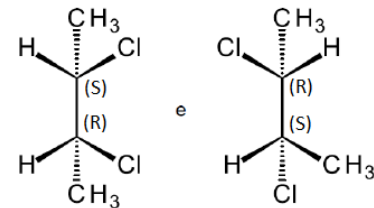


Solução:

a) São representações diferentes de um mesmo composto, pois as estruturas são sobreponíveis.

b) São enantiômeros, pois as duas moléculas são imagens especulares não sobreponíveis entre si.

c) São representações diferentes de um mesmo composto.



São representações diferentes do (2R, 3S)-2,3-diclorobutano (um composto meso).

d) São diastereoisômeros (estereoisômeros que não são imagens especulares entre si), pois a molécula da esquerda tem configuração cis na dupla ligação, enquanto a da direita tem configuração trans.

e) São isômeros constitucionais. São isômeros de posição, pois diferem na posição do grupo funcional (ligação carbono-cloro).