

FEZ

ELITE
PRÉ-VESTIBULAR
c a m p i n a s

Aprovou!

Elite Resolve

IME 2014

QUÍMICA

Discursivas

www.elitecampinas.com.br

os melhores **gabaritos** da internet

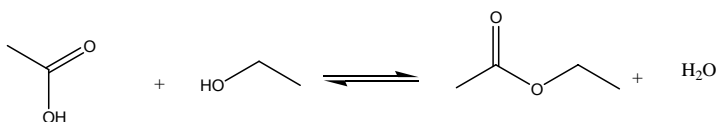
QUÍMICA

QUESTÃO 01

1,0 mol de ácido acético é adicionado a uma solução de 1,0 mol de álcool etílico e 36 g de água. Aguarda-se que o meio formado atinja o equilíbrio à temperatura T_{eq} , quando se verifica que a sua composição contém 0,5 mol de éster e o restante de ácido acético, etanol e H_2O . Calcule quantos mols de éster poderiam ser formados no equilíbrio, à mesma temperatura T_{eq} , se 2,0 mols de etanol puro fossem misturados a 1,0 mol de ácido acético num recipiente seco.

Resolução

A reação que ocorre entre o ácido acético e o álcool etílico é uma reação de esterificação, e pode ser caracterizada pela seguinte equação química:



Como se vê, a reação segue a proporção estequiométrica de 1:1 em relação de reagentes e produtos.

No exercício foi proposto que 1 mol de ácido acético foi adicionado a 1 mol de álcool etílico e 36 g de água. Pela análise da massa molar, tem-se:

$$\begin{array}{ccc} 1 \text{ mol H}_2\text{O} & \text{_____} & 18 \text{ g} \\ X & \text{_____} & 36 \text{ g} \end{array}$$

$$X = 2 \text{ mol de H}_2\text{O}$$

Também foi dito que o equilíbrio é atingido na temperatura T_{eq} , sendo que há no equilíbrio 0,5 mol de éster e o restante de ácido acético, etanol e H_2O .

Se há 0,5 mol de éster no equilíbrio, podemos montar o seguinte esquema, considerando a estequiometria da reação:

	Ac. Acético (mol)	Álcool (mol)	Éster (mol)	Água (mol)
Início	1	1	0	2
Reage	0,5	0,5	-	-
Forma	-	-	0,5	0,5
Fim	1-0,5 = 0,5	1-0,5 = 0,5	0,5	2+0,5 = 2,5

Sendo assim, no equilíbrio, temos as seguintes quantidades de cada substância.

- Ác Acético = 0,5 mol
- Álcool = 0,5 mol
- Éster = 0,5 mol
- Água = 2,5 mol

Montando a expressão da constante de equilíbrio, temos:

$$K = \frac{[\text{éster}]x[\text{água}]}{[\text{ácido}]x[\text{álcool}]} = \frac{\left(\frac{0,5}{V}\right)x\left(\frac{2,5}{V}\right)}{\left(\frac{0,5}{V}\right)x\left(\frac{0,5}{V}\right)} = 5$$

Sendo V o volume total da mistura.

Na segunda hipótese do problema, foi proposto que 2,0 mols de etanol puro fossem misturados a 1,0 mol de ácido acético, num recipiente seco. Nessa nova situação, temos

	Ac. Acético (mol)	Álcool (mol)	Éster (mol)	Água (mol)
Início	1	2	0	0
Reage	x	x	-	-
Forma	-	-	x	x
Fim	1-x	2-x	x	x

Como a temperatura T_{eq} não foi alterada, a constante de equilíbrio nessa nova situação permanece a mesma.

Montando a expressão da constante de equilíbrio

$$K = \frac{\left(\frac{x}{V}\right).\left(\frac{x}{V}\right)}{\left(\frac{1-x}{V}\right).\left(\frac{2-x}{V}\right)} = 5$$

Sendo V_2 o volume total da mistura nessa nova situação.

$$4x^2 - 15x + 10 = 0$$

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{15 \pm \sqrt{65}}{8} = 2,88 \text{ mol ou } 0,87 \text{ mol}$$

O valor de $x = 2,88$ não faz sentido, já que partimos de apenas 1 mol de ácido acético e 2 mol de etanol puro.

Logo, o valor para o número de mol de éster produzido é:

$$\boxed{0,87 \text{ mol}}$$

QUESTÃO 02

Determine as fórmulas estruturais planas de todos os compostos derivados do benzeno que satisfazem as seguintes imposições:

- i) em 1 mol do composto encontram-se 16 g de oxigênio e 7 mols de carbono;
- ii) o elemento carbono corresponde a 77,78% em massa do composto; e
- iii) em 21,6g do composto encontram-se 1,6 g de hidrogênio.

Resolução

A partir das imposições, temos:

i) Em 1 mol do composto há:

- 16 g de oxigênio, o que corresponde a 1 mol de O;
- Além disso, em 1 mol do composto há 7 mols de C.

ii) O elemento carbono corresponde a 77,78% em massa do composto:

$$\frac{m_{\text{carbono}}}{m_{\text{composto}}} = 77,78\% \Leftrightarrow \frac{m_{\text{carbono}}}{m_{\text{O}} + m_{\text{C}} + m_{\text{outros}}} = 77,78\% \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \frac{12 \times 7}{16 + 12 \times 7 + m_{\text{outros}}} = 77,78\% \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow m_{\text{outros}} = \frac{12 \times 7 - 77,78\% \times (16 + 12 \times 7)}{77,78\%} \Rightarrow$$

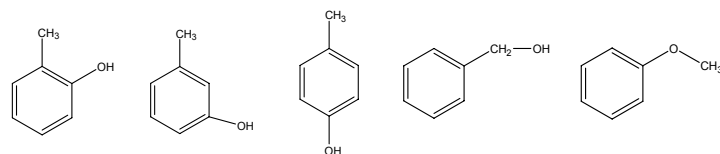
$$\begin{cases} m_{\text{outros}} = 8\text{g} \\ m_{\text{composto}} = m_{\text{C}} + m_{\text{O}} + m_{\text{outros}} = 12 \times 7 + 16 + 8 = 108\text{g} \end{cases}$$

iii) em 21,6g do composto encontram-se 1,6 g de hidrogênio, logo:

$$\begin{array}{ccc} 1,6 \text{ g de H} & \text{_____} & 21,6 \text{ g de composto} \\ m_{\text{H}} \text{ g de H} & \text{_____} & 108 \text{ g de composto} \end{array}$$

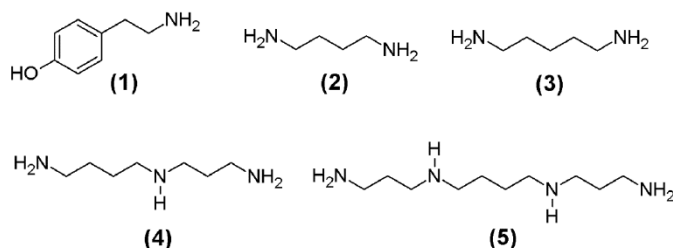
$$m_{\text{H}} = \frac{1,6 \times 108}{21,6} \Leftrightarrow m_{\text{H}} = 8\text{g logo } m_{\text{H}} = m_{\text{outros}}, \text{ portanto, o composto tem}$$

a fórmula plana C_7H_8O e suas fórmulas estruturais são:



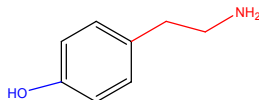
QUESTÃO 03

As aminas biogênicas (AB) são bases orgânicas tóxicas produzidas pela descarboxilação de aminoácidos por microrganismos, que podem ser encontradas como contaminantes em diversos alimentos. Dadas as estruturas das AB feniletilamina (1), putrescina (2), cadaverina (3), espermidina (4) e espermina (5) abaixo, determine o nome de cada uma dessas moléculas de acordo com as normas da IUPAC.



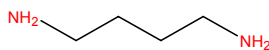
Resolução

(1)



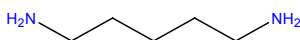
4 - (2 - aminoetil) - 1 - hidróxibenzeno

(2)



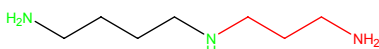
butano - 1,4 - diamina

(3)



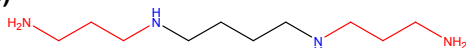
pentano - 1,5 - diamina

(4)



N - (3 - aminopropil)butano - 1,4 - diamina

(5)



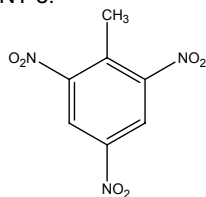
N, N' - bis - (3 - aminopropil)butano - 1,4 diamina

QUESTÃO 04

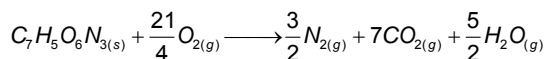
O TNT (2,4,6 - trinitrotolueno) é um composto químico com propriedades combustíveis e explosivas. Em condições específicas e controladas, m gramas de TNT entram em combustão completa em presença de ar estequiométrico sem detonar ou explodir. Os produtos dessa reação foram coletados e transferidos para um sistema de captura de 820 L. Ao atingirem equilíbrio térmico com o ambiente (27°C), a pressão registrada no sistema de captura foi de 1,77 atm. Assumindo que a hipótese do gás ideal é válida, que o ar é uma mistura de N_2 e O_2 na proporção volumétrica de 4:1, que todo o nitrogênio existente nos produtos está na forma de uma única substância simples e que não existem produtos sólidos, determine o valor de m .

Resolução

A fórmula estrutural do TNT é:



A equação de combustão pode ser escrita como:



Como os produtos dessa reação são coletados e colocados num sistema que atinge o equilíbrio térmico a 27°C , a água então é liquefeita. Assim, resta no sistema os outros dois produtos (N_2 e CO_2) gasosos além do N_2 proveniente do ar atmosférico e que não reage.

A proporção volumétrica entre N_2 e O_2 no ar atmosférico é de 4:1, que é a mesma proporção em mols. Assim, se a quantidade de O_2 consumida na reação, por mol de TNT, é de $\frac{21}{4}$ mols, a de N_2 será

quatro vezes maior, ou seja, $4 \cdot \frac{21}{4} = 21$ mols.

Calculando o número de mols de gases no sistema final, temos:

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T \rightarrow 1,77 \cdot 820 = n \cdot 0,082 \cdot (27 + 273)$$

$$n = 59 \text{ mols}$$

Pela proporção estequiométrica, para cada 1 mol de TNT, forma-se $\frac{17}{2}$ mols de gases N_2 e CO_2 , após o equilíbrio térmico, além de restar 21 mols de N_2 que não reagiu proveniente do ar atmosférico.

Deste modo, para cada mol de TNT, há $\frac{17}{2} + 21 = \frac{59}{2}$ mols de gases.

Logo, sabendo-se que a massa molar do TNT é 227 g/mol , temos:

1 mol TNT		$\frac{59}{2}$ mols de gases
227 g		$\frac{59}{2}$ mols
m		59 mols
	$m = 454 \text{ g}$	

QUESTÃO 05

1,00 kg de carbonato de cálcio, na temperatura de 298 K, é introduzido em um forno que opera a 101 kPa. O forno é então aquecido até a temperatura T_c na qual ocorrerá a calcinação do carbonato de cálcio. Sabendo-se que o módulo da variação da energia livre de Gibbs da reação de calcinação à temperatura T_c é igual a 10,7 kJ/mol, **determine a temperatura de calcinação T_c e a quantidade de calor necessária** à completa calcinação do carbonato. Despreze os efeitos de mistura e considere que, para o sistema reacional, aplicam-se as seguintes equações:

$$* \Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad * \Delta H = \Delta H_f^0 + Cp\Delta T \quad * \Delta S = \Delta S_f^0 + Cp\frac{\Delta T}{T}$$

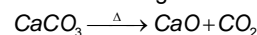
Dados:

Entalpias e entropias de formação a 298 K e capacidades caloríficas médias:

Substância	$\Delta H_f^0 (kJ/mol)$	$\Delta S_f^0 (J/mol.K)$	$C_p (J/mol.k)$
$CO_2 (g)$	-394	213	54,0
$CaO(s)$	-636	39,0	56,0
$CaCO_3 (s)$	-1207	94,0	110

Resolução

A reação descrita no problema é a seguinte:



Foi dado no enunciado que o módulo para ΔG na temperatura de T_c é igual a 10,7 kJ/mol. Como na temperatura T_c a calcinação é um processo espontâneo, sabemos que ΔG possui valor negativo, logo $\Delta G = -10,7 \text{ kJ/mol}$.

Foi pedido o valor da temperatura de calcinação, logo precisamos esquematizar uma expressão que relacione o valor de ΔG dado e a temperatura T_c de calcinação. Para isso, vamos calcular o valor de ΔG para cada substância, considerando que no processo global temos:

$$\Delta G = \Delta G_{\text{produtos}} - \Delta G_{\text{reagentes}}$$

Para o $CaCO_3$:

$$\Delta G = \Delta H - T_c \Delta S$$

$$\Delta H = \Delta H_f^0 + Cp\Delta T = -1207000 + 110 \Delta T$$

$$\Delta S = \Delta S_f^0 + Cp\frac{\Delta T}{T} = 94 + 110 \frac{\Delta T}{T}$$

$$\Delta G_{CaCO_3} = -1207000 + 110 \Delta T - T_c(94 + 110 \frac{\Delta T}{T})$$

Para o CaO :

$$\Delta G = \Delta H - T_c \Delta S$$

$$\Delta H = -636000 + 56 \Delta T$$

$$\Delta S = 39 + 56 \frac{\Delta T}{T}$$

$$\Delta G_{CaO} = -636000 + 56 \Delta T - T_c \left(39 + 56 \frac{\Delta T}{T} \right)$$

Para o CO₂:

$$\Delta G = \Delta H - T_c \Delta S$$

$$\Delta H = -394000 + 54 \Delta T$$

$$\Delta S = 213 + 54 \frac{\Delta T}{T}$$

$$\Delta G_{CO_2} = -394000 + 54 \Delta T - T_c \left(213 + 54 \frac{\Delta T}{T} \right)$$

Utilizando a expressão: $\Delta G = \Delta G_{\text{produtos}} - \Delta G_{\text{reagentes}}$ temos:

$$\begin{aligned} \Delta G_{\text{total}} &= (\Delta G_{CO_2} + \Delta G_{CaO}) - \Delta G_{CaCO_3} \\ -10700 \frac{J}{mol} &= -394000 + 54 \Delta T - 213 T_c - 54 T_c \frac{\Delta T}{T} \\ &\quad - 636000 + 56 \Delta T - 39 T_c - 56 T_c \frac{\Delta T}{T} \\ &\quad + 1207000 - 110 \Delta T + 94 T_c + 110 T_c \frac{\Delta T}{T} \end{aligned}$$

Analisando os termos dessa equação e fazendo as devidas simplificações, temos a seguinte expressão simplificada:

$$-10700 \frac{J}{mol} = -394000 - 213 T_c - 636000 - 39 T_c + 1207000 + 94 T_c$$

Isolando T_c, temos

$$T_c = 1188 \text{ K}$$

Na segunda pergunta do enunciado, pede-se a quantidade de calor necessária à completa calcinação do carbonato.

Como a pressão é constante nas condições do problema, a quantidade de calor trocado é exatamente o ΔH da reação.

Como ΔH é função de estado, podemos calculá-lo por qualquer caminho reacional e o resultado será o mesmo. Dessa forma, cabe ao candidato escolher a rota que lhe for mais conveniente.

Nesse caso, consideraremos que a calcinação ocorreu em duas etapas:

1º: Ocorre a reação a 298 K e todo carbonato de cálcio é consumido.

2º Aquece-se os produtos até o valor de T_c = 1188 K

Calculando o ΔH da primeira etapa:

$$\begin{aligned} \Delta H_1 &= \Delta H_{F, \text{produtos}} - \Delta H_{F, \text{reagentes}} \quad (\text{a } 298 \text{ K}) \\ \Delta H_1 &= -394000 - 636000 + 1207000 = 177000 \text{ J/mol} \end{aligned}$$

Calculando o ΔH da segunda etapa:

$$\Delta H_2 = 54(1188 - 298) + 56(1188 - 298) \text{ J/mol} = 97900 \text{ J/mol}$$

Obs.: ΔH₂ = energia necessária para aquecer os produtos até a temperatura de calcinação, na rota hipotética.

$$\Delta H_{\text{total}} = \Delta H_1 + \Delta H_2 = 177000 + 97900 = 274900 \text{ J/mol}$$

No caso do problema, temos 1 kg de carbonato de cálcio:

$$n = \frac{1000}{100} = 10 \text{ mol}$$

Logo, o total de calor necessário é:

$$274900 \frac{J}{mol} \times 10 \text{ mol} = 2749000 \text{ J} = \boxed{2749 \text{ kJ}}$$

QUESTÃO 06

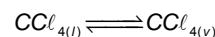
O tetracloreto de carbono é um composto orgânico apolar, líquido à temperatura ambiente. Dentre outras aplicações, foi amplamente utilizado no século passado como solvente, como pesticida e na síntese de agentes refrigerantes. Seu emprego comercial, entretanto, foi progressivamente reduzido quando se tornaram evidentes os seus efeitos nocivos à saúde humana e ao meio ambiente. Estudos constataram que a inalação é a principal via de exposição ao tetracloreto de carbono para trabalhadores e para a população em

geral em razão de sua pressão de vapor relativamente elevada e de sua lenta degradação no ambiente.

Supondo que as energias livres padrão de formação (ΔG⁰_f) do tetracloreto de carbono, nos estados líquido e vapor a 25°C, sejam -68,6 kJ/mol e -64,0 kJ/mol respectivamente, determine sua pressão de vapor, à mesma temperatura, em função constante e (número de Neper)

Resolução

O equilíbrio que ocorre entre as fases líquido e vapor pode ser descrito como:



A constante de equilíbrio em termos de pressões parciais é:

$$K_p = p_{CCl_4}$$

O valor da variação da energia livre de Gibbs padrão para o processo (ΔG⁰) pode ser calculado a partir dos dados fornecidos no enunciado:

$$\Delta G^0 = \Delta G_{f(CCl_{4(v)})}^0 - \Delta G_{f(CCl_{4(l)})}^0 = -64 - (-68,6) = +4,6 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

A variação da energia livre de Gibbs (ΔG) pode ser relacionada com a constante de equilíbrio, segundo a equação:

$$\Delta G = \Delta G^0 + R \cdot T \cdot \ln K$$

Como a pressão de vapor é a pressão exercida pela fase gasosa quando o equilíbrio líquido-gás é estabelecido, o valor de ΔG deve ser igual a zero. Substituindo os valores, temos:

$$\begin{aligned} \Delta G = \Delta G^0 + R \cdot T \cdot \ln K_p \Rightarrow 0 &= 4600 + 8,314 \cdot 298 \cdot \ln K_p, \\ \Rightarrow \ln K_p = -1,86 \Rightarrow K_p &= e^{-1,86} \end{aligned}$$

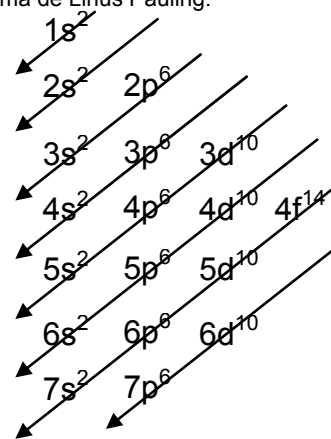
Sendo K_p = p_{CCl₄}, temos que $p_{CCl_4} = e^{-1,86} \text{ atm}$

QUESTÃO 07

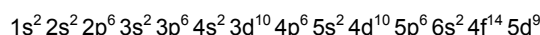
Dê a configuração eletrônica no estado fundamental do elemento com número atômico Z = 79. Determine o período e o grupo da Tabela Periódica a que pertence o elemento.

Resolução

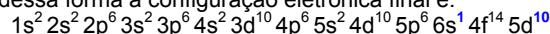
Seguindo o diagrama de Linus Pauling:



A distribuição eletrônica do ouro (Au) seria:



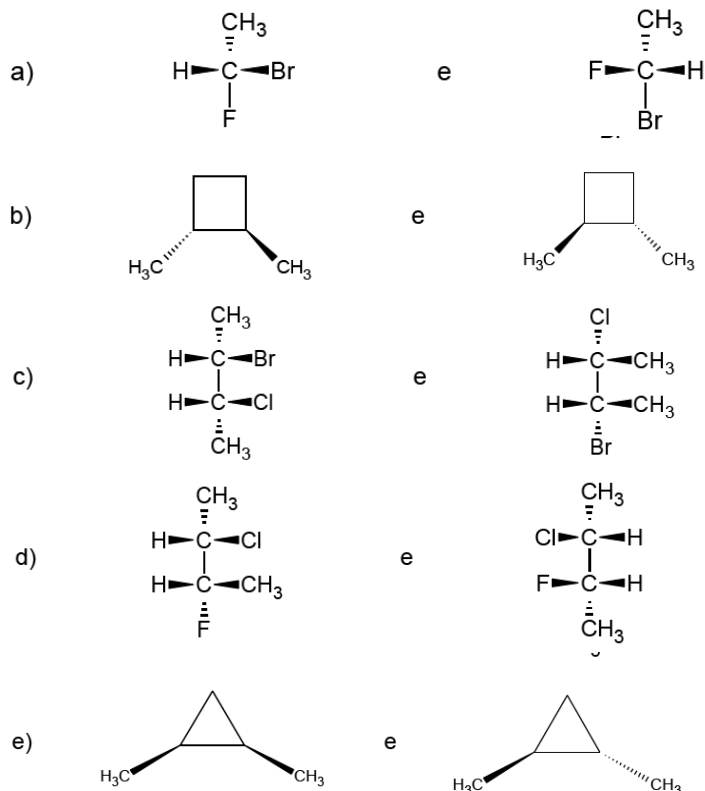
Contudo, nessa situação os orbitais 5d, que podem acomodar no máximo 10 elétrons, estão com 9. Se o átomo de ouro promover um elétron do orbital 6s² para o orbital 5d⁹, o orbital d passa a estar completamente preenchido, o que confere uma maior estabilidade ao átomo, dessa forma a configuração eletrônica final é:



Como o subnível mais externo do átomo de ouro o 6s está na sexta camada o **átomo se encontra no sexto período** e como a soma dos elétrons nos subníveis 6s e 5d é 11 **ele se encontra no grupo 11 (1B)**.

QUESTÃO 08

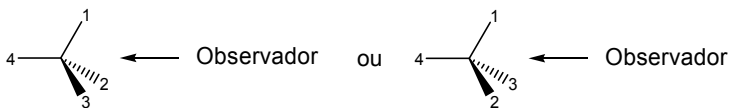
Estabeleça a relação entre as estruturas de cada par abaixo, identificando-as como enantiômeros, diastereoisômeros, isômeros constitucionais ou representações diferentes de um mesmo composto.



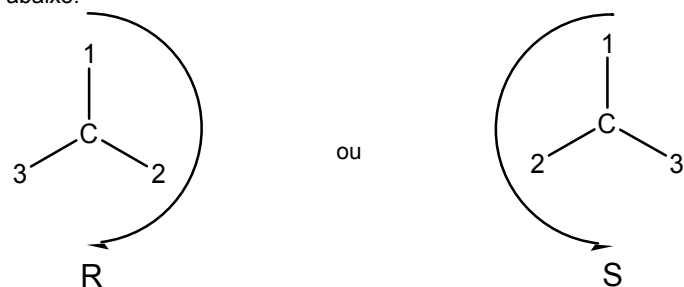
Resolução

Isômeros são compostos que possuem a mesma fórmula molecular, mas fórmulas estruturais diferentes. Os isômeros constitucionais se diferem quanto à ordem com que seus átomos estão ligados.

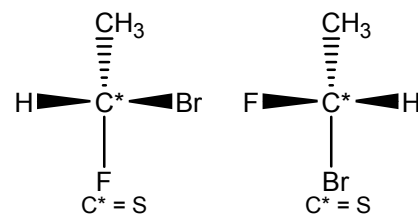
Existe uma classe de isômeros, chamados de ópticos, que são compostos que possuem um, ou mais elementos com quatro ligantes diferentes (na grande maioria dos casos se trata de Carbono), conhecidos por elementos quirais ou estereocentros. Cada estereocentro pode ser classificado segundo o sistema R.S., em que se estabelece uma prioridade para cada um dos seus ligantes, de acordo com suas massas atômicas, sendo 1 o ligante de maior prioridade (maior massa atômica) e o 4 de menor prioridade (menor massa atômica). Em seguida, deve-se orientar o estereocentro no espaço, de forma que o ligante de menor prioridade (4) esteja oposto ao observador, conforme as figuras abaixo:



Após isso, deve-se traçar um caminho entre o ligante de maior prioridade para o de menor prioridade. Quando a orientação desse caminho for horário, o composto será denominado "R" e quando for anti-horário, o composto será denominado "S", conforme a figura abaixo:

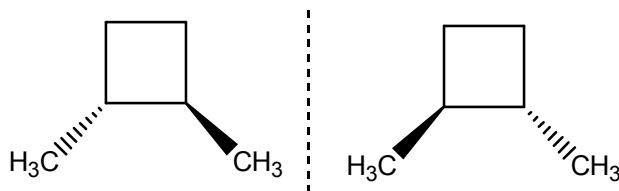


a) Cada composto em questão possui um único estereocentro, conforme a figura abaixo:

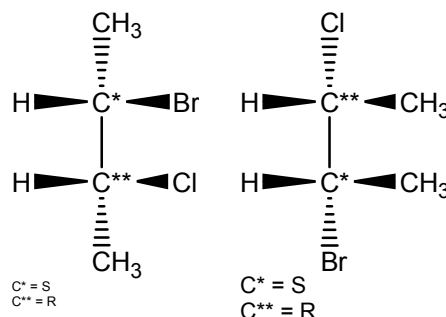


Como os dois compostos apresentam estereocentros S, eles são representações diferentes do mesmo composto.

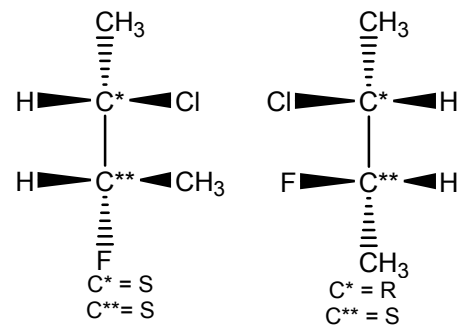
b) Os compostos apresentados são enantiômeros por serem imagens especulares uns dos outros, conforme a figura abaixo:



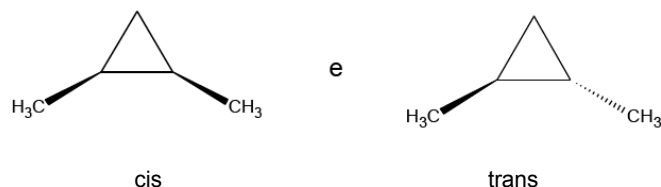
c) Os compostos são representações diferentes dos mesmos compostos, pois apresentam a mesma configuração, nos mesmos estereocentros em cada composto, conforme a figura abaixo:



d) Os compostos são diastereoisômeros por serem isômeros ópticos que não são imagens especulares uns dos outros:



e) Os compostos são diastereoisômeros, pois um dos compostos é cis, o outro é trans, portanto eles não são imagens especulares uns dos outros:

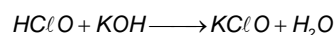


QUESTÃO 09

Determine o pH no ponto de equivalência da titulação de 25,0 mL de ácido hipocloroso aquoso ($K_a = 3 \times 10^{-8}$) com concentração 0,010 mol/L, com hidróxido de potássio 0,020 mol/L, realizada a 25 °C.

Resolução

A reação de neutralização que ocorre nessa titulação pode ser escrita como:



A partir dos dados, pode-se calcular o número de mol de ácido a ser neutralizado:

$$C = \frac{n}{V} \Rightarrow 0,01 = \frac{n_{\text{ácido}}}{25 \cdot 10^{-3}} \Rightarrow n_{\text{ácido}} = 2,5 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

Pela equação acima, temos que a proporção entre o ácido e a base é de 1:1, assim

$$n_{\text{base}} = 2,5 \cdot 10^{-4} \text{ mol.}$$

Calculando o volume da base utilizada:

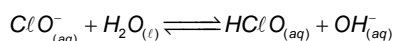
$$C = \frac{n}{V} \Rightarrow 0,02 = \frac{2,5 \cdot 10^{-4}}{V_{\text{base}}} \Rightarrow V_{\text{base}} = 1,25 \cdot 10^{-2} \text{ L}$$

O volume final da titulação é igual a 37,5 mL (25 mL do ácido + 12,5 mL da base).

O número de mol de $KClO$ formado também é igual a $2,5 \cdot 10^{-4}$ mol (proporção 1 ácido : 1 base : 1 sal). Assim, a concentração de $KClO$ pode ser calculada como:

$$C_{KClO} = \frac{2,5 \cdot 10^{-4}}{37,5 \cdot 10^{-3}} = \frac{1}{15} \cdot 10^{-1} \text{ mol/L}$$

O ânion do sal formado sofre hidrólise, alterando o pH do meio, conforme o equilíbrio:



A expressão da constante de hidrólise é:

$$K_h = \frac{[HClO] \cdot [OH^-]}{[ClO^-]} \quad (I)$$

Temos ainda a relação entre K_h , K_w e K_a :

$$K_h = \frac{K_w}{K_a} \quad (II)$$

Substituindo II em I:

$$\frac{K_w}{K_a} = \frac{[HClO] \cdot [OH^-]}{[ClO^-]}$$

A concentração de $HClO$ é igual a de OH^- e a concentração de ClO^- é igual a do sal $KClO$, deste modo:

$$\frac{k_w}{k_a} = \frac{[HClO] \cdot [OH^-]}{[ClO^-]} \Rightarrow \frac{10^{-14}}{3 \cdot 10^{-8}} = \frac{[OH^-]^2}{\frac{1}{15} \cdot 10^{-1}} \Rightarrow [OH^-] = \sqrt{\frac{1}{45} \cdot 10^{-7}} = \frac{\sqrt{2}}{3} \cdot 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$$

Calculando pOH :

$$pOH = -\log[OH^-] \Rightarrow pOH = -\log\left(\frac{\sqrt{2}}{3} \cdot 10^{-4}\right) \Rightarrow pOH = -\log 10^{-4} + \log 3 - \frac{1}{2} \log 2 \Rightarrow pOH = 4 + 0,48 - 0,15 \Rightarrow pOH = 4,33$$

Logo,

$$pH + pOH = 14 \Leftrightarrow pH = 14 - 4,33 \Leftrightarrow \boxed{pH = 9,67}$$

QUESTÃO 10

A reação abaixo segue a mesma cinética do decaimento radioativo.



Ao se acompanhar analiticamente o desenvolvimento desta reação na temperatura T_1 , obtêm-se o Gráfico 1, o qual estabelece uma relação entre a concentração molar da substância A no meio reacional e o tempo de reação

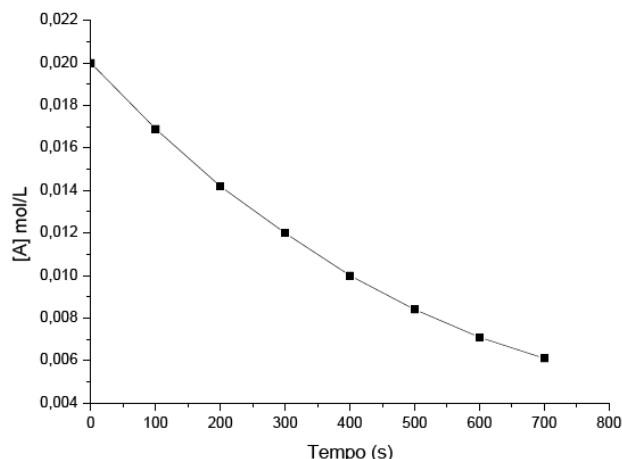


Gráfico 1 – Concentração da substância A no tempo

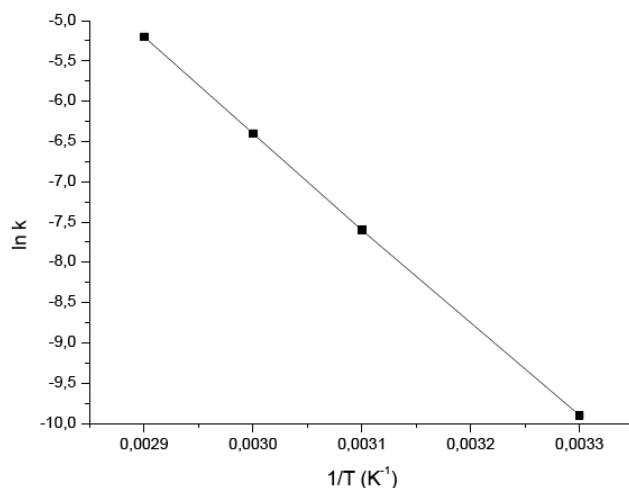


Gráfico 2 – ln k versus 1/T

Ao se conduzir esta mesma reação em diversas temperaturas, obtêm-se diferentes valores para a constante de velocidade de reação k , conforme os dados da Tabela 1.

Tabela 1 – Efeito da temperatura na constante de velocidade k

Temperatura(°C)	25	45	55	65
Constante de velocidade, $k(s^{-1})$	$3,2 \times 10^{-5}$	$5,1 \times 10^{-4}$	$1,7 \times 10^{-3}$	$5,2 \times 10^{-3}$

Finalmente, com um tratamento matemático dos dados da Tabela A, pode-se construir o Gráfico 2, o qual fornece uma relação entre a constante de velocidade e a temperatura.

Com base nas informações fornecidas, considerando que $\ln 2 = 0,69$ e que a constante universal dos gases é igual a $8,3 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$, determine:

- a temperatura T_1
- a energia de ativação em, em kJ/mol, da reação

Resolução

a) O enunciado diz que o gráfico apresenta a mesma cinética de decaimento radioativo, ou seja temos uma cinética de primeira ordem. Com essa informação podemos escrever:

$$v = -k[A] \Rightarrow \frac{d[A]}{dt} = -k[A] \Rightarrow \frac{d[A]}{[A]} = -kdt \Rightarrow$$

$$\int \frac{1}{[A]} d[A] = -\int kdt \Rightarrow \ln\left(\frac{[A]}{[A]_0}\right) = -k\Delta t \Rightarrow \ln\left(\frac{[A]_0}{[A]}\right) = k\Delta t$$

Analisando o gráfico 1 podemos escolher dois pontos quaisquer e substituir os valores nessa equação. Então podemos selecionar dois pontos que facilitem as contas. Assim, por leitura do gráfico temos:

$$\text{Ponto 1: } \begin{cases} t = 0 \text{ s} \\ [A]_0 = 0,020 \text{ mol/L} \end{cases}$$

$$\text{Ponto 2: } \begin{cases} t = 400 \text{ s} \\ [A] = 0,010 \text{ mol/L} \end{cases}$$

Substituindo os valores temos:

$$\ln\left(\frac{0,02}{0,01}\right) = k \cdot 400 \Rightarrow k = \frac{\ln 2}{400} \Rightarrow k = 1,7 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$

Ao analisarmos a Tabela 1 vemos que a constante de velocidade é igual a $1,7 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ que equivale à **temperatura de 55°C ou 328 K**.

b) O valor da energia de ativação está relacionada com a constante de velocidade através da equação de Arrhenius:

$$k = A \cdot e^{\frac{-E_a}{RT}}$$

onde:

- k é a constante cinética
- A é a constante pré-exponencial
- E_a é a Energia de Ativação
- R é a constante universal dos gases
- T é a Temperatura

Aplicando-se a função \ln na equação de arrhenius:

$$\ln k = \ln A e^{\frac{-E_a}{RT}} \Rightarrow \ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$

Se chamarmos $\ln k$ de y e $\frac{1}{T}$ de x obtemos:

$$y = \ln A - \frac{E_a}{R} x$$

Como A , E_a e R são constantes, temos uma equação de 1° grau. Portanto o gráfico 2 descreve uma reta, onde no eixo x temos valores de $\frac{1}{T}$ e no eixo y valores de $\ln k$. Dessa forma o coeficiente angular

dessa reta deve ser igual a $-\frac{E_a}{R}$.

Para calcular o valor da energia de ativação é necessário calcular a equação da reta do gráfico 2, mas, como no caso do gráfico 2, temos os valores tabelados dos pontos é mais preciso usar os valores fornecidos na tabela 1 em vez de utilizar a leitura de gráfico.

Seja $\alpha = -\frac{E_a}{R}$ o coeficiente angular da reta dada:

$$\alpha = \frac{\Delta y}{\Delta x} \Leftrightarrow \alpha = \frac{\ln k_2 - \ln k_1}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}} \Leftrightarrow \alpha = \frac{\ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right)}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}}$$

Tomando-se dois pontos quaisquer da tabela, temos:

$$\begin{cases} T_1 = 25 + 273 = 298\text{K} \\ k_1 = 3,2 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1} \end{cases} \text{ e } \begin{cases} T_2 = 45 + 273 = 318\text{K} \\ k_2 = 5,1 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1} \end{cases}$$

$$\text{Obtemos: } \alpha = \frac{\ln\left(\frac{5,1 \times 10^{-4}}{3,2 \times 10^{-5}}\right)}{\frac{1}{318} - \frac{1}{298}} \Leftrightarrow \alpha \cong -\frac{\ln(16) \times 318 \times 298}{20} \Leftrightarrow$$

$$\alpha \cong -\frac{4 \times \ln(2) \times 318 \times 298}{20} \Leftrightarrow \alpha \cong -1,3 \times 10^4$$

O coeficiente angular se relaciona com a E_a , por:

$$\alpha = -\frac{E_a}{R} \Leftrightarrow E_a = -\alpha \cdot R \Leftrightarrow$$

$$E_a = 1,3 \times 10^4 \times 8,3 \Leftrightarrow \boxed{E_a = 108 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}}$$

Equipe desta resolução

Química

Roberto Bineli Mutterle
Lucas dos Santos Vargette
Rafael Capobiango Timo Peixoto
Tathiana de Almeida Guizellini

Revisão

Edson Vilela Gadbem
Eliel Barbosa da Silva
Felipe Eboli Sotorilli

Digitação, Diagramação e Publicação

Lucas Rubi Rosa