

Resolução dos Exercícios do Módulo 3

Fernando de Azevedo
Ribeiro Saab

Exercício 1

- Quando uma reação apresenta, em uma determinada condição, ΔH [variação de entalpia] > 0 ela é dita **endotérmica**, e suas moléculas participantes obtém acréscimo de temperatura.
- Quando $\Delta H < 0$, a reação é **exotérmica**, e libera energia na forma de temperatura para o meio externo.

Exercício 2

- Quando uma reação apresenta variação de energia livre $\Delta G > 0$ ela é dita **não-espontânea**, e não ocorre sem acoplamento à reações espontâneas por meio de enzimas. Quando $\Delta G < 0$, a reação é **espontânea** e é termodinamicamente favorável.
- O fato de um reação ser espontânea não significa que ela ocorrerá rapidamente.

Exercício 3

$$\Delta G = \Delta G^{\circ} + 2,3RT \log K_{eq}$$

Se $\Delta G^{\circ} > 0$ e $2,3RT \log K_{eq} > 0$ então $\Delta G > 0$

Se $\Delta G^{\circ} > 0$ e $2,3RT \log K_{eq} < 0$ com $|\Delta G^{\circ}| > |\log K_{eq}|$ então $\Delta G > 0$

Se $\Delta G^{\circ} > 0$ e $2,3RT \log K_{eq} < 0$ com $|\Delta G^{\circ}| < |\log K_{eq}|$ então $\Delta G < 0$

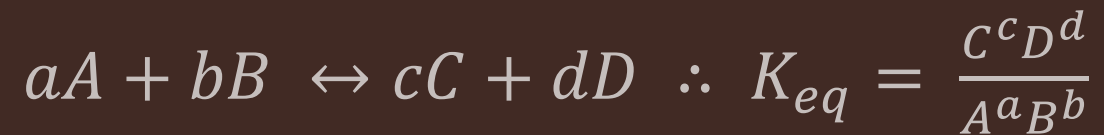
Se $\Delta G^{\circ} < 0$ e $2,3RT \log K_{eq} > 0$ com $|\Delta G^{\circ}| > |\log K_{eq}|$ então $\Delta G < 0$

Se $\Delta G^{\circ} < 0$ e $2,3RT \log K_{eq} > 0$ com $|\Delta G^{\circ}| < |\log K_{eq}|$ então $\Delta G > 0$

Se $\Delta G^{\circ} < 0$ e $2,3RT \log K_{eq} < 0$ então $\Delta G < 0$

Exercício 3

- No entanto ΔG^0 é fixo. Mas o valor de $\log K_{eq}$ depende das concentrações dos reagents:



Este logarítmo tomará valores positivos se $|C^c D^d| > |A^a B^b|$, multiplicando o restante da segunda parte da equação ($+2,3RT$) e possivelmente alterando o valor de ΔG . De mesmo modo, este Log terá valores negativos para $|A^a B^b| > |C^c D^d|$, que pode suplantar um ΔG^0 positivo dependendo de seu valor, alterando o sinal de ΔG .

Exercício 4

a)

$$A \leftrightarrow B \quad K_{eq} = 10^3 \rightarrow \Delta G^{0'} = -2,3RT \log K_{eq}$$
$$\Delta G^{0'} = -2,3RT \log 10^3 = -(2,3)(298)(8.314)(3)$$

$$\Delta G^{0'} = -17.0952468 \frac{KJ}{mol}$$

b) Por definição, no ponto de equilíbrio as concentrações molares não podem variar.

Exercício 4

- C) Vamos utilizar $\Delta G = \Delta G^{\circ} + 2,3RT \log K_{eq}$
- Temos que $\Delta G = -17.09 + 2,3RT \log K_{eq}$
- Para $K_{eq} = 10^3$, temos obviamente que $\Delta G = 0$, pois a reação está no equilíbrio.
- Vamos ver para $K_{eq} = 10^6$ Ou seja, $[B] \gg \gg [A]$:
- $\Delta G = -17.09 + (2,3)(298)(8.314)(6) = -17.09 + 34.17 = +17.08\text{KJ/Mol}$

Exercício 4

- Vamos ver para $K_{eq} = 10^{-1}$ (Ou seja, $[A] \gg [B]$) :
- $\Delta G = -17.09 + (2,3)(298)(8.314)(-1) = -17.09 - 5.698 =$
 $-22,788\text{KJ/Mol}$
- Podemos concluir que com a mudança de K_{eq} , e, portanto, das concentrações iniciais de A e B, o sinal de ΔG pode mudar, tornando esta uma reação espontânea ou não-espontânea.

Exercício 5

- Reação inversa: $B \leftrightarrow A \therefore K_{eq-1} = \frac{1}{K_{eq}} = 10^{-3}$

$$\Delta G^{0'} = -2,3RT \log 10^{-3} = -(2,3)(298)(8.314)(-3)$$

$$\Delta G^{0'} = +17.0952468 \frac{KJ}{mol}$$

Exercício 5

Temos que $\Delta G = +17.09 + 2,3RT \log K_{eq}$

E queremos um $\Delta G < 0$, logo:

$$\Delta G \longrightarrow 0 < +17.09 + 2,3RT \log \frac{B}{A}$$

$$-17.09 < +5,698 \log \frac{B}{A}$$

$$-3 < \log \frac{B}{A}$$

Exercício 5

$$-3 < \log \frac{B}{A}$$

$$\boxed{\frac{B}{A} \leq 10^{-3}}$$

Esta questão possui múltiplas respostas: Para qualquer valor de relação entre B/A menor ou igual a 10^{-3} , a reação será espontânea.

Exercício 5

Alternativamente, podemos aquecer a solução em 100°:

$$\Delta G \longrightarrow 0 < +17.09 + 2,3RT \log \frac{B}{A}$$

$$-17.09 < (2,3) \boxed{(398)} (8.314) \log \frac{B}{A}$$

$$-17.09 < 7.610 \log \frac{B}{A}$$

$$-2.2457 < \log \frac{B}{A}$$

Exercício 5

$$-2.2457 < \log \frac{B}{A}$$

$$\frac{B}{A} \leq 5 \times 10^{-3}$$

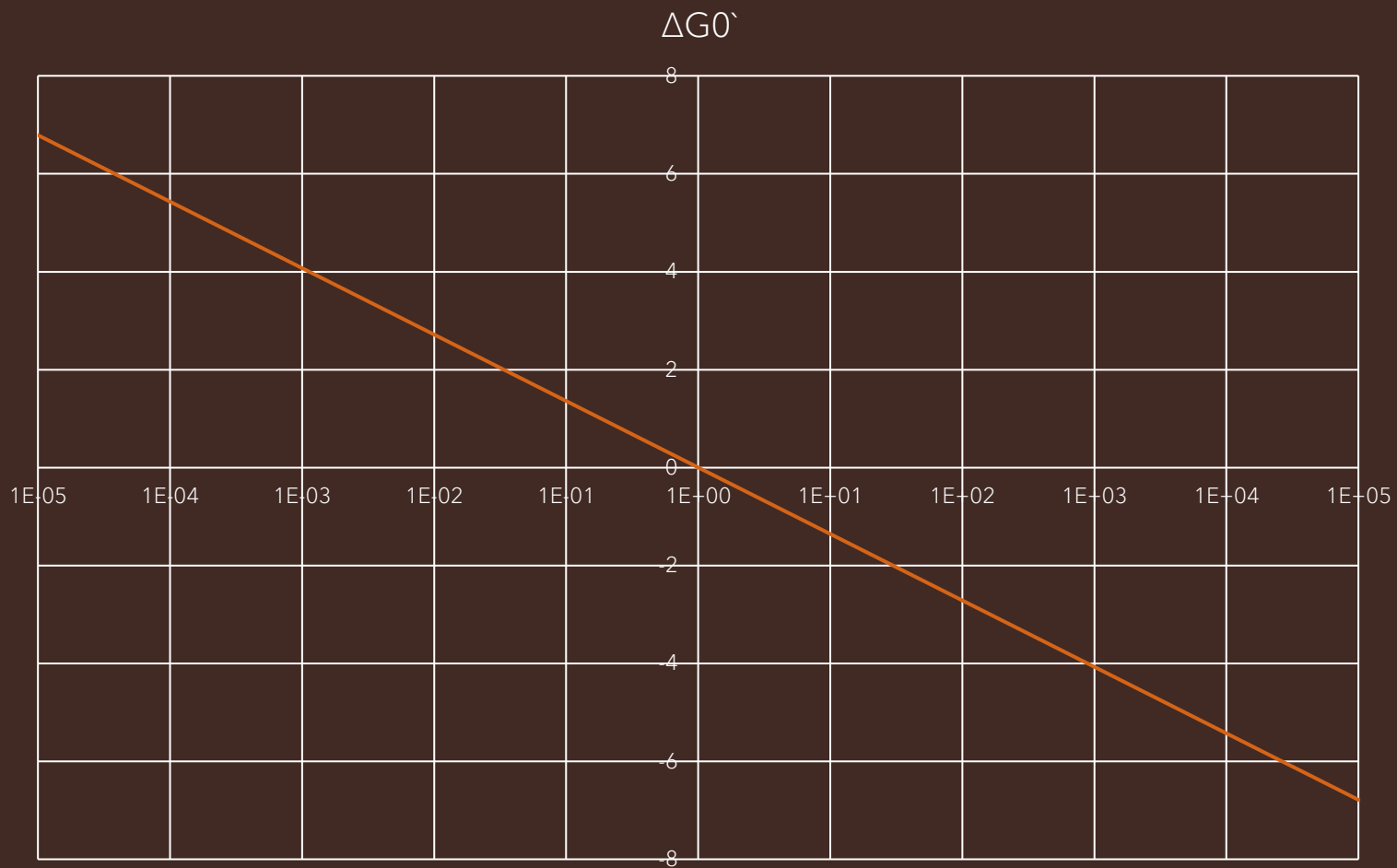
Esta questão possui múltiplas respostas: Para qualquer valor em 398K de temperatura e de relação entre B/A menor ou igual a 5×10^{-3} , a reação será espontânea.

Exercício 6

- Para $k_1 = 10$, temos $k_{eq} = \frac{k_1}{k_{-1}} = 10^3 = \frac{10}{k_{-1}} \therefore \boxed{k_{-1} = 10^{-2}}$
- Como $K_{eq} = \frac{K_1}{K_{-1}}$, temos que existem infinitos valores de constantes de velocidade regulares e inversas, desde que estas respeitem a proporção dada pela constante de equilíbrio da reação. À medida que a concentração de um determinado reagente ou produto aumenta numa solução for a de equilíbrio, uma das velocidades aumenta e a outra diminui, pois há alteração contínua da constante K , até que estas alcancem o equilíbrio na proporção $K=K_{eq}$.

Exercício 7

K	ΔG^0
1E+05	-6,78546
1E+04	-5,428368
1E+03	-4,071276
1E+02	-2,714184
1E+01	-1,357092
1E+00	0
1E-01	1,357092
1E-02	2,714184
1E-03	4,071276
1E-04	5,428368
1E-05	6,78546



Exercício 8

