CCM-0124 – Química II – P1: Gases e termodinâmica – entrega 07/06/2021

Utilize caso achar necessário R = 8,3145 J K^{-1} mol^{-1}, R = 0,082057 L atm K^{-1} mol^{-1}, R=82,05745 cm^3 atm K^{-1} mol^{-1}, R=1,897 cal K^{-1} mol^{-1}. Justifique sua resposta e mostre as etapas de cálculo. Não esqueça das unidades!

1) A equação de estado P(Vm – b) = RT é adotada, às vezes, em cálculos aproximados envolvendo gases reais. Admitindo que existam gases que obedecem rigorosamente a essa equação.

a) É possível liquefazer tais gases? Justifique seu raciocínio. Sugestão: considere a similaridade da equação com a equação de van der Waals.

2) A 273 K, o argônio tem os seguintes coeficientes do virial: B = -21,7 cm^3 mol^{-1} e C = 1200 cm^6 mol^{-2}. Admitindo que a lei dos gases perfeitos seja suficientemente exata para estimar o segundo e terceiro termos da expansão (ou seja, use a lei dos gases perfeitos em caso de necessidade):

a) calcule o fator de compressibilidade do argônio a 100 atm e 273 K. Sugestão: Obtenha uma expressão para Z em função de P com B, C e T constantes.

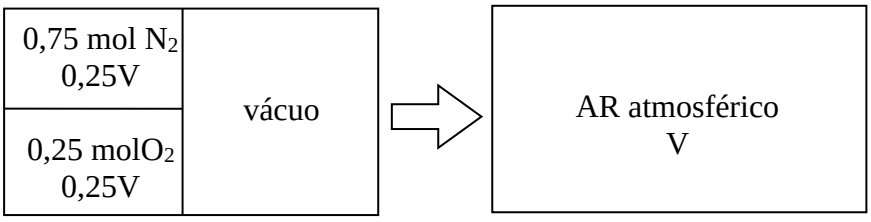
b) Explique como o fator de compressibilidade varia com a temperatura. Faça um esboço indicando o comportamento de Z acima e abaixo da temperatura de Boyle (T_B), identificando também essa temperatura no esboço.

3) A seguinte equação que relaciona (p/ρ) com p (em atm) a temperatura constante, onde ρ é a densidade do gás (em g L^{-1}), foi obtida para o oxigênio a 273,15 K:

$$(p/\rho) = 0{,}700510 - 6{,}732.10^{-4}\, p$$

Considerando essa equação, calcule o valor da constante dos gases, R, com a maior precisão possível.

4) Considere o sistema representado abaixo, onde um compartimento de volume V, dividido em dois volumes de 0,25 V e um de 0,50 V. Um dos volumes menores foi preenchido com 0,75 mols de N_2 e o outro dos volumes menores com 0,25 mols de O_2, ambos a 300 K, como ilustrado abaixo. Em um certo momento, a barreira que divide o volume é removida. Considere ainda que os gases são ideais.



a) Calcule a variação de entropia do N_2 e do O_2 entre os estados final e inicial sabendo que a temperatura permanece constante. Indique os cálculos a partir da derivada total apropriada.
b) Calcule a variação de entropia total do sistema entre o estado inicial e final (após a remoção das divisórias).
c) Explique porque a mistura de O_2 e N_2, nas condições descritas, pode ser considerada como um processo adiabático ($dq = 0$).
d) Algumas vezes os alunos respondem o item a dizendo que a variação de entropia é zero pois a entropia é definida como $dS = dq_{rev}/T$ e, sendo o processo adiabático (item c), dS também deveria ser zero. Explique qual é o problema com esse raciocínio.

6) Você sabe que a combustão incompleta de combustíveis fósseis pode gerar monóxido de carbono e dióxido de carbono, gases importantes no efeito estufa tido como responsável pelo aquecimento global. Em função disso, o estudo da reação

$$CO(g) + H_2O(g) \rightarrow CO_2(g) + H_2(g)$$

é de fundamental importância sob o ponto de vista prático. A partir dos dados fornecidos, calcule:

a) verifique se a reação é favorável a 298 K
b) determine a temperatura na qual a reação se torna favorável no sentido oposto. Considere que apenas o $C_{P,m}$, das espécies envolvidas pode ser considerado constante nesse intervalo de temperatura.

Dados:
$\Delta_f H^0_{298}(_{CO,g})$ = -110,52 kJ mol^{-1}; $\Delta_f H^0_{298}(_{H2O,g})$ = -241,83 kJ mol^{-1}; $\Delta_f H^0_{298}(_{CO2,g})$ = -393,54kJ mol^{-1}. Para a reação direta: $\Delta_r S^0_{298}$ = -42,4 J mol^{-1} K^{-1};
$C_{P,m}$ (298 K)($CO_{(g)}$) = 29,14 J mol^{-1} K^{-1}; $C_{P,m}$ (298 K)($H_2O_{(g)}$) = 33,58 J mol^{-1} K^{-1};
$C_{P,m}$ (298 K)($CO_{2(g)}$) = 37,11 J mol^{-1} K^{-1}; $C_{P,m}$ (298 K)($H_{2(g)}$) = 28,82 J mol^{-1} K^{-1}.