

Nome:

Nº USP:

**Equilíbrio Químico****Instruções:**

Essa atividade deve ser entregue individualmente, podendo ser realizada em grupo, caso desejem. Justifique bem as suas respostas e demonstre os cálculos.

Entregue até o **dia 15/09/2022**, através do formulário abaixo.

Para melhor organização, entregar a atividade pelo Google Forms:

<https://forms.gle/MozhxWJfN5DhUNb26> (configuração para entrega: fazer login com email @usp.br, anexar até 10 arquivos - mas se possível, entregar em 1 arquivo só - , com tamanho máximo total de 100 MB por pessoa).

**Questão 1.** Nas reações abaixo, o estado físico de produtos e reagentes foi proposadamente omitido. Classifique-as como equilíbrio homogêneo ou heterogêneo e escreva a equação da constante de equilíbrio (pode ser  $K_p$  ou  $K_c$ , especificando qual).

- a)  $C + 2H_2 \rightleftharpoons CH_4$
- b)  $H_2C=CH_2 + H_2 \rightleftharpoons C_2H_6$
- c)  $2Mg + O_2 \rightleftharpoons 2MgO$
- d)  $AgCl \rightleftharpoons Ag^+ + Cl^-$

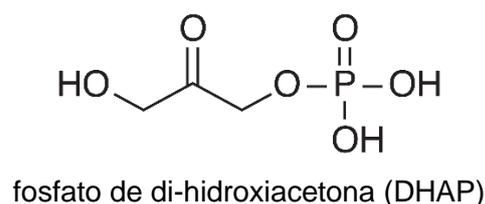
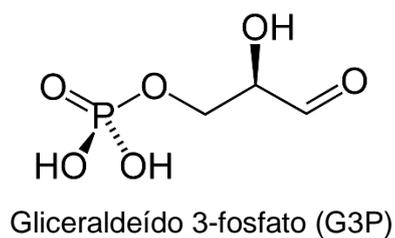
**Questão 2.** A 500 K, a reação  $PCl_3(g) + Cl_2(g) \rightleftharpoons PCl_5(g)$  tem  $K_c = 2,1$ . Dois recipientes mantidos a essa temperatura constante e inicialmente em equilíbrio, tiveram seu equilíbrio perturbados de forma diferente:

- Sistema A: perturbado de forma que as concentrações finais de produtos e reagentes fossem  $[PCl_3] = 0,0563$ ;  $[Cl_2] = 0,0784$ ;  $[PCl_5] = 0,8934$ .
- Sistema B: perturbado de forma que as concentrações finais de produtos e reagentes fossem  $[PCl_3] = 0,4390$ ;  $[Cl_2] = 0,3547$ ;  $[PCl_5] = 0,1048$ .

O que se pode dizer sobre cada um dos dois casos após essa perturbação? Para qual lado a reação irá, para reestabelecer o equilíbrio? Justifique.

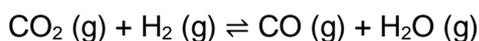
**Questão 3.** A reação  $2HI(g) \rightleftharpoons H_2(g) + I_2(g)$  tem uma constante de equilíbrio  $K_p = 1,82 \times 10^{-2}$  a 698 K. Mantendo essa temperatura constante, é adicionado a um recipiente a pressão parcial de 1 atm de HI e deixado até o equilíbrio. Qual será a pressão parcial de todos os gases no equilíbrio?

**Questão 4.** A conversão de gliceraldeído 3-fosfato (*glyceraldehyde 3-phosphate* ou G3P) em fosfato de di-hidroxiacetona (dihydroxyacetone phosphate ou DHAP) catalisada pela enzima triose-fosfato isomerase tem  $K_c = 22,2$ .



- Escreva a equação de  $K_c$  nessa conversão de G3P para DHAP.
- Qual dos compostos será favorecido (produzido em maior quantidade) nessa reação?
- Descreva como a constante de equilíbrio muda conforme a adição da enzima nesse processo.

**Questão 5.** A reação não balanceada entre  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2$  gasosos é mostrada abaixo.



No equilíbrio, as concentrações dos gases encontradas são:

$$[\text{CO}_2]_{\text{eq}} = 0,0954 \text{ mol L}^{-1}$$

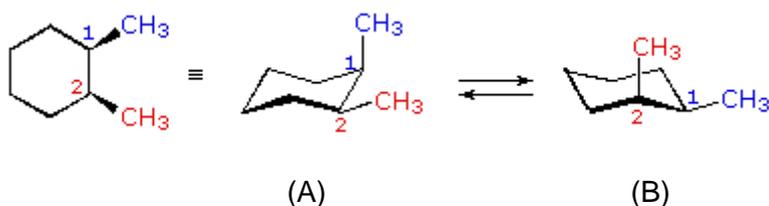
$$[\text{CO}]_{\text{eq}} = 0,0046 \text{ mol L}^{-1}$$

$$[\text{H}_2]_{\text{eq}} = 0,0454 \text{ mol L}^{-1}$$

$$[\text{H}_2\text{O}]_{\text{eq}} = 0,0046 \text{ mol L}^{-1}$$

Calcule  $K_c$ .

**Questão 6.** A molécula de 1,2-dimetilciclohexano pode existir em duas conformações, conforme figura abaixo.



Calcule a constante de equilíbrio dessa reação de mudança de conformação, sabendo que nessa temperatura 68,7% das moléculas estão na conformação (A).

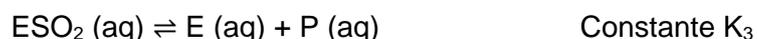
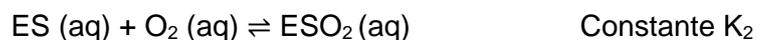
**Questão 7.** A decomposição térmica do  $\text{NH}_4\text{Cl}$  é dada pela equação



Cuja constante de equilíbrio a  $275^\circ\text{C}$  é  $K_p = 1,04 \times 10^{-2}$ .

Em um experimento, a pressão parcial de  $\text{NH}_3(\text{g})$  e de  $\text{HCl}(\text{g})$  foi deixada igual no sistema, cuja pressão total era de 0,200 atm. Nessas condições, em qual direção a reação deve proceder? Justifique com base no cálculo do coeficiente de reação (Q).

**Questão 8.** Na equação de uma reação enzimática de oxidação, mostrada abaixo, ES representa o complexo formado entre enzima e substrato. Na etapa final, o produto P formado se dissocia do complexo ESO<sub>2</sub>, que regenera a atividade enzimática.



Calcule a equação da constante global  $K = K_1 \times K_2 \times K_3$ .

**Questão 9.** O tampão carbonato/bicarbonato é responsável por 64% do controle do pH no organismo (entre 7,35 e 7,45). Os demais 36% são controlados por outros tampões, conforme mostrado na tabela 1:

Tabela 1. Principais sistemas tampão do organismo.

Composição do Sistema	Percentual do total
Bicarbonato / Ácido Carbônico	64 %
Hemoglobina / Oxihemoglobina	28 %
Proteínas ácidas / Proteínas básicas	7 %
Fosfato monoácido / Fosfato diácido	1 %

Dois órgãos são responsáveis pela regulação do pH: pulmão e rim. Os pulmões regulam o pH através da respiração, enquanto os rins eliminam ácidos não voláteis e não carbônicos. O pH global é resultado de um delicado equilíbrio entre os componentes metabólico e respiratório:

$$pH = \frac{\text{Componente metabólico}}{\text{Componente respiratório}}$$

A faixa normal para a pressão parcial de CO<sub>2</sub> (pCO<sub>2</sub>) é de 35 a 45 mmHg. Em condições de hipotermia, a temperatura corporal diminui, dificultando a interpretação e o significado dos parâmetros do equilíbrio ácido-base no organismo. Estamos habituados a considerar normais o pH de 7,40 e a pCO<sub>2</sub> de 40mmHg. Entretanto, isto é correto apenas à temperatura de 37°C. Se colhermos uma quantidade de sangue arterial normal, a 37°C e resfriarmos uma amostra, o CO<sub>2</sub> se tornará mais solúvel. Em consequência, a pCO<sub>2</sub> será mais baixa, para manter constante o conteúdo total de CO<sub>2</sub>. O pH será mais elevado, na proporção de 0,0157 para cada grau de redução de temperatura.

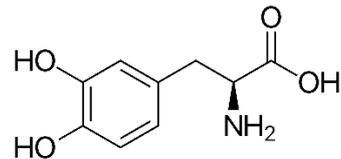
Com base no texto, responda:

- a) Utilizando as reações envolvidas nos equilíbrios ácido-base no organismo, sugira uma hipótese que explique por que o pulmão isoladamente não conseguirá manter o tampão sanguíneo, e precisará do controle metabólico exercido pelos rins.

- b) Com base nos conceitos de equilíbrio químico, explique porque o equilíbrio ácido-base no organismo em condição de hipotermia é diferente daquele na temperatura basal do corpo.

**Questão 10.** A ausência de dopamina – 2-(3,4-dihidroxifenil)etilamina) – em regiões específicas do cérebro é apontada como a principal causa da síndrome de Parkinson. Um dos tratamentos utilizados é a administração oral do seu precursor biológico, a molécula L-DOPA (L-3,4-dihidroxifenilalanina), através do fármaco conhecido como levodopa, que após passar a

barreira hematoencefálica (BHE), é rapidamente transformado em dopamina pela enzima dopa-descarboxilase. A administração direta de dopamina não é eficiente para esse tratamento, pois ela não passa pela BHE.



Estrutura da L-DOPA

Essa molécula, portanto, é amplamente estudada e seu equilíbrio químico bem caracterizado, tendo algumas características bem interessantes.

- a) Veja, por exemplo, no post [https://en.wikipedia.org/wiki/Equilibrium\\_constant](https://en.wikipedia.org/wiki/Equilibrium_constant), item *Micro-constant*. Explique o significado de micro-constante de equilíbrio e macro-constante de equilíbrio, mostrando suas diferenças.
- b) Explique o que acontece com essa molécula e com os equilíbrios mostrados no item A quando o fármaco levodopa é administrado em um paciente, considerando as situações:
- no estômago (na presença de HCl);
  - na corrente sanguínea (em tampão fisiológico).

**Final:** Para uma discussão bem legal sobre  $\Delta G$  e constante de equilíbrio em sistemas bioquímicos, recomendo a leitura do artigo:

<https://iubmb.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1016/0307-4412%2881%2990102-3>, sobre aspectos termodinâmicos da glicólise. Atendem para a discussão de  $\Delta G^0$  e  $\Delta G$ .