

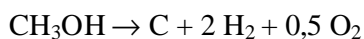
ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PQI 2110 - QUÍMICA TECNOLÓGICA GERAL - 2009
GABARITO DA LISTA DE EXERCÍCIOS DE TERMODINÂMICA E COMBUSTÃO
(QUESTÕES NUMÉRICAS)

- 1) (a) $w = -450$ J, realizado pelo sistema
 (b) $q = -240$ J, sistema perde calor
- 2) $w = -60,8$ J
- 3) $w = -0,94$ kJ
- 4) $w = -1,93$ kJ
- 5) (a) $q = -6,5$ kJ (reação exotérmica)
 (b) $q = -15,3$ kJ (reação exotérmica)
- 6) $C_{Fe} = 476$ J/kg.K = 0,114 cal/g. °C
- 10) (a) $\Delta H = -50$ kJ; $\Delta U = -70$ kJ
 (b) $\Delta H = +30$ kJ; $\Delta U = +70$ kJ
- 11) (a) $\Delta H_{vap} = +31$ kJ/mol
 (b) $\Delta H_{vap} = +44$ kJ/mol
- 12) $\Delta H_{comb} = -3271$ kJ/mol de benzeno
- 13) $\Delta H = -2544$ kJ. Não haveria diferença, pois $\Delta(pV) = \Delta(nRT) = 0$.
- 16) $\Delta H_{sis} = -654$ J, $\Delta H_{neut} = -53,4$ kJ/mol de HCl
- 17) (a) não; (b) $\Delta S_{viz} = 109,6$ J/K
- 18) a) Água pois $S(\text{líquidos}) > S(\text{sólidos})$
 b) Polietileno a 25 °C, pois T é maior
 c) Iodo por é átomo mais pesado. ($Z(\text{Br}) = 35$, $Z(\text{I}) = 53$)
 d) 1-Penteno pois tem molécula mais complexa
 e) Cobre pois tem estrutura cristalina menos rígida
 Justificativa: aplicar a fórmula de Boltzmann, comparando W .
- 20) Sim, $\Delta S_{total} = 0,0$ J/K.
- 21) a) $\Delta G = -219$ J/mol \rightarrow espontâneo
 b) $\Delta G = 0,0$ J/mol \rightarrow equilíbrio
 c) $\Delta G = +221$ J/mol \rightarrow não espontâneo
- 23) a) 5,0 kJ/K; b) 3,2 mJ/K; c) 5,71 J/K; d) 0,40 J/K; e) 0,32 J/K; f) -0,31 J/K
- 25) $T_{min} = 565$ °C

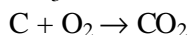
28)

A) Cálculo completo PCI

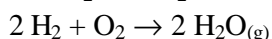
Para CH₃OH, por exemplo:



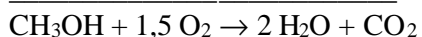
$$\Delta H = -\Delta H_{\text{formação}} = +48,03 \text{ kcal}$$



$$\Delta H = 1 \times (-96,7) = -96,7 \text{ kcal}$$



$$\Delta H = 2 \times (-57,8) = -115,6 \text{ kcal}$$



$$\Delta H = 48,03 + (-96,7) + (-115,6) = -164,3 \text{ kcal}$$

$$\text{PCI} = |-164,3| / 32 = 5133 \text{ kcal/kg}$$

Generalizando:

$$\Delta H_{\text{total}} = -\Delta H_{\text{formação}} + \Delta H_{\text{C}} + \Delta H_{\text{H}_2} = -\Delta H_{\text{formação}} + n_{\text{C}}(-96,7) + n_{\text{H}_2}(-57,8)$$

$$\text{PCI} = |\Delta H_{\text{total}}| / \text{massa molecular}$$

		$-\Delta H_{\text{formação}}$	ΔH_{C}		ΔH_{H_2}		ΔH_{total} kcal/mol	MM g/mol	PCI kcal/g
			C	kcal/mol	H ₂	kcal/mol			
a	CH ₃ OH	48,03	1	-96,7	2	-115,6	-115,60	32	5.13
b	C ₂ H	-135,33	2	-193,4	1	-57,8	-28,90	26	14.31
c	C ₂ H ₆	20,04	2	-193,4	3	-173,4	-173,40	30	11.56
d	mistura	1,3956	2	-193,4	5,4	-312,12	-156,06	34,8	11.84
e	C ₂ H ₂	-54,54	2	-193,4	1	-57,8	-57,80	26	11.76
f	C ₃₆ H ₇₄	173,21	36	-3481,2	74	-4277,2	-2138,60	580	10.76
g	HCCOH	-18,7	2	-193,4	1	-57,8	-57,80	42	6.43

B) Fórmula simplificada PCI

$$\Delta H_{\text{total}} = \Delta H_{\text{C}} + \Delta H_{\text{H}_2 \text{ livre}} - \Delta H_{\text{vap H}_2\text{O ligada}} = n_{\text{C}} (-96,7) + n_{\text{H}_2 \text{ livre}} (-57,8) - n_{\text{H}_2\text{O ligada}} (-10,5)$$

		C	ΔH_{C} kcal/mol	H ₂	O	H ₂ livre	$\Delta H_{\text{H}_2 \text{ livre}}$ kcal/mol	H ₂ O ligada	$\Delta H_{\text{vap H}_2\text{O ligada}}$ kcal/mol	ΔH_{total} kcal/mol	MM g/mol	PCI kcal/g
a	CH ₃ OH	1	-94,05	2	1	1	-57,8	1	+10,5	-144,00	32	4.50
b	C ₂ H	2	-188,1	1		1	-57,8			-222,30	26	8.89
c	C ₂ H ₆	2	-188,1	3		3	-173,4			-366,80	30	12.23
d	mistura	2	-188,1	5,4		5,4	-312,1			-349,46	34,8	11.89
e	C ₂ H ₂	2	-188,1	1		1	-57,8			-251,20	26	9.66
f	C ₃₆ H ₇₄	36	-3386	74		74	-4277			-5619,80	580	11.11
g	HCCOH	2	-188,1	1	1	0	0	1	+10,5	-182,90	42	4.35

Comparação dos PCIs

		simplificado kcal/g	completo kcal/g	diferença	
				kcal/g	%
a	CH ₃ OH	4.50	5.13	0.633	12.3
b	C ₂ H	8.89	14.31	5.413	37.8
c	C ₂ H ₆	12.23	11.56	-0.668	-5.8
d	mistura	11.89	11.84	-0.047	-0.4
e	C ₂ H ₂	9.66	11.76	2.098	17.8
f	C ₃₆ H ₇₄	11.11	10.76	-0.342	-3.2
g	HCCOH	4.35	6.43	2.071	32.2

Quando o combustível **não contém oxigênio**, o cálculo simplificado fornece um PC subestimado quando a formação do combustível é endotérmica (C₂H, C₂H₂), e vice-versa. Quando ele **contém oxigênio**, o desvio será nulo quando a entalpia de formação for igual à formação da “água ligada” calculada (-57,80 kcal/mol para cada mol de O). Quando ela for menos negativa que isso, como no caso do CH₃OH e do HCCOH (-48,03 e 18,70 kcal/mol para um mol de O, respectivamente), o valor de PC será subestimado, e vice-versa.

29)

	Comb. A	Comb. B	Comb. C
a) O ₂ teórico (mol/kg)	68	67	69
Ar teórico (mol/kg)	324	319	329
Ar real (mol/kg)	486	479	493
b) PCS (kcal/kg)	7030	6893	7034
PCI (kcal/kg)	6715	6599	6719
c) PCS (kcal/kg)	7108	6970	7117
PCI (kcal/kg)	6780	6664	6789
d) Água ligada (mol/kg)	0	2	4
f) H ₂ livre (mol/kg)	24	22	20
g) Composição dos fumos, base úmida (% mol):			
CO ₂	10,9	11,1	11,2
H ₂ O	6,0	5,6	5,9
SO ₂	0,2	0,2	0,3
N ₂	76,2	76,3	75,9
O ₂	6,7	6,7	6,7
Composição dos fumos, base seca (% mol):			
CO ₂	11,6	11,7	11,9
SO ₂	0,2	0,2	0,3
N ₂	81,0	80,9	80,6
O ₂	7,2	7,2	7,2
h) Composição dos fumos, base úmida (% mol):			
CO ₂	16,1	16,3	16,5
H ₂ O	8,8	8,3	8,6
SO ₂	0,3	0,3	0,4
N ₂	74,9	75,1	74,5
O ₂	0,0	0,0	0,0
Composição dos fumos, base seca (% mol):			
CO ₂	17,6	17,8	18,0
SO ₂	0,3	0,3	0,5
N ₂	82,1	81,9	81,5
O ₂	0,0	0,0	0,0