FCAV/ UNESP

Assunto: Equilíbrio Químico e Auto-ionização da Água

Docente: Profa. Dra. Luciana M. Saran

1. Introdução

- ✓ Existem dois tipos de reações:
 - a) aquelas em que, após determinado tempo, pelo menos um dos reagentes foi totalmente consumido;

Ex.:
$$Zn(s) + 2HCl(aq) \rightarrow ZnCl_2(aq) + H_2(g)$$
 (1)

b) aquelas que, após determinado tempo, apresentam quantidades de reagentes que não variam mais.

Ex.:
$$H_2(g) + I_2(g) \rightleftharpoons 2HI(g)$$
 (2)

No caso da reação 2, após determinado tempo, atingi-se o **Equilíbrio Químico**, isto é:

- ✓ as quantidades de reagentes deixam de diminuir, permanecendo constantes;
- ✓ as quantidades de produtos deixam de aumentar, também permanecendo constantes.

2. A Constante de Equilíbrio

- ✓ As quantidades de reagentes e produtos existentes no equilíbrio, a uma dada temperatura, se relacionam através de uma grandeza denominada constante de equilíbrio, K.
- ✓ Para a equação simbólica a seguir:

$$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$$

$$K = \frac{[C]^{c}[D]^{d}}{[A]^{a}[B]^{b}}$$

- ✓ Cada reação possui uma constante de equilíbrio característica, cujo valor depende da temperatura.
- ✓ O valor de K, depende dos coeficientes estequiométricos da equação química balanceada; por isso todo valor de constante de equilíbrio deve ser acompanhado da equação química a que se refere.

2.1. Expressões da Constante de Equilíbrio para Reações que Envolvem Sólidos e Água

- ✓ Na expressão da constante de equilíbrio não devem ser incluídas substâncias no estado sólido ou líquido.
- ✓ Exemplos:

a) C(s) + O₂(g)
$$\rightleftharpoons$$
 CO₂(g) $=$ K = $\frac{[CO_2]}{[O_2]}$

b)
$$NH_3(aq) + H_2O(I) \iff NH_4^+(aq) + OH^-(aq)$$

$$K = \frac{[NH_4^+][OH^-]}{[NH_3]}$$

2.2. Expressão da Constante de Equilíbrio

 \checkmark É bastante comum que na expressão da constante de equilíbrio se exprimam as concentrações em mol L⁻¹ e por isso o símbolo K recebe o índice \mathbf{c} (de concentração) e torna-se $K_{\mathbf{c}}$ ou simplesmente K.

2.3. Significado da Constante de Equilíbrio

- ✓ O valor da constante de equilíbrio mostra se a reação é favorável aos produtos ou aos reagentes.
- ✓ Quanto maior o valor da constante de equilíbrio, maior o rendimento da reação.
 - **K > 1:** A reação é *favorável aos produtos;* as concentrações dos produtos no equilíbrio são maiores do que as dos reagentes.
 - K < 1: A reação é favorável aos reagentes; as concentrações dos reagentes no equilíbrio são maiores do que as dos produtos.

3. Perturbação do Equilíbrio Químico: Princípio de *Le Chatelier*

"Quando qualquer um dos fatores que determinam as condições de equilíbrio de um sistema reacional sofre uma modificação, o sistema altera o seu estado de maneira a *reduzir* ou *contrabalançar* o efeito da modificação."

Exemplo: efeito da adição de um reagente ou produto sobre o equilíbrio e sobre *K*.

Perturbação	Alteração quando o Sistema Reacional Retorna ao Equilíbrio	Efeito sobre o Equilíbrio	Efeito sobre
✓ Adição de reagente	✓ Parte do reagente adicionado é consumida	✓ Deslocamento para a direita	✓ Não há alteração
✓ Adição de produto	✓ Parte do produto adicionado é consumido	✓ Deslocamento para a esquerda	✓ Não há alteração

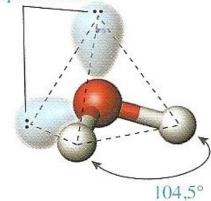
Fonte: Adaptado de KOTZ & TREICHEL, 2005 : p. 73.

- ✓ Fórmula molecular: H₂O.
- ✓ Geometria: angular.

$$H-\ddot{O}-H$$

(b)

Pares de elétrons não compartilhados

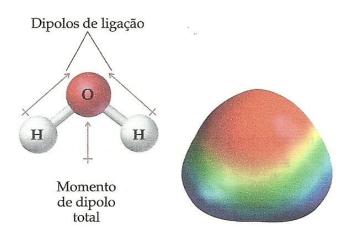


- (a) Fórmula estrutural (estrutura de Lewis).
- (b) Modelo de esferas e bastões.

Fonte: BROWN et al., 2005 : p. 302.

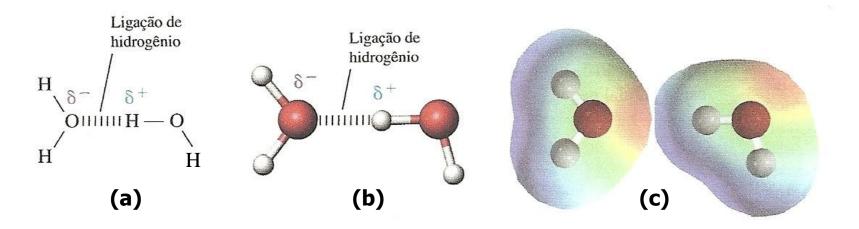
✓ Molécula de H₂O: apresenta ligações H-O polares.

✓ A molécula de H_2O é **polar** ($\mu = 1.85$ D).



Fonte: BETTELHEIM et al., 2012 : p. 82.

- ✓ Entre as moléculas de H₂O ocorre um tipo de interação denominada *ligação de hidrogênio*.
- ✓ Ligação de hidrogênio: força de atração, não covalente, entre a carga parcial positiva de um átomo de H ligado a um átomo de elevada eletronegatividade (geralmente O ou N) e carga parcial negativa de um oxigênio ou nitrogênio próximos.



Duas moléculas de água unidas por *ligação de hidrogênio*. (a) Fórmulas estruturais. (b) Modelos de esferas e bastões. (c) Mapas de densidade eletrônica.

Fonte: BETTELHEIM et al., 2012 : p. 137.

Ligações de hidrogênio entre moléculas de água.

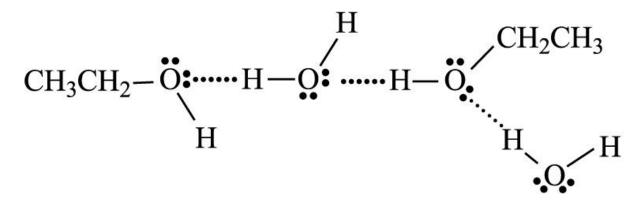
- ✓ Ligações de hidrogênio não se restringem à água.
- ✓ Formam-se entre duas moléculas sempre que uma delas tem um átomo de hidrogênio ligado ao O ou N, e a outra, um átomo de O ou N com carga parcial negativa.

✓ Exemplo 1:

Ligação de hidrogênio entre a molécula de um éter e da água.

Fonte: BARBOSA, 2004: p. 21.

✓ Exemplo 2:



Representação das interações entre moléculas de água e etanol

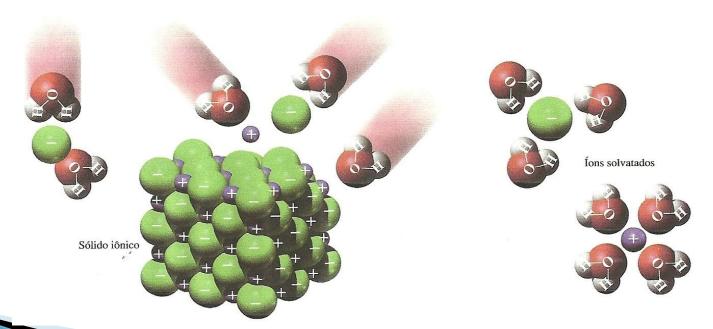
Fonte: BARBOSA, 2004 : p. 22.

✓ Exemplo 3:

Ligações de hidrogênio entre moléculas de ácido carboxílico.

Fonte: BARBOSA, 2004 : p. 22.

- ✓ Excelente solvente (solvente universal).
- ✓ Capaz de dissolver diferentes compostos iônicos e moleculares.
 - Exemplo: dissolução do NaCl (sólido iônico) em H₂O.

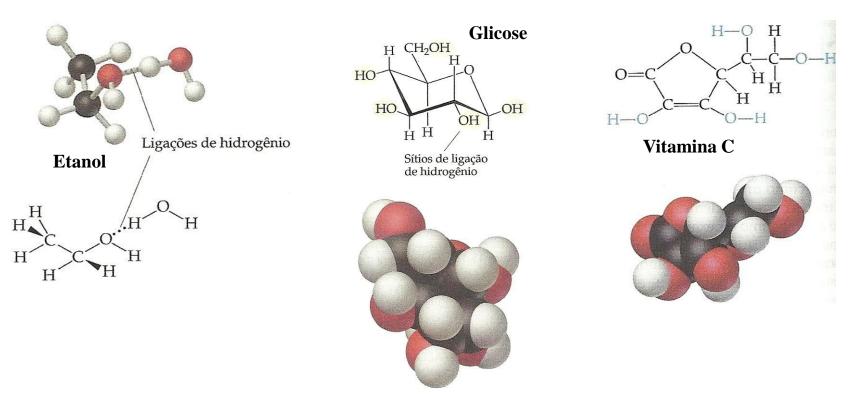


Fonte: BETTELHEIM et al., 2012 : p. 169.

✓ Interação Íon-Dipolo:

Fonte: BARBOSA, 2004 : p. 17.

✓ Etanol, glicose e ácido ascóbico ou vitamina C, são exemplos de compostos moleculares solúveis em água.



Fonte: BROWN et al., 2005 : p. 453.

Exercício 1: preveja se cada uma das seguintes substâncias apresenta maior probabilidade de se dissolver em tetracloreto de carbono (CCl₄) ou em água. Justifique a sua resposta.

- (a) heptano, C_7H_{16}
- (b) sulfato de sódio, Na₂SO₄
- (c) cloreto de hidrogênio, HCl
- (d) iodo, I_2 .

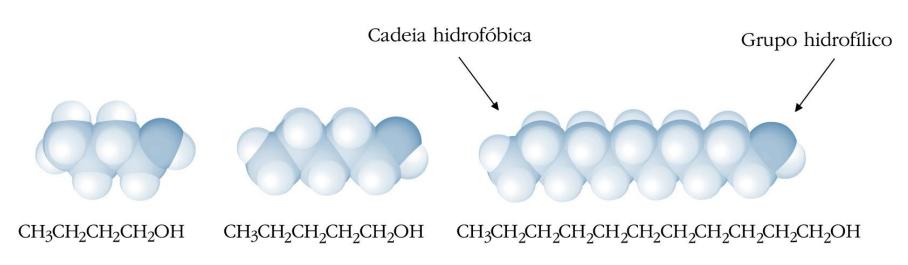
Exercício 2: coloque as substâncias a seguir, em ordem crescente de solubilidade em água:

- (a) pentano, C_5H_{12}
- (b) pentan-1-ol, C₅H₁₁OH
- (c) pentano-1,5-diol, $C_5H_{10}(OH)_2$

Exercício 3: dada a seguir, a fórmula estrutural da vitamina A, explique por que essa vitamina é solúvel em solventes apolares e nos tecidos gordurosos (que são apolares) e "insolúvel" em água.

Fonte: BROWN et al., 2005 : p. 453.

Exercício 4: dadas a seguir, as fórmulas estruturais dos álcoois *butan-1-ol*, *pentan-1-ol* e *undecan-1-ol*, coloque-os em ordem de solubilidade crescente: (a) em água; (b) hexano (C_6H_{14}) . Justifique a sua resposta.



Fonte: BARBOSA, 2004 : p. 23.

5. Auto-ionização da Água

√ Água Pura: considerada, em geral, não condutora de eletricidade.

Na realidade, já foi demonstrado por medidas precisas que a água apresenta uma condução pequena de eletricidade, que decorre da sua auto-ionização, isto é:

$$H_2O(I) + H_2O(I) \rightleftharpoons H_3O^+(aq) + OH^-(aq)$$

ou

$$H_2O(I) \Longrightarrow H^+(aq) + OH^-(aq)$$

5. Auto-ionização da Água

✓ A expressão que representa o equilíbrio de auto-ionização da água é a seguinte:

$$K_{W} = [H^{+}].[OH^{-}]$$
 ou $K_{W} = [H_{3}O^{+}].[OH^{-}]$

 K_{w} : constante do produto iônico da água

✓ A 25°C, o valor das concentrações dos íons é:

$$[H_3O^+] = [OH^-] = 1,0x10^{-7} \text{ mol/L}$$
 e portanto,

$$K_{W} = (1,0x10^{-7}) \times (1,0x10^{-7})$$

$$K_{\rm w} = 1.0 \times 10^{-14}$$

✓ Condições para que uma solução seja considerada ácida, neutra ou alcalina (básica):

```
se [H_3O^+] = [OH^-] \Rightarrow a solução é neutra;
se [H_3O^+] > [OH^-] \Rightarrow a solução é ácida;
se [H_3O^+] < [OH^-] \Rightarrow a solução é alcalina ou básica.
```

- ✓ A água pura é neutra, pois apresenta concentrações iguais de H_3O^+ e OH^- . Conforme já visto, a 25°C, tais concentrações são iguais a 1,0x10⁻⁷ mol/L.
- ✓ A equação referente a ionização da água é importante porque se aplica não só à água pura, mas também a qualquer solução aquosa.

EXERCÍCIO 5: O corpo humano contém aproximadamente 70% de água em massa. Na temperatura normal do corpo humano, 37° C, a concentração do íon H⁺ em água pura é 1,54x10⁻⁷ mol L⁻¹. Qual o valor de K_{w} nesta temperatura?

Resp.: 2,37x10⁻¹⁴

EXERCÍCIO 6: A 50°C o produto iônico da água, K_w , é 5,5x10⁻¹⁴. Calcule $[H_3O^+]$ e $[OH^-]$ numa solução neutra a 50°C?

Resp.: 2,35x10⁻⁷ mol L⁻¹

EXERCÍCIO 7: explique como é afetado o equilíbrio de auto-ionização da água, pela adição de HCl. Considere a adição de 0,010 mol de HCl a 1 L de água pura e calcule a concentração molar de OH⁻ na solução resultante.

EXERCÍCIO 8: explique como é afetado o equilíbrio de auto-ionização da água, pela adição de NaOH. Considere a adição de 0,010 mol de NaOH a 1 L de água pura e calcule a concentração molar de H₃O+ na solução resultante.

6. Bibliografia Consultada

BARBOSA, L. C. de A. Introdução à química orgânica. 1. ed. São Paulo: Prentice Hall, 2004.

BETELLHEIM, F. A.; BROWN, W. H.; CAMPEBELL, M. K.; FARRELL, S. O. **Introdução à química geral**. 9. ed. São Paulo:Cengage Learning, 2012.

BROWN, T. L.; LEMAY, H. E.; BURSTEN, B. E.; BURDGE, J. R. Química a ciência central. 9. ed. São Paulo:Pearson Prentice Hall, 2005.

KOTZ, J. C.; TREICHEL Jr., P. M. **Química geral 2 e reações químicas**. 5. ed. São Paulo:Pioneira Thomson Learning, 2005.