

# Qualidade Ambiental Química

## Programa

- Revisão dos Conceitos Básicos de Química e Estatística
- Poluição do Ar e a Química da Troposfera
- Reações Químicas ligadas à Emissão de Poluentes da Atmosfera

# Bibliografia

---

- Utimura, T. Y., Linguanoto, M. "Química: livro único", Ed. FTD S.A., 1a. Edição, 1998.
- Finlayson-Pitts, B. J., Pitts Jr., J. N., "Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere: Theory, experiments and Applications", Academic Press, 1a. Edição, 2000.
- Seinfeld, J. H., Pandis, S. N., "Atmospheric Chemistry and Physics: from air pollution to climate change", Wiley-Interscience Publication, 1a. Edição, 2000.

---

## **Revisão dos Conceitos Básicos de Química e Estatística**

# Revisão dos Conceitos Básicos de Química e Estatística

## ■ Química

- Noções fundamentais
- Modelo Atômico Atual
- Classificação Periódica dos Elementos Químicos
- Reações Químicas
- Funções Inorgânicas (ácidos, bases, sais e óxidos)
- Átomos e moléculas
- Estudo do comportamento físico dos gases

## ■ Estatística

- Conceitos Básicos de Estatística, Média, Variância, Desvio Padrão, Função de Distribuição de Probabilidade, Quartil, Percentil e Tamanho da Amostra

# Noções fundamentais

- **Definição de sistema:** É uma porção do Universo isolada para estudo. Exemplo: Um copo d'água (sistema: copo de água e meio ambiente: tudo que cerca o copo de água)

- Os sistemas podem ser:



abertos



fechados



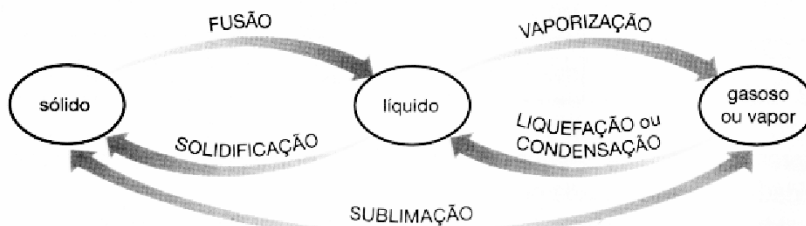
isolados

## Noções fundamentais

- Definição de Fenômeno Químico e Físico: Fenômeno é qualquer transformação que ocorre no sistema.
- **Fenômeno Químico** é aquele que altera a natureza dos tipos de matéria que formam o sistema (formação de ferrugem, queima do álcool e do papel)
- **Fenômeno Físico** é aquele que não altera a natureza dos tipos de matéria que formam o sistema (fundir ferro, evaporar álcool, rasgar papel).

## Noções fundamentais

- Dentre os fenômenos físicos tem-se as **mudanças de estado físicos**:
  - Fusão, solidificação, vaporização (evaporação e ebulição), condensação (e liquefação) e sublimação



## Noções fundamentais

---

### ■ Átomo e Elemento Químico

- **Átomos** são minúsculas partículas que compõem a matéria formados por três tipos de partículas subatômicas (elétrons, prótons e neutrons). Os átomos diferem pelo número de prótons que seu determina o numero atômico.
- Os **elementos químicos** é um conjunto de átomos com o mesmo número de prótons

## Noções fundamentais

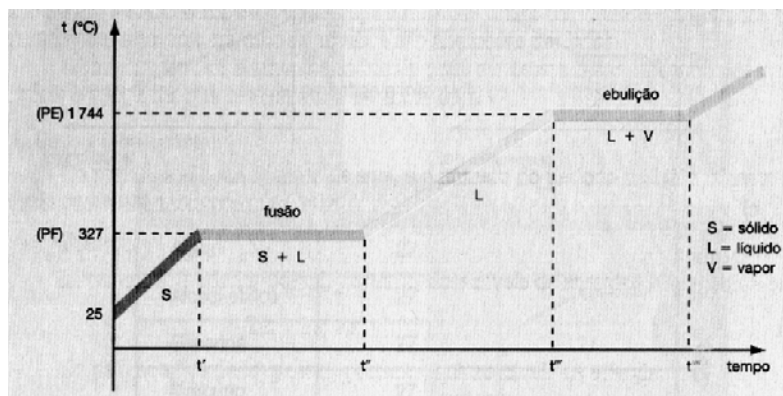
---

### ■ Substâncias Simples e Compostas

- **Substância simples** é formada por átomos de um só elemneto químico (Oxigênio -  $O_2$ , Ozônio -  $O_3$ , Hidrogênio -  $H_2$ , Diamante -  $C_n$ ).
- **Substância composta** é formada por átomos de dois ou mais elementos químicos (água -  $H_2O$ , Gás carbônico -  $CO_2$ )

## Noções fundamentais

- Propriedades físicas da matéria (densidade ou massa específica, temperatura de fusão e de ebulição)



## Modelo Atômico Atual

- **Número Atômico** ( $Z$ ) é o número de prótons presentes no átomo. Para cada tipo de átomo tem-se um determinado valor de número atômico. Cada valor identifica um elemento químico. Atualmente conhecemos os números atômicos até o valor 112. O átomo eletricamente neutro apresenta número de prótons igual ao número de elétrons.
- **Número de Massa** ( $A$ ) é o número obtido pela soma do número de prótons e nêutrons.
  - ${}_Z^A\text{E}$  ou  ${}_Z^A\text{E}$ , por exemplo:  ${}_{11}\text{Na}^{23}$  ou  ${}_{11}^{23}\text{Na}$

# Modelo Atômico Atual

- Eletrosfera:

- Os elétrons estão distribuídos na **eletrosfera** em níveis e sub-níveis energéticos (camadas e sub-camadas eletrônicas)

Níveis de energia	1	2	3	4	5	6	7
Subníveis de energia	s	s, p	s, p, d	s, p, d, f	s, p, d, f	s, p, d	s

# Classificação Periódica dos Elementos Químicos

- Os elementos podem ser classificados de acordo com suas propriedades como metais, semi metais, não-metais e gases nobres.

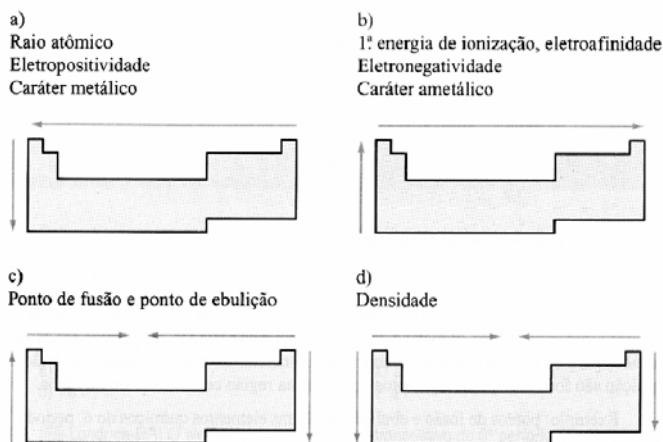
The periodic table displays elements from Hydrogen (H) to Oganesson (Og). It is divided into groups (1A to 8A) and periods (1 to 7). The lanthanide and actinide series are shown below the main table. Each element cell contains its symbol, atomic number, and name.





# Classificação Periódica dos Elementos Químicos

Esquema da variação das propriedades periódicas:

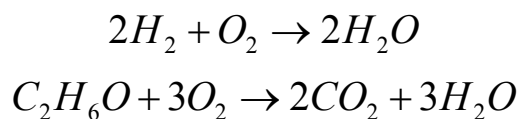


Observação

A seta (→) indica ordem crescente.

## Reações Químicas

- Cada reação é representada por uma equação química. Colocam-se os reagentes no primeiro membro e os produtos no segundo separados por uma seta ( $A + B \rightarrow C + D$ ). O número de cada átomo de cada elemento deve ser igual nos dois membros. Para conseguir esta igualdade faz-se o balanceamento da reação.



- As reações podem ser classificadas como: Reações de síntese (composição ou adição), de decomposição (de análise), de simples troca ou deslocamento e de dupla troca

# Estequiometria

Os cálculos estequiométricos estão baseados nas leis ponderais das reações químicas.

Deve-se, inicialmente, escrever a reação química, obtendo-se os números de mols de cada substância participante da reação.

Em uma equação química essas relações podem estar representadas das seguintes formas:

$\text{N}_2 + 3 \text{H}_2 \longrightarrow 2 \text{NH}_3$			
1 mol	3 mols	2 mols	(proporção em mol)
1 · 28 g	3 · 2 g	2 · 17 g	(proporção em massa)
1 · 6,02 · 10 <sup>23</sup> moléculas	3 · 6,02 · 10 <sup>23</sup> moléculas	2 · 6,02 · 10 <sup>23</sup> moléculas	(proporção em moléculas)
1 V	3 V	2 V	(proporção em volume)

Podem-se relacionar grandezas diferentes, desde que para a mesma substância seja usada a mesma grandeza.

## Exemplo 1

Na síntese parcial do gás carbônico, em determinadas condições de pressão e temperatura, partiu-se de 5 litros de monóxido de carbono. Pedem-se:

- volume de oxigênio consumido;
- volume de gás carbônico obtido.

### Resolução

Equação da reação:  $2 \text{CO}_{(g)} + \text{O}_{2(g)} \longrightarrow 2 \text{CO}_{2(g)}$

- Grandezas relacionadas: volume volume volume
- Da equação resulta: 2V V 2V

a) Cálculo do volume de oxigênio consumido

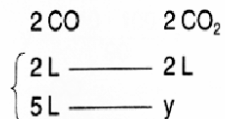
- Proporção resultante:

$$\begin{array}{l} 2 \text{CO} \quad \text{O}_2 \\ \left\{ \begin{array}{l} 2 \text{L} \text{ ——— } 1 \text{L} \\ 5 \text{L} \text{ ——— } x \end{array} \right. \\ x = \frac{5 \cdot 1}{2} = 2,5 \quad x = 2,5 \text{L} \end{array}$$

## Exemplo 1

b) Cálculo do volume de gás carbônico obtido

• Proporção resultante:



$$y = \frac{5 \cdot 2}{2} = 5 \qquad y = 5 \text{ L}$$

### Resposta

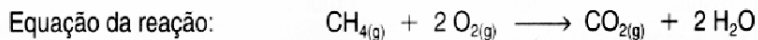
O volume de oxigênio é 2,5 L e o volume de gás carbônico é 5 L.

## Exemplo 2

Na combustão do metano ( $\text{CH}_4$ ), ocorre formação de gás carbônico e água. Ao se queimarem 3,2 gramas de metano, calcule:

- o volume de gás carbônico formado nas CNTP;
- o volume do gás carbônico formado a  $27^\circ\text{C}$  e 2 atm de pressão

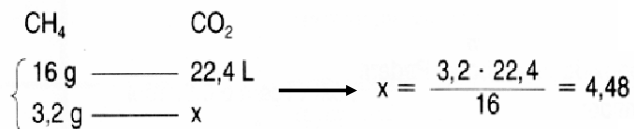
### Resolução



- Grandezas relacionadas: massa volume
- Da equação resulta: 1 mol  $\therefore$  16 g 1 mol  $\therefore$  22,4 L

a) Cálculo do volume de gás carbônico nas CNTP

• Proporção resultante:



## Exemplo 2

b) o volume do gás carbônico formado a 27 °C e 2 atm de pressão

Cálculo do volume de gás carbônico formado a 27 °C e 2 atm

Estado inicial (CNTP)

$$P_1 = 1 \text{ atm}$$

$$t_1 = 0 \text{ °C}$$

$$T_1 = 273 \text{ K}$$

$$V_1 = 4,48 \text{ L}$$

Estado final

$$P_2 = 2 \text{ atm}$$

$$t_2 = 27 \text{ °C}$$

$$T_2 = 300 \text{ K}$$

$$V_2 = ?$$

Pela equação dos gases:  $\frac{P_1 V_1}{T_1} = \frac{P_2 V_2}{T_2}$

$$\frac{1 \cdot 4,48}{273} = \frac{2 \cdot V_2}{300}$$

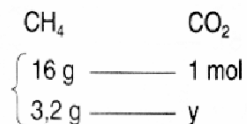
$$V_2 = 2,46 \text{ L}$$

## Exemplo 2

b) o volume do gás carbônico formado a 27 °C e 2 atm de pressão

Outra forma de calcular o volume nessas condições é por meio da equação de Clapeyron ( $PV = nRT$ ):

• Proporção resultante:



$$y = \frac{1 \cdot 3,2}{16} = 0,2$$

$$y = 0,2 \text{ mol de CO}_2$$

Substituindo-se os valores na equação de Clapeyron, temos:

$$2 \cdot V = 0,2 \cdot 0,082 \cdot 300 \Rightarrow V = 2,46$$

$$V = 2,46 \text{ L}$$

## Funções Inorgânicas (ácidos, bases, sais e óxidos)

---

- O grupo de substâncias que apresentam propriedades semelhantes é denominado *função química*.
- Ácido é toda substância que em água sofre ionização, formando cátion exclusivamente o  $H^+$ . Exemplos (pagina 98)
- As propriedades funcionais do ácido são: sabor azedo, conduzem corrente elétrica somente em solução aquosa devido a ionização e podem mudar de cor de acordo com o indicador utilizado.
- Base é toda substância que se dissocia em água fornecendo, como ânion, exclusivamente o ânion hidroxila ( $OH^-$ ). Exemplos (pagina 105)
- As propriedades funcionais da base são sabor cáustico, conduzem corrente elétrica no estado líquido ou em solução aquosa devido a presença de íons livres e podem mudar de cor de acordo com o

## Funções Inorgânicas (ácidos, bases, sais e óxidos)

---

- O caráter ácido-básico de uma solução pode ser verificado pela quantidade de íons  $H^+$  ou  $OH^-$  livres que pode ser medida na escala de pH. (figura pag 106).
- Sais são substâncias que em água sofre a dissociação produzindo pelo menos um cátion diferente de  $H^+$  e pelo menos um ânion diferente de  $OH^-$ . Exemplos: (pag 109)
- As reações de neutralização entre bases e ácidos formam sal e água como produtos.
- As propriedades funcionais do sal são: sabor salgado e conduzem corrente elétrica se estiverem no estado líquido ou em solução aquosa.

## Funções Inorgânicas (ácidos, bases, sais e óxidos)

- Óxido é toda substância binária em que o elemento mais eletronegativo é o oxigênio. Exemplos (pagina 114)
- Os óxidos podem ser básicos, anfóteros e ácidos, ou ainda óxidos neutros, óxidos duplos ou peróxidos. Exemplos: de cada um deles nas paginas 116, 117, 118 e 119

## Átomos e moléculas

- Massa atômica é a soma das massas de seus prótons, neutrôns e elétrons. É mais prático, entretanto, compará-la com o padrão abaixo:

$$\frac{1}{12} {}^{12}\text{C} = 1\text{u} = 1,66 \times 10^{-24} \text{ gramas}$$

- onde u é a unidade de massa atômica.
- A massa de um átomo de C é 12 u, logo sua massa real será  $12 \times (1,66 \times 10^{-24} \text{ g})$

## Átomos e moléculas

- Se colocarmos numa balança imaginária uma massa em gramas do mesmo valor numérico da massa atômica, a balança ficará desequilibrada. Para equilibrar a balança é necessário um determinado número de átomos que pode ser calculado como:

$$1 \text{ átomo de C} = 12 \times (1,66 \times 10^{-24} \text{ g})$$

$$x \text{ átomos de C} = 12 \text{ g}$$

$$x = \frac{12 \text{ g}}{12 \times 1,66 \times 10^{-24} \text{ g}} = 0,602 \times 10^{-24} \text{ átomos}$$

$$x = 6,02 \times 10^{23} \text{ átomos}$$

$$1 \text{ átomo de H} = 1 \times (1,66 \times 10^{-24} \text{ g})$$

$$x \text{ átomos de H} = 1 \text{ g}$$

$$x = \frac{1 \text{ g}}{1 \times 1,66 \times 10^{-24} \text{ g}} = 0,602 \times 10^{-24} \text{ átomos}$$

$$x = 6,02 \times 10^{23} \text{ átomos}$$

## Átomos e moléculas

- A massa que contém  $6,02 \times 10^{23}$  átomos de um elemento é chamada massa molar. É numericamente igual a massa atômica, só que expressa em grama/mol.
- A massa de um átomo também pode ser calculada em gramas. Por exemplo, para um átomo de massa atômica 40u, sua massa molar é 40 g/mol e encerra  $6,02 \times 10^{23}$  átomos. Logo, podemos estabelecer a seguinte proporção:

$$40 \text{ g} = 6,02 \times 10^{23} \text{ átomos} = 1 \text{ mol}$$

$$x = 1 \text{ átomo}$$

$$x = \frac{40 \text{ g}}{6,02 \times 10^{23} \text{ átomos}} = 6,64 \times 10^{23} \text{ g}$$

# Massa molecular

Massa molecular é o número que indica quantas vezes a massa de uma molécula é maior que  $\frac{1}{12}$  da massa do  $^{12}\text{C}$ . É calculada somando-se as massas atômicas de todos os átomos de cada elemento que forma a substância.

Por exemplo, a massa molecular da água ( $\text{H}_2\text{O}$ ) é 18 u. Esse valor foi obtido a partir das massas atômicas do hidrogênio e do oxigênio.

Massa molecular:

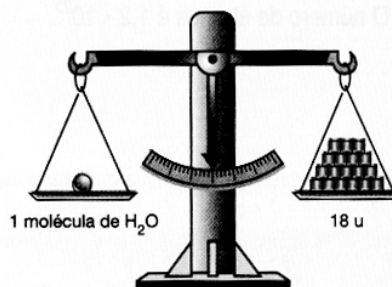
$$\text{H} \{ 2 \cdot 1 = 2$$

$$\text{O} \{ 1 \cdot 16 = 16$$


---


$$18$$

$$\text{MM}_{\text{H}_2\text{O}} = 18 \text{ u}$$



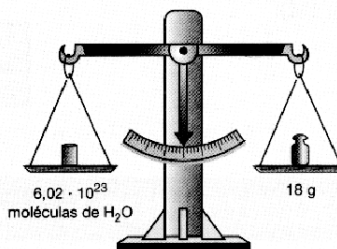
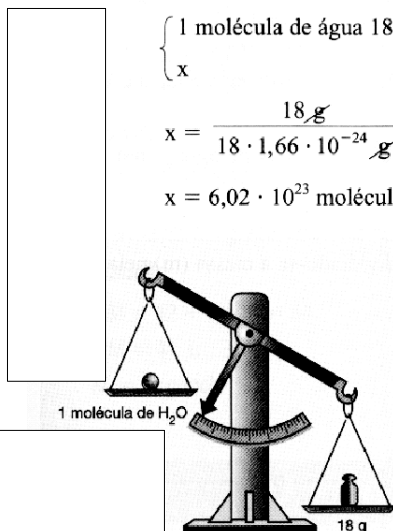
# Massa molar da substância

Por exemplo: a massa molecular da água é 18 u; a massa molar é 18 g/mol e contém  $6,02 \cdot 10^{23}$  moléculas.

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 \text{ molécula de água } 18 \text{ u} \text{ ————— } 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ g} \\ x \text{ ————— } 18 \text{ g} \end{array} \right.$$

$$x = \frac{18 \text{ g}}{18 \cdot 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ g}} = 0,602 \cdot 10^{24} \text{ moléculas}$$

$$x = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ moléculas}$$





## Comparação entre Massa Molecular e Massa Molar da Substância

---

	NÚMERO DE MOLÉCULAS	UNIDADE DE MEDIDA
Massa molecular (MM)	1	u
Massa molar (M)	$6,02 \cdot 10^{23}$	g/mol

## Número de Avogadro

---

- O valor de  $6,02 \times 10^{23}$  é chamado de número de **Avogadro**. Representa o número de átomos e/ou moléculas de um elemento e/ou substância na sua massa molar. Denomina-se **mol** a quantidade de matéria de um sistema que contenha  $6,02 \times 10^{23}$  partículas. Quando se utiliza essa unidade, é necessário verificar a que partículas elementares está se referindo: átomos, moléculas, íons, elétrons e outras.
- Exemplos:
  - 1 mol de átomos de hidrogênio
  - 1 mol de moléculas de de hidrogênio

# Número de Avogadro

Genericamente, relaciona-se mol, número de Avogadro e massa molar da seguinte forma:

$$1 \text{ mol} \text{ ————— } 6,02 \cdot 10^{23} \text{ ————— } \text{ massa molar}$$

Isso significa que um mol corresponde a  $6,02 \cdot 10^{23}$  partículas e equivale à massa molar.

Exemplo: 1 mol de água contém  $6,02 \cdot 10^{23}$  moléculas de água e tem massa molar igual a 18 g.

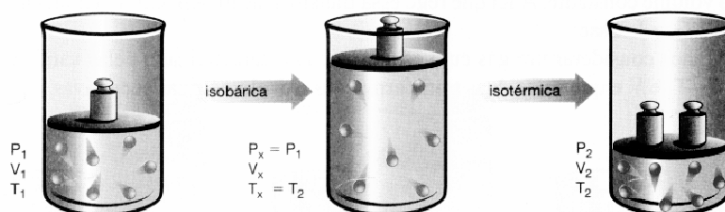
*Observação*

O número de mols ( $n$ ) pode ser calculado dividindo-se a massa ( $m$ ) pela massa molar ( $M$ ).

$$n = \frac{m}{M}$$

# Estudo do comportamento físico dos gases

Uma transformação gasosa pode ocorrer envolvendo variações simultâneas de pressão, volume e temperatura, entretanto, ela pode ser considerada assim:

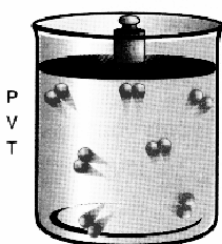


Numa transformação geral, temos a seguinte relação:

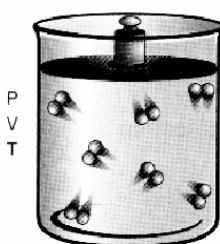
$$\frac{P_1 V_1}{T_1} = \frac{P_2 V_2}{T_2} \therefore \frac{PV}{T} = \text{constante}$$

# Princípio de Avogadro

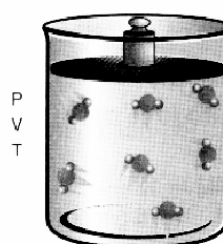
Nas mesmas condições de pressão e temperatura, volumes iguais de quaisquer gases encerram o mesmo número de moléculas.



gás nitrogênio



gás hidrogênio



gás carbônico

# Equação de Clapeyron

A transformação realizada com certa massa fixa de gás em que o volume, a pressão e a temperatura variam simultaneamente leva à conclusão de que:

$$\frac{PV}{T} = \text{constante}$$

Essa constante é igual ao produto  $nR$ , em que  $n$  é o número de mols de moléculas do gás e  $R$  é denominada constante universal dos gases perfeitos.

$$\frac{PV}{T} = nR \quad \text{ou} \quad \boxed{PV = nRT}$$

$$R = 0,082 \frac{\text{atm.l}}{\text{mol.K}}$$

Sabendo que o número de mols de moléculas  $n$  pode ser calculado por  $\frac{m}{M}$ , deduzimos que:

$$\boxed{PV = \frac{m}{M} RT}$$

## Unidades de concentração de contaminantes

---

$$\blacksquare \text{ Concentração em ppm} = \frac{\text{Volume de contaminante}}{\text{Volume de ar}}$$

$$\blacksquare \text{ Concentração em } \mu\text{g}/\text{m}^3 = \frac{\text{Massa de contaminante}}{\text{Volume de ar}}$$

## Conversão de unidades de concentração de contaminantes

---

$$C_{\left[\frac{\mu\text{g}}{\text{m}^3}\right]} = \frac{C_{[\text{ppm}]} \times P_{[\text{Pa}]} \times M_{[\text{g}/\text{mol}]}}{8.1314 \times T_{[\text{K}]}}$$

$C_{[\mu\text{g}/\text{m}^3]}$	concentração dada em $\mu\text{g}/\text{m}^3$
$C_{[\text{ppm}]}$	concentração dada em ppm
$M_{[\text{g}/\text{mol}]}$	valor da massa molecular da substância
$T_{[\text{K}]}$	Temperatura da amostra em Kelvin
$P_{[\text{Pa}]}$	Pressão dada em Pascal

## Exemplo de conversão de unidades de concentração

Exemplo :

Determinar a concentração em  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  de  $\text{O}_3$  em uma amostra de ar a 298 K e 1 atm, sabendo que a concentração de  $\text{O}_3$  na amostra é de 120 ppb.

$$c_{\left[\frac{\mu\text{g}}{\text{m}^3}\right]} = \frac{c_{[\text{ppm}]} \times p_{[\text{Pa}]} \times M_{[\text{g}/\text{mol}]}}{8.1314 \times T_{[\text{K}]}} = 235.6 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^3}$$

Diagram illustrating the conversion of concentration units for  $\text{O}_3$  from ppm to  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ . The equation is annotated with boxes and arrows indicating the values used:

- $0.12 \text{ ppm}$  (Note: The diagram shows 0.12 ppm, which is likely a typo for 120 ppb)
- $1 \text{ atm} = 1.0133 \times 10^5 \text{ Pa}$
- $48 \text{ gramas}$  (Molar mass of  $\text{O}_3$ )
- $298 \text{ K}$