

TERMOQUÍMICA



TERMOQUÍMICA

- Quase toda reação química é acompanhada de liberação ou absorção de calor (queima da gasolina, queima do etanol, queima do GLP).
- **A termoquímica estuda as quantidades de calor envolvidas em uma reação química.**
- Como se mede as quantidades de calor envolvidas em uma reação química?
- Como relacionar as quantidades de calor envolvidas em uma determinada reação com a quantidade de calor de outra reação química?

TERMOQUÍMICA

- **Termodinâmica:** É a ciência das relações entre o calor e outras formas de energia
- **Termoquímica:** É uma das áreas da termodinâmica, que estuda as quantidades de calor absorvidas ou desprendidas nas reações químicas
- **Calor (Q):** É a energia que entra ou sai do sistema, em virtude da diferença de temperatura entre o sistema termodinâmico e as suas vizinhanças

SISTEMA-VIZINHANÇA

TIPO DE REAÇÃO	EFEITO OBSERVADO	RESULTADO NO SISTEMA	SINAL DE Q
Endotérmica	Frasco resfria	Aumenta energia	Positivo
Exotérmica	Frasco aquece	Diminui energia	Negativo

CALOR DE REAÇÃO

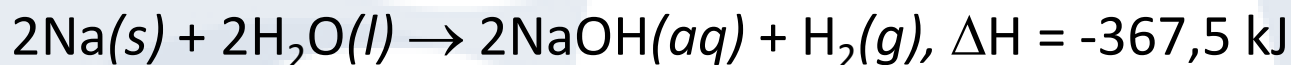
- É a quantidade de calor (Q) trocada pelo sistema e pelas vizinhanças, necessária para que a temperatura do sistema, depois da reação completa, seja a mesma que no início da reação (numa dada temperatura).

ENTALPIA, H

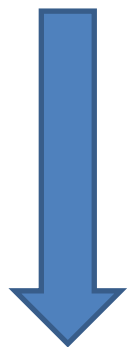
- É uma propriedade extensiva de uma substância, que esta relacionada com o calor de reação (Q_p), e permite calcular o calor absorvido ou desprendido numa reação química.
 - É uma função de estado: $\Delta H = H_{\text{final}} - H_{\text{inicial}}$
 - A pressão constante: $Q_p = \Delta H$
- A variação de entalpia (ΔH), corresponde ao calor liberado ou absorvido a pressão constante (Q_p)

ENTALPIA

- A equação química abaixo representa a reação entre sódio metálico e água.
- Esta reação, feita em um béquer aberto, a 25°C, e 1 atm, libera 367,5 kJ de energia.



2 mol de Na(s) + 2 mol de H₂O(l)



$\Delta H = -367,5 \text{ kJ}$

(há despreendimento de 367,5 kJ de calor)

2 mol de NaOH(aq) + 1 mol de H₂(g)

ENERGIA INTERNA, U

- É a energia total de um sistema, menos sua energia cinética e sua energia potencial.

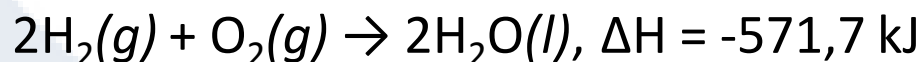
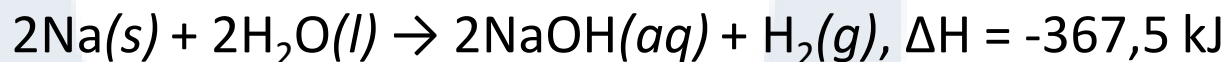
$$E_{\text{total}} = E_{\text{cin}} + E_{\text{pot}} + U \Rightarrow U = E_{\text{total}} - E_{\text{cin}} - E_{\text{pot}}$$

$$H = U + pV$$

A pressão constante: $\Delta H = \Delta U + p\Delta V \Rightarrow \Delta U = \Delta H - p\Delta V$

$$\Delta U \approx \Delta H$$

EQUAÇÕES TERMOQUÍMICAS

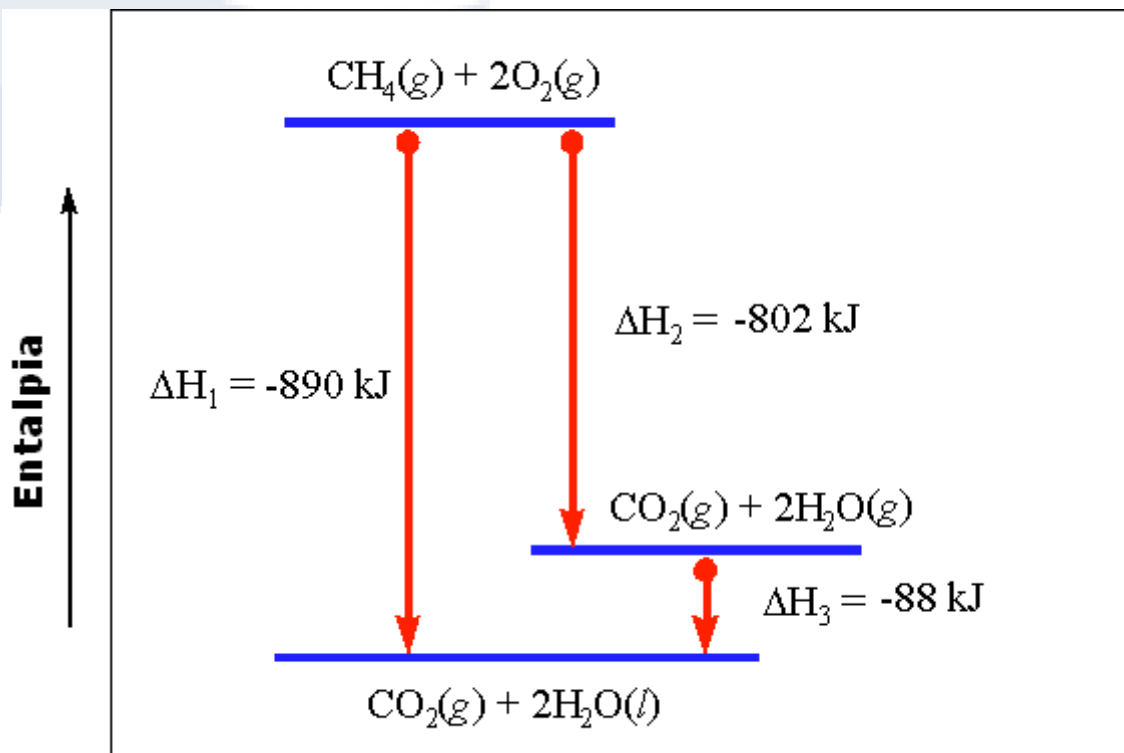


- Duas regras importantes:
 - Quando uma equação termoquímica for multiplicada por um fator, o valor de ΔH da equação será multiplicado pelo mesmo fator.
 - Quando uma equação termoquímica for invertida, o valor de ΔH muda de sinal.



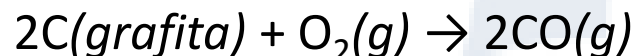
LEI DE HESS

- Afirma que se uma equação química puder ser escrita como a soma de 2 ou mais etapas, a variação de entalpia da equação global é igual à soma das variações de entalpia das etapas.
- Para entender a Lei de Hess:



EXEMPLO

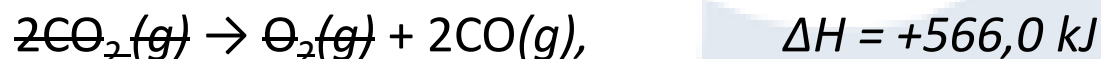
- Deseja-se saber a variação de entalpia para a seguinte reação:



- A síntese é difícil de estudar devido a formação de $CO(g)$, porém é fácil medir a combustão de $C(\text{graf})$ e $CO(g)$:

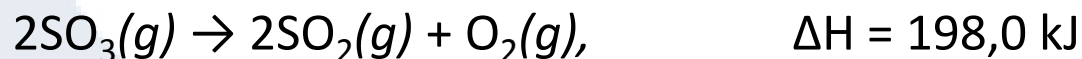


- Combinando as equações, ou seja, invertendo a 2ª equação e combinando-a com a 1ª, temos:



OUTRO EXEMPLO

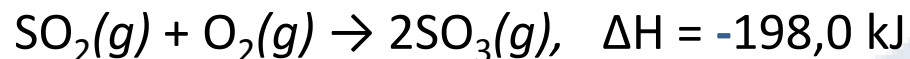
- Sabendo que,



- Podemos calcular a variação de entalpia para a reação:



- Multiplicando a 1ª equação por 2 e invertendo a 2ª equação, temos:

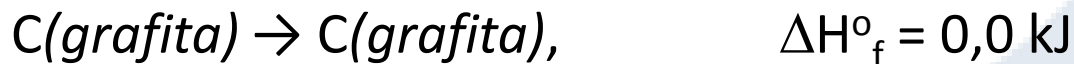
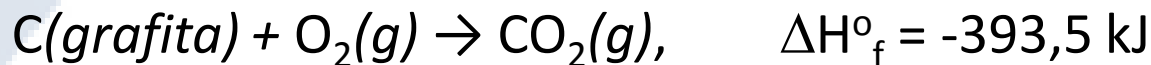
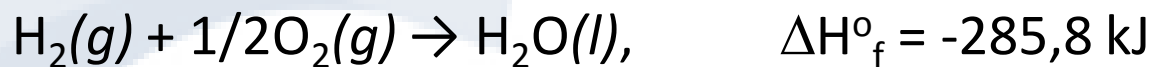


ESTADO PADRÃO

- O **estado padrão** de uma substância é a fase mais estável que ela existe, a 1 atm, em uma determinada temperatura. O estado padrão é indicado pelo símbolo (^o).
- Sendo assim, representa-se por ΔH^o a variação de entalpia para uma reação em que reagentes e produtos estão no estado padrão.
- ΔH^o é a entalpia padrao da reação.
- $\Delta H^o_{\text{reação}} = \sum H^o(\text{produtos}) - \sum H^o(\text{reagentes})$

ENTALPIA PADRÃO DE FORMAÇÃO, ΔH_f°

- É a variação de entalpia na formação de 1 mol de substância no seu estado padrão, a partir de substâncias elementares também nos seus estados padrões.



ENTALPIA PADRÃO DE FORMAÇÃO DE ALGUMAS SUBSTÂNCIAS, ΔH°_f (kJ mol⁻¹)

Substância	ΔH°_f	Substância	ΔH°_f	Substância	ΔH°_f	Substância	ΔH°_f
Ag(s)	0	Ca(s)	0	HNO ₃ (l)	-173,2	NaHCO ₃ (s)	-947,7
AgBr(s)	-100,4	CaBr ₂ (s)	-682,8	H ₂ SO ₄ (l)	-811,3	Na ₂ CO ₃ (s)	-1131,0
AgCl(s)	-127,0	CaCO ₃ (s)	-1207,0	HC ₂ H ₃ O ₂ (l)	-487,0	NaCl(s)	-411,0
Al(s)	0	CaCl ₂ (s)	-795,0	Hg(l)	0	NaOH(s)	-426,8
Al ₂ O ₃ (s)	-1669,8	CaO(s)	-635,5	Hg(g)	60,8	Na ₂ SO ₄ (s)	-1384,5
C(graf)	0	Ca(OH) ₂ (s)	-986,6	I ₂ (s)	0	O ₂ (g)	0
CO(g)	-110,5	CaSO ₄ .1/2H ₂ O(s)	-1432,7	K(s)	0	Pb(s)	0
CO ₂ (g)	-393,5	CaSO ₄ .2H ₂ O(s)	-2021,1	KCl(s)	-435,9	PbO(s)	-219,2
CH ₄ (g)	-74,8	Cl ₂ (g)	0	K ₂ SO ₄ (s)	-1433,7	S(s)	0
CH ₃ Cl(g)	-82,0	Fe(s)	0	N ₂ (g)	0	SO ₂ (g)	-296,9
CH ₃ I(g)	14,2	Fe ₂ O ₃ (s)	-822,2	NH ₃ (g)	-46,2	SO ₃ (g)	-395,2
CH ₃ OH(l)	-238,6	H ₂ O(g)	-241,8	NH ₄ Cl(s)	-315,4		
CO(NH ₂) ₂ (s)	-333,2	H ₂ O(l)	-285,9	NO(g)	90,4		
CO(NH ₂) ₂ (aq)	-391,2	H ₂ (g)	0	NO ₂ (g)	33,8		
C ₂ H ₂ (g)	226,8	H ₂ O ₂ (l)	-187,6	N ₂ O(g)	81,6		
C ₂ H ₄ (g)	52,3	HBr(g)	-36,0	N ₂ O ₄ (g)	9,7		
C ₂ H ₆ (g)	-84,7	HCl(g)	-92,3	N ₂ O ₅ (g)	11,0		
C ₂ H ₅ OH(l)	-227,6	HI(g)	26,6	Na(s)	0		

EXEMPLO 3

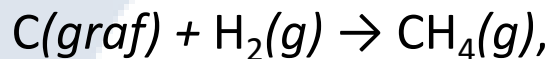
- Cálculo da entalpia para a reação:



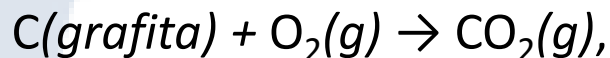
1. Utilizando a fórmula: $\Delta H^\circ_{\text{reação}} = \Sigma H^\circ(\text{produtos}) - \Sigma H^\circ(\text{reagentes})$

$$\Delta H^\circ_{\text{reação}} = (-393,5) + 2(-241,8) - [(-74,8) + 2(0)] = -802,3 \text{ kJ}$$

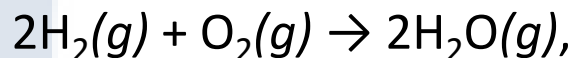
2. Utilizando a Lei de Hess



$$\Delta H^\circ_f = -74,8 \text{ kJ (inverter)}$$



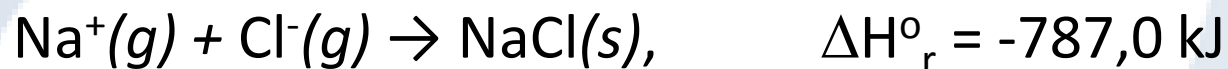
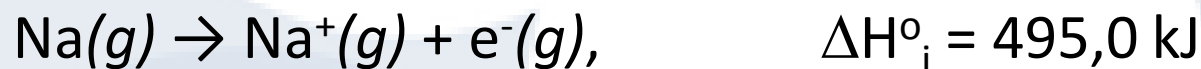
$$\Delta H^\circ_f = -393,5 \text{ kJ}$$



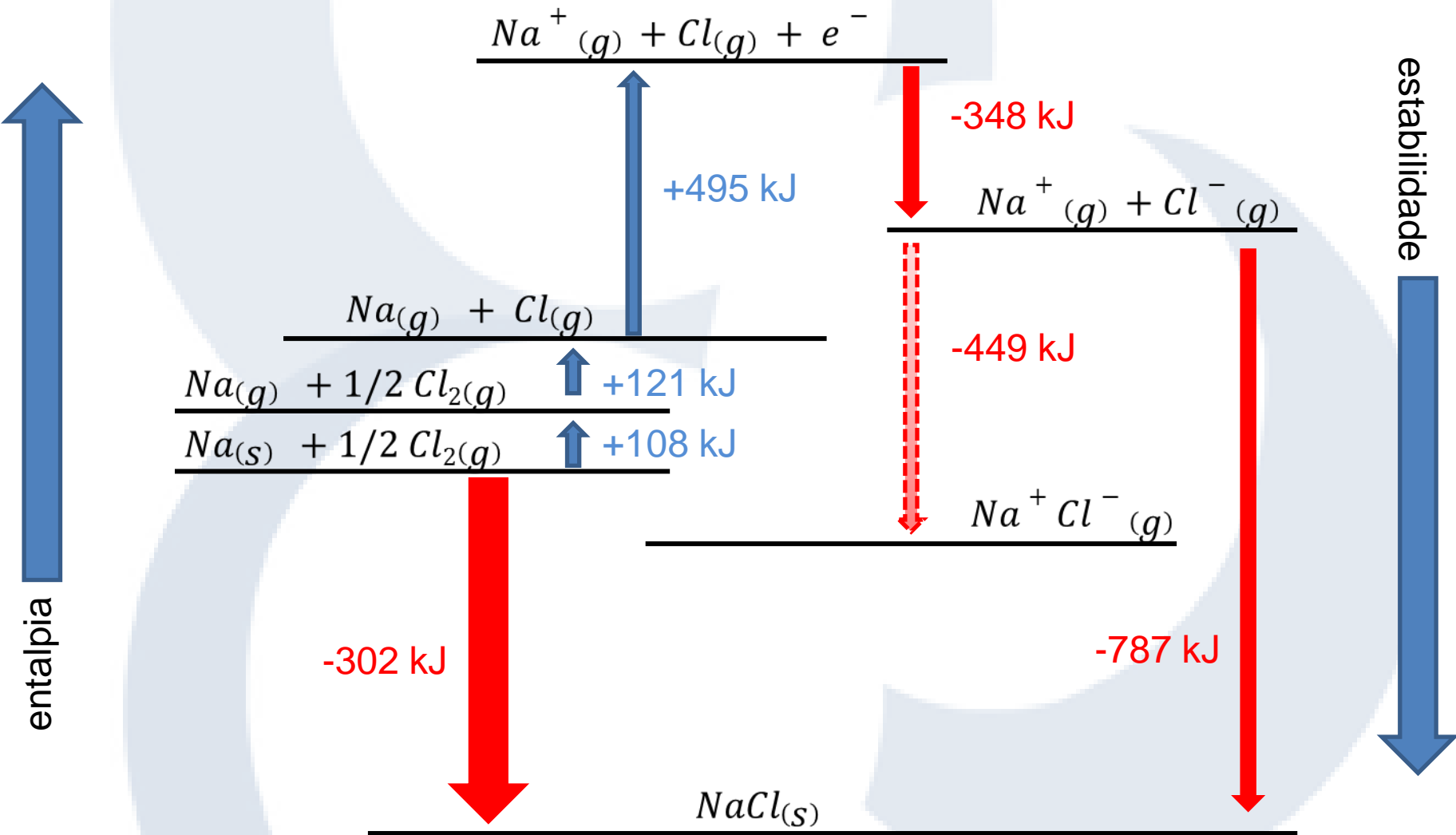
$$\Delta H^\circ_f = -241,8 \text{ kJ (x2)}$$



OUTRAS VARIAÇÕES DE ENTALPIA



TERMOQUÍMICA



ENTALPIA MÉDIA DE LIGAÇÃO

- Na reação abaixo, quatro ligações C-H de uma espécie gasosa são rompidas, pode-se atribuir a cada uma dessas ligações uma entalpia média de ligação, $E(\text{C-H})$, igual a $1663,5/4 = 415,9 \text{ kJ mol}^{-1}$.

