

TRABALHO 1 - Ficha de estudo dirigido

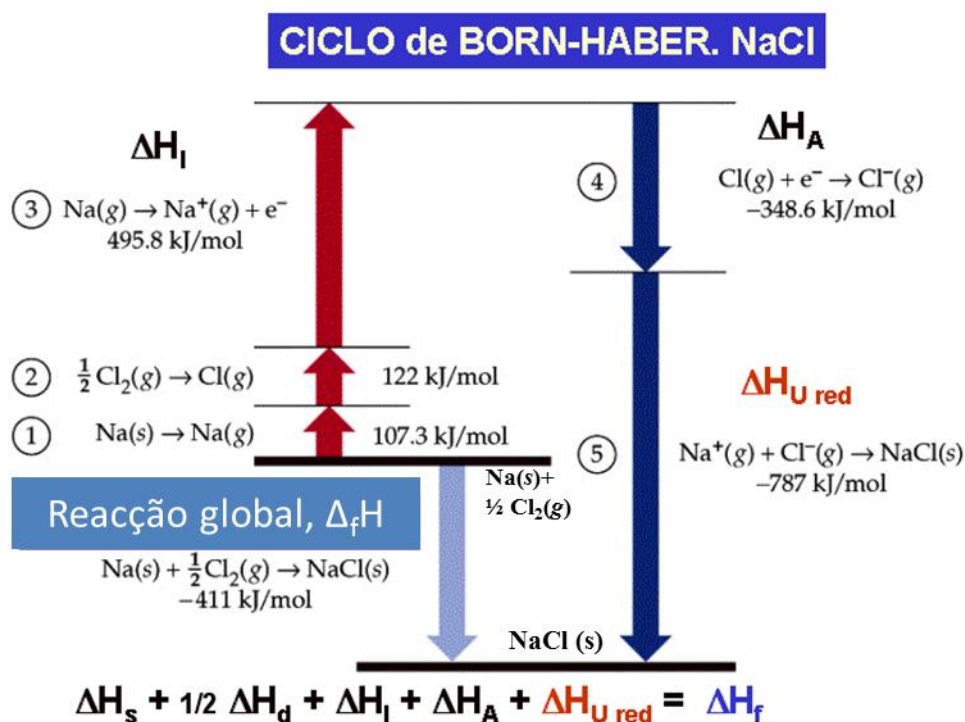
Construção de um ciclo de Born-Haber para o cálculo de variação de entalpia de formação padrão ($\Delta_f H^\circ$) de um composto

1. Introdução

Neste trabalho pretende-se aplicar um ciclo de Born-Haber ao cálculo de entalpias de formação padrão de compostos.

Um ciclo de Born-Haber consiste numa sequência de processos que começam e terminam no mesmo ponto. A soma das variações de entalpia que ocorrem no ciclo completo é zero pois a entalpia é uma função de estado.

A aplicação mais frequente dos ciclos de Born-Haber é para a determinação de energias de rede de um composto sólido ($\Delta_{\text{rede}} H^\circ = \Delta_m H^\circ$ (iões, gasosos) - $\Delta_m H^\circ$ (sólido)). A energia de rede, ou entalpia de rede, corresponde à formação de um composto iónico a partir dos seus iões gasosos. O ciclo de Born-Haber aplica a Lei de Hess para calcular a entalpia pretendida tendo como ponto de partida a reação de formação padrão do composto. A figura seguinte apresenta o ciclo de Born-Haber para a formação de 1 mole de cloreto de sódio sólido:



O processo de cálculo da entalpia de formação do NaCl sólido através do ciclo de Born-Haber envolve vários passos sucessivos: (1) sublimação de uma

Introdução à Química-Física

mole de átomos de sódio; (2) dissociação de meia mole de Cl_2 gasoso em átomos Cl separados no estado gasoso; (3) ionização de uma mole de átomos de sódio gasoso; (4) adição de 1 mole de electrões a uma mole de átomos de Cl gasoso; (5) combinação de uma mole de Na^+ e uma mole de Cl^- para formar uma mole de NaCl sólido. A soma de todas as variações de entalpias associadas aos processos (1) a (5) é igual à variação de entalpia de formação padrão do composto sólido. Isto resulta directamente da Lei de Hess.

O estudo vai ser realizado durante um período de 1 hora de estudo individual antes da aula e 3 horas lectivas.

As ferramentas principais de estudo são a bibliografia recomendada no programa de trabalhos bem como bibliografia anexa.

2. Objectivos

1. Representar através de equações químicas os processos de transições de fase (e.g. vaporização), ionização, afinidade electrónica e reacções de formação de compostos.
2. Consultar tabelas para obter dados de entalpias padrão de sublimação, energias de ionização, afinidade electrónica, entalpias de formação.
3. Construir o ciclo de Born-Haber para a formação de um dado composto sólido.
4. Calcular entalpias de formação de um dado composto utilizando um ciclo de Born-Haber em que se conheçam as restantes variações de entalpia envolvidas.

3. Plano de trabalho

1. Desenhe um ciclo de Born-Haber que permita a determinação da entalpia de formação de um composto MX(s) .
2. Escreva a expressão matemática para $\Delta_f H^\circ$ em termos das variações de entalpias envolvidas nos vários passos.
3. Utilize o algoritmo que desenvolveu nas alíneas anteriores para determinar a entalpia de formação do fluoreto de potássio, KF.

Dados: $\Delta_{\text{atom}} H^\circ (\text{K(s)}) = 90,00 \text{ kJ/mol}$; $\Delta_{\text{ioniz}} H^\circ (\text{K(g)}) = 424,93 \text{ kJ/mol}$; $\Delta_{\text{dissoc}} H^\circ (\text{F}_2(\text{g})) = 157,99 \text{ kJ/mol}$; $\Delta_{\text{elec}} H^\circ (\text{F(g)}) = -349,7 \text{ kJ/mol}$; Energia de rede (KF(s)) = -806,8 kJ/mol.

4. Construa ciclos de Born-Haber que permitam calcular as entalpias de formação padrão de MgCl_2 e do composto hipotético MgCl .
5. Calcule a entalpia de formação padrão de cada um dos compostos MgCl e MgCl_2 .

Introdução à Química-Física

6. Discuta a estabilidade relativa dos compostos MgCl e MgCl_2 . Pode justificar-se porque é que o composto MgCl não é conhecido?

Referências

“Chemical Principles. The Quest for Insight”, P. Atkins and L. Jones, Freeman 5th ed. (2010).

“Química”, R. Chang, 11^a ed., McGraw-Hill (2012).

ANEXO –

Tabela 1 Entalpias de rede molares a 25 °C (kJ/mol)

Halogenetos			
LiF	-1046	LiCl	-861
NaF	-929	NaCl	-787
KF	-826	KCl	-717
AgF	-971	AgCl	-916
BeCl ₂	-3017	MgCl ₂	-2524
		MgCl	-676
Óxidos			
MgO	-3850	CaO	-3461
SrO	-3283	BaO	-3114
Sulfuretos			
MgS	-3406	CaS	-3119
SrS	-2974	BaS	-2832

Tabela 2 Entalpias de dissociação molares de moléculas diatómicas (kJ/mol)

Molécula	$\Delta_{\text{diss}}H^0$	Molécula	$\Delta_{\text{diss}}H^0$
H ₂	+436	Br ₂	+193
N ₂	+944	I ₂	+151
O ₂	+496	HF	+565
CO	+1074	HCl	+431
F ₂	+158	HBr	+366
Cl ₂	+242	HI	+299

Tabela 3 Entalpias de ionização a 25 °C (kJ/mol)

Li ⁺	+519	H ⁻	-73
Na ⁺	+495,8	F ⁻	-328
K ⁺	+418	Cl ⁻	-349
Mg ⁺	+738,1	Br ⁻	-325
Mg ²⁺	+2188,1	I ⁻	-295
Ca ²⁺	+1734,5	O ⁻	-141
Ba ²⁺	+1467	S ⁻	-200

Tabela 4 Entalpias de sublimação a 25 °C (kJ/mol)

Li	+162
Na	+108
K	+90
Mg	+150,2