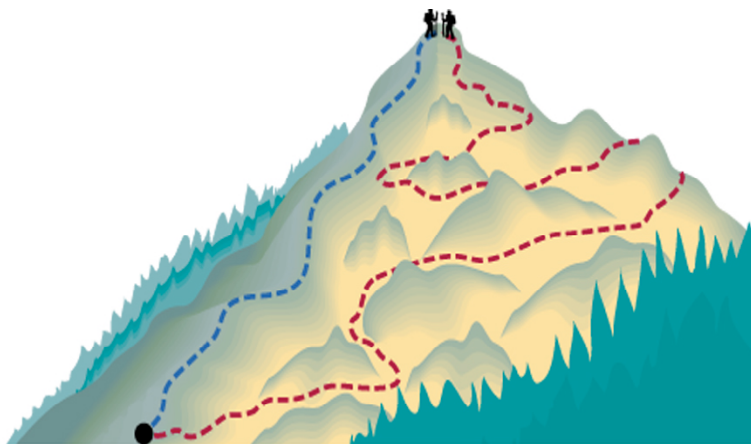


II - TERMODINÂMICA

É o estudo da conversão do calor em outras formas de energia.

Estuda as variações de estado de um sistema que é definido pelos valores de todas as propriedades macroscópicas: energia, temperatura, pressão e volume.

Funções de estado - propriedades que são determinadas pelo estado do sistema, independentemente do modo como ele foi atingido.



$$\Delta E = E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}}$$

$$\Delta P = P_{\text{final}} - P_{\text{inicial}}$$

$$\Delta V = V_{\text{final}} - V_{\text{inicial}}$$

$$\Delta T = T_{\text{final}} - T_{\text{inicial}}$$

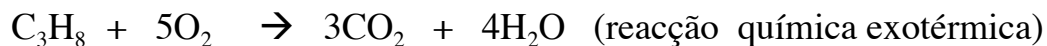
A energia potencial do caminhante 1 e do caminhante 2 é a mesma apesar de usarem trilhos diferentes.

Primeira lei da termodinâmica — a energia pode ser convertida de uma forma noutra, mas não pode ser criada ou destruída.

$$\Delta E_{\text{sistema}} + \Delta E_{\text{meio}} = 0$$

ou

$$\Delta E_{\text{sistema}} = -\Delta E_{\text{meio}}$$



Energia química **perdida** por combustão = Energia **ganha** pela vizinhança

A forma mais útil da primeira lei:

$$\Delta E = q + w$$

ΔE = variação da energia interna do sistema

q = troca de calor entre o sistema e o meio exterior (vizinhança)

w = trabalho efectuado sobre (ou pelo) sistema

$w = -P \times \Delta V$ quando um gás se expande contra uma pressão

externa constante

TABELA 6.1

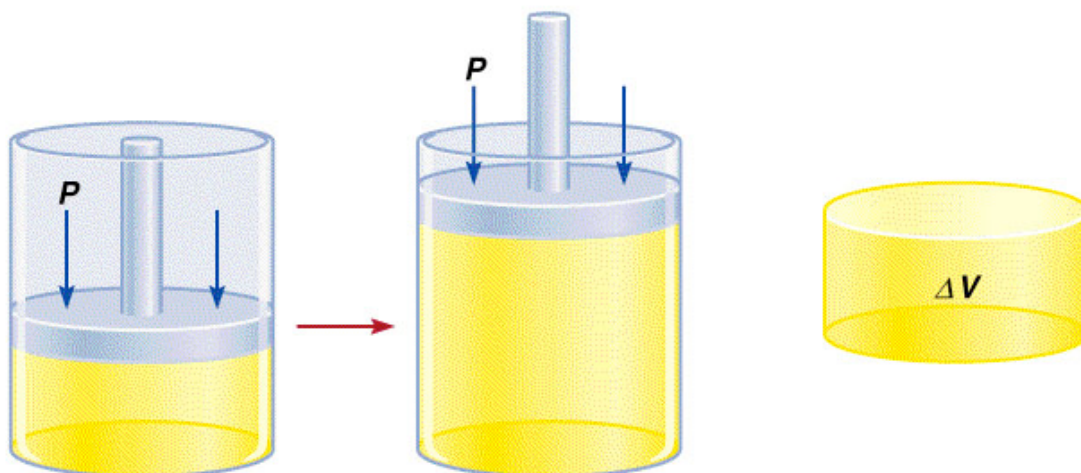
Convenções de Sinais para o Calor e o Trabalho

Processo	Sinal
Trabalho efectuado pelo sistema sobre a vizinhança	-
Trabalho efectuado sobre o sistema pela vizinhança	+
Calor absorvido pelo sistema a partir da vizinhança (processo endotérmico)	+
Calor absorvido pela vizinhança a partir do sistema (processo exotérmico)	-

Trabalho e calor

$$w = F \times d$$

Trabalho mecânico: expansão de um gás



À medida que o gás se expande empurra o pistão para cima contra a pressão atmosférica constante **P** que se lhe opõe.

O trabalho realizado pelo gás sobre o meio exterior:

$$W = - P \times \Delta V$$

$$\Delta V = V_f - V_i$$

$$\Delta V > 0$$

Para um dado aumento de volume o trabalho realizado depende do valor de P (pressão externa) que se lhe opõe:

$$P = 0 \quad \rightarrow \quad w = 0$$

(gás a expandir-se contra o vácuo)

$$P > 0 \quad \rightarrow \quad w = - P \times \Delta V$$

Expansão de um gás:

$$\Delta V > 0 \rightarrow -P \times \Delta V < 0 \quad w < 0$$

Compressão de um gás:

$$\Delta V < 0 \rightarrow -P \times \Delta V > 0 \quad w > 0$$

Exemplo 1

O volume de um gás aumenta de 2,0 l até 6,0 l a $T = \text{cte}$. Calcule o trabalho realizado pelo gás se ele se expandir:

a) contra o vácuo

b) contra uma pressão constante de 1,2 atm.

O trabalho não é uma função de estado: porque embora os estados iniciais e finais sejam os mesmos o trabalho realizado é diferente.

O trabalho não depende só dos estados iniciais e finais mas também da forma como a transformação se deu.

Não se pode escrever:

$$\Delta w = w_f - w_i$$

O calor não é uma função de estado

Numa transformação em que há mudança de um estado inicial para um

estado final este pode ocorrer de 2 formas diferentes:

- 1) $w = 0$ $\Delta E = q_1 + w_1 = q_1$
2) $w = 0$ e $q = 0$ $\Delta E = q_2 + w_2$

como a variação de energia ΔE é sempre a mesma $q_1 = q_2$

O calor também não é uma variável de estado porque depende da maneira como o processo se realiza.

Embora **q** e **w** não sejam funções de estado a sua soma $\Delta E = q + w$ é uma função de estado.

O calor e o trabalho não são funções de estado porque não são propriedades de um sistema.

Manifestam-se apenas quando se dá uma transformação.

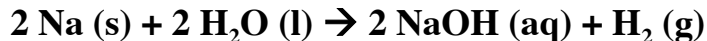
Entalpia e 1ª Lei da Termodinâmica

Numa reacção que ocorre a pressão e volume constante:

$$\Delta E = q + w = q_v$$

A maioria das reacções ocorre a $P = c^{te}$ (normalmente à pressão atmosférica)

Para a reacção seguinte a $P = c^{te}$



Um dos produtos é hidrogénio gasoso que sai para a atmosfera empurrando o ar (ΔV) contra a pressão atmosférica (P).

$$q_p = \Delta H$$

$$\Delta E = \Delta H - P \Delta V$$

$$\Delta H = \Delta E + P \Delta V$$

$$H = E + PV$$

E - energia interna do sistema

A entalpia **H** dum sistema é definida pela soma de 2 parcelas: **E** (energia interna do sistema) e o trabalho (realizado pelo sistema ou sobre o sistema).

A entalpia **H** é uma função de estado visto que é a soma de várias funções de estado: E, P e V.

O facto de ser uma variável de estado permite-nos aplicar a Lei de Hess.

Permite também calcular a variação de energia interna de uma reacção envolvendo gases:

Admitindo um comportamento de gás perfeito e que a temperatura permanece constante:

$$\Delta E = \Delta H - \Delta(nRT)$$

$$\Delta E = \Delta H - RT\Delta n$$

Δn = número de moles de produtos gasosos - número de moles de reagentes gasosos



Calcule a variação de energia interna quando 2 moles de CO são convertidas em 2 moles de CO₂, a 1 atm. e 25 °C.



Processos Espontâneos e Entropia

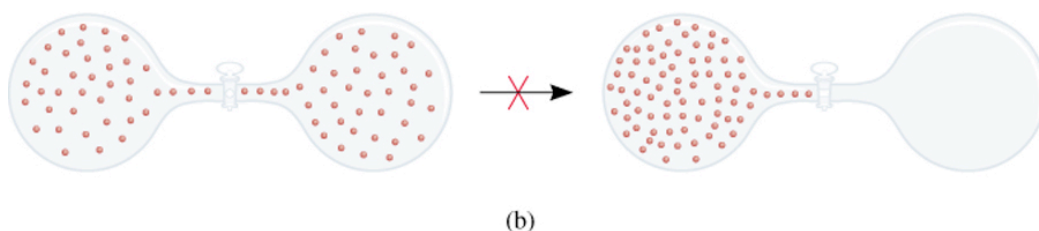
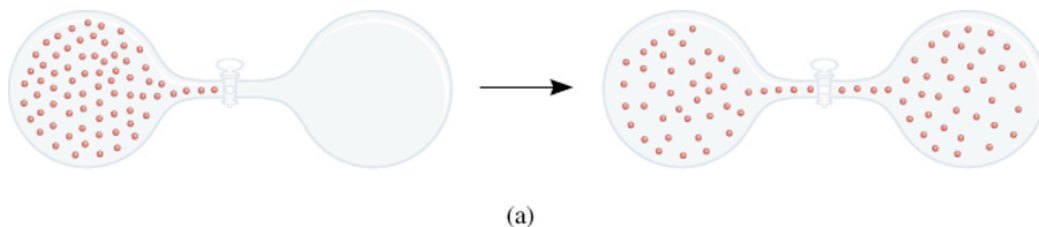
Um dos objectivos da termodinâmica: prever se uma dada reacção vai ou não ocorrer quando se juntam os reagentes em determinadas condições (P, T e concentração).

Reacção espontânea: reacção que ocorre nessas condições específicas.

Reacção não espontânea: reacção que não ocorre nessas condições específicas.



- Numa queda de água esta corre pela encosta abaixo, mas nunca pela encosta, acima espontaneamente.
- Um torrão de açúcar dissolve-se espontaneamente numa chávena de café, mas o açúcar dissolvido não reaparece espontaneamente na forma original.
- A água solidifica espontaneamente abaixo de 0°C e o gelo funde espontaneamente acima de 0°C (a 1 atm).
- O calor flui de um objecto mais quente para outro mais frio, mas o inverso nunca acontece espontaneamente.
- A expansão de um gás para dentro de um balão sob vácuo é um processo espontâneo. O processo inverso, isto é, a acumulação de todas as moléculas num único balão, não é espontâneo.



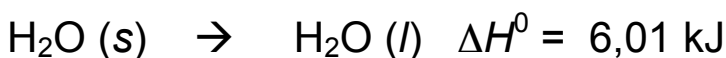
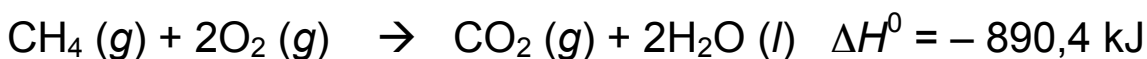
- Um pedaço de metal sódio reage violentamente com água para formar hidróxido de sódio e hidrogénio gasoso. No entanto, o hidrogénio gasoso não reage com o hidróxido de sódio para formar água e sódio.
- O ferro exposto à água e oxigénio forma ferrugem, mas a ferrugem não se transforma espontaneamente em ferro.

Estes exemplos mostram que os processos que ocorrem espontâneamente numa direcção não podem nas mesmas condições ocorrer espontâneamente na direcção oposta.

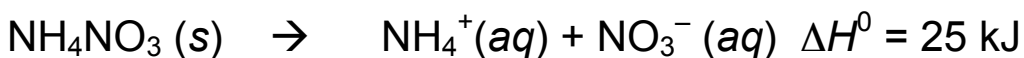
Um processo espontâneo ocorre na direcção que provoca uma diminuição de energia do sistema.

Uma diminuição na entalpia significa que uma reacção é espontânea?

Reacções espontâneas



O gelo derrete espontâneamente acima dos 0 °C ainda que o processo seja exotérmico.



O processo de dissolução provoca um arrefecimento do sistema, ou seja embora o processo seja espontâneo é endotérmico.

Só a variação da energia de um sistema não é suficiente para prever a espontaneidade de uma reacção. É necessário conhecer as variações de **entalpia** e **entropia** do sistema.

Entropia (S) - medida do **estado caótico** ou da **desordem** de um sistema.

É uma medida do grau de aleatoriedade da distribuição dos átomos, moléculas ou iões numa dada região do espaço.

O conceito de ordem e desordem está relacionado com o conceito de probabilidade:

$\begin{array}{ccc} > \text{ desordem} & \rightarrow & > \text{ entropia} \\ > \text{ ordenação do sistema} & \rightarrow & < \text{ entropia} \end{array}$

$$\Delta S = S_f - S_i$$

Se a variação do estado inicial para o final provoca um aumento na desordem:

$$S_f > S_i$$

$$\Delta S > 0$$

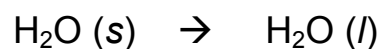
É possível determinar a entropia absoluta de uma substância

$S^\circ \rightarrow$ entropia padrão (1 atm., 25 °C) Unidades: J/K ou J/K.mol

$$S^{\circ}_{\text{elementos e compostos}} > 0$$

Para qualquer substância, o estado sólido é mais ordenado do que o estado líquido, e o estado líquido é mais ordenado do que o estado gasoso:

$$S_{\text{sólido}} < S_{\text{líquido}} \ll S_{\text{gasoso}}$$



$$\Delta S > 0 \quad \text{Aumento da desordem}$$

$$S_f > S_i$$

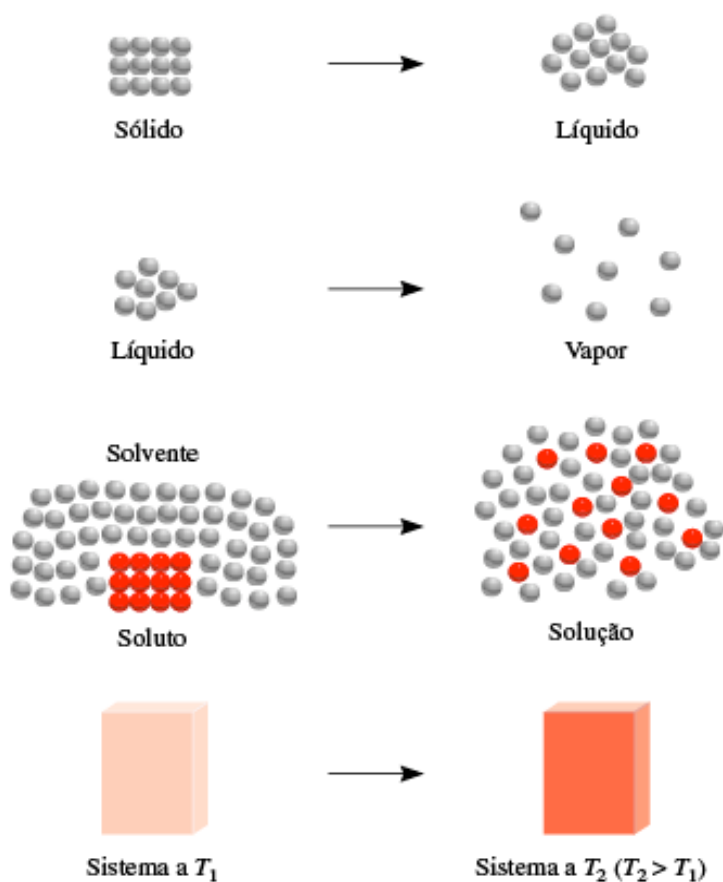
Processos que conduzem a um aumento de entropia

fusão

evaporação

dissolução

aquecimento



Valores de Entropia Padrão (S°) para Algumas Substâncias a 25°C	
Substância	S° (J/K · mol)
H ₂ O (l)	69,9
H ₂ O (g)	188,7
Br ₂ (l)	152,3
Br ₂ (g)	245,3
I ₂ (s)	116,7
I ₂ (g)	260,6
C (diamante)	2,4
C (grafite)	5,69
CH ₄ (metano)	186,2
C ₂ H ₆ (etano)	229,5
He (g)	126,1
Ne (g)	146,2

TABELA 18.1

Exemplo:

Preveja se a ΔS associada a cada processo é positiva ou negativa:

- a) solidificação de bromo líquido;
- b) evaporação de etanol à temperatura ambiente;
- c) dissolução de sacarose em água;
- d) arrefecimento de azoto gasoso de 80 °C a 20 °C.

Segunda Lei da Termodinâmica

A entropia do **universo** aumenta num processo espontâneo e mantém-se inalterada num processo em equilíbrio.

Processo espontâneo:

$$\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S_{\text{sis}} + \Delta S_{\text{meio}} > 0$$

Processo em equilíbrio:

$$\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S_{\text{sis}} + \Delta S_{\text{meio}} = 0$$

Variações de Entropia no Sistema (ΔS_{sis})


Precisamos de conhecer $\Delta S_{\text{sist.}}$ e ΔS_{meio} para podermos calcular $\Delta S_{\text{univ.}}$

Entropia padrão da reacção ΔS^0_r - a variação da entropia de uma reacção levada a cabo a 1 atm e 25°C.



$$\Delta S^0 = [cS^0(C) + dS^0(D)] - [aS^0(A) + bS^0(B)]$$

$$\Delta S^0 = \sum nS^0(\text{produtos}) - \sum mS^0(\text{reagentes})$$

Exemplo:

Qual é a variação da entropia padrão da seguinte reacção a 25°C?

$$2\text{CO (g)} + \text{O}_2 \text{ (g)} \longrightarrow 2\text{CO}_2 \text{ (g)}$$


$S^\circ(\text{CO}) = 197,9 \text{ J/K mol}$
 $S^\circ(\text{O}_2) = 205,0 \text{ J/K mol}$
 $S^\circ(\text{CO}_2) = 213,6 \text{ J/K mol}$

$R = -173,6 \text{ J/K mol}$

Variações de Entropia no Sistema (ΔS_{sis})

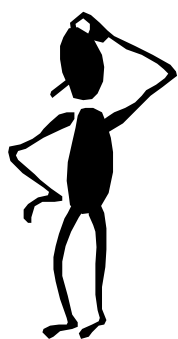
Quando há produção de gases (ou consumo)

- Se uma reacção produzir mais moléculas de gás do que as que consome, $\Delta S > 0$.
- Se o número total de moléculas de gás diminui, $\Delta S < 0$.
- Se não existe uma variação global do número de moléculas de gás, então ΔS pode ser positivo ou negativo **MAS** ΔS terá um valor pequeno.

Exemplo:

Qual é o sinal da variação da entropia da seguinte reacção?

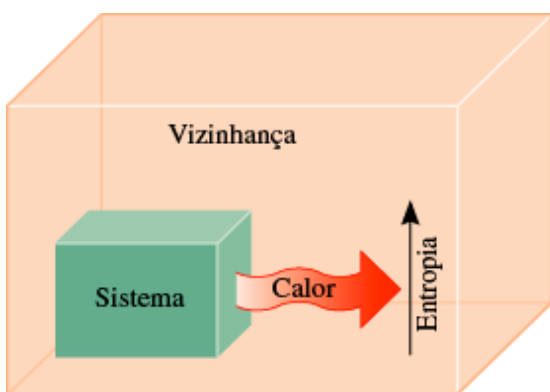
$$2\text{Zn (s)} + \text{O}_2 \text{ (g)} \longrightarrow 2\text{ZnO (s)}$$



Preveja se a variação da entropia do sistema em cada uma das seguintes reacções é positiva ou negativa:

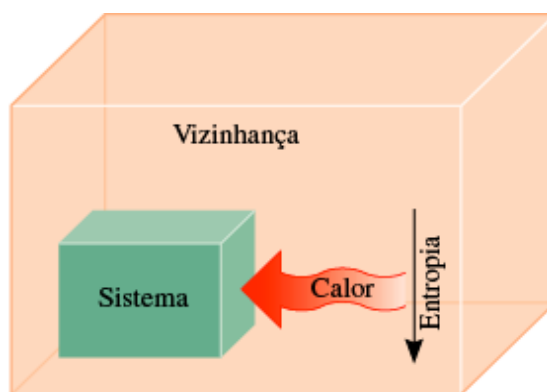


Variações da Entropia no meio exterior (vizinhança) (ΔS_{viz})



Processo exotérmico

$$\Delta S_{\text{viz}} > 0$$



Processo endotérmico

$$\Delta S_{\text{viz}} < 0$$

Quando num sistema ocorre um processo exotérmico, o calor transferido para o meio ambiente acentua os vários tipos de movimento das moléculas:

→ aumento da desordem molecular → S_{meio} aumenta.

Reciprocamente, um processo endotérmico num sistema faz com que haja absorção de calor do meio ambiente, e portanto ΔS_{meio} diminui porque os movimentos moleculares se tornam menos energéticos.

Para processos a $P = c^{\text{te}}$, $q = \Delta H_{\text{sist.}}$ e ΔS_{meio} **é proporcional a $\Delta H_{\text{sist.}}$**

A variação de entropia correspondente à troca de uma determinada quantidade de calor entre o sistema e o meio depende da temperatura.

Se o meio se encontra a uma temperatura elevada, os vários tipos de movimento molecular já são à partida muito energéticos.

Deste modo a absorção de calor em resultado de um processo exotérmico no sistema vai ter um impacto pequeno no movimento molecular e o aumento de S vai ser pequeno.

Se a temperatura do meio é baixa a adição de uma quantidade de calor causará um maior aumento de S.

$$\Delta S_{\text{meio}} \text{ é proporcional a } -\Delta H_{\text{sist.}}$$

Existe uma relação inversa entre ΔS_{meio} e a temperatura (em Kelvin): quanto
> T < ΔS_{meio} e vice-versa.

$$\Delta S_{\text{meio}} = - \frac{\Delta H_{\text{sis}}}{T}$$



Verifique se a reacção de síntese do amoníaco a 25 °C é uma reacção espontânea.

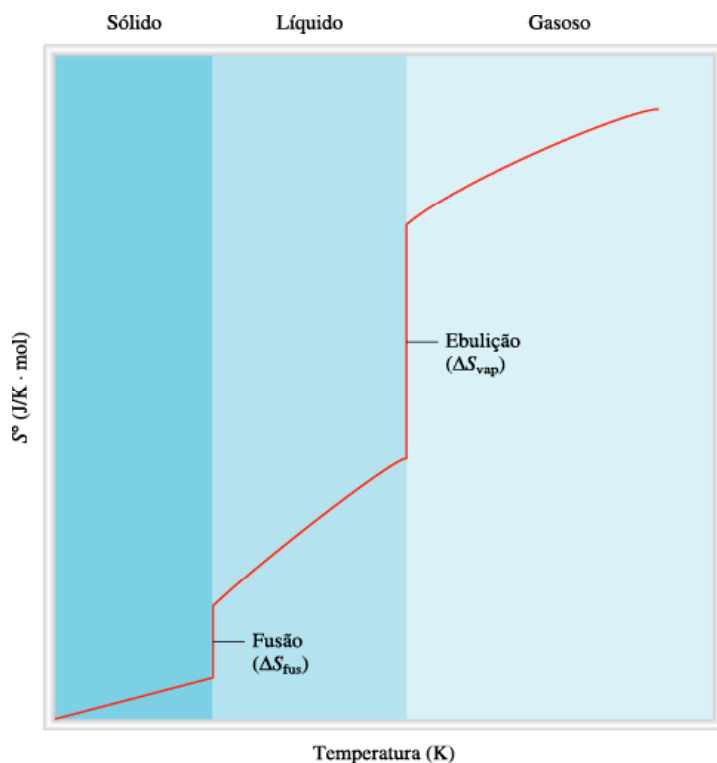


Terceira Lei da Termodinâmica

Até agora relacionámos a entropia (S) com desordem molecular. Quanto maior a desordem molecular ou a liberdade de movimento de átomos e moléculas de um sistema maior S do sistema.

A disposição mais ordenada que qualquer substância pode assumir correspondendo à menor liberdade de movimento atómico e molecular é o arranjo correspondente a um cristal perfeito no zero absoluto (0 K).

Terceira Lei da Termodinâmica: A entropia de uma substância perfeitamente cristalina é zero à temperatura de zero absoluto.



Aumento de entropia de uma substância com a temperatura

Importância da terceira lei da termodinâmica: permite calcular os valores de S absolutas das substâncias.

Sabendo que a **S** da substância pura é **0** a **0 K** podemos medir o seu aumento quando esta é aquecida por ex: a 25 °C, como $S_i = 0$:

$$\Delta S = S_f - S_i = S_f \quad (\text{entropia absoluta})$$

Deste modo a entropia de uma substância é dada ΔS ou S_f .

S_f – Entropia absoluta visto ser o valor real da entropia e não um valor calculado em relação a uma referência arbitrária.

Energia de Gibbs

A segunda lei da termodinâmica diz-nos que para que uma reacção seja espontânea é necessário que $\Delta S_{\text{univ}} > 0$. No entanto para conhecermos ΔS_{univ} precisamos de calcular em simultâneo ΔS_{sist} e ΔS_{meio} . Como por vezes o cálculo do ΔS_{meio} pode ser difícil socorremo-nos de outra função termodinâmica para nos ajudar a prever se a reacção é espontânea ou não.

Processo em equilíbrio: $\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S_{\text{sist}} + \Delta S_{\text{meio}} = 0$

Processo espontâneo: $\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S_{\text{sist}} + \Delta S_{\text{meio}} > 0$

Substituindo - $\Delta H_{\text{sist}} / T$ por ΔS_{meio}

$$\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S_{\text{sist}} - \Delta H_{\text{sist}} / T > 0$$

Se multiplicarmos todos os membros da equação por T:

$$T\Delta S_{\text{univ}} = -\Delta H_{\text{sist}} + T\Delta S_{\text{sist}} > 0$$

$$-T\Delta S_{\text{univ}} = \Delta H_{\text{sist}} - T\Delta S_{\text{sist}} < 0$$

Para que a reacção seja espontânea à temperatura T é necessário que as variações de entalpia e de entropia do sistema sejam tais que:

$$\Delta H_{\text{sist}} - T\Delta S_{\text{sist}} < 0$$

Para exprimirmos de modo mais directo o critério da espontaneidade duma reacção, introduzirmos uma nova função termodinâmica chamada **energia de Gibbs (G)**:

$$G = H - TS$$

A variação de energia de Gibbs para um processo a temperatura constante:

$$\Delta G = \Delta H_{\text{sis}} - T\Delta S_{\text{sis}}$$

$\Delta G < 0$ A reacção é espontânea no sentido directo.

$\Delta G > 0$ A reacção é não-espontânea no sentido directo.
A reacção no sentido inverso é espontânea.

$\Delta G = 0$ O sistema está em equilíbrio.

Variação da energia de Gibbs padrão de reacção (ΔG_r^0) - variação de energia de Gibbs quando uma reacção ocorre sob condições padrão, isto é, quando os reagentes nos seus estados padrão são convertidos em produtos nos seus estados padrão.



$$\Delta G_r^0 = [c\Delta G_f^0(C) + d\Delta G_f^0(D)] - [a\Delta G_f^0(A) + b\Delta G_f^0(B)]$$

$$\Delta G_r^0 = \sum n \Delta G_f^0 (\text{produtos}) - \sum m \Delta G_f^0 (\text{reagentes})$$

Energia de Gibbs padrão de formação (ΔG_f^0) - a variação de energia de Gibbs que ocorre quando **1 mole** do composto é sintetizado a partir dos seus elementos nos seus estados padrão.

ΔG^0 de qualquer elemento na sua forma estável é zero.

18.2

TABELA

Convenções para Estados Padrão	
Estado da Matéria	Estado Padrão
Gás	Pressão de 1 atm
Líquido	Líquido puro
Sólido	Sólido puro
Elementos*	$\Delta G_f^0 = 0$
Solução	Concentração 1 molar

* A forma alotrópica mais estável a 1 atm e 25°C.



Calcule as variações de energia de Gibbs padrão para a seguinte reacção a 25°C.



A reacção é espontânea a 25°C?

Resposta $\Delta G_0 = -6405 \text{ kJ} < 0$. Reacção espontânea.

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

As 4 situações possíveis:

- 1- Se ΔH e ΔS forem ambos positivos, então $\Delta G < 0$ apenas quando o termo $T\Delta S$ for $>$ que ΔH em módulo. Esta condição verifica-se quando T é elevado.
- 2- Se ΔH for positivo e ΔS for negativo, ΔG é sempre positivo independentemente da temperatura.
- 3- Se ΔH for negativo e ΔS for positivo, ΔG é sempre negativo, independentemente da temperatura
- 4- Se ΔH e ΔS forem ambos negativos, então $\Delta G < 0$ apenas quando o termo $T\Delta S$ for $<$ que ΔH em módulo. Esta condição verifica-se quando T é pequeno.

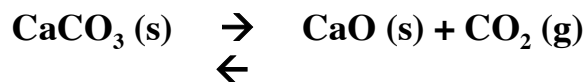
TABELA 18.3

Factores que Afectam o Sinal de ΔG na Relação $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$

ΔH	ΔS	ΔG	Exemplo
+	+	A reacção realiza-se espontaneamente a temperaturas elevadas. A temperaturas baixas, a reacção é espontânea no sentido inverso.	$2\text{HgO}(s) \longrightarrow 2\text{Hg}(l) + \text{O}_2(g)$
+	-	ΔG é sempre positivo. A reacção é espontânea no sentido inverso para todos os valores de temperatura.	$3\text{O}_2(g) \longrightarrow 2\text{O}_3(g)$
-	+	ΔG é sempre negativo. A reacção realiza-se espontaneamente para todos os valores de temperatura.	$2\text{H}_2\text{O}_2(l) \longrightarrow 2\text{H}_2\text{O}(l) + \text{O}_2(g)$
-	-	A reacção processa-se espontaneamente a temperaturas baixas. A temperaturas elevadas, a reacção inversa torna-se espontânea	$\text{NH}_3(g) + \text{HCl}(g) \longrightarrow \text{NH}_4\text{Cl}(s)$

Temperatura e Reacções Químicas

Aplicação da equação $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ para a reacção:



É uma reacção reversível. No processo industrial o sistema nunca é mantido em equilíbrio dado que o CO_2 é removido de modo a deslocar o sistema para a direita.

Interessa saber qual a temperatura à qual a decomposição do CaCO_3 se torna significativa ou seja a reacção se torna espontânea.

Em primeiro lugar calcula-se ΔH° e ΔS° para a reacção a 25°C utilizando os dados do apêndice 3.

Como ΔG° é > 0 : a reacção não é favorável a 25°C . Para tornar $\Delta G^\circ < 0$ tem que se saber a temperatura a partir da qual ΔG° é negativo.

$$0 = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$$

$$\Delta H^\circ / \Delta S^\circ = T$$

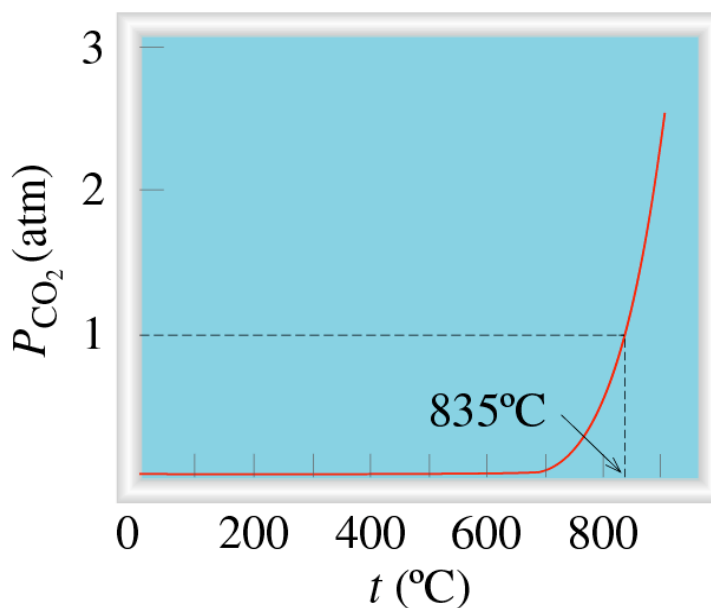
$$\Delta H^\circ = 177,8 \text{ kJ}$$

$$\Delta S^\circ = 160,5 \text{ J/K}$$

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$$

$$t = 25^\circ\text{C}, \Delta G^\circ = 130,0 \text{ kJ}$$

$$\Delta G^\circ = 0 \text{ a } t = 835^\circ\text{C}$$



A temperaturas $>$ que $835\text{ }^{\circ}\text{C}$, ΔG° torna-se negativo e a reacção é espontânea.

Energia de Gibbs e Transições de Fase

$$\Delta G^0 = 0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0$$

A temperatura de transição (ou seja no ponto de fusão ou de solidificação) o sistema está em equilíbrio ($\Delta G = 0$). Nesta situação:

$$0 = \Delta H - T\Delta S$$

$$\Delta S = \Delta H / T$$

1) Equilíbrio gelo \rightarrow água

$$\Delta H_{\text{fusão molar}} = 6010\text{ J/mol}$$

$$T = 0\text{ }^{\circ}\text{C}$$

$$\Delta S_{\text{gelo} \rightarrow \text{água}} = 6010\text{ J/mol} / 273\text{ K} = 22,0\text{ J/Kmol}$$

Quando uma mole de gelo funde a $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ há um aumento de entropia de $22,0\text{ J/K}$. O aumento é consistente com o aumento da desordem quando se passa da fase sólida para a fase líquida.

2) Equilíbrio água \rightarrow gelo

$$\Delta S_{\text{água} \rightarrow \text{gelo}} = - 6010\text{ J/mol} / 273\text{ K} = - 22,0\text{ J/Kmol}$$

A fusão do gelo é um processo endotérmico (ΔH é positivo) e a solidificação da água é um processo exotérmico (ΔH é negativo).

Energia de Gibbs e Equilíbrio Químico

As equações que nos dão as variações de energia de Gibbs padrão e de energia de Gibbs:

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0$$

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Quando não estamos em condições padrão, usa-se ΔG em vez de ΔG^0

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln Q$$

R = constante dos gases (8,314 J/K mol)

T = temperatura absoluta (K)

Q = quociente da reacção = [produtos] / [reagentes]

ΔG depende de ΔG^0 e $RT \ln Q$.

Para uma dada reacção a T fixa ΔG^0 é fixo no entanto $RT \ln Q$ não permanece constante visto que Q varia coma composição da mistura reaccional.

Consideremos 3 casos:

Caso 1

Se ΔG^0 for uma quantidade negativa elevada, o termo $RT \ln Q$ não se tornará um valor positivo suficientemente grande para anular ΔG^0 sem que ocorra formação de uma quantidade significativa de produtos.

Caso 2

Se ΔG^0 for uma quantidade positiva elevada, o termo $RT \ln Q$ só será mais negativo do que ΔG^0 é positivo (valor absoluto superior a ΔG^0) se apenas se tiver formado uma pequena quantidade de produtos e se a concentração de reagentes for elevada em relação à dos produtos.

Caso 3 (Em equilíbrio)

$$\Delta G = 0$$

$$Q = K$$

$$0 = \Delta G^0 + RT \ln K$$

$$\Delta G^0 = - RT \ln K$$

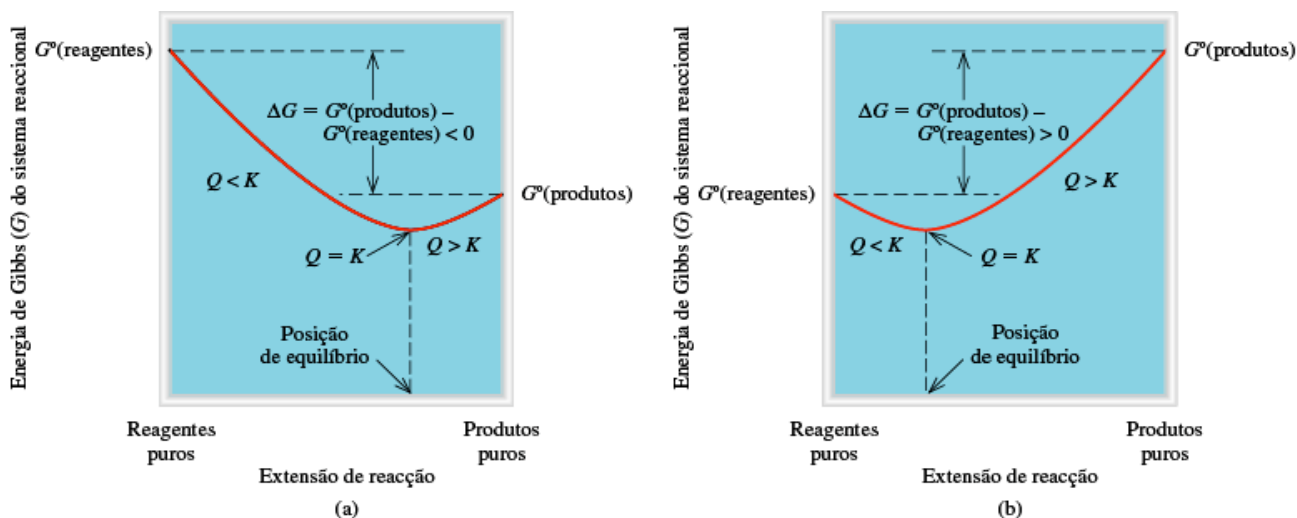
É uma das equações mais importantes da termodinâmica visto que possibilita relacionar a constante de equilíbrio (K) de uma reacção com a energia de Gibbs padrão e vice-versa.

TABELA 18.4

Relação entre ΔG° e K como Previsto pela Equação $\Delta G^\circ = -RT \ln K$

K	$\ln K$	ΔG°	Comentários
> 1	Positivo	Negativo	No equilíbrio, os produtos são favorecidos relativamente aos reagentes.
$= 1$	0	0	No equilíbrio, os produtos e reagentes são igualmente favorecidos.
< 1	Negativo	Positivo	No equilíbrio, os reagentes são favorecidos relativamente aos produtos.

Energia de Gibbs de um sistema de reacção vs. a extensão da reacção



$\Delta G^0 < 0$: no equilíbrio há uma conversão significativa de reagentes em produtos.

$\Delta G^0 > 0$: no equilíbrio os reagentes são favorecidos em detrimento dos produtos.



Recorrendo aos dados do apêndice 3 calcule K para a seguinte reacção a 25°C.

