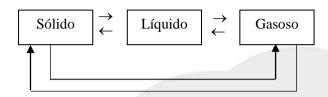
TERMOQUÍMICA



AULA 1 – CONCEITOS GERAIS

Na natureza podemos observar uma série de fenômenos (físicos ou químicos) que ocorrem com absorção ou liberação de energia na forma de calor. Um exemplo fácil de verificar são as passagens de estados físicos da matéria:



Observa-se que as passagens de sólido para líquido e líquido para gasoso, além do processo direto de sólido para gasoso (sublimação), ocorrem com absorção de energia.

Por outro lado, ir do estado gasoso para o líquido e depois do líquido para o sólido, bem como o processo direto de gás para sólido, ocorrem com liberação de energia.

- Chamaremos de ENDOTÉRMICO aqueles processos que absorvem calor.
- Os processos EXOTÉRMICOS são aqueles que liberam calor para acontecer.

No estudo da termoquímica usaremos uma grandeza chamada ENTALPIA (H).

A entalpia (H) é a medida do conteúdo ou quantidade de energia de um sistema à pressão constante.

Os valores absolutos de entalpia de um sistema não podem ser medidos e assim sendo mediremos a variação da entalpia (ΔH).

Sendo assim, podemos classificar as reações químicas das seguintes maneiras:

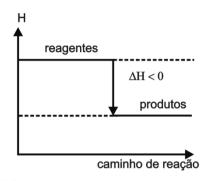
Reação Exotérmica

Libera calor ou é aquela onde o calor é considerado como produto de reação.

$$A + B \longrightarrow C + D \Delta H < 0$$

ou

$$A + B \longrightarrow C + D + Calor$$



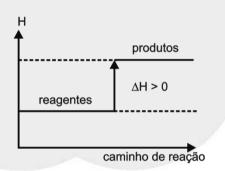
Reação Endotérmica

Absorve calor ou é aquela onde o calor é considerado como reagente.

$$A + B \longrightarrow C + D \quad \Delta H > 0$$

ou

$$A + B + calor \longrightarrow C + D$$



AULA 2 – ENTALPIA DE FORMAÇÃO

Um conceito importante para a compreensão da termoquímica e consequentemente para os cálculos envolvendo a transferência de calor é o de **entalpia padrão.**

<u>Entalpia Padrão</u> - toda e qualquer substância simples, na sua forma alotrópica mais estável e no estado físico mais comum que se encontra no estado padrão (298K e 1atm) possui entalpia igual a ZERO.

Sabendo a definição da entalpia padrão, podemos agora falar sobre a entalpia de formação.

Entalpia de Formação - É a quantidade de calor liberada ou absorvida durante a formação de 1 mol de uma substância composta, a partir de substâncias simples, no estado padrão.

1

TERMOQUÍMICA



Por exemplo: a 25 °C e 1 atm, temos:

$$H_{2(g)} + \sqrt[4]{2} O_{2(g)} \longrightarrow 1 H_2 O_{(\ell)}$$
 $\Delta H = -68,4 \text{ kca}\ell/\text{mol}$

Podemos interpretar a equação acima da seguinte maneira:

Para formar um mol de água líquida, a partir de substâncias simples, H2 (g) e O2 (g), no estado padrão (298K, 1 atm e estado físico e alotrópico mais estável) há a liberação de 68,4 kcal.

O sentido químico mais importante que devemos levar em consideração quando analisamos uma equação de formação como visto acima é que através dela sabemos qual a entalpia da própria substância formada na reação.

Considerando que todos os reagentes possuem, por definição, entalpia igual a zero, o valor envolvido no processo corresponde ao produto formado.

AULA 3 - ENTALPIA DE COMBUSTÃO

Entalpia ou Calor de Combustão é a energia liberada na forma de calor na combustão de um 1 mol de uma determinada substância química.

Observe os exemplos abaixo:

Combustão de um mol de metano:

1 CH4 (g) + 2 O2 (g)
$$\rightarrow$$
 CO2 (g) + 2 H2O (l) Δ H = -889, 5 kJ/mol

Podemos ler a equação acima da seguinte maneira: "Na combustão de um mol de metano, consome-se 2 mol de gás oxigênio, gerando 1 mol de dióxido de carbono gasoso, 2 mol de água líquida, com liberação de 889,5 kJ de energia na forma de calor".

Combustão do metanol (álcool metílico):

2 CH3OH (I) + 2 O2 (g)
$$\rightarrow$$
 2 CO2 (g) + 4 H2O (I)
 Δ H = - 1451,2 kJ

Qual seria a entalpia de combustão para a queima do metanol?

Tome cuidado! Observe que a reação está balanceada para 2 mol do metanol, ou seja, o valor do ΔH indicado não é a entalpia de combustão.

Para respondermos corretamente o valor da entalpia de combustão devemos dividir o valor dado por dois. Sendo assim, temos que a entalpia de combustão do metanol equivale a $\Delta H = -725,6 \text{ kJ/mol}$.

AULA 4 - LEI DE HESS

A Lei de Hess indica que a variação de entalpia de uma reação global é o somatório das entalpias das reações parciais, ou seja, depende apenas dos estados inicial e final da reação.

Observe o exemplo abaixo para entender a aplicação da Lei de Hess:

Combustão total do grafite:

C (grafite) + O2 (g)
$$\rightarrow$$
 CO2 (g) $\Delta H_{reação} = ?$

Para determinarmos o ΔH da reação acima podemos utilizar duas outras reações para chegarmos até ele.

Equação 1:

C (grafite) +
$$\frac{1}{2}$$
 O2 (g) \rightarrow CO (g) $\Delta H = -110.3 \text{ kJ}$

Equação 2:

CO (g) +
$$\frac{1}{2}$$
 O2 (g) \rightarrow CO2 (g) $\Delta H = -283,0 \text{ kJ}$

Se somarmos a equação 1 e a equação 2 cancelando os intermediários de reação (neste caso o CO) chegamos na reação global:

C (grafite) + O2 (g)
$$\rightarrow$$
 CO2 (g)

Esta reação é exatamente aquela que precisamos calcular o valor do $\Delta H_{\text{reacão}}.$

Pela Lei de Hess, temos:

$$\Delta H_{reação} = \Delta H1 + \Delta H2$$

$$\Delta H_{reação} = -110,3 + (-283,0) = -393,3 \text{ kJ}$$

Atenção às consequências da utilização da Lei de Hess.

Muitas vezes necessitamos inverter, multiplicar ou dividir uma determinada reação química para chegarmos na equação global. Para isso você deve ter sempre em mente que:

- Ao inverter uma determinada equação química, o sinal do ΔH também deve ser invertido;
- Quando multiplicamos uma equação, devemos também multiplicar o valor do ∆H;
- Ao dividir uma equação, dividimos também o valor do ΔH.

TERMOQUÍMICA



AULA 5 – ENTALPIA DE LIGAÇÃO

Entalpia ou Energia de Ligação é o calor envolvido na quebra ou formação de 1 mol de ligação química.

Vale a pena você lembrar que:

- A quebra de ligações é sempre um processo endotérmico;
- A formação de ligações é sempre um processo exotérmico;

Exemplos:

H2 (g)
$$\rightarrow$$
 2 H (g) $\Delta H = + 435,5 \text{ kJ/mol}$

Lê-se: a quebra de um mol de ligações químicas entre os átomos de hidrogênio absorve 435,5 kJ de energia

2 Cl (g)
$$\rightarrow$$
 Cl2 (g) Δ H = - 242,0 kJ/mol

Lê-se: a formação de 1 mol de ligação química entre átomos de cloro libera 242,0 kJ de energia

Tome muito cuidado e tenha muita atenção para o cálculo do ∆H_{reação} pelas energias de ligação!

Aqui não fazemos o cálculo pela variação, ou seja, a condição final menos a condição inicial e sim pelo saldo energético das ligações quebradas nos reagentes e formadas nos produtos.

$$\underbrace{2 \, H - I}_{2 \cdot (298.4)} + \underbrace{C\ell - C\ell}_{1 \cdot (242.0)} \longrightarrow \underbrace{2 \, H - C\ell}_{2 \cdot (430.9)} + \underbrace{I - I}_{1 \cdot (150.9)}$$

$$\Delta H = +838.8 - 1012.7 = -173.9 \text{ kJ}$$

AULA 6 – ENERGIA DE GIBBS E ESPONTANEIDADE DE REAÇÃO

A energia de Gibbs também chamada de energia livre de Gibbs indica se uma reação é espontânea ou não sob determinadas condições.

Basicamente devemos lembrar que:

 $\Delta G < 0 \implies$ Reação Espontânea (Também chamada de Exergônica, libera energia)

 $\Delta G > 0 \implies$ Reação não ocorre Espontaneamente (Chamada de Endergônica, absorve energia)

Para o cálculo da energia livre de Gibbs utilizamos a seguinte equação matemática:

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

Onde:

 $\Delta G \implies \text{Energia Livre de Gibbs}$

ΔH ⇒ Variação da Entalpia

 $T \Rightarrow$ Temperatura em kelvin

ΔS ⇒ Variação da Entropia