

Discente: _____

1. Termoquímica

Reações → Energias

Estuda as variações de energia, na forma de calor, que acompanham as reações químicas.

❖ Conceitos importantes da Termoquímica

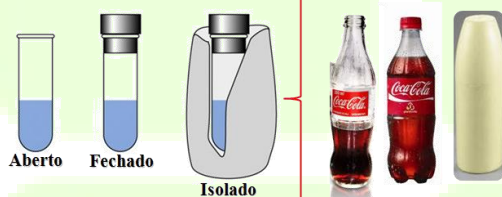
◆ **Sistema:**
Parte do universo a qual queremos estudar.

◆ **Fronteira:**
Parte que separa o sistema do universo.

◆ **Vizinhanças:**
Parte restante do universo.



Tipos de Sistemas



1.1 Calor e Temperatura

Energia é a capacidade de algo de realizar trabalho

Térmica

Calor

Designa a troca de energia entre corpos

Status:
Derretendo...



Cinética

Temperatura

Caracteriza a agitação das moléculas de um corpo



❖ Medidas de quantidade de calor

- **Caloria** (simbolizada por cal), que equivale à quantidade de calor necessária para elevar em 1 °C a temperatura de 1 g de água.

- **Joule (J)** é a unidade de energia no Sistema Internacional e, sendo a mais utilizada em todo o mundo. Determina-se, experimentalmente, que a equivalência entre a caloria e o joule é: **1 cal = 4,184 J** (exatos)

1.2 Entalpia e processos endotérmicos e exotérmicos

Entalpia: É o calor transferido entre o sistema e a vizinhança realizado sob pressão constante. O Símbolo é H.

Como se calcula? $\Delta H = H_{\text{produto}} - H_{\text{reagente}}$

$$\Delta H^\circ = [\sum n \cdot \Delta H_f^\circ (\text{produtos})] - [\sum n \cdot \Delta H_f^\circ (\text{reagentes})]$$

Processos

Endotérmicos

ENDO = Para dentro

Absorve Calor

O ambiente é resfriado

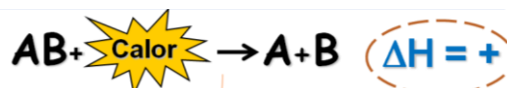
Exotérmicos

EXO = Para fora

O ambiente é aquecido

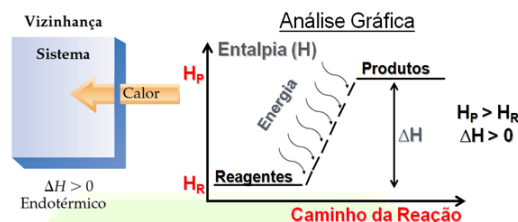
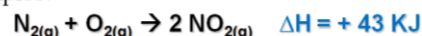
Libera Calor

Endotérmico

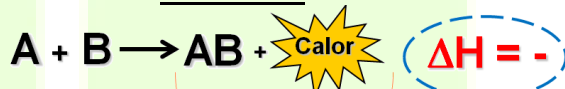


Reagentes

Exemplos:

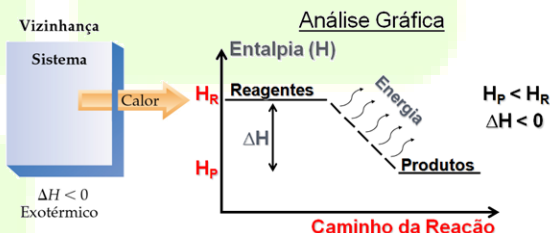
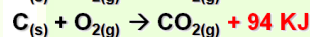
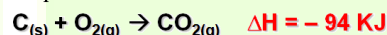


Exotérmico

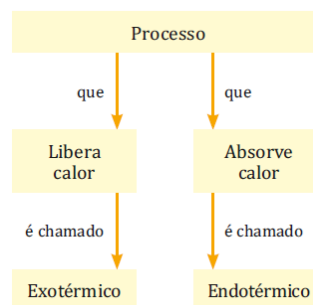


Produtos

Exemplos:



Resumo



1.3 Tipos de Entalpia

Entalpia-padrão (ΔH°)

É a entalpia usada quando a reação está a 25°C, sob pressão de 1 atm (para gases) ou na concentração de 1 mol/L (para soluções).

$$\Delta H^\circ = H_{\text{produtos, 1 atm ou 1 mol/L}} - H_{\text{reagentes, 1 atm ou 1 mol/L}}$$

Entalpia de Formação (ΔH_f)

Corresponde à variação da entalpia na formação de uma substância composta a partir de seus elementos constituintes

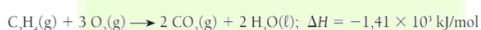
Substância	ΔH_f° (kJ/mol)	Substância	ΔH_f° (kJ/mol)
H ₂ (g)	0,0	C ₂ H ₅ O (l) (etanol)	-277,6
H ₂ O (l)	-285,8	C ₂ H ₃ O (l) (acetona)	-248,4
H ₂ O ₂ (l)	-187,8	C ₄ H ₁₀ O (l) (éter dietílico)	-279,5
H ₂ S (g)	-20,6	N ₂ (g)	0,0
C (grafite)	0,0	NH ₃ (g)	-45,9
C (diamante)	+1,9	NO ₂ (g)	+33,2
CO (g)	-110,5	N ₂ O (g)	+81,6
CO ₂ (g)	-393,5	N ₂ O ₃ (g)	+86,6
CH ₄ (g) (metano)	-74,6	N ₂ O ₄ (g)	+11,1
C ₂ H ₂ (g) (etino)	+227,4	N ₂ O ₅ (g)	+13,3
C ₂ H ₄ (g) (eteno)	+52,4	O ₂ (g)	0,0
C ₂ H ₆ (g) (etano)	-84,0	O ₃ (g)	+142,7
C ₃ H ₈ (g) (propano)	-103,8	Al (s)	0,0
C ₄ H ₁₀ (g) (butano)	-125,7	Al ₂ O ₃ (s)	-1 675,7
C ₅ H ₁₂ (l) (pentano)	-173,5	S (rômbico)	0,0
		S (monoclínico)	+0,3
		SO ₂ (g)	-296,8

Entalpia de Combustão (ΔH_{comb})

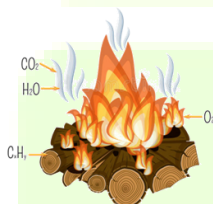
É a entalpia encontrada nas reações de combustão.

Combustão é a reação **exotérmica** de uma substância com o **oxigênio**, realizada em condições tais que o próprio calor liberado é suficiente para manter a reação em andamento até que pelo menos um dos reagentes se esgote.

Combustível + n O₂(g) → produtos da combustão; $\Delta H < 0$



Combustion reaction



Substância	ΔH_c° (kJ/mol)
H ₂ (g)	-285,8
C (graf.)	-393,5
CO (g)	-283,0
CH ₄ (g) (metano)	-890,8
C ₂ H ₂ (g) (etino)	-1301,1
C ₂ H ₄ (g) (eteno)	-1411,2
C ₂ H ₆ (g) (etano)	-1 560,7
C ₃ H ₈ (g) (propano)	-2 219,2
C ₄ H ₁₀ (g) (butano)	-2 877,6
C ₅ H ₁₂ (l) (pentano)	-3 509,0
C ₆ H ₆ (l) (benzeno)	-3 267,6
C ₆ H ₁₄ (l) (hexano)	-4 163,2
C ₇ H ₁₆ (l) (heptano)	-4 817,0
CH ₂ O (l) (formaldeído)	-570,7
CH ₃ O (l) (metanol)	-726,1
C ₂ H ₅ O (l) (etanol)	-1 366,8
C ₂ H ₃ O (l) (acetona)	-1 789,9
C ₄ H ₉ O (l) (éter dietílico)	-2 723,9

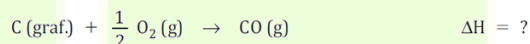
1.4 Lei de Hess

A Lei de Hess permite que trabalhem com equações termoquímicas como se fossem equações matemáticas. Ao somarmos equações, o ΔH da reação resultante dessa soma será igual à soma dos ΔH s das etapas somadas.

- Se uma reação for executada em uma série de etapas, o ΔH para a reação será igual à soma dos ΔH para as etapas individuais.

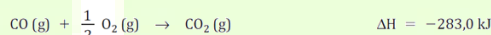
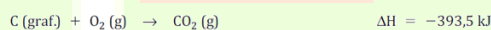
- A ΔH total para o processo **independe** do número de etapas ou da maneira a reação ocorre.

Exemplo:



Essa reação é muito difícil de realizar na prática; uma parte do carbono pode queimar até formar dióxido de carbono (CO₂) e outra parte pode permanecer sem queimar. Por isso, é bastante difícil medir o ΔH dessa reação.

Aplicando a Lei de Hess



Resolução do exemplo

1.5 Energia de ligação

Reação química

Algumas ligações químicas são **quebradas** e outras **formadas**

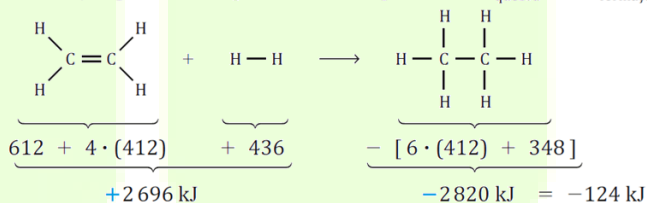
processo
endotérmico

processo
exotérmico



Denomina-se **energia de ligação** a variação de entalpia da reação em que um mol de ligações é quebrado, estando o reagente e os produtos dessa quebra no estado gasoso.

O ΔH da reação global corresponde à soma algébrica: $\Delta H_{\text{quebra}} + \Delta H_{\text{formação}}$



Ligações quebradas

Ligações formadas

Ligação	ΔH_L	Ligação	ΔH_L	Ligação	ΔH_L	Ligação	ΔH_L
H—H	436*	Cl—Cl	242*	C—H	412	C—F	484
O—O	157	Br—Br	193*	C—C	348	C—Cl	338
O=O	496*	I—I	151*	C=C	612	C—Br	276
N—N	163	H—F	565*	C≡C	837	C—I	238
N=N	409	H—Cl	431*	C—O	360	O—H	463
N≡N	944*	H—Br	366*	C=O	743	N—H	388
F—F	158*	H—I	299*	C—N	305	N—O	210

* Energia de ligação na molécula biatômica correspondente. Nos demais casos, o valor é uma **média** de valores obtidos de várias moléculas em que existe a ligação mencionada.

Fonte: ATKINS, P. et al. *Chemical principles, the quest for insight*. 6. ed. New York: Freeman, 2013. p. 300.

Bons estudos!

