



Termodinámica II

Cálculo da variação em entalpia

1) Calores de formação



A variação de entalpia de uma substância pode ser calculada utilizando os calores de formação de cada substância

$$\Delta H = H_{\text{final}} - H_{\text{inicial}}$$

Lembrando:

Entalpia de formação de uma substância simples no estado padrão é zero

Entalpia de formação é calculada por mol.

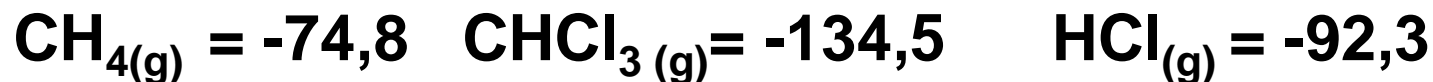
Levar em conta a estequiometria da reação

Exemplo 1: Considere a reação de cloração do metano



Calcule a variação de entalpia do processo

Dados: Entalpia padrão de formação, em KJ/mol e a 25 °C:



Exemplo 2: O alumínio é utilizado como redutor de óxidos, no processo denominado de aluminotermia, conforme mostra a equação química:



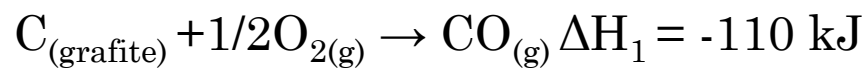
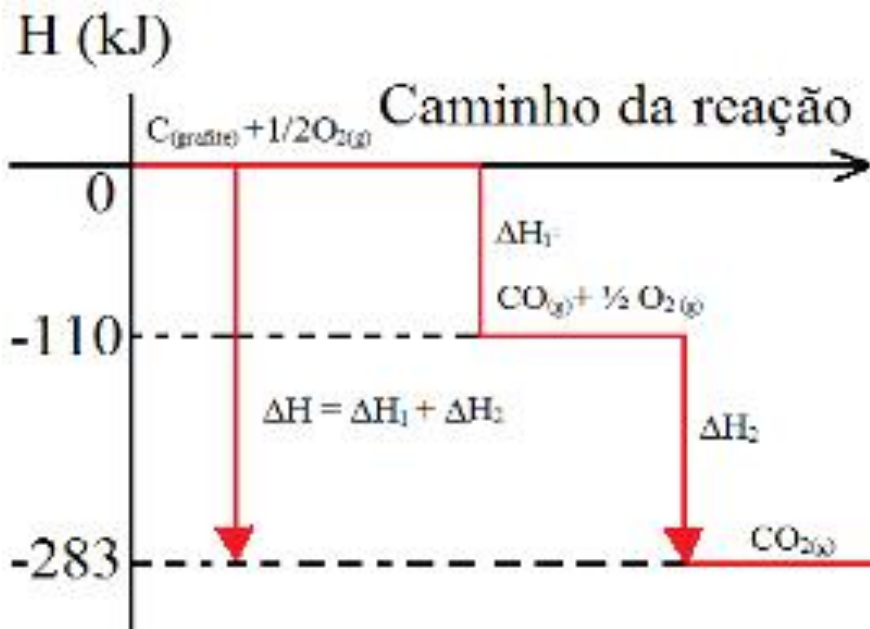
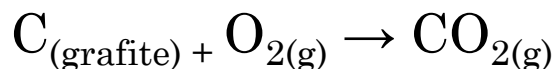
Calcule a variação de entalpia do processo

Dados: Entalpia padrão de formação, em KJ/mol e a 25 °C:



2) Lei de Hess

O calor liberado ou absorvido em uma reação química depende apenas dos estados final e inicial dessa reação.





$$\Delta H = \Delta H_1 + \Delta H_2 = -393 \text{ kJ}$$



A Lei de Hess permite tratar as equações químicas como equações matemáticas

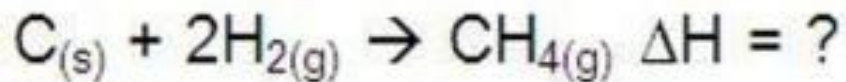
 Possibilidade de manipulação das equações

 Invertidas  Inverter o valor do ΔH

 Multiplicar ou dividir por um fator  Realizar a mesma operação com ΔH

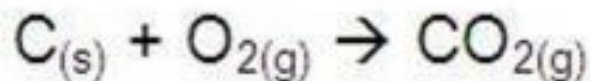


Exemplo 3: Calcule a variação de entalpia do processo

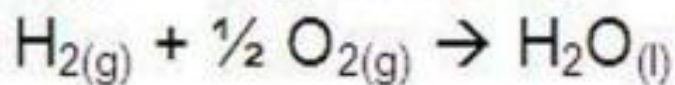


Dados:

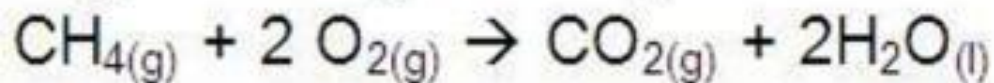
Semi reações:



$$\Delta H_1 = -94 \text{ kcal}$$



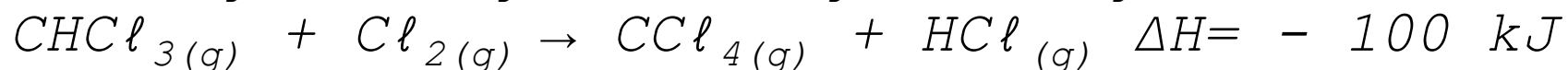
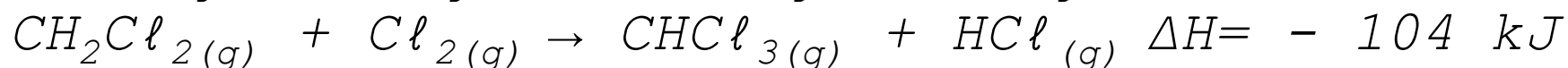
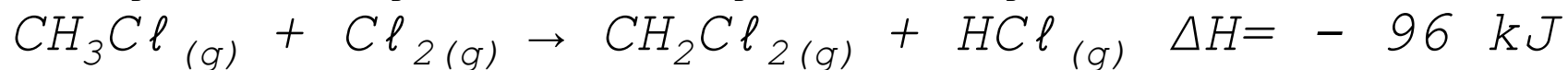
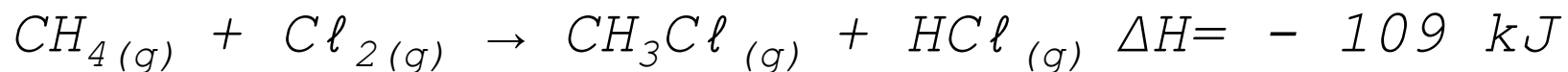
$$\Delta H_2 = -68 \text{ kcal}$$



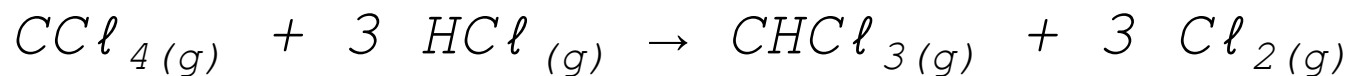
$$\Delta H_3 = -213 \text{ kcal}$$



Exemplo 4: As seguintes equações termoquímicas são:



Qual a variação de entalpia (k Joule) correspondente à obtenção de 1 mol de cloreto de metila (CH_3Cl), a partir de tetracloreto de carbono e cloreto de hidrogênio, quando reagentes e produtos forem gases a 25°C e 1 atmosfera de pressão?



2) Energia de ligação

Reação Química



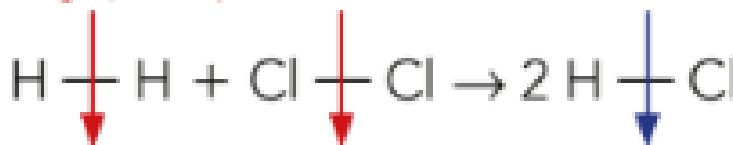
Rearranjo de átomos



Quebra das ligações dos reagentes e formação das ligações dos produtos



Ligações quebradas



Ligações formadas



Toda reação química ocorre em duas etapas



A variação de entalpia pode ser estimada a partir das energias das ligações quebradas e formadas



Toda reação química ocorre em duas etapas



A variação de entalpia pode ser estimada a partir das energias das ligações quebradas e formadas

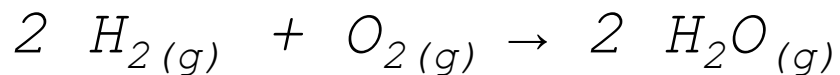
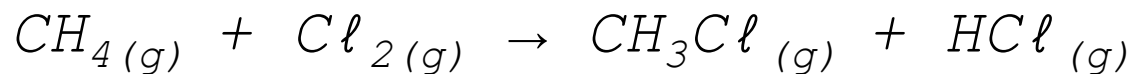


Ligação	Energia de ligação em kJ/mol
H—H	436,0
H—F	563,2
H—Cl	431,8
H—Br	366,1
H—I	298,7
C—H	413,4
C—O	353,5
C—F	434,3
C—Cl	372,2
C—Br	280,7
C—I	241,4
C—C	346,8

Ligação	Energia de ligação em kJ/mol
C=C	614,2
C≡C	833,4
C=O (CO ₂)	804,3
H—O	463,5
O—O	468,6
N—N	945,4
N—H	391,0
N—Cl	192,6
F—F	153,1
Cl—Cl	242,6
Br—Br	192,8
I—I	151,0



Exemplo 4: Considere as equações



Qual a variação de entalpia da reação sabendo que:

Ligação	Energia de ligação KJ/mol
C-H	413,4
Cl-Cl	242,6
C-Cl	372,2
H-Cl	431,8
H-H	436,0
O=O	498
O-H	462



Energia de ativação e catalisadores

Reação Química

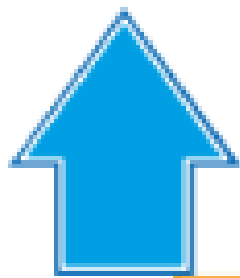


Necessita de uma determinada
quantidade de energia mínima para
iniciar

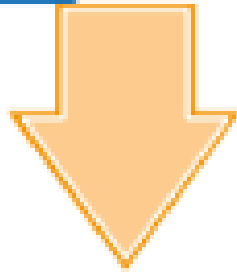


Energia de ativação





Quanto maior for a energia de ativação,



menor será a velocidade da reação.

Catalisadores



**Substâncias que aceleram a reação pela
diminuição da energia de ativação**



Não há alteração dos produtos



Reação exotérmica



Figura 4. Diagrama de entalpia de reação exotérmica.

Reação endotérmica



Figura 5. Diagrama de entalpia de reação endotérmica.

