

## Disciplina de Química Geral

### Aula 7: Termoquímica

Profa. Roberta L. Zioli

## TERMOQUÍMICA

Estuda a quantidade de calor (forma de energia) absorvida ou desprendida numa reação química.

Tópicos a serem abordados:

1. Como se mede a quantidade de calor desprendida ou absorvida numa reação ?
2. Como se pode relacionar a quantidade de calor envolvida numa certa reação com a quantidade de calor envolvida em outras reações?
3. Como se usa esse tipo de informação e qual sua utilidade?

### 1. Como medir a quantidade de calor desprendida ou absorvida numa reação ?

em meio aquoso utiliza-se um **calorímetro** (garrafa térmica)  
Para reações de combustão utiliza-se uma **bomba calorimétrica**

calorímetro



bomba calorimétrica



Nos dois casos o calor é transferido para uma massa de água e obtido a partir da expressão

$$q = m \cdot c \cdot \Delta T$$

q é a quantidade de calor (cal).

m é a massa de água (g)

c é o calor específico da água (cal/g.°C)

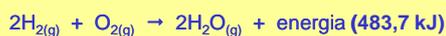
$\Delta T$  é a variação de temperatura (°C)

### Como medir o calor de uma reação na ausência de um calorímetro (experimento feito no laboratório)?

1. Descrever como medir experimentalmente a quantidade de calor envolvida numa reação;
2. Definir: sistema, vizinhanças e limite no experimento realizado no lab.

## Nomenclatura e unidade

Exemplo:



mais usual: calor

Heat

Enthalpein  
(grego)

Entalpia (H) propriedade (extensiva) das substâncias relacionada ao calor de reação\*

\*  $\Delta H = q$ , a pressão constante

$$\Delta H = H_2 - H_1$$

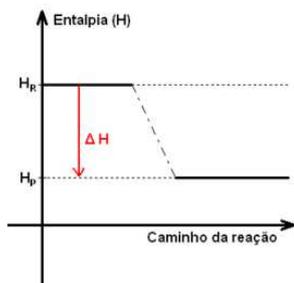
A entalpia é uma função de estado: o calor liberado ou absorvido numa reação (variação de entalpia) depende dos estados inicial (**reagentes**) e final (**produtos**).

Entalpia (H), propriedade extensiva que permite calcular o calor absorvido ou desprendido numa reação química

Propriedade extensiva, é propriedade que depende da quantidade de substância. Ex: massa, volume, e outras.

A entalpia é uma função de estado: o calor liberado ou absorvido numa reação (variação de entalpia) depende dos estados inicial (**reagentes**) e final (**produtos**).

### Reação exotérmica

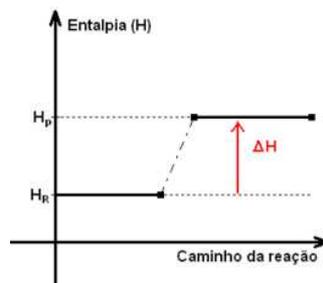


$$H_P < H_R$$

$$\Delta H = H_P - H_R$$

$$\Delta H < 0$$

### Reação endotérmica



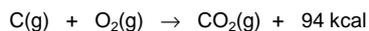
$$H_P > H_R$$

$$\Delta H = H_P - H_R$$

$$\Delta H > 0$$

### Representações de equações termoquímicas

#### Reações que liberam energia: reações exotérmicas



(Diz-se que a vizinhança **ganha** 94 kcal do sistema)

ou



(Diz-se que o sistema **perde/libera** 94 kcal para a vizinhança)

*\*Termodinâmica: necessidade de definição de sistema e vizinhança  
\*Pela IUPAC a unidade de  $\Delta H^\circ$  deve ser em  $\text{kJ mol}^{-1}$   
\*1 cal = 4,184 J*

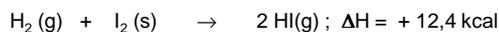
### Representações de equações termoquímicas

#### Reações que absorvem energia: reações endotérmicas



(Diz-se que a vizinhança **perde** 12,4 kcal para o sistema)

ou



(Diz-se que o sistema **ganha** 12,4 kcal da vizinhança)

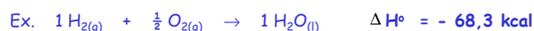
### Entalpias ou Calores de Reação mais usuais

1. Calor de Formação
2. Calor de Combustão
3. Calor de Dissolução
4. Calor de Neutralização

Quantidade de Calor que se refere sempre a **1 mol de substância**, na **Formação**, **Combustão**, **Dissolução** ou **Neutralização**.

#### 1. Calor de formação:

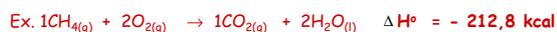
Refere-se à **formação de 1 mol de substância**, a partir de suas substâncias simples.



$$\Delta H^\circ_f H_2O(l) = -68,3 \text{ kcal/mol}$$

#### 2. Calor de combustão:

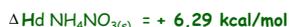
Refere-se à **combustão de 1 mol de substância**.



$$\Delta H^\circ_{\text{comb}} CH_4(g) = -212,8 \text{ kcal/mol}$$

### 1. Calor de dissolução:

Refere-se à **dissolução de 1 mol de substância**.



### 2. Calor de neutralização:

Refere-se à reação de **neutralização de um ácido por uma base com formação de 1 mol de H<sub>2</sub>O**.



Na reação de um ácido forte ( $\alpha = 1$ ) com base forte ( $\alpha = 1$ ) a variação de entalpia é aproximadamente constante e igual a 13,8 kcal/mol de água formada pois a reação que verdadeiramente ocorre é  $\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightarrow \text{H}_2\text{O}$

### Entalpia padrão de formação ( $\Delta H_f^\circ$ ): 1 mol da substância.

O estado padrão: 1 atm de pressão e, em geral, 25°C.

As condições padrão são indicadas pelo índice superior (°).

Por convenção, a entalpia padrão de substâncias simples na forma alotrópica mais estável a 25°C e 1 atm é igual a zero.

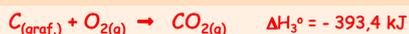
#### Valores de entalpia padrão de formação:

Substância	Fórmula	$\Delta H_f^\circ$ (kJ mol <sup>-1</sup> )
Hidrogênio	H <sub>2</sub> (g)	0
Metano	CH <sub>4</sub> (g)	- 74,9
Chumbo	Pb(s)	0
Sulfeto de chumbo	PbS(s)	- 98,3
Amônia	NH <sub>3</sub> (g)	- 45,9
Cloreto de prata	AgCl(s)	- 127,0
Óxido de nitrogênio	NO(g)	90,3
Água	H <sub>2</sub> O(g)	-241,8

## LEI DE HESS

### Lei da soma dos calores de reação

Numa reação que ocorre com mais de uma etapa, a soma dos calores de cada reação intermediária será o calor total da reação.



### Equação termoquímica:



Nas equações termoquímicas:

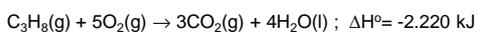
1. Quando uma equação termoquímica for multiplicada por um fator, deve-se multiplicar o valor da  $\Delta H$  pelo mesmo fator;
2. Quando a equação química for invertida, o valor da  $\Delta H$  fica com o sinal trocado.

### Cálculos estequiométricos envolvendo calor de reação

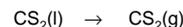
**Exemplo 1.** Calcule o calor desprendido quando se obtêm 907 kg de amônia, pela reação representada abaixo? (Admita que a reação ocorra a pressão constante)



**Exemplo 2.** Calcule a massa de propano necessária para obter 350 kJ de calor, que é a energia necessária para aquecer 1L de água da temperatura ambiente (20 °C) até o ponto de ebulição ao nível do mar.



**Exemplo 3.** Calcule a variação de entalpia padrão de vaporização do dissulfeto de carbono a 25 °C.

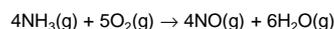


$$\Delta H_f^\circ[\text{CS}_2(\text{l})] = 88,0 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^\circ[\text{CS}_2(\text{g})] = 117 \text{ kJ/mol}$$

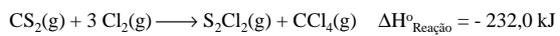
$$\Delta H^\circ_{\text{reação}} = \sum n\Delta H_f^\circ(\text{produtos}) - \sum n\Delta H_f^\circ(\text{reagentes})$$

**Exemplo 4.** Calcule a variação de entalpia padrão para a reação abaixo. Use os dados da tabela em slide anterior.



**(Questão de Prova)**

Considere a reação abaixo:



Inicialmente, em um reator de 10 L a 25 °C, as pressões do  $\text{CS}_2(\text{g})$  e do  $\text{Cl}_2(\text{g})$  são 2,0 e 4,0 atm respectivamente.

- Calcule o rendimento da reação, admitindo que a energia liberada pela reação foi de 92,8 kJ.
- Determine a pressão total no reator, após o término da reação, considerando que o rendimento seja de 100%.