

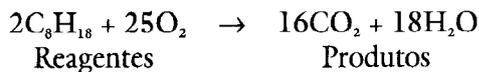
Extraído de: Sandra Regina Mutarelli Setúbal, O outro lado da energia, Apokhila: Pueri Domus Escolas Associadas

QUAL É A ENERGIA ENVOLVIDA EM REAÇÕES DE COMBUSTÃO?

No estudo de reações químicas, como já mencionado, é fundamental levarmos em conta não apenas o nível de agitação térmica das partículas, como também a energia envolvida nas ligações químicas, pois, na maior parte das vezes, a liberação ou absorção de calor observada nessas reações ocorre por causa da formação de compostos com diferentes ligações químicas. Por exemplo, na queima da gasolina, a energia é liberada, pois o conteúdo energético das moléculas de gasolina e de oxigênio é maior do que o dos produtos, que são gás carbônico e água.

Como exemplo, vamos analisar a energia envolvida na queima de um dos componentes da gasolina: o isooctano.

A equação de combustão do isooctano é:



Durante a análise desse processo, precisaremos utilizar o conceito de **energia de ligação**, pois sua variação de energia será avaliada a partir das ligações rompidas e formadas.

Uma característica interessante a ser observada é que, em processos nos quais a energia é *necessária*, ocorre absorção de energia (processos endotérmicos), ou seja, o calor de ligação é a energia necessária para romper ligações. Processos inversos, que formam ligações, liberam energia (processos exotérmicos). Portanto, invertendo-se um processo endotérmico, obtém-se um processo exotérmico e vice-versa; o calor envolvido, porém, continua com a mesma magnitude.

Voltando à análise da combustão da gasolina por meio dos valores de calores médios de ligação, outra forma de representar a equação de queima do isooctano é a utilização de modelos (figuras 6 e 7).

Para que essa reação ocorra, é preciso que se rompam 36 ligações C—H, 14 ligações C—C e 25 ligações O=O, e esses processos consomem energia. A tabela 2 resume o cálculo do total da energia gasta nesse processo de quebra.

TABELA 2: CÁLCULO DO TOTAL DA ENERGIA GASTA

LIGAÇÃO	Nº DE LIGAÇÕES	ENERGIA MÉDIA DE LIGAÇÃO (eV)	TOTAL DE ENERGIA NECESSÁRIA NA QUEBRA DAS LIGAÇÕES (eV)
C—H	36	4,15	149,4
C—C	14	3,48	48,7
O=O	25	4,97	124,3
Total geral			322,4

Depois de rompidas essas ligações, os átomos se ligam, liberando energia. São formadas 36 ligações O—H e 32 ligações C=O. A tabela 3 resume o cálculo do total da energia liberada no processo de formação das ligações.

TABELA 3: CÁLCULO DO TOTAL DA ENERGIA LIBERADA

LIGAÇÃO	Nº DE LIGAÇÕES	ENERGIA MÉDIA DE LIGAÇÃO (eV)	TOTAL DE ENERGIA LIBERADA NA FORMAÇÃO DE LIGAÇÕES (eV)
O—H	36	4,63	166,7
C=O	32	7,24	231,7
Total geral			398,4

Assim, no processo global (queima de duas moléculas de gasolina), como a energia consumida (322,4 eV) é menor do que a liberada (398,4 eV), há liberação de 76 eV de energia (398,4 – 322,4). Ou seja, nessa reação ocorre liberação de energia, motivo pelo qual ela é utilizada para colocar o carro em movimento.

CONEXÃO

ENERGIA DE LIGAÇÃO

Por definição, a energia de ligação é a energia necessária para romper 1 mol de ligação entre dois átomos.

A entalpia média de ligação entre dois átomos A—B é medida pelo estudo de rompimento de ligações A—B contidas em vários compostos. Apesar de ser uma aproximação, esse valor serve para avaliar aproximadamente a quantidade de energia necessária para romper 1 mol de ligação.

A partir desses valores, podemos comparar, por exemplo, a capacidade calorífica de combustíveis. Esse cálculo, porém, é teórico e, para a obtenção do valor real da capacidade calorífica de um combustível, utilizam-se, como veremos mais adiante, procedimentos experimentais.

Para romper 1 mol de ligação H—H são necessários, em média, 435,5 kJ.



As formas de representar esse processo são:

$435,5 \text{ kJ} + H_2(g) \rightarrow 2H(g)$, que indica a energia como reagente, ou seja, é necessária para que o processo ocorra;

ou

$H_2(g) \rightarrow 2H(g) - 435,5 \text{ kJ}$, que indica que a energia foi consumida;

ou

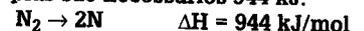
$H_2(g) \rightarrow 2H \quad \Delta H = 435,5 \text{ kJ/mol}$, que indica a variação de entalpia ocorrida nesse processo.

$\Delta H = H_f - H_i$, em que H_f é a entalpia do sistema final, que no caso são dois átomos de hidrogênio, e H_i , a entalpia do sistema inicial, que no caso é uma molécula de hidrogênio.

Como esse processo ocorre com absorção de energia ($H_f > H_i$), ΔH tem valor positivo ($\Delta H > 0$).

Para facilitar a utilização desse dado, utiliza-se o termo **calor de ligação** para ligações duplas ou triplas.

Assim, o calor de ligação de $N \equiv N$ é 944 kJ/mol. Isso significa que para romper 1 mol de ligações triplas são necessários 944 kJ:



No exemplo acima, o cálculo foi feito para a reação de duas moléculas de C_8H_{18} com 25 moléculas de O_2 . Esses dados são normalmente apresentados em kJ/mol, porém, para facilitar o entendimento de como ocorre a liberação de energia, convertamos kJ/mol em eV/molécula; assim, os dados foram transformados para um número pequeno de moléculas.

As transformações feitas por nós na análise acima foram:

Passo 1:

1 mol = $6,02 \times 10^{23}$ moléculas, portanto:

$$\text{energia de ligação em } \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = \frac{1}{6,02 \times 10^{23}} \frac{\text{kJ}}{\text{molécula}}$$

Passo 2:

1 kJ = 1 000 J, portanto:

$$\text{energia de ligação} = \frac{1}{6,02 \times 10^{23}} \frac{\text{kJ}}{\text{molécula}} = \frac{1 \times 1000}{6,02 \times 10^{23}} \frac{\text{J}}{\text{molécula}}$$

Passo 3:

$$1 \text{ J} = \frac{1}{1,6022 \times 10^{-19}} \text{ eV, portanto: energia de ligação} =$$

$$= \frac{1 \times 1000}{6,02 \times 10^{23}} \frac{\text{J}}{\text{molécula}} = \frac{1000}{6,02 \times 10^{23}} \frac{1}{1,6022 \times 10^{-19}} \frac{\text{eV}}{\text{molécula}}$$

Pelos três passos:

$$\text{energia de ligação em } \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = \frac{1000}{6,02 \times 10^{23} \times 1,6022 \times 10^{-19}} \frac{\text{eV}}{\text{molécula}}$$

$$\frac{1000}{6,02 \times 10^{23} \times 1,6022 \times 10^{-19}} \cong 0,01, \text{ portanto,}$$

energia de ligação em kJ/mol \cong 0,01 da energia de ligação em eV/molécula

Para descobriremos os fatores de transformação, basta analisarmos as unidades envolvidas.

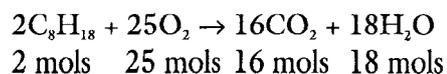
Com esse fator de conversão, podemos construir a tabela 4 e fazer a análise de energia liberada, 76 eV, quando duas moléculas de gasolina sofrem combustão.

TABELA 4: ENERGIA MÉDIA DE LIGAÇÃO EM kJ mol⁻¹ E eV

LIGAÇÃO	C—H	C—C	O=O	O—H	C=O
ENERGIA MÉDIA DE LIGAÇÃO EM kJ mol ⁻¹	415	348	497	463	724
ENERGIA MÉDIA DE LIGAÇÃO EM eV	4,15	3,48	4,97	4,63	7,24

Normalmente, trabalhamos com um número grande de moléculas. Assim, as medidas dos calores envolvidos em uma reação são dadas em kJ mol⁻¹ (tabela 4).

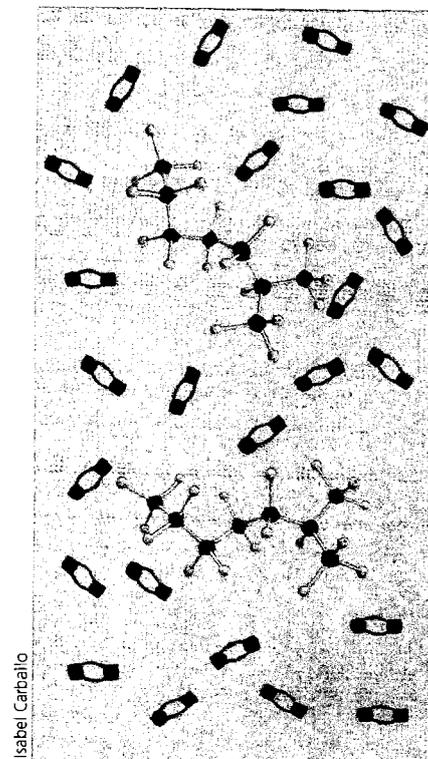
No exemplo da queima da gasolina, teríamos:



Na primeira etapa, ocorre a atomização de 2 mols de C_8H_{18} e 25 mols de O_2 , consumindo-se 32 237 kJ de energia (tabela 5).

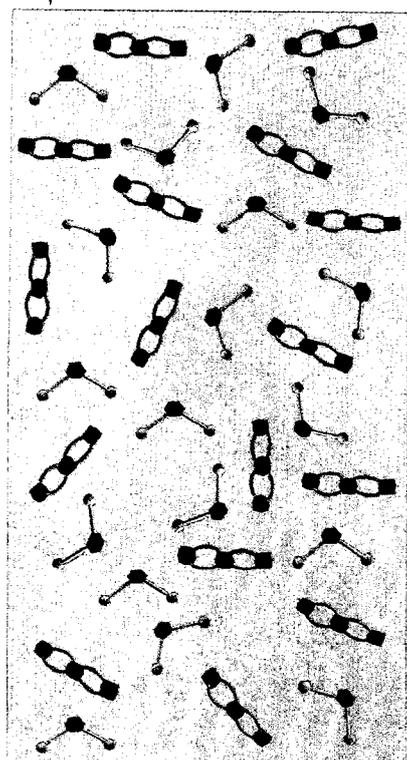
TABELA 5: CONSUMO DE ENERGIA NO PROCESSO DE QUEBRA DE LIGAÇÃO

LIGAÇÃO	Nº DE mols	Nº DE LIGAÇÕES POR mol	ENERGIA MÉDIA DE LIGAÇÃO POR mol/kJ mol ⁻¹	TOTAL (kJ)
C—C	2	7	348	4872
C—H	2	18	415	14940
O=O	25	1	497	12425
Total geral				32237



Isabel Carballo

Figura 6
Reagentes: 2 moléculas de C_8H_{18}
e 25 moléculas de O_2 .



Isabel Carballo

Figura 7
Produtos: 16 moléculas de CO_2
e 18 moléculas de H_2O .

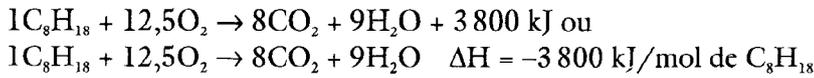
Na segunda etapa, há a formação de 16 mols de CO_2 e 18 mols de água a partir de 16 mols de átomos de carbono, 50 mols de átomos de oxigênio e 36 mols de átomos de hidrogênio, liberando-se 39 836 kJ de energia (tabela 6).

TABELA 6: LIBERAÇÃO DE ENERGIA NO PROCESSO DE ^{Formação} QUEBRA DE LIGAÇÃO

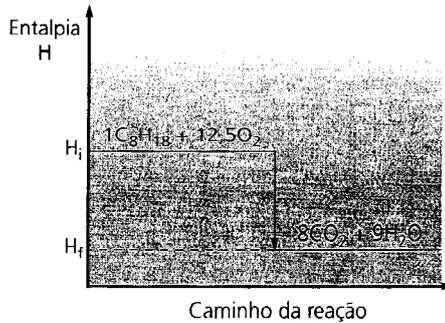
LIGAÇÃO	Nº DE MOIS	Nº DE LIGAÇÕES POR MOL	ENERGIA MÉDIA DE LIGAÇÃO POR MOL/KJ MOL ⁻¹	TOTAL (KJ)
C=O	16	2	724	23 168
O—H	18	2	463	16 668
Total geral				39 836

Assim, a cada 2 mols de C_8H_{18} queimados há liberação de aproximadamente 7 600 kJ ($39 836 - 32 237$). Diz-se que o calor de combustão da gasolina é 3 800 kJ/mol de C_8H_{18} , pois 7 600 kJ é a energia liberada quando 2 mols queimam. Essa quantidade de energia, porém, é um valor aproximado e serve para análises comparativas. Resumindo, esse valor é conhecido como calor de combustão. Ou seja, o calor de combustão de C_8H_{18} é 3 800 kJ mol⁻¹, que é a energia liberada quando 1 mol de C_8H_{18} é queimado.

Analogamente, o processo de quebra de ligação é representado das seguintes maneiras:



Pode-se também representar esse processo pelo gráfico ao lado.



Com dados de calor de combustão, pode-se comparar a eficiência dos vários combustíveis do ponto de vista de liberação de energia.

O problema na escolha de um combustível está relacionado com a capacidade que ele tem de fornecer energia. Deve-se levar em conta, porém, além do poder calorífico (que é a quantidade de calor liberada por grama de combustível):

1. a facilidade de evaporação, pois a combustão na câmara de combustão ocorre entre o vapor do combustível e o oxigênio;
2. o poder de resistência, ou seja, a compressão da mistura ar e vapor do combustível dentro do motor, porque, quanto maior for a possibilidade de se comprimir essa mistura sem que ela chegue a explodir, maior será o deslocamento do pistão e maior será a potência do motor;
3. o preço do combustível e sua disponibilidade.

Dessa forma, diante da crise mundial, o álcool, apesar de ter menos capacidade calorífica, tornou-se uma alternativa. A maior parte do álcool produzido no Brasil é obtida da cana-de-açúcar, cultura que ocupa vasta área do país, viabilizando, assim, a utilização desse combustível no lugar da gasolina.

1. Dado que o calor de combustão de C_8H_{18} é 3 800 kJ/mol e $M_{\text{C}_8\text{H}_{18}} = 114 \text{ g/mol}$, calcule a capacidade calorífica da gasolina em kJ/g.

2. Escreva a equação de queima do etanol, mostrando as fórmulas moleculares. A partir da equação e dos valores de energia média de ligação mostrados na tabela abaixo, calcule o calor de combustão e, em seguida, sabendo que $M_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}} = 46 \text{ g/mol}$, o poder calorífico do etanol em kJ/g.

LIGAÇÃO	ENERGIA MÉDIA DE LIGAÇÃO EM KJ MOL ⁻¹
C—C	348
C—H	415
O—H	463
O=O	497
C=O	724
O—H	463
C—O	360

3. Com os cálculos feitos nos itens 1 e 2, complete a seguinte tabela:

COMBUSTÍVEL	CALOR DE COMBUSTÃO EM KJ/MOL	PODER CALORÍFICO EM KJ/G
Gasolina	3 800	
Álcool		

4. Com base nos valores obtidos, produza uma tira de quadrinhos (ver boxe de como fazer na quarta capa) sobre a eficiência dos carros a álcool em relação aos carros a gasolina.



Figura 8

Bomba calorimétrica.