

Lista 2 - Termodinâmica Química

Entrega: 03/06/22

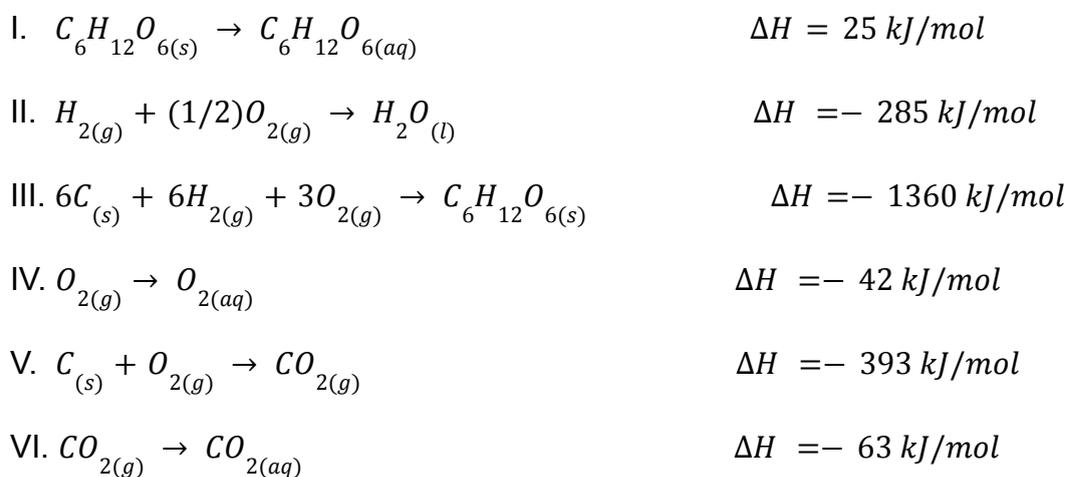
1. Sobre termoquímica, analise as afirmações a seguir, indicando se são verdadeiras ou falsas. **(1.0)** (0.2 cada)
 - I. () Ao derramar gotas de propanona na pele, sentimos uma sensação de frio pela evaporação ser um processo exotérmico.
 - II. () Funções de estado são funções que só dependem dos estados inicial e final. São exemplos de funções de estado: ΔU , ΔH , ΔS e ΔG .
 - III. () À pressão constante, $\Delta H = Q$. Já a volume constante, $\Delta U = Q$.
 - IV. () Ao aquecermos um sistema, no geral, observamos uma diminuição de sua entropia.
 - V. () Processos espontâneos ocorrem no sentido de aumentar a entropia do universo, ou seja, de diminuir a variação da energia livre de Gibbs.
2. Indique se a variação da entropia é maior ou menor que zero nas transformações a seguir. **(0.6)** (0.1 cada)
 - a) $2O_{3(g)} \rightarrow 3O_{2(g)}$
 - b) $Ferro_{(s)} \rightarrow Ferro_{(l)}$
 - c) Ar \rightarrow ar comprimido
 - d) Cristalização do sal nas salinas
 - e) $N_{2(g)} + 3H_{2(g)} \rightarrow 2NH_{3(g)}$
 - f) $CaCO_{3(s)} + 2HCl_{(aq)} \rightarrow CaCl_{2(aq)} + H_2O_{(l)} + CO_{2(g)}$
3. Um sistema com volume de 50 L absorve exatamente 1 kJ de calor. **(0.6)**
Calcule ΔU para esse sistema considerando os casos abaixo.
 - a) O calor é absorvido a volume constante. (0.3)
 - b) O sistema expande para um volume de 53,95 L contra uma pressão constante de 1 atm. (0.3)

4. A partir da tabela de energia de ligação a seguir, responda o que se pede. (0.8)

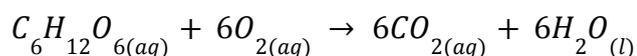
Ligação	Energia de ligação (kJ/mol)
$H - O$	464
$H - H$	436
$O = O$	498
$O - O$	134

- a) Conceitue Energia de ligação e indique se a quebra de uma ligação é um processo endo ou exotérmico. (0.2)
- b) Conceitue o que é entalpia padrão de formação (ΔH_f^0). (0.2)
- c) Com base na tabela acima, indique a entalpia padrão de formação da água gasosa. (0.4)

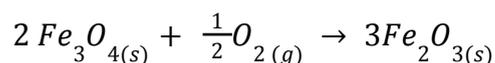
5. A partir das transformações a seguir



Determine a variação de entalpia (ΔH) da seguinte reação, considerando o consumo de 1 mol de glicose: (1.0)



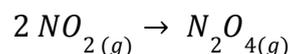
6. Um sistema formado por aproximadamente 2 mols de gás ideal, ocupando inicialmente um volume de 50 L sofre uma expansão isotérmica à temperatura constante de 25 °C, chegando ao fim do processo com um volume de 136 L.
Assumindo que não houve variação da energia interna do sistema, indique o calor envolvido no processo. **(1.0)**
(Considere $R = 8.31 \text{ J}/(\text{mol K})$)
7. Calcule a temperatura final e a variação de energia interna de um sistema quando 500 J de energia são transferidos, na forma de calor, para 0,90 mol de O_2 a 298 K e 1,0 atm nas seguintes condições: **(0.8)**
a. volume constante;
b. pressão constante.
(Considerar gás ideal e $R = 8.31 \text{ J}/(\text{mol K})$)
8. Calcule o trabalho em cada um dos seguintes processos, começando com uma amostra de gás em um sistema com pistão com $T = 350 \text{ K}$, $P = 1,79 \text{ atm}$ e $V = 4,29 \text{ L}$:
a. expansão irreversível contra pressão externa constante de 1 atm, até um volume final de 6,52 L;
b. expansão reversível isotérmica até o volume final de 6,52 L;
9. Considere um gás ideal cuja capacidade calorífica independe da temperatura e calcule a variação de entropia associada ao aumento reversível da temperatura de 1 mol de um gás monoatômico ideal, de 310,75 K até 431,05 K, (a) em pressão constante; (b) em volume constante.
10. Durante o teste de um motor de combustão interna, 3,00 L de gás nitrogênio a 18,5 °C foram rapidamente comprimidos rapidamente (e irreversivelmente) até 0,50 L por um pistão. No processo, houve um aumento de temperatura até 28,1 °C. Assumindo comportamento ideal, qual foi a variação de entropia do gás?
11. Calcule a entropia padrão de reação, a variação de entropia e a variação de energia livre de Gibbs de cada uma das reações abaixo, a 298 K:
a. oxidação de magnetita a hematita:



b. dissolução de CaF_2 em água:



c. dimerização de NO_2 :



Dados para questão 10:

Substância	Massa molar $M/(g \cdot mol^{-1})$	Entalpia de formação $\Delta H_f^\circ/(kJ \cdot mol^{-1})$	Energia livre de Gibbs de formação $\Delta G_f^\circ/(kJ \cdot mol^{-1})$	Capacidade calorífica molar $C_{p,m}/(J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1})$	Energia molar* $S_m^\circ/(J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1})$
Ferro					
Fe(s)	55,84	0	0	25,10	27,28
Fe ²⁺ (aq)	55,84	-89,1	-78,90	—	-137,7
Fe ³⁺ (aq)	55,84	-48,5	-4,7	—	-315,9
FeS(s, α)	87,90	-100,0	-100,4	50,54	60,29
FeS(aq)	87,90	—	+6,9	—	—
FeS ₂ (s)	119,96	-178,2	-166,9	62,17	52,93
Fe ₂ O ₃ (s), hematita	159,68	-824,2	-742,2	103,85	87,40
Fe ₃ O ₄ (s), magnetita	231,52	-1118,4	-1015,4	143,43	146,4

Substância	Massa molar $M/(g \cdot mol^{-1})$	Entalpia de formação $\Delta H_f^\circ/(kJ \cdot mol^{-1})$	Energia livre de Gibbs de formação $\Delta G_f^\circ/(kJ \cdot mol^{-1})$	Capacidade calorífica molar $C_{p,m}/(J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1})$	Energia molar* $S_m^\circ/(J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1})$
CaO(s)	56,08	-635,09	-604,03	42,80	39,75
CaC ₂ (s)	64,10	-59,8	-64,9	62,72	69,96
Ca(OH) ₂ (s)	74,10	-986,09	-898,49	87,49	83,39
Ca(OH) ₂ (aq)	74,10	-1002,82	-868,07	—	-74,5
CaF ₂ (s)	78,08	-1219,6	-1167,3	67,03	68,87
CaF ₂ (aq)	78,08	-1208,09	-1111,15	—	-80,8
CaCO ₃ (s), calcita	100,09	-1206,9	-1128,8	81,88	92,9
CaCO ₃ (s), aragonita	100,09	-1207,1	-1127,8	81,25	88,7
CaCO ₃ (aq)	100,09	-1219,97	-1081,39	—	-110,0
CaCl ₂ (s)	110,98	-795,8	-748,1	72,59	104,6
CaCl ₂ (aq)	110,98	-877,1	-816,0	—	59,8
CaSO ₄ (s)	136,14	-1434,11	-1321,79	99,66	106,7
CaSO ₄ (aq)	136,14	-1452,10	-1298,10	—	-33,1
CaBr ₂ (s)	199,88	-682,8	-663,6	72,59	130

Substância	Massa molar $M/(g \cdot mol^{-1})$	Entalpia de formação $\Delta H_f^\circ/(kJ \cdot mol^{-1})$	Energia livre de Gibbs de formação $\Delta G_f^\circ/(kJ \cdot mol^{-1})$	Capacidade calorífica molar $C_{p,m}/(J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1})$	Energia molar* $S_m^\circ/(J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1})$
Nitrogênio					
N ₂ (g)	28,02	0	0	29,12	191,61
NH ₃ (g)	17,03	-46,11	-16,45	35,06	192,45
NH ₃ (aq)	17,03	-80,29	-26,50	—	111,3
NH ₄ ⁺ (aq)	18,04	-132,51	-79,31	—	+ 113,4
NO(g)	30,01	+90,25	+86,55	29,84	210,76
N ₂ H ₄ (l)	32,05	+50,63	+149,34	139,3	121,21
NH ₂ OH(s)	33,03	-114,2	—	—	—
HN ₃ (g)	43,04	+294,1	+328,1	98,87	238,97
N ₂ O(g)	44,02	+82,05	+104,20	38,45	219,85
NO ₂ (g)	46,01	+33,18	+51,31	37,20	240,06
NH ₄ Cl(s)	53,49	-314,43	-202,87	—	94,6
NO ₃ ⁻ (aq)	62,02	-205,0	-108,74	—	+ 146,4
HNO ₃ (l)	63,02	-174,10	-80,71	109,87	155,60
HNO ₃ (aq)	63,02	-207,36	-111,25	—	146,4
NH ₄ NO ₃ (s)	80,05	-365,56	-183,87	84,1	151,08
N ₂ O ₄ (g)	92,02	+9,16	+97,89	77,28	304,29
NH ₄ ClO ₄ (s)	117,49	-295,31	-88,75	—	186,2
Oxigênio					
O ₂ (g)	32,00	0	0	29,36	205,14
OH ⁻ (aq)	17,01	-229,99	-157,24	—	-10,75
O ₃ (g)	48,00	+142,7	+163,2	39,29	238,93

Gabarito Lista 2

- I. (F) ... pela evaporação ser um processo endotérmico
- II. (V)
- III. (V)
- IV. (F) aumento
- V. (V)

2. a) $\Delta S > 0$; aumento do n° de mols. de gás
- b) $\Delta S > 0$; $S_{(g)} > S_{(l)} > S_{(s)}$
- c) $\Delta S < 0$; $\uparrow V \rightarrow \uparrow S$
- d) $\Delta S < 0$;
- e) $\Delta S < 0$;
- f) $\Delta S > 0$;

3. a) $\Delta V = 0$
 $W = 0$
 $\Delta U = Q = \underline{1 \text{ kJ}}$
* 1ª Lei: $\Delta U = Q + W$
 $W = - \int P_{\text{ext}} dV$
- b) $\Delta V = 3,95 \text{ L}$
 $P_{\text{ext}} = \text{cte} = 1 \text{ atm}$
 $W = - P \Delta V$
 $J = P_a \cdot m^3$
 $1 \text{ atm} \approx 10^5 P_a$
 $3,95 \text{ L} = 3,95 \cdot 10^{-3} m^3$
 $W = - 10^5 \cdot 3,95 \cdot 10^{-3}$
 $W = - 3,95 \cdot 10^2 \text{ J}$
 $\Delta U = 1 + (-0,395) \approx \underline{0,6 \text{ kJ}}$

4. a) Energia de ligação é a energia necessária para romper 1 mol de ligações entre dois átomos em um sistema gasoso, 25°C e 1 atm.

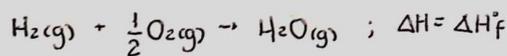
* Quebra de ligações: endo ($\Delta H > 0$)

* Formação de ligações: exo ($\Delta H < 0$)

b) Entalpia de formação é a variação da entalpia na reação de formação de 1 mol de substância a partir de substâncias simples nas suas formas mais estáveis.

- Padrão: condições normais de temperatura e pressão (CNTP) (298 K, 1 atm)

c) * Formação da água gasosa:

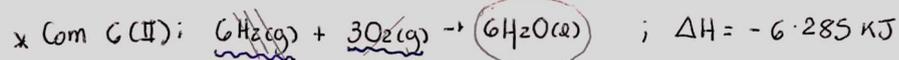
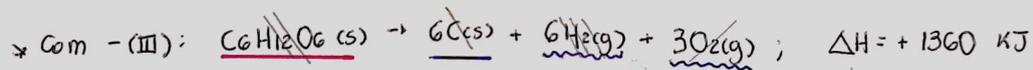
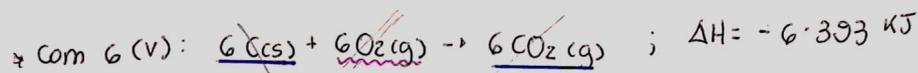
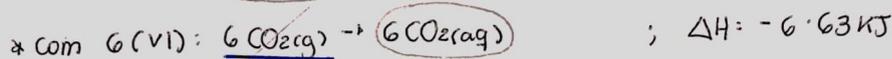


$$|\Delta H_{\text{abs}}|: 1(\text{H}-\text{H})_{\text{ex}} + \frac{1}{2}(\text{O}=\text{O})_{\text{ex}} = 685 \text{ kJ}$$

$$|\Delta H_{\text{lib}}|: 2(\text{H}-\text{O})_{\text{ex}} = 928 \text{ kJ}$$

$$\Delta H = +685 - 928 = -243 \text{ kJ}$$

$$\underline{\Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}) = -243 \text{ kJ/mol} \downarrow}$$



$$\Delta H = -25 + 252 - 378 - 2358 + 1360 - 1710 = \underline{\underline{-2859 \text{ kJ} \downarrow}}$$

7-

$$\textcircled{J} \text{ O}_2 \rightarrow \text{diatômico} : C_v = \frac{5}{2} R$$

$$C_v = 20,79 \text{ J/mol K}$$

$$C_p = C_v + R = \frac{7}{2} R = 29,1 \text{ J/mol K}$$

$$(a) q = n \cdot C_v \cdot \Delta T$$

$$\Delta T = \frac{500}{0,9 \cdot 20,79} \approx 26,7 \text{ K} \quad T_f = 324,7 \text{ K}$$

$$0,9 \cdot 20,79$$

$$V \text{ cta} \rightarrow W = 0 \quad \Delta U = q = 500 \text{ J}$$

$$(b) \Delta T = \frac{q}{n \cdot C_p} = \frac{500}{0,9 \cdot 29,1} \approx 19,1 \text{ K} \quad T_f = 317,1 \text{ K}$$

$$\text{aquecimento: } \Delta U = q = n \cdot C_v \cdot \Delta T$$

$$\Delta U = 0,9 \cdot 20,79 \cdot 19,1 = 357,4 \text{ J}$$

$$\text{expansão isotérmica: } \Delta U = 0$$

$$\Delta U = 357,4 \text{ J}$$

8-

Lista 2 - GAB

$$\textcircled{7} T = 350 \text{ K}; P = 1,79 \text{ atm e } V = 4,29 \text{ L}$$

$$(a) W = -P_{\text{ext}} \cdot \Delta V$$

$$W = -10^5 \cdot 1,01325 \cdot (6,52 - 4,29) \cdot 10^{-3}$$

$$W = -2,2595 \cdot 10^2 \text{ N}\cdot\text{m} \approx -226 \text{ J}$$

$$(b) W = -nRT \ln \left(\frac{V_f}{V_i} \right)$$

$$\text{então: } n = \frac{P \cdot V}{RT} = \frac{1,79 \cdot 4,29}{0,082 \cdot 350} \approx 0,2675 \text{ mol}$$

$$W = -0,2675 \cdot 8,31 \cdot 350 \cdot \ln \left(\frac{6,52}{4,29} \right)$$

$$W \approx -326 \text{ J}$$

9-

⑧ $n = 1 \text{ mol}$ de gás monoatômico $T_1 = 310,75 \text{ K}$ $T_2 = 431,05 \text{ K}$

(B) C_v de gás mono. $= \frac{3}{2} R = 12,47 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$

$$\Delta S = C_v \cdot \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) = 12,47 \cdot \ln\left(\frac{431,05}{310,75}\right) = 4,08 \text{ J/K}$$

(A) $C_p = C_v + R = \frac{5}{2} R$

$$C_p = 20,775 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$$

$$\Delta S = C_p \cdot \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) = 20,775 \cdot \ln\left(\frac{431,05}{310,75}\right)$$

$$\Delta S \approx 6,80 \text{ J/K}$$

10-

⑩ $C_v = \frac{5}{2} R \approx 20,79 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$

$$\Delta S = nR \ln \frac{V_f}{V_i} + n C_v \ln \frac{T_f}{T_i}$$

$$\Delta S \approx -14,3 \text{ J/K}$$

11-

$$(11) (a) \Delta S^\circ = (3 \cdot 87,4) - (2 \cdot 146,4 + 0,5 \cdot 205,14)$$

$$\Delta S^\circ = -133,17 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$$

$$\Delta H^\circ = 3 \cdot (-824,2) - 2 \cdot (-1118,4) = -235,8 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G^\circ = 3 \cdot (-742,2) - 2 \cdot (-1015,4) = -195,8 \text{ kJ/mol}$$

$$(b) \Delta H^\circ = 11,5 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta S^\circ = -149,7 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$$

$$\Delta G^\circ = 56,2 \text{ kJ/mol}$$

$$(c) \Delta H^\circ = -57,2 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta S^\circ = -175,93 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$$

$$\Delta G^\circ = -4,73 \text{ kJ/mol}$$