

Lista 3 – Termodinâmica de Materiais LOM3015

1) É comum se dizer que “uma reação exotérmica libera calor”. Explique fisicamente a origem deste calor. A sua explicação deve envolver menção às temperaturas do sistema e da vizinhança;

2) A partir da definição de entalpia de estado padrão, a 298 K, quais das afirmações a seguir é a correta? Explique.

(a) $\Delta H^\circ_{N(g)} = 0$; (b) $\Delta H^\circ_{N_2(g)} = 0$

3) Por que não é possível ter um valor absoluto para a entalpia de um elemento ou substância simples numa dada temperatura e pressão? Lembre-se que devido a isso atribui-se arbitrariamente o valor zero para a entalpia de elementos e substâncias simples, puros, na forma mais estável a 298 K e 1 atm.

4) Calcular a entalpia padrão de formação do $Cr_2O_3(s)$ a 2400 K. Dados:

$\Delta_f H^\circ(Cr_2O_3(s), 298 K) = -1129 \text{ kJ/mol}$;

Ponto de fusão do $Cr_2O_3 = 2673 \text{ K}$;

Ponto de fusão do $Cr = 2123 \text{ K}$

$\Delta_{fusao} H^\circ(Cr, 2123 K) = 19,25 \text{ kJ/mol}$

$C_p(Cr_{(s)}) = 24,44 + 9,88 \cdot 10^{-3} T - 3,68 \cdot 10^5 T^{-2} \text{ [J/mol.K]}$;

$C_p(Cr_{(l)}) = 39,33 \text{ [J/mol.K]}$

$C_p(Cr_2O_3(s)) = 119,40 + 9,21 \cdot 10^{-3} T - 15,65 \cdot 10^5 T^{-2} \text{ [J/mol.K]}$

$C_p(O_{2(g)}) = 48,318 - 0,6913 \cdot 10^{-3} T - 4,2066 \cdot 10^2 T^{-1/2} + 49,923 \cdot 10^4 \cdot T^{-2} \text{ [J/mol.K]}$

R: $\Delta_f H^\circ(Cr_2O_3(s), 2400 K) = -1580 \text{ kJ/mol}$

5) Calcule a variação de entalpia da reação $CaO_{(s)} + CO_{2(g)} \rightarrow CaCO_{3(s)}$ a 1000 K.

Dados:

	$\Delta_f H^\circ$ a 298 K (kJ/mol)	C_p (J/mol.K)
$CaO_{(s)}$	- 634,3	$49,62 + 4,52 \cdot 10^{-3} T - 6,95 \cdot 10^5 T^{-2}$
$CO_{2(g)}$	- 393,5	$44,14 + 9,04 \cdot 10^{-3} T - 8,54 \cdot 10^5 T^{-2}$
$CaCO_{3(s)}$	- 1206,7	$104,52 + 21,92 \cdot 10^{-3} T - 25,94 \cdot 10^5 T^{-2}$

R: $\Delta_r H = -169989 \text{ J/mol}$

6) Para a reação $C_{(s,graf)} + 2 H_2O_{(g)} \rightarrow CO_{2(g)} + 2 H_{2(g)}$, calcule a variação de entalpia e de energia interna desta reação a 25°C e 1 atm, considerando que os calores de formação a 25°C do $H_2O_{(g)}$ e $CH_{4(g)}$ são -57,9 kcal/mol e -17,9 kcal/mol, respectivamente. Também, o calor de combustão do $CH_{4(g)}$ a 25°C para $CO_{2(g)}$ e $H_2O_{(g)}$ é igual a -192,2 kcal/mol.

R: $\Delta_r H = 21,5$ kcal/mol

7) Queimando-se completamente 3,0539 g de álcool etílico líquido (C_2H_5OH) com oxigênio, a 25°C numa bomba calorimétrica, o calor liberado é igual a 90,447 kJ. a) Calcule o $\Delta_c H^\circ$ molar de combustão do álcool etílico a 25°C; b) Se a 25°C o $\Delta_f H^\circ$ do $CO_{2(g)}$ e do $H_2O_{(l)}$ são iguais a - 393,51 kJ/mol e - 285,83 kJ/mol, respectivamente, calcule o $\Delta_f H^\circ$ do álcool etílico.

R: a) $\Delta_c H^\circ = -1364,21$ kJ/mol

b) $\Delta_f H^\circ = -280,3$ kJ/mol

8) Sendo a etapa fundamental no processo de obtenção do zinco por via pirometalúrgica, a redução do ZnO sólido pelo carbono poderá ser feita a 1300°C, conforme a reação: $ZnO_{(s)} + C_{(s,grafite)} = Zn_{(g)} + CO_{(g)}$. Calcule para esta reação a 1300°C, o valor de $\Delta_r H^\circ$. Dados:

Temperaturas (°C)	$C_{p,m}$ [cal.mol ⁻¹ .K ⁻¹];	ΔH° [kcal.mol ⁻¹]
Fusão do zinco = 419,5°C	$C_{p,m}(Zn,s) = 5,35 + 2,40 \cdot 10^{-3}T$	$\Delta_f H^\circ(ZnO,s) = -$
Ebulição do zinco = 907°C	$C_{p,m}(Zn,l) = 7,50$	83,200
	$C_{p,m}(Zn,g) = 4,97$	$\Delta_f H^\circ(CO,g) = -$
	$C_{p,m}(ZnO,s) = 11,71 + 1,22 \cdot 10^{-3}T$	26,4426 $\Delta_{fusao} H^\circ(Zn)$
	$C_{p,m}(C,s) = 4,10 + 1,02 \cdot 10^{-3}T$	= 1,74 $\Delta_{ebulicao} H^\circ(Zn)$
	$C_{p,m}(CO,g) = 6,79 + 0,98 \cdot 10^{-3}T$	= 27,3

R: $\Delta_r H = 98098$ cal/mol

9) A temperatura de solidificação do cobre puro é 1083°C; no entanto, é possível manter cobre em estado subresfriado a 847°C, sem que ocorra a solidificação espontânea. No caso em que esta última venha ocorrer, pede-se calcular a variação de entalpia por mol de cobre puro, durante a solidificação isotérmica a 847°C.

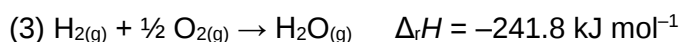
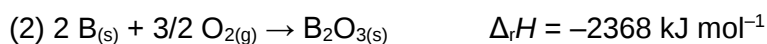
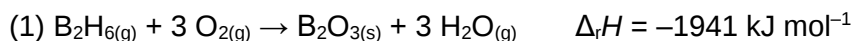
Dados: $C_{p,m}(Cu_{(s)}) = 5,41 + 1,50 \cdot 10^{-3} T$ [cal/mol.K]; $C_{p,m}(Cu_{(l)}) = 7,50$ [cal/mol.K]; Calor latente de fusão do cobre = 3100 cal/mol

R: a) $\Delta_{sol} H = -3155$ cal/mol

10) A entalpia padrão de combustão do ciclopropano é $-2091 \text{ kJ mol}^{-1}$ a 25°C . A partir dessas informações e dados de entalpia de formação para $\text{CO}_{2(\text{g})}$ e $\text{H}_2\text{O}_{(\text{g})}$, calcule a entalpia de formação do ciclopropano.

R: $\Delta_f H^\circ = 52,98 \text{ kJ/mol}$

11) A partir dos seguintes dados, determine $\Delta_f H^\circ$ para diborano, $\text{B}_2\text{H}_{6(\text{g})}$, a 298 K :

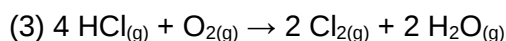
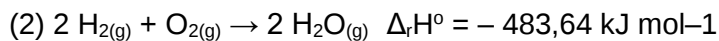


R: $\Delta_f H^\circ = -1152,4 \text{ kJ/mol}$

12) Dado que a entalpia padrão de combustão da grafite é $-393,51 \text{ kJ mol}^{-1}$ e a do diamante é $-395,41 \text{ kJ mol}^{-1}$, calcule a entalpia da transição grafite-para-diamante.

R: $\Delta_{\text{trs}} H^\circ = 1,9 \text{ kJ/mol}$

13) Dadas as reações (1) e (2) abaixo, determine (a) $\Delta_r H^\circ$ and $\Delta_r U^\circ$ para a reação (3), (b) $\Delta_f H^\circ$ para $\text{HCl}_{(\text{g})}$ e $\text{H}_2\text{O}_{(\text{g})}$, todos a 298 K .



R: a) $\Delta_r H^\circ = -114,4 \text{ kJ/mol}$

b) $\Delta_f H^\circ_{\text{HCl}} = -92,31 \text{ kJ/mol}$

$\Delta_f H^\circ_{\text{H}_2\text{O}} = -241,82 \text{ kJ/mol}$

14) Para a reação $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}_{(\text{l})} + 3 \text{O}_{2(\text{g})} \rightarrow 2 \text{CO}_{2(\text{g})} + 3 \text{H}_2\text{O}_{(\text{g})}$, $\Delta_r U^\circ = -1373 \text{ kJ mol}^{-1}$ a 298 K . Calculate $\Delta_r H^\circ$.