Lista Complementar – Termodinâmica de Materiais

Loop Termodinâmico

1. Determine o ΔH final das reações abaixo nas temperaturas indicadas, e informe se a reação é endotérmica ou exotérmica. Considere para todas as reações n=1 mol.

i) $CaCO_{3\,(s)} \rightarrow CaO_{\,(s)} + CO_{2\,(g)}$ em 700°C

Dados: $\Delta_f H°_{298K}(CaCO_{3\,(s)}) = -1206{,}7$ kJ/mol; $\Delta_f H°_{298K}(CaO_{\,(s)}) = -633{,}88$ kJ/mol; $\Delta_f H°_{298K}(CO_{2\,(g)}) = -393{,}51$ kJ/mol

$C_{p,m}(CaCO_{3\,(s)}) = 99{,}715 + 26{,}92\times10^{-3}.(T) - 215{,}76\times10^{4}.(T)^{-2}$ J/mol.K

$C_{p,m}(CaO_{\,(s)}) = 49{,}954 + 4{,}888\times10^{-3}.(T) - 0{,}35\times10^{4}(T)^{-2}$ J/mol.K

$C_{p,m}(CO_{2\,(g)}) = 87{,}82 - 2{,}6442\times10^{-3}.(T) - 9{,}9886\times10^{2}.(T)^{-0{,}5} + 70{,}641\times10^{4}.(T)^{-2}$ J/mol.K

ii) $CO_{2\,(g)} + C_{\,(s)} \rightarrow CO_{\,(g)}$ em 800°C

Dados: $\Delta_f H°_{298K}(CO_{2\,(g)}) = -393{,}51$ kJ/mol ; $\Delta_f H°_{298K}(CO_{\,(g)}) = -110{,}53$ kJ/mol;

$C_{p,m}(CO_{2\,(g)}) = 87{,}82 - 2{,}6442\times10^{-3}.(T) - 9{,}9886\times10^{2}.(T)^{-0{,}5} + 70{,}641\times10^{4}.(T)^{-2}$ J/mol.K

$C_{p,m}(C_{\,(s)}) = 17{,}15 + 4{,}27\times10^{-3}.(T) - 8{,}79\times10^{5}(T)^{-2}$ J/mol.K

$C_{p,m}(CO_{\,(g)}) = 25{,}57 + 6{,}096\times10^{-3}.(T) + 4{,}055\times10^{5}.(T)^{-2}$ J/mol.K

iii) $Ti_{(s)} + C_{(s)} \rightarrow TiC_{(s)}$ em 1000°C.

Dados: $\Delta_f H°_{298K}(TiC_{(s)}) = -183,70$ kJ/mol

$T_{\alpha\rightarrow\beta} = 1115K$

$\Delta H_{\alpha\rightarrow\beta} = 3,473$ kJ/mol

$C_{p,m}(\alpha\text{-}Ti_{(g)}) = 22,09 + 10,04x10^{-3}.(T)$ J/mol.K

$C_{p,m}(\beta\text{-}Ti_{(g)}) = 28,91$ J/mol.K

$C_{p,m}(C_{(s)}) = 17,15 + 4,27x10^{-3}.(T) - 8,79x10^{5}(T)^{-2}$ J/mol.K

$C_{p,m}(TiC_{(s)}) = 49,50 + 3,35x10^{-3}.(T) - 14,98x10^{5}.(T)^{-2}$ J/mol.K

iv) $Mg(OH)_{2\,(s)} \rightarrow MgO_{(s)} + H_2O_{(v)}$ em 300°C.

Dados: $\Delta_f H°_{298K}(Mg(OH)_{2\,(s)}) = -925,5$ kJ/mol; $\Delta_f H°_{298K}(MgO_{(s)}) = -601,3$ kJ/mol; $\Delta_f H°_{298K}(H_2O_{(l)}) = -241,8$ kJ/mol

H_2O: $T_{l\rightarrow v} = 100$°C.

$\Delta H_{l\rightarrow v} = -285,8$ kJ/mol

$C_{p,m}(Mg(OH)_{2\,(s)}) = 158,40 - 4,076x10^{-3}.(T) - 10,523x10^{5}.(T)^{-2} - 1,1713x10^{3}.(T)^{-0,5}$ J/mol.K

$C_{p,m}(MgO_{(s)}) = 42,59 - 7,28x10^{-3}.(T) - 6,19x10^{5}.(T)^{-2}$ J/mol.K

$C_{p,m}(H_2O_{(l)}) = 75,44$ J/mol.K

$C_{p,m}(H_2O_{(v)}) = 30,00 - 10,71x10^{-3}.(T) + 0,33x10^{5}.(T)^{-2}$ J/mol.K

v) $MoS_{2\,(s)} + O_{2\,(g)} \rightarrow MoO_{3\,(s)} + SO_{2\,(g)}$ em 800°C.

Dados: $\Delta_f H°_{298K}\,(MoS_{2\,(s)}) = -925{,}5$ kJ/mol; $\Delta_f H°_{298K}\,(MoO_{3\,(s)}) = -745{,}17$ kJ/mol; $\Delta_f H°_{298K}\,(SO_{2\,(g)}) = -297{,}0$ kJ/mol

$C_p\,(MoS_{2\,(s)}) = 68{,}56 + 15{,}59 \times 10^{-3}.(T) - 8{,}65 \times 10^{5}.(T)^{-2}$ J/mol.K

$C_p\,(O_{2\,(g)}) = 48{,}318 - 0{,}6913 \times 10^{-3}.(T) - 4{,}202 \times 10^{2}.(T)^{-0{,}5} + 49{,}923 \times 10^{4}.(T)^{-2}$ J/mol.K

$C_p\,(SO_{2\,(g)}) = 21{,}43 + 74{,}35 \times 10^{-3}(T) - 0{,}0867 \times 10^{4}(T)^{-2}$ J/mol.K

$C_p\,(MoO_{3\,(s)}) = 93{,}31 - 22{,}81 \times 10^{-3}(T) + 1{,}41 \times 10^{4}(T)^{-2}$ J/mol.K