

Lista 3 - Termodinâmica de Materiais:

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 298K, quais das afirmações a seguir são corretas?

a) $\Delta H_{N(g)}^{\circ} = 0$

d) $\Delta H_{Ti(s,HC)}^{\circ} = 0$

g) $\Delta H_{N2(g)}^{\circ} = 0$

b) $\Delta H_{Si(s,CCC)}^{\circ} = 0$

e) $\Delta H_{Ti(s,CFC)}^{\circ} = 0$

h) $\Delta H_{O3(g)}^{\circ} = 0$

c) $\Delta H_{Fe(s,CCC)}^{\circ} = 0$

f) $\Delta H_{O(g)}^{\circ} = 0$

i) $\Delta H_{C(s,dia)}^{\circ} = 0$

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 298K e 1 atm.

4) Considere o sistema Ti-Zr e responda:

a) Plotar, utilizando a base CUDEMO, a curva de entalpia de mistura da solução Ti-Zr em função da quantidade de Zr nas temperaturas de 1200°C e 2000°C.

b) Calcular, considerando a base CUDEMO, a variação de entalpia por mol de solução para as seguintes soluções abaixo, nas temperaturas de 1200°C e 2000°C, e pressão de 1 atm:

Ti-20Zr (mol%)

Ti-50Zr (mol%)

Ti-80Zr (mol%)

c) Essas soluções se aproximam de uma solução ideal? Se sim, por quê?

Resolução:

- 1) Ao ocorrer a reação, há um aumento da temperatura do sistema associado com essa reação, com isso o sistema fica com uma temperatura acima da vizinhança. Assumindo que o sistema está com fronteira diatérmica, ou seja, que permite a troca de calor, vai haver fluxo de calor do sistema para a vizinhança.

- 2) Entalpia é zero para:

(c), (d), (g).

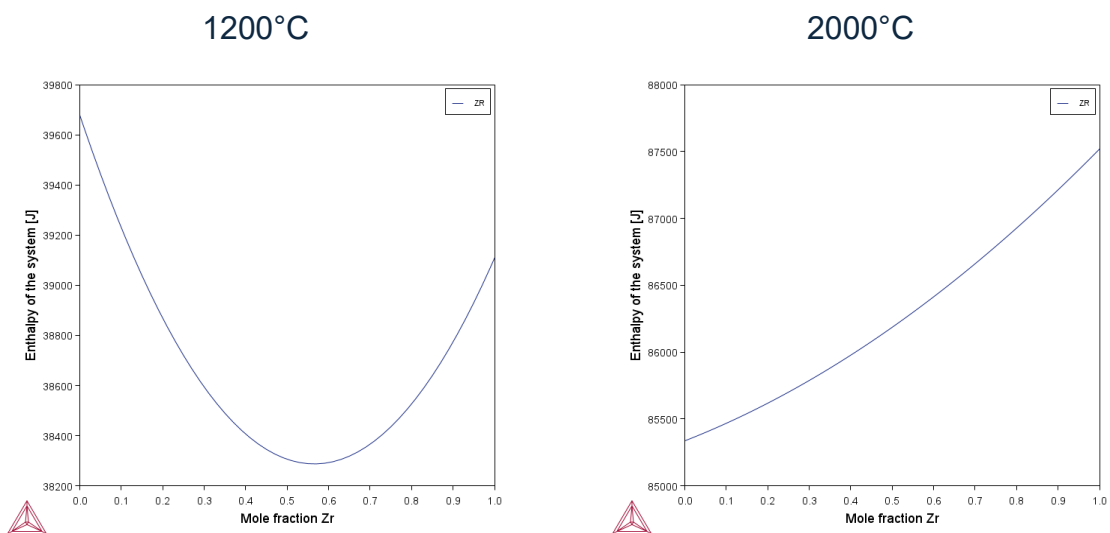
- 3) Levando em consideração que a entalpia é dada pela equação:

$$\Delta H = \Delta U + PV$$

Como não há energia interna nula, não há entalpia zero.

- 4)

a)



b)

	1200	2000
Ti	39677	85337
Zr	39108	87518
Ti-20Zr	38868	85618
DmisH =	-695.2	-155.2
	1200	2000
Ti	39677	85337
Zr	39108	87518
Ti-50Zr	38306	86186
DmisH =	-1086.5	-241.5
	1200	2000
Ti	39677	85337
Zr	39108	87518
Ti-80Zr	38527	86927
DmisH =	-694.8	-154.8

- c) Sim, as misturas se aproximam de uma solução ideal. Isso se deve aos raios atômicos dos elementos serem próximos (Ti = 147 pm e Zr = 145 pm, 1,4% de diferença) e suas eletronegatividades também (Ti = 1,54 e Zr = 1,33, 14% de diferença).