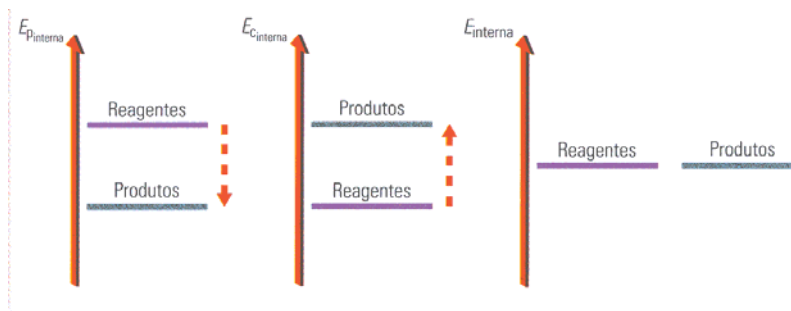


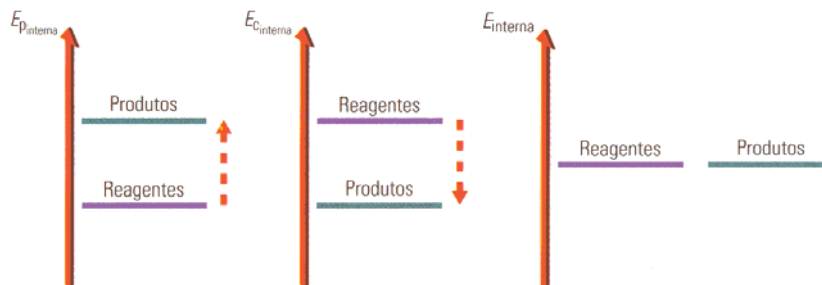
Componente de Química

1.3 Síntese do amoníaco e balanços energéticos

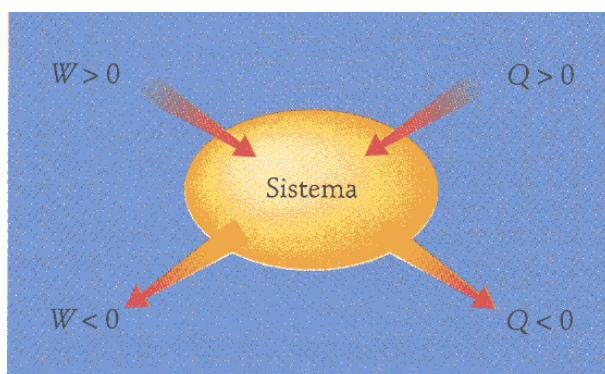
- Os sistemas químicos são formados por enormes quantidades de unidades estruturais que possuem energia, a **energia interna do sistema**.
 - **Energia cinética**, que resulta dos movimentos das partículas do sistema.
 - **Energia potencial**, que resulta da interacção entre as partículas, nomeadamente das forças intermoleculares e interatómicas.
- Os átomos possuem também energia; parte dela está associada aos núcleos, a outra parte está associada aos electrões. Esta energia tem carácter potencial, em consequência das repulsões entre os electrões e da atracção entre o núcleo e os electrões, e carácter cinético, como resultado do movimento que os anima.
- Logo, $U = E_c + E_p$
- A energia cinética de um sistema aumenta com a temperatura, uma vez que a temperatura é uma medida da energia cinética média das partículas que compõem o sistema.
- **1ª Lei da Termodinâmica**, ou **Lei da Conservação da Energia**, afirma que a energia total do Universo permanece constante, tal que, $U = \text{constante} \Rightarrow \Delta U = 0$.
 - **A energia de um sistema isolado é constante**
 - $E_c + E_p = \text{constante} \Rightarrow \Delta E_c + \Delta E_p = 0 \Leftrightarrow \Delta E_c = -\Delta E_p$
- Em muitas reacções químicas o principal objectivo não é o de obter os produtos de reacção mas sim aproveitar a energia delas resultante. Assim:
 - Numa **reacção exotérmica** que ocorre em sistema isolado há **aumento de temperatura**, a que vai corresponder um **aumento de energia cinética**, e, consequentemente, vai ter de existir uma **diminuição da energia potencial**.



- Numa **reacção endotérmica** que ocorre em sistema isolado há **diminuição de temperatura**, a que vai corresponder uma **diminuição de energia cinética**, e, conseqüentemente, vai ter de existir um **aumento da energia potencial**.

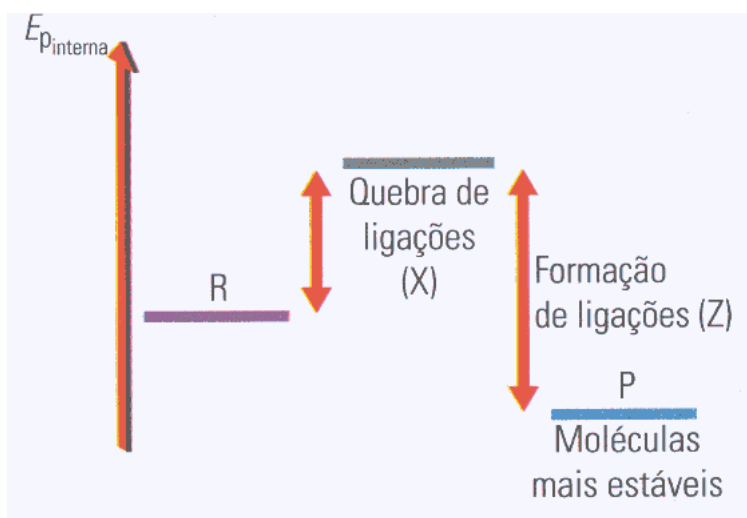


- Se o sistema não for isolado vão ocorrer trocas de energia com o exterior, mas a soma da energia total do sistema com a energia do meio exterior é constante.
 - $U_{\text{sistema}} + U_{\text{meio exterior}} = k \Leftrightarrow U = k$
 - As trocas de energia com o meio exterior podem ocorrer sob a forma de calor e de trabalho.

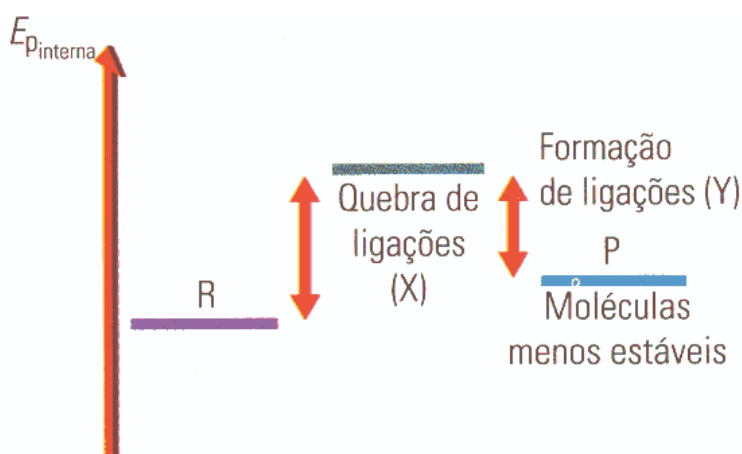


- Como os sistemas não isolados trocam energia com as vizinhanças, recorreremos também às designações de **reacções exoenergéticas** e **reacções endoenergéticas**. Assim:
 - Numa **reacção exoenergética** ocorre transferência de energia do sistema para o exterior.
 - Numa **reacção endoenergética** ocorre transferência de energia do exterior para o sistema.
 - Numa **reacção exotérmica** a energia dos produtos é menor do que a energia dos reagentes.
 - Numa **reacção endotérmica** a energia dos produtos é maior do que a energia dos reagentes.

- Durante uma reacção química vão romper-se as ligações químicas existentes nos reagentes e vão formar-se novas ligações que originam os produtos da reacção. O processo de **ruptura de ligações** é sempre um **processo endotérmico** e o processo de **formação de novas ligações** é sempre **exotérmico**.
 - Nas **reacções exotérmicas**, a energia necessária para quebrar as ligações dos reagentes, **soma de todas as energias de dissociação**, é **menor** do que a energia libertada na formação dos produtos, **soma de todas as energias de ligação**.



- Nas **reacções endotérmicas**, a energia necessária para quebrar as ligações dos reagentes, **soma de todas as energias de dissociação**, é **maior** do que a energia libertada na formação dos produtos, **soma de todas as energias de ligação**.

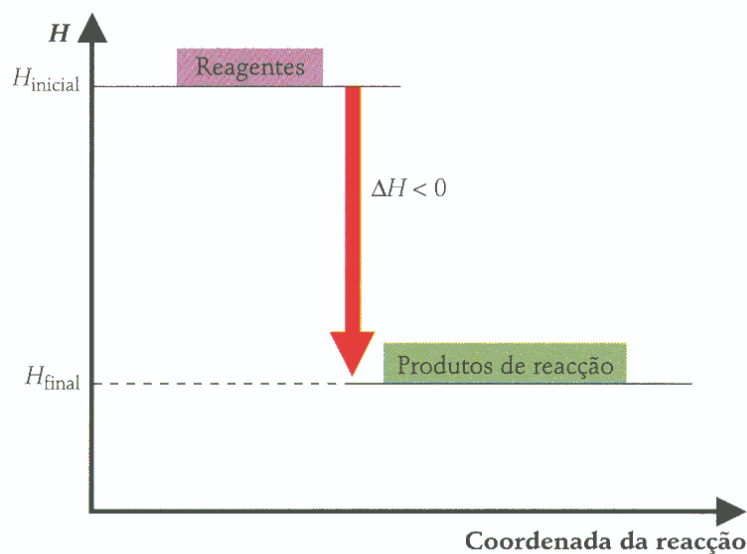


- Ao conteúdo calorífico de um sistema chama-se **entalpia** e representa-se por H (entalpia é uma palavra de origem grega, *enthalpein*, que significa “aquecer”).

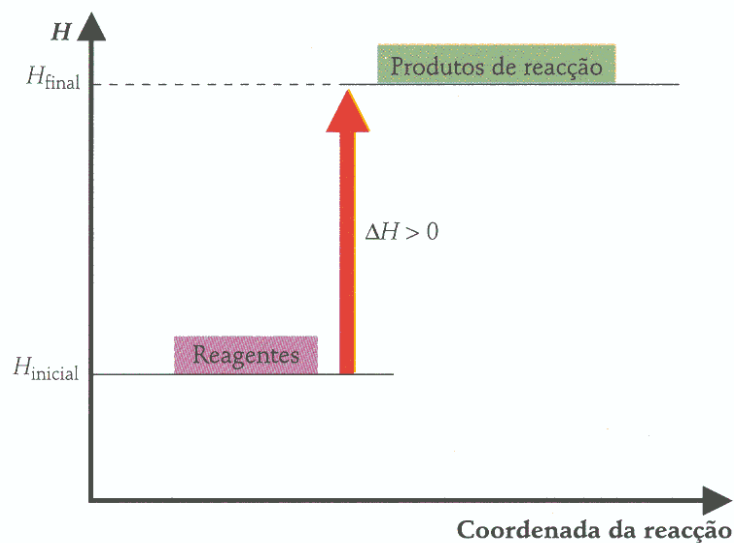
- A **variação de entalpia** numa reacção química é igual à diferença entre o somatório das entalpias dos produtos de reacção e o somatório das entalpias dos reagentes:

$$\Delta H = \sum H_{\text{produtos da reacção}} - \sum H_{\text{reagentes}} \Leftrightarrow \Delta H = H_{\text{final}} - H_{\text{inicial}}$$

- A **variação de entalpia** durante uma reacção é avaliada pela quantidade de energia, sob a forma de calor, trocada entre o sistema e o exterior, a pressão constante.
- Numa reacção exotérmica o sistema cede calor ao exterior e $H_{\text{final}} < H_{\text{inicial}} \Rightarrow \Delta H < 0$.

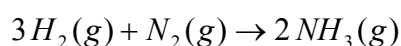


- Numa reacção endotérmica o sistema recebe calor do exterior e $H_{\text{final}} > H_{\text{inicial}} \Rightarrow \Delta H > 0$.



- Em conclusão:
 - na **formação** de uma ligação química há **libertação de energia**, designada por **energia de ligação**.
 - na **quebra** de uma ligação química há **absorção de energia**, designada por **energia de dissociação**.
 - as energias de ligação e dissociação possuem valores simétricos; a energia de ligação é **negativa** e a energia de dissociação é **positiva**.
 - quanto **mais forte** é uma ligação **maior** é a energia libertada quando essa ligação se forma e, conseqüentemente, **maior** será a energia absorvida quando é quebrada.

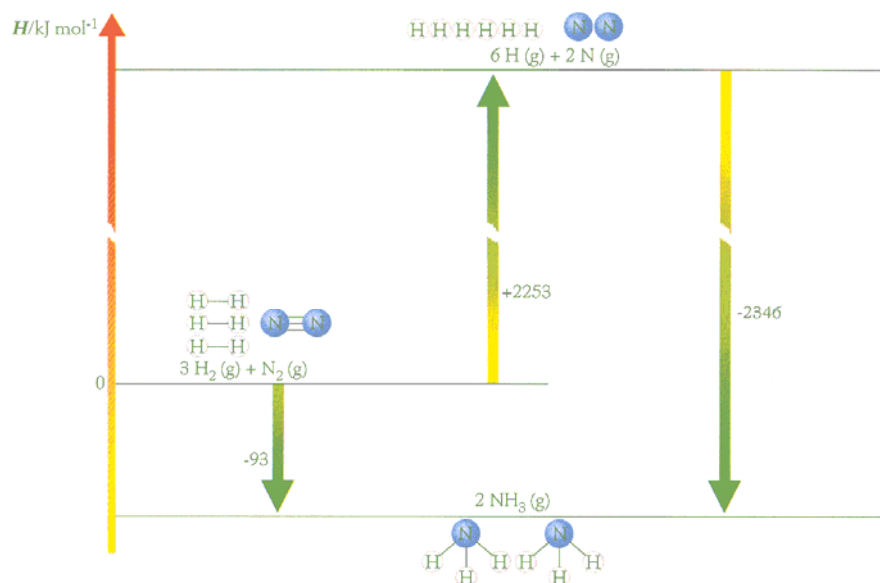
- Análise da equação que traduz a reacção de síntese do amoníaco:



Ligação	Processo	Nº de ligações	Energia por ligação (kJ mol ⁻¹)	Total (kJ)
H – H	Quebra de ligação	3	436	1308
N ≡ N	Quebra de ligação	1	945	945
N – H	Formação de ligação	6	-391	-2346
Balanço				- 93 kJ

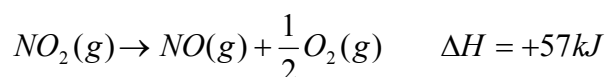
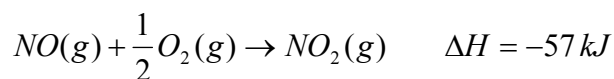
Nota: se tivessem sido utilizados valores exactos iríamos obter o valor de -92 kJ

- O **calor de reacção** (Q) é atribuído à variação da energia interna do sistema reaccional verificada quando acontecem as quebras de ligações nos reagentes e a formação de novas ligações nos produtos de reacção.
- $Q = \Delta H = 1308 + 945 - 2346 = -93 \text{ kJ}$
- Como $\Delta H < 0$ ($Q < 0$), a reacção de **síntese do amoníaco é exotérmica**.
- A reacção pode ser interpretada através de um diagrama dos níveis de entalpia:

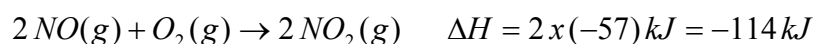
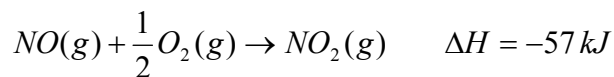


Equações termoquímicas

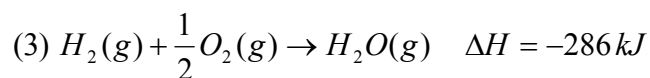
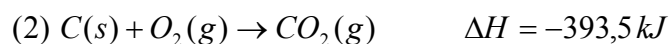
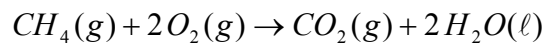
- Uma equação termoquímica especifica o calor de reacção correspondente, mostrando a variação de entalpia.
- As equações termoquímicas gozam das seguintes propriedades:
 - Invertendo a equação, ΔH muda de sinal.



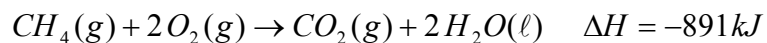
- Multiplicando ou dividindo os coeficientes estequiométricos por um dado factor, ΔH é também multiplicado ou dividido por esse mesmo factor.



- Se uma equação termoquímica resultar da soma de duas ou mais equações (etapas), então, o ΔH da equação global é igual à soma dos ΔH das várias equações etapas: $\Delta H_{global} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \dots$
Esta relação é conhecida por **lei de Hess**, ou lei da aditividade dos calores de reacção.

Equações parciais**Equação global que traduz a combustão do metano**

Aplicando as propriedades atrás referidas, temos que:

**AL 1.2 – Síntese do sulfato de tetraaminocobre (II) monohidratado**