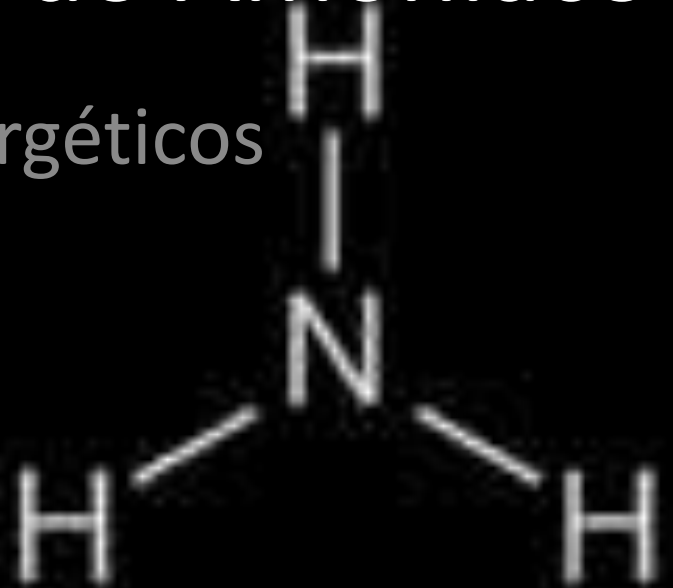




# Síntese do Amoníaco

Balances energéticos



## O que é de facto ENERGIA?

# ENERGIA

## Ainda não sabemos o que é energia

**" Ainda não sabemos o que é energia. Não sabemos ainda por ser a energia uma coisa estranha ".** A única coisa de que temos certeza e que a Natureza nos permite observar é uma realidade, ou se prefere, uma lei chamada "Conservação da Energia"

*Richard Feynman*

"Esta lei diz que **existe 'algo'**, uma quantidade que chamamos energia, **que se modifica em forma**, mas que a cada momento que a medimos ela **apresenta sempre o mesmo resultado numérico**.

É incrível que algo assim aconteça.

Na verdade é **muito abstracto, matemático** até.

# Física

Baseia-se nas **observações** e nas experiências que **permitem formular leis** habitualmente expressas por equações matemáticas



## TERMODINÂMICA

GREGO

*Therme* (calor) e *dynamics* (potência)

*Sendo uma descrição dos primeiros esforços para converter “calor em potência”*

# TERMODINÂMICA

- Baseia-se em **leis empíricas** (os Princípios da Termodinâmica),
- Os fenómenos são interpretados a partir de uma **abordagem macroscópica da estrutura da matéria**, por análise dos efeitos da alteração da temperatura, pressão e volume dos sistemas físicos (propriedades que podemos medir no laboratório).
- Estas propriedades fundamentais estão relacionadas entre si por relações matemáticas designadas “**equações de estado**”

É o estudo das propriedades macroscópicas dos sistemas, não assumindo um modelo para a constituição da matéria.

# TERMODINÂMICA

Os dois pontos de vista, macroscópicos e microscópicos, são incompatíveis?

**Não**, porque as *poucas* propriedades mensuráveis, cuja especificação *constitui o ponto de vista macroscópico*, são *médias*, durante um dado período de tempo, de um grande número *de propriedades microscópicas*.

# TERMODINÂMICA

A soma de todas as formas microscópicas de energia de um sistema é designada por **Energia Interna - U**. Esta está relacionada com a estrutura molecular e com a actividade molecular



A **energia interna** pode ser vista como a **soma das energias cinética e potencial das partículas** constituintes da matéria (moléculas e respectivos constituintes)

# Energia Interna de um Sistema



## **Energia Cinética Interna**

associada ao movimento vibracional, rotacional, translacional, electrónico, etc das partículas que constituem o sistema (moléculas e respectivos constituintes)

## **Energia Potencial Interna**

armazenada no sistema e que resulta das interacções entre essas partículas



Esta pode ser libertada ou convertida noutras formas de energia, incluindo a cinética.

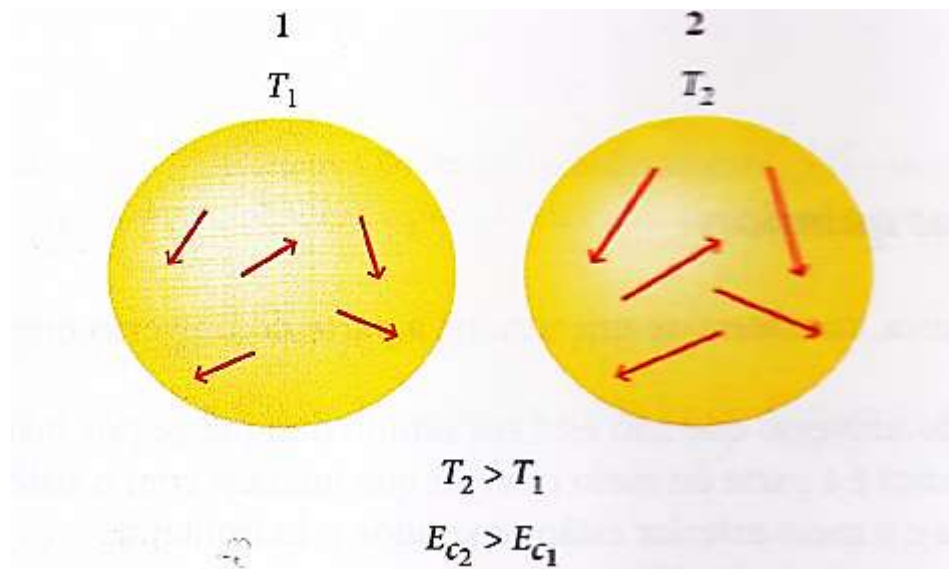


Energia do sistema = Energia cinética + Energia potencial

↓ ↓

associada associada  
ao movimento às interações entre  
das partículas as partículas

$$U = E_c + E_p$$



# Primeira Lei da Termodinâmica

sistema isolado

$$U = \text{constante} \Rightarrow \Delta U = 0$$

$$E_c + E_p = \text{constante} \Rightarrow \Delta E_c + \Delta E_p = 0$$

$$\Delta E_{\text{cinética}} = -\Delta E_{\text{potencial}}$$

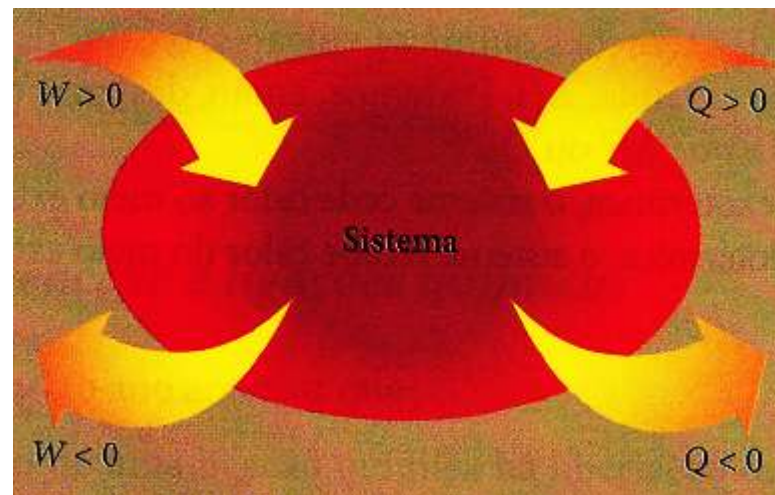
Assim, em sistemas isolados:

- numa reacção exotérmica há aumento de temperatura, a que corresponde um aumento de energia cinética; logo, tem de haver uma diminuição da energia potencial;
- numa reacção endotérmica há diminuição de temperatura, a que corresponde uma diminuição de energia cinética; logo, deve haver um aumento da energia potencial.

# Primeira Lei da Termodinâmica

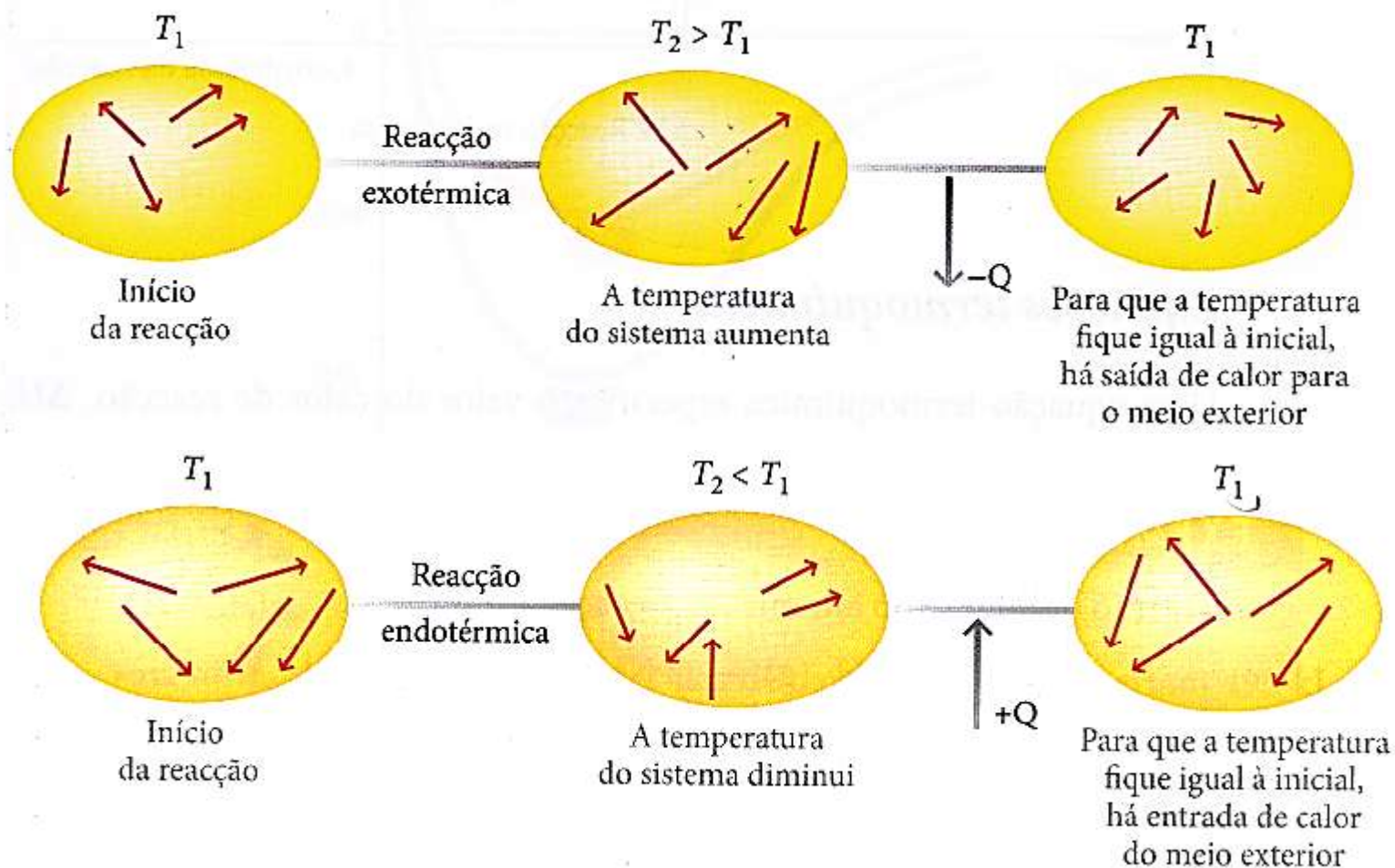
sistemas fechados

$$U_{\text{sistema}} + U_{\text{meio exterior}} = \text{constante}$$
$$U = \text{constante} \Rightarrow \Delta U = 0$$
$$\Delta U_{\text{sistema}} + \Delta U_{\text{meio exterior}} = 0$$
$$\Delta U_{\text{sistema}} = -\Delta U_{\text{meio exterior}}$$



# Calor da Reação

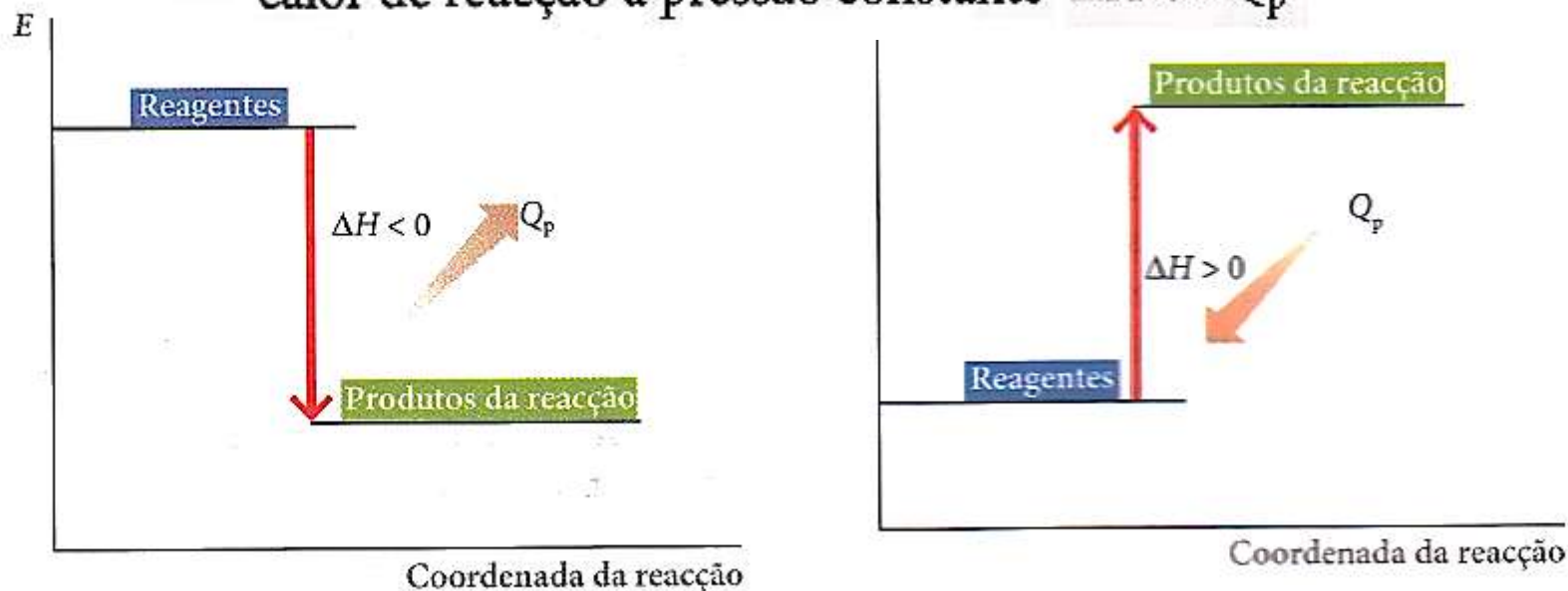
A energia transferida como calor entre o sistema reaccional e o meio exterior, à medida que a reacção decorre e de modo a que a temperatura do sistema não se altere, designa-se por calor de reacção.



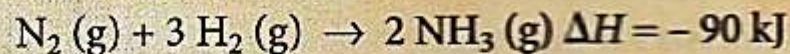
# Calor da Reação

calor de reacção designa -se por variação de entalpia,  $\Delta H$ .

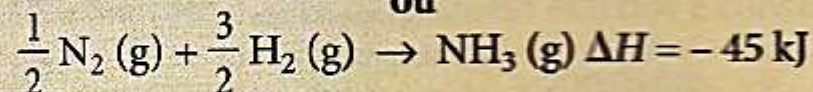
calor de reacção a pressão constante  $\Delta H$  ou  $Q_p$ .



- Reacção de síntese do amoníaco – reacção exotérmica.



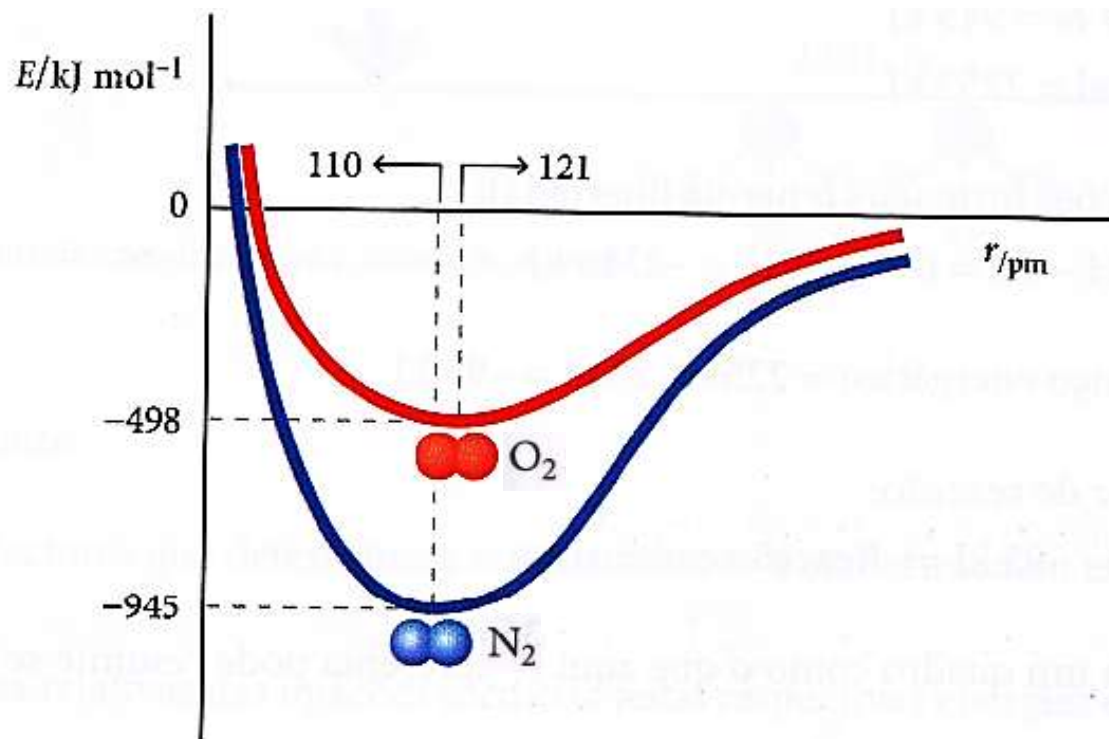
ou



Esta equação indica que por cada mole de moléculas de amoníaco formado se libertam 45 kJ de energia.

# Calor da Reação e ligações químicas

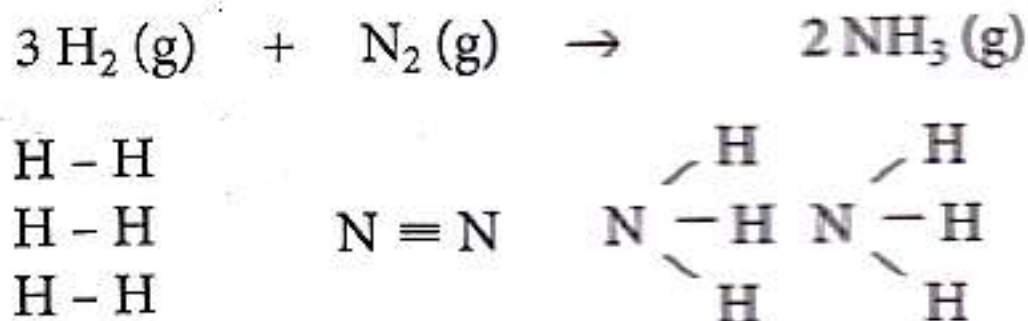
- na formação de uma ligação química há libertação de energia, chamada energia de ligação;
- na quebra de uma ligação química há absorção de energia, chamada energia de dissociação.



Variação da energia potencial na formação de ligações

# Calor da Reação e ligações químicas

O calor de reacção pode ser fundamentalmente **atribuído** à variação da energia interna do sistema reaccional verificada **aquando da quebra** das ligações nos reagentes e da formação de novas **ligações nos produtos** da reacção.



## Energias de Ligação

- $\text{H} - \text{H} = 436 \text{ kJ mol}^{-1}$ ;
- $\text{N} \equiv \text{N} = 945 \text{ kJ mol}^{-1}$ ;
- $\text{H} - \text{N} = -391 \text{ kJ mol}^{-1}$ .

# Calor da Reação e ligações químicas

Ligações quebradas (energia absorvida):

- $3 (\text{H} - \text{H}) = 3 \times 436 = 1308 \text{ kJ}$
  - $\text{N} \equiv \text{N} = 945 \text{ kJ}$
- Total = 2253 kJ

Ligações formadas (energia libertada):

- $6 (\text{H} - \text{N}) = 6 \times (-391) = -2346 \text{ kJ}$

$$\text{Balanço energético} = 2253 - 2346 = -93 \text{ kJ}$$

Calor de reacção:

$$\Delta H = -93 \text{ kJ} \Rightarrow \text{Reacção exotérmica}$$



# Calor da Reação e ligações químicas

Diagrama da energia relativa à síntese do amoníaco

