

ACA0410 Introdução à Química Atmosférica - Docente: Adalgiza Fornaro

Lista de Exercícios (abril 2019)

1) O processo de transferência de energia (em geral na forma de calor) durante as reações químicas é denominado entalpia. A mudança de entalpia durante reações químicas tem sido calculada a partir das mudanças de entalpia de formação dos compostos envolvidos. Esta abordagem da termoquímica pode ser expressa em uma equação geral útil para muitos cálculos:

$$\Delta_r H^\circ_{298} = \sum v_{if} \Delta H^\circ_{298} (\text{produtos}) - \sum v_{ir} \Delta H^\circ_{298} (\text{reagentes})$$

O símbolo " v_i " é o coeficiente estequiométrico, o número de mols de cada reagente ou produto envolvido no balanço da equação termoquímica.

Os valores "padrão de mudança de entalpia de formação, ΔH°_{298} " para alguns gases de interesse atmosférico estão na tabela apresentada no Anexo 1 do livro "Finlayson-Pitts" (preste atenção na unidade: kJ/mol, portanto valor de H para 1 mol de moléculas ou fótons). Considerando os gases N_2 , O_2 , CO_2 , CH_4 , NO_2 e O_3 escreva as reações de fotólise (quebra da molécula por interação com radiação) - preste atenção no oxigênio atômico e molecular que tem diferentes estados espectroscópicos (Tabela do Anexo 1 Finlayson-Pitts), assim a fotólise de O_2 pode ter 3 possíveis produtos (três reações diferentes), o O_3 seis e o CO_2 e o NO_2 tem duas. Calcule a energia da reação de fotólise referente a cada uma das reações anteriores para 1 fóton. **Calcule o comprimento de onda relacionado à energia de 1 fóton (equação de Planck) para cada uma das reações escritas.**

Dados: h = constante de Planck = $6,626 \times 10^{-34}$ J s

c = velocidade da luz = $2,998 \times 10^8$ m s⁻¹

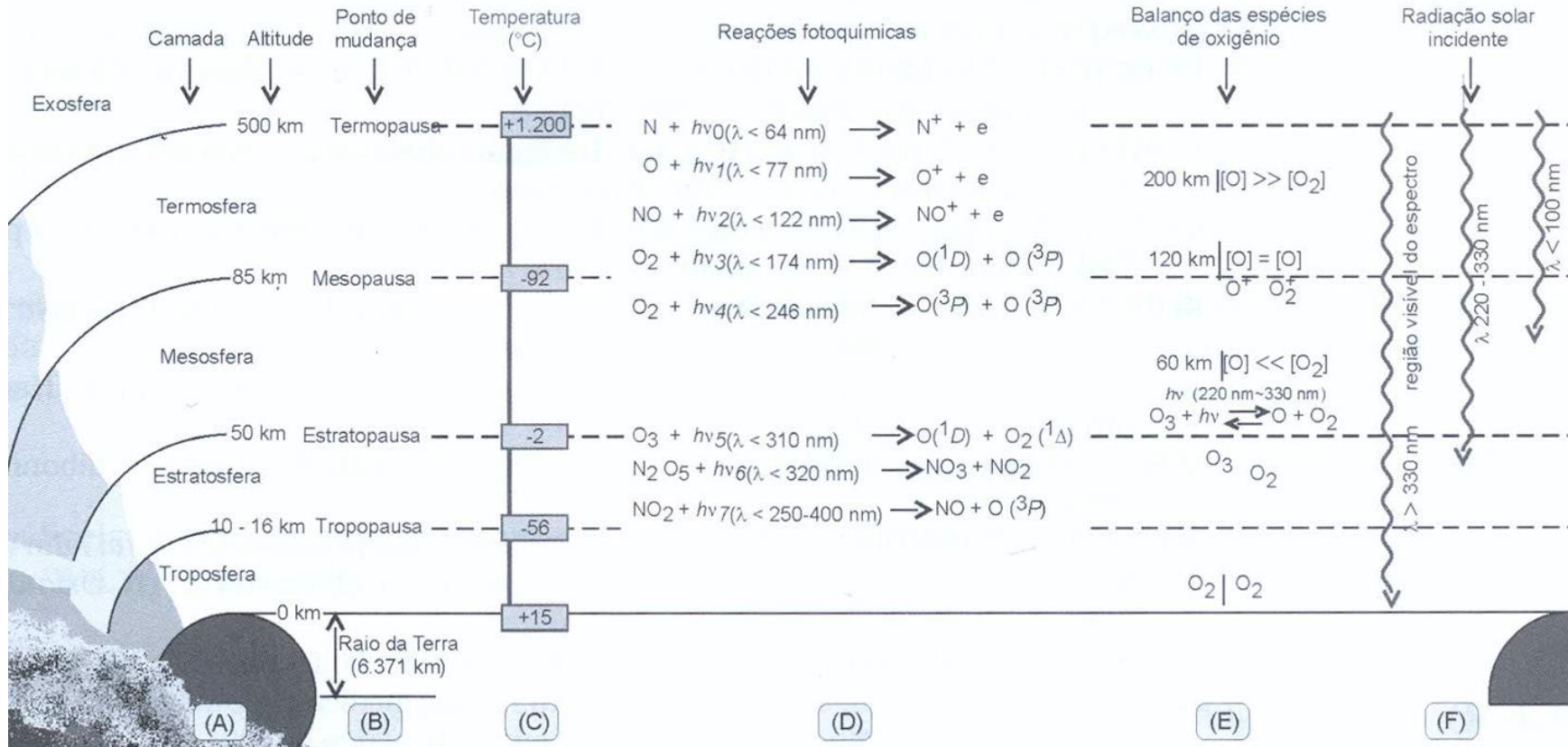
N_A = constante de Avogadro = 6.022×10^{23} mol⁻¹

2) Os cálculos da questão 1 consideram condições padrão (298K) e sistema aberto, podendo assim ser extrapolado para atmosfera, sempre lembrando que estamos fazendo um modelo muito simplificado. Discutir o papel dos diferentes gases do item 1 na função de "filtro" da radiação solar de onda curta (UV) atravessando a atmosfera até a superfície. Mostre as possíveis regiões atmosféricas (a partir da classificação pela temperatura) em que estes "filtros" atuam. Nestas reações quais poderiam ter papel importante para reações próximo à superfície terrestre (ver Figura 3.29 do livro de Lenzi e Favero, 2009).

Enthalpies of Formation of Some Gaseous Molecules, Atoms, and Free Radicals at 298 K^{a,c}

Species	ΔH_{f298}° (kJ mol ⁻¹)	Species	ΔH_{f298}° (kJ mol ⁻¹)
H	218.0	CH ₃ O ₂ NO ₂	-44
H ₂	0	CO ₂	-393.5
O(³ P)	249.2	C ₂ H ₂	228.0
O(¹ D)	438.9	C ₂ H ₄	52.2
O ₂	0	C ₂ H ₅	120.9
O ₂ (¹ Δ)	94.3	C ₂ H ₆	-84.0
O ₂ (¹ Σ)	156.9	CH ₃ CN	64.3
O ₃	142.7	CH ₂ CO	-47.7
HO	39.3	CH ₃ CO	-10.0
HO ₂	14.6	CH-CHOH	115
H ₂ O	-241.8	CH ₃ CHO	-165.8
H ₂ O ₂	-136.3	C ₂ H ₅ O	-15.5
N	472.7	C ₂ H ₅ OH	-234.8
N ₂	0	C ₂ H ₆ OH	-34
NH	352	(CHO) ₂	-211.9
NH ₂	168.7	CH ₃ CO ₂	-207.5
NH ₃	-45.9	CH ₃ CO ₂ H	-432.0
NO	90.3	C ₂ H ₅ O ₂	-28.7
NO ₂	33.2	CH ₃ OOCH ₃	-125.7
NO ₃	73.7	CH ₃ C(O)O ₂	-172
N ₂ O	82.1	C ₂ H ₅ ONO	-103.8
N ₂ O ₄	9.1	C ₂ H ₅ ONO ₂	-154.0
N ₂ O ₅	11.3	C ₂ H ₅ OONO ₂	-63.2
HNO	112.9	C ₃ H ₆	20.2
HNO ₂	-79.5	<i>n</i> -C ₃ H ₇	97.5
HNO ₃	-135.1	<i>i</i> -C ₃ H ₇	90.0
HO ₂ NO ₂	-57	C ₃ H ₈	-104.5
CH ₃	146.4	CH ₃ COCH ₂	-23.9
CH ₄	-74.8	C ₂ H ₅ CHO	-187.4
CN	435	CH ₃ COCH ₃	-217.2
HCN	135	C ₃ H ₆ OH	-74
HCO	41.8	<i>n</i> -C ₃ H ₇ O	-41.4
CH ₂ O	-108.6	<i>i</i> -C ₃ H ₇ O	-52.3
CH ₃ O	17.2	<i>i</i> -C ₃ H ₇ OH	-272.5
CH ₂ OH	-12.1 ^d	CH ₃ COCHO	-271.1
CH ₃ OH	-201.6	C ₃ H ₅ O ₂	87.9
CO	-110.5	<i>i</i> -C ₃ H ₇ O ₂	-68.9
HCOOH	-378.8	<i>n</i> -C ₃ H ₇ ONO ₂	-174.1
CH ₃ O ₂	10.4	<i>i</i> -C ₃ H ₇ ONO ₂	-190.8
CH ₃ OOH	-131	CH ₃ C(O)O ₂ NO ₂	-258
HOCH ₂ O ₂	-162.1	S	277.2
CH ₃ ONO	-65.3	HS	143.0
CH ₃ ONO ₂	-119.7	H ₂ S	-20.6

Estruturas da atmosfera



A) Camadas atmosféricas e respectivas altitudes;

C) temperatura na região de mudança da camada;

E) balanço das espécies de oxigênio;

B) região de mudança da camada;

D) reações fotoquímicas;

F) radiação solar que chega à superfície da Terra.

Lenzi e Favero, 2009