Задача 3.

Тепловой эффект реакции можно рассчитать различными способами. Например, через теплоту образования веществ (Q_f , кДж/моль). Для реакции вида:

$$aA + bB \rightarrow cC + Q_{x,p,}$$
 где $a,b,c - коэффициенты, $Q_{x,p,} = cQ_f(C) - bQ_f(B) - aQ_f(A)$$

1) Запишите уравнение реакции полного сгорания метанола (СН₃ОН) и рассчитайте тепловой эффект этой реакции используя теплоту образования веществ.

Второй способ расчета $Q_{x.p.}$ заключается в использовании данных по энергиям связей. Рассмотрим, к примеру, реакцию образования хлороводорода:

$$H-H + Cl-Cl \rightarrow 2HCl + Q_{x,p}$$
, $Q_{x,p} = 2E_{cB}(H-Cl) - E_{cB}(H-H) - E_{cB}(Cl-Cl)$

Т.е. тепловой эффект реакции представляет собой разность суммы энергий связей, которые образовались, и суммы энергий связей, которые разорвались.

- 2) Рассчитайте тепловой эффект реакции сгорания метанола, но уже с использованием данных по энергиям связей.
- 3) При условии отсутствия погрешностей при определении энергий связей и теплот образования, как Вы считаете, какой метод расчета теплового эффекта реакции более точный через Есв или через Q/?
- 4) Запишите уравнения реакций полного гидролиза хлорида фосфора (V) и оксохлорида фосфора (POCl₃). Рассчитайте тепловые эффекты этих реакций. На основании полученных данных рассчитайте энергии связей P=O и P-Cl. Примите, что энергия связи не зависит от окружения.

Справочная информация

| Вещ-во | Q _f , кДж/моль | Вещ-во | Qƒ, кДж/моль | Связь | Е _{св} , кДж/моль | Связь | Е _{св} , кДж/моль |
|--------------------|------------------------------|--------------------------------|-----------------|-------|-------------------------------|----------------|-------------------------------|
| CO ₂ | 393 | POCl ₃ | 597 | О-Н | 459 | O ₂ | 494 |
| H ₂ O | 286 | H ₃ PO ₄ | 1279 | С-Н | 410 | P-O | 350 |
| CH ₃ OH | 239 | HCl | 93 | С-О | 358 | H-Cl | 427 |
| O ₂ | 0 | PCl ₅ | 367 | C=O | 798 | | |

Решение

$$2CH_3OH + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 4H_2O$$

1 балла

$$Q_{x,p,}$$
 (через Q_f) = $4*286 + 2*393 - 3*0 - 2*239 = 1452 кДж$

2 балла

$$Q_{x.p.}$$
(через E_{cB}) = $4*798 + 8*459 - 3*494 - 2*459 - 2*358 - 6*410 = 1288 кДж$

2 балла

Более точным будет метод расчета через Q_f , так как в случае использования энергий связей в данном случае не учитывается факт того, что одинаковые связи могут иметь разную энергию, в силу различного окружения (например, в рамках задачи энергия связи О-Н в воде и метаноле считается одинаковой)

$$POCl_3 + 3H_2O \rightarrow H_3PO_4 + 3HCl(1)$$

2 балла

$$Q_{x.p.}(1) = 1279 + 3*93 - 3*286 - 597 = 103 кДж$$

2 балла

$$PCl_5 + 4H_2O \rightarrow H_3PO_4 + 5HCl(2)$$

2 балла

$$Q_{x.p.}(2) = 1279 + 5*93 - 4*286 - 367 = 233 кДж$$

2 балла

Пусть
$$E_{cb}(P=O) = x кДж/моль, E_{cb}(P-Cl) = y кДж/моль, тогда$$

$$103 = 3E_{cB}(H-Cl) + 3E_{cB}(O-H) + 3E_{cB}(P-O) + x - 6E_{cB}(O-H) - 3y - x$$

$$103 = 3E_{cB}(H-C1) + 3E_{cB}(P-O) - 3E_{cB}(O-H) - 3y$$

Отсюда находим у:

$$3y = 3*427 + 3*350 - 3*459 - 103$$

$$y \approx 284$$

3 балла

$$233 = 5E_{cB}(H-C1) + 3E_{cB}(O-H) + 3E_{cB}(P-O) + x - 8E_{cB}(O-H) - 5y$$

$$x = 233 - 5*427 + 5*459 - 3*350 + 5*284$$

$$x = 763$$

3 балла