ESERCITAZIONI SULLA TERMOCHIMICA

1 - Quanto calore produce la combustione di 10g di CH4 in condizioni standard?

$$CH_4(g) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + H_2O(g)$$

Per prima cosa di deve bilanciare la reazione

$$CH_4(g) + 2O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + 2H_2O(g)$$

il problema richiede il calore prodotto dalla combustione di 10g di CH₄ si calcolino per prima cosa il numero di moli del metano;

PF (CH₄) =
$$16.0426$$
 g/mol (C=12; H=1,007)

$$n (CH_4) = 10g / 16.0426 g/mol = 0.623 mol$$

dopodiché, poiché il calore q è espresso secondo la relazione: q = n ΔH°

$$q = 0.623 \text{ mol } (-802 \text{ kJ/mol}) = -500 \text{ kJ}$$

il segno negativo indica che la reazione è esotermica

2- Calcolare la massa di propano (C_3H_8) che serve per ricavare -350kJ di calore (una quantità di energia pari a quella necessaria per riscaldare 1L di H_2O da $20^{\circ}C$ alla T di ebollizione).

$$C_3H_8(g) + = 2(g) \rightarrow CO_2(g) + H_2 = (I)$$

Per la combustione $\Delta H_{reazione} = -2220 \text{ kJ/mol}$

$$C_3H_8(g) + 5 O_2(g) \rightarrow 3CO_2(g) + 4H_2O(I)$$

$$N = (-350 \text{ kJ}/-2220 \text{kJ/mol}) = 0.1577 \text{ mol}$$

M= nx MM= 0.1577 mol x 44.0962 g/mol =6.95 g

3 -In base ai seguenti dati

$$\Delta H_F^{\circ}PCl_3$$
 (I) = -319.7 kJ/mol

$$\Delta H_F$$
°Cl₂ (g) = 0

$$PCl_3(I) + Cl_2(g) \rightarrow PCl_5(s)$$

$$\Delta H^{\circ}_{reazione} = -124 \text{ kJ/mol}$$

Calcolare l'entalpia standard di formazione di PCI_{5.}

Poiché:
$$\Delta H_{reaz.} = \Delta H_{prodotti}^{\circ} - \Delta H_{reagenti}^{\circ}$$

$$-124 \text{ kJ/mol} = \Delta H_F^{\circ}PCl_{5(s)} - [\Delta H^{\circ}_FPCl_{3(l)} + \Delta H^{\circ}_FCl_{2(g)}]$$

$$-124 \text{ kJ/mol} = \Delta H_F^{\circ}PCl_{5(s)} - [-319.7 + 0] \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H^{\circ}_{F}PCI_{5(s)} = -443.7 \text{ kJ/mol}$$

4 – Trovare l'entalpia standard di combustione (reazione) per il benzene C₆H₆

$$2C_6H_6(I) + 15 O_2(g) \rightarrow 12 CO_2(g) + 6 H_2O(I)$$

$$\Delta H^{\circ}_{F} CO_{2} (g) = -393.51 \text{ kJ/mol}_{CO_{2}}$$

$$\Delta H^{\circ}_{F} H_{2}O (I) = -285.83 \text{ kJ/mol}_{H2O}$$

$$\Delta H^{\circ}_{F} C_{6} H_{6} (I) = 49 \text{ kJ/mol}_{C6H6}$$

$$\Delta H^{\circ}_{F} O_{2}(g) = 0$$

$$\Delta H^{\circ}_{reaz.} = [12 \text{ x } (-393.51) + 6 \text{ x } (-285.83)] - [2 \text{ x} 49] = -6437.1 - 98 = -6535.1 \text{ kJ/mol}$$

Il ΔH°_{reaz} è prodotto da 2 moli di C_6H_6 , quindi il di combustione di C_6H_6 sarà:

$$6535.1 \text{ kJ/mol}^{-1} / 2 = -3267.6 \text{ kJ/mol } C_6H_6$$

5 – In base ai seguenti dati

$$\Delta H^{\circ}_{F} NO (g) = 90.25 \text{ kJ/mol}$$

$$2NO(g) + O_2(g) \rightarrow 2NO_2(g)$$

$$\Delta H^{\circ}_{reazione} = -114.1 \text{ kJ/mol}$$

$$4NO_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2N_2O_5(g)$$

$$\Delta H^{\circ}_{reazione} = -110.2 \text{ kJ/mol}$$

Calcolare l'entalpia standard di formazione di N₂O₅ (g)

Ci sono due modi per risolvere l'esercizio.

a) Bilancio le semireazioni e ottengo:

$$2x (2NO_{(g)} + O_{2(g)} \rightarrow 2NO_{2(g)}) = 4NO_{(g)} + 2O_{2(g)} \rightarrow 4NO_{2(g)}$$

$$\Delta H^{\circ}$$
= -228.2 kJ/mol

$$4NO_{2(g)} + O_{2(g)} \rightarrow 2N_2O_{5(g)}$$

$$\Delta H^{\circ}$$
= -110.2 kJ/mol

$$4NO_{(g)} + 3O_{2(g)} \rightarrow 2N_2O_{5(g)}$$

$$-338.4 \text{ kJ/mol} = 2 \text{ x } \Delta \text{H}^{\circ}_{\text{F}} \text{N}_{2} \text{O}_{5 \text{ (g)}} - [4\Delta \text{H}^{\circ}_{\text{F}} \text{NO}_{\text{ (g)}} + 3 \Delta \text{H}^{\circ}_{\text{F}} \text{O}_{2 \text{ (g)}}]$$

$$-338.4 \text{ kJ/mol} = 2 \text{ x } \Delta \text{H}^{\circ}_{\text{F}} \text{N}_{2} \text{O}_{5 \text{ (g)}} - [4 \text{ x } (90.25) + 0] \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H^{\circ}_{F} N_{2}O_{5 (g)} = 11.3 \text{ kJ/mol}$$

b) Dalla prima reazione si calcola il $\Delta H^{\circ}_{F} NO_{2(g)}$ $\Delta H^{\circ}_{reaz.} = 2 \times \Delta H^{\circ}_{F} NO_{2(g)} - [2 \times \Delta H^{\circ}_{F} NO_{(g)} + \Delta H^{\circ}_{F} O_{2(g)}]$ $\Delta H^{\circ}_{F} NO_{2(g)} = (\Delta H^{\circ}_{reaz} + 4 \times \Delta H^{\circ}_{F} NO_{2(g)}) / 2$ $\Delta H^{\circ}_{F} NO_{2(g)} = (-110.2 \text{ kJ/mol} + 4 \times 33.2 \text{ kJ/mol})/2 = 11.3 \text{ kJ/mol}$ 6 - Per la reazione

 $HBr + Cl_2 \rightarrow HCl + Br_2$

Date le seguenti energie di legame:

H-Br: 364 kJ/mol

CI-CI: 239 kJ/mol

H-Cl: 431 kJ/mol

Br-Br: 190 kJ/mol

Calcolare il valore approssimato di ΔH della reazione.

Per prima cosa si procede al bilanciamento della reazione:

 $2HBr + Cl_2 \rightarrow 2HCl + Br_2$

 ΔH° Reagenti: (2x364 +239) kJ/mol = 967 kJ/mol

ΔH° Prodotti: (2 x -431 + (-190) kJ/mol = -1052 kJ/mol (energia di formazione dei legami)

 $\Delta H^{\circ}_{reaz.} = \Delta H^{\circ}_{(rottura\ legami\ reagenti)} + \Delta H^{\circ}_{(formazione\ legami\ prodotti)}$

 $\Delta H^{\circ}_{reaz.} = 967 \text{ kJ/mol} + (-1052 \text{ kJ/mol}) = -85 \text{ kJ/mol}$

7- Si calcoli il valore dell'entalpia standard della reazione:

$$2SO_2 + O2 -> 2SO_3$$

Noti i valori $\Delta H^0_{f(SO3)} = -395,2 \text{ kJ e } \Delta H^0_{f(SO2)} = -296,9 \text{ kJ}$

L'entalpia della reazione si calcola secondo la formula generale

$$\Delta H^0_{reazione} = \Delta H^0_{f(prodotti)} - \Delta H^0_{f(reagenti)}$$

Ricordando che H⁰_f degli elementi è nulla per convenzione, nel caso del problema

$$\Delta H^{0}_{reazione} = 2* (-395,2) - 2* (-296,9) = -196,6 \text{ kJ}$$

8 - Si calcoli il valore di ΔH⁰f del metano in base ai seguenti valori

$$\Delta H^0_{f(CO2(g))} = -393,50 \text{ kJ}$$
 $\Delta H^0_{f(H2O(g))} = -241,84 \text{ kJ};$ $\Delta H^0 (CH_{4(g)} + 2 O_{2(g)} -> CO_2 + 2H_2O_{(g)}) = -802,20 \text{ kJ}$

Sapendo che l'entalpia della reazione è data da:

$$\Delta H^{0}_{reazione} = \Sigma \Delta H^{0}_{f(prodotti)} - \Sigma \Delta H^{0}_{f(reagenti)}$$

Nel nostro caso avremo che

$$\Delta H^{0}\left(CH_{4(g)}+2\ O_{2(g)}->CO_{2}+2H_{2}O_{(g)}\right)=2^{*}\ \Delta H^{0}_{f(H2O(g))}+\Delta H^{0}_{f(CO2(g))}-2^{*}\ \Delta H^{0}_{f(O2(g))}-\Delta H^{0}_{f(CH4(g))}$$

Ricordando che H^0_f degli elementi è nulla per convenzione, possiamo evidenziare che l'unica incognita è $\Delta H^0_{f(CH4(g))}$ che è appunto ciò che noi cerchiamo. Dunque tramite una semplice sostituzione, si avrà che:

$$-802,20 = 2 * (-241,84) + (393,50) - \Delta H^{0}_{f(CH4(g))}$$

$$\Delta H_{f(CH4(g))}^{0} = -74,98 \text{ kJ * mol}^{-1}$$

ESERCIZI DA SVOLGERE

1 - Calcolare la massa di butano (C_4H_{10}) quando si dissipano 350 KJ di calore. (-350KJ) Per la combustione $\Delta H_{reazione}$ = - 5756 kJ/mol

$$C_4H_{10}(I) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + H_2O(I)$$

[soluzione: 7.1 g]

2 - Data la reazione

$$C(s) + H_2O(g) \rightarrow CO(g) + H_2(g)$$

E sapendo che ΔH°_{F} (H₂O) = -241.82 kJ/mol e ΔH°_{F} (CO) = - 110.53 kJ/mol

Determinare:

- a) Se la reazione è esotermica o endotermica
- b) Calcolare il ΔH relativo alla produzione di 200 L di H₂ (a 500 torr e 65°C)

[soluzione: a) 131.29 kJ/ mol; b) 624.94 KJ]

3 – La combustione del benzene avviene secondo la reazione

$$C_6H_6 (I) + 7,5 O_{2(g)} -> 6 CO_{2(g)} + 3 H_2O (I)$$

Si calcoli la quantità di calore prodotta dalla combustione di 1,000 l di C_6H_6 (densità a (25° C = 0,88 g/cc) in base ai seguenti dati:

$$\Delta H^0_{f(C6H6(I))} = 49,09 \text{ kJ}$$
; $\Delta H^0_{f(H2O(I))} = -285,85 \text{ kJ}$; $\Delta H^0_{f(CO2(g))} = -393,50 \text{ kJ}$

[soluzione: $3,68 * 10^4 \text{ kJ}$]

4- Si stabilisca se, a condizioni standard, la reazione

$$CO_{(g)} + 2H_{2(g)} -> CH_3OH_{(l)}$$

Avviene spontaneamente o meno, in base ai dati riportati:

$$\Delta H^{0}_{reazione} = -141,84 \text{ kJ}; S^{0}_{(CO(g))} = 197,90 \text{ J} * \text{K}^{-1} * \text{mol}^{-1};$$

$$S^{0}_{(H2(g))} = 130,58 \text{ J * K}^{-1} \text{ * mol}^{-1};$$
 $S^{0}_{(CH3OH(I))} = 126,78 \text{ J * K}^{-1} \text{ * mol}^{-1}$

[soluzione: Reazione spontanea $\Delta G^{0}_{reazione}$ = - 42,77 kJ]