Termoquímica

- Ley de Hess y Entalpías Estándar de Formación
- Química en contexto

eacastaneda@uc.cl

Entalpías Estándar de Formación (ΔH^o_f)

- La entalpía estándar de formación de un compuesto se define como ***"el cambio en entalpía que acompaña la formación de 1 mol de un compuesto desde sus elementos constituyentes, con todas la sustancias en sus estados estándar"***

Compound	ΔH°_f (kJ/mol)
$NH_3(g)$	−46
$NO_2(g)$	34
$H_2O(l)$	−286
$Al_2O_3(s)$	−1676
$Fe_2O_3(s)$	−826
$CO_2(g)$	−394
$CH_3OH(l)$	−239
$C_8H_{18}(l)$	−269

$C_{(s,\ grafito)} + O_{2\ (g)} \rightarrow CO_{2\ (g)}$ $\quad \Delta H_f^o = -394$ kJ/mol

$\frac{1}{2} N_{2(g)} + 3/2\ H_{2\ (g)} \rightarrow NH_{3\ (g)}$ $\quad \Delta H_f^o = -46$ kJ/mol

$C_{(s,\ grafito)} + \frac{1}{2} O_{2\ (g)} + 2H_2 \rightarrow CH_3OH_{\ (l)}$ $\quad \Delta H_f^o = -239$ kJ/mol

- El símbolo de grado (°) en una función termodinámica indica que el proceso se ha llevado a cabo en su estado estándar

- Para un ***elemento***, su estado estándar es la forma en la cual el elemento existe bajo 1 bar y 25 °C. Por definición la ΔH_f^o de un elemento en su estado estándar es **0**

Ejemplo: $Na_{(s)}$ $H_{2(g)}$ $N_{2(g)}$ $O_{2(g)}$ $C_{(grafito)}$ $Br_{2(l)}$ $\Delta H_f^o = 0$

- Para un ***compuesto*** gaseoso, su estado estándar es definido a 1 bar de presión

- Para un ***compuesto*** sólido o líquido, el estado estándar es el del líquido o sólido puro a 1 bar de presión

- Determine la entalpía de combustión estándar del etano, $C_2H_{6\,(g)}$, utilizando el concepto de entalpía de formación estándar y la ley de Hess

$$C_2H_{6\,(g)} + 7/2\ O_{2\,(g)} \longrightarrow 2\ CO_{2\,(g)} + 3\ H_2O_{\,(l)} \qquad \Delta H^o = ?$$

$$C_2H_{6\,(g)} \longrightarrow 2\ C_{\,(grafito)} + 3\ H_{2\,(g)} \qquad \Delta H^o = -\Delta H_f^o$$

$$2\ C_{\,(grafito)} + 2\ O_{2\,(g)} \longrightarrow 2\ CO_{2\,(g)} \qquad \Delta H^o = 2 \times \Delta H_f^o$$

$$3\ H_{2\,(g)} + 3/2\ O_{2\,(g)} \longrightarrow 3\ H_2O_{\,(l)} \qquad \Delta H^o = 3 \times \Delta H_f^o$$

$$C_2H_{6\,(g)} + 7/2\ O_{2\,(g)} \longrightarrow 2\ CO_{2\,(g)} + 3\ H_2O_{\,(l)}$$

Resultado Neto: $\Delta H^o = [2 \times \Delta H_f^o(CO_2) + 3 \times \Delta H_f^o(H_2O)] - \Delta H_f^o(C_2H_6)]$

$$C_2H_{6\,(g)} + 7/2\ O_{2\,(g)} \longrightarrow 2\ CO_{2\,(g)} + 3\ H_2O_{\,(l)}$$

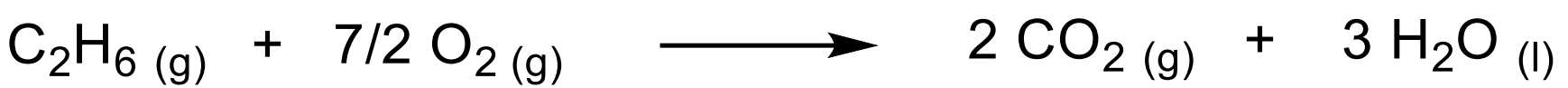
Resultado Neto: $\Delta H^o = [2 \times \Delta H_f^o(CO_2) + 3 \times \Delta H_f^o(H_2O)] - \Delta H_f^o(C_2H_6)$

- Esto nos lleva a la siguiente generalización

$$\Delta H^o = \sum n_p \Delta H_f^o(productos) - \sum n_r \Delta H_f^o(reactivos)$$

- Donde n_p y n_r representan los coeficientes estequiométricos de productos y reactantes

- Calculemos entonces la entalpía estándar de combustión de la reacción anterior de acuerdo a la fórmula:



$$\Delta H^o = \sum n_p \Delta H_f^o (productos) - \sum n_r \Delta H_f^o (reactivos)$$

$\Delta H^o = [2 \times \Delta H_f^o(CO_2) + 3 \times \Delta H_f^o(H_2O)] - \Delta H_f^o(C_2H_6) - 7/2\ \Delta H_f^o(O_2)$

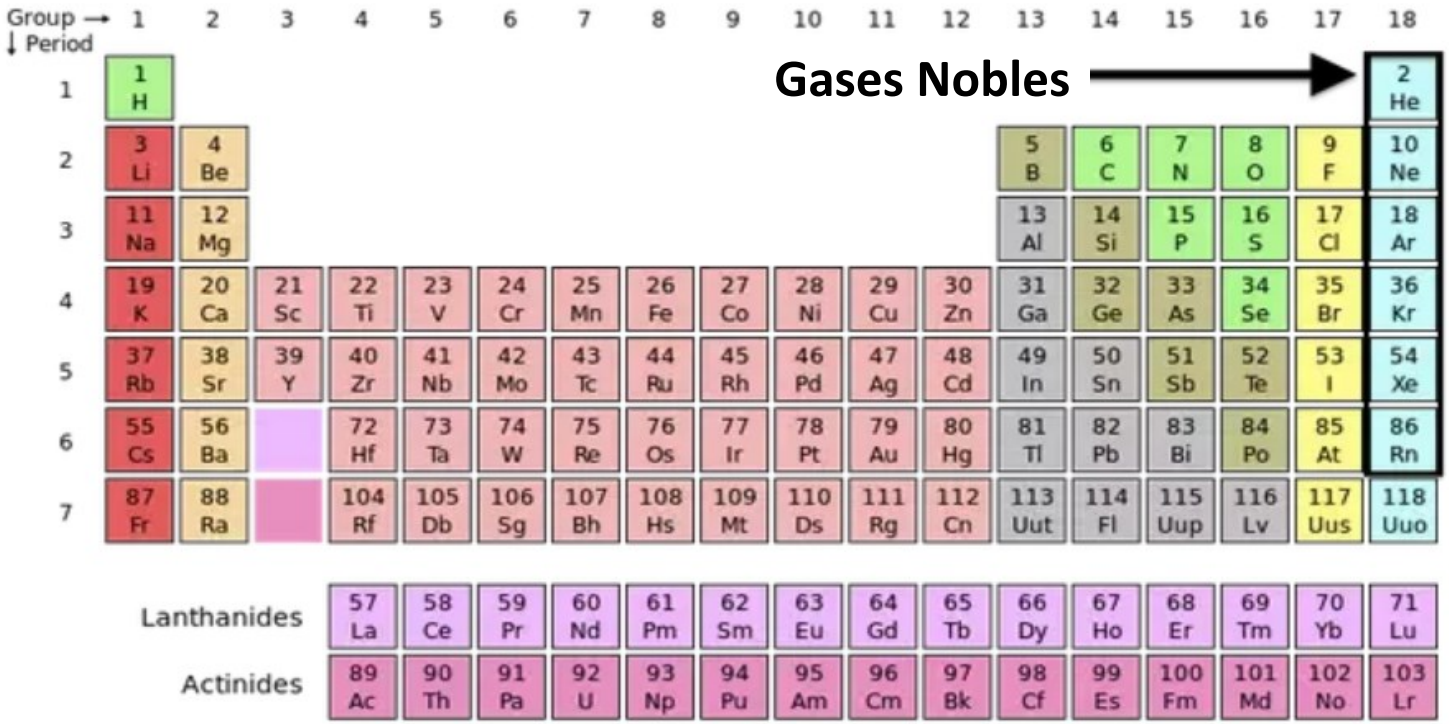
$\Delta H^o = [2 \times (-393{,}5\ kJ) + 3 \times (-285{,}8\ kJ)] - (-84{,}7\ kJ) - 7/2\ (0)$

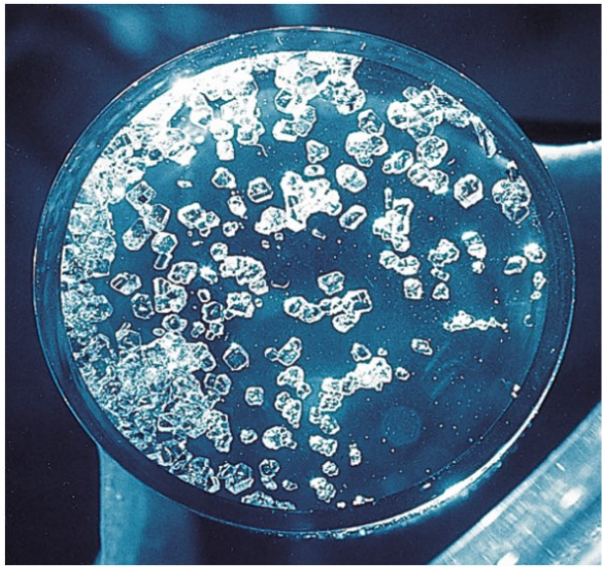
$\Delta H^o = -1559{,}7\ kJ$

Química en Contexto: Tetrafluororuro de Xenón

- Aunque los gases nobles son considerados “inertes”, la termoquímica predice que bajo ciertas condiciones, estos pueden reaccionar y formas compuestos estables a T ambiente:

$$Xe + 2F_2 \longrightarrow XeF_4 \qquad \Delta H = -251\ kJ$$





Cristales de XeF_4

Usando los valores de entalpía de formación (ΔH^o_f) de la tabla provista, calcule la entalpía estándar (ΔH^o) para la siguiente reacción:

$$2NH_3\,(g) + 3O_2\,(g) + 2CH_4\,(g) \longrightarrow 2HCN\,(g) + 6H_2O\,(g) \qquad \Delta H^o = ?$$

Compuesto	ΔH_f^o (kJ/mol)
NH_3	-46
CH_4	-75
HCN	135,1
H_2O	-242

Usando los valores de entalpía de formación (ΔH^o_f) de la tabla provista, calcule la entalpía estándar (ΔH^o) para la siguiente reacción:

$$2NH_3\,(g) + 3O_2\,(g) + 2CH_4\,(g) \longrightarrow 2HCN\,(g) + 6H_2O\,(g) \quad \Delta H^o = ?$$

Compuesto	ΔH_f^o (kJ/mol)
NH_3	-46
CH_4	-75
HCN	135,1
H_2O	-242

$\Delta H^o = \Delta H_f^o$ Productos - ΔH_f^o Reactantes

$\Delta H^o = [2x\ x\Delta H_f^o(HCN) + 6x\Delta H_f^o(H_2O)] - [2x\Delta H_f^o(NH_3) + 2x\Delta H_f^o(CH_4) + 3x\Delta H_f^o(O_2)$

Reemplazamos los valores según la tabla… recuerden que elementos puros tienen $\Delta H_f^o = 0$

Usando los valores de entalpía de formación (ΔH^o_f) de la tabla provista, calcule la entalpía estándar (ΔH^o) para la siguiente reacción:

$$2NH_3\,(g) + 3O_2\,(g) + 2CH_4\,(g) \longrightarrow 2HCN\,(g) + 6H_2O\,(g) \quad \Delta H^o = ?$$

Compuesto	ΔH_f^o (kJ/mol)
NH_3	-46
CH_4	-75
HCN	135,1
H_2O	-242

$$\Delta H^o = [2x\ x\Delta H_f^o(HCN) + 6x\Delta H_f^o(H_2O)] - [2x\Delta H_f^o(NH_3) + 2x\Delta H_f^o(CH_4) + 3x\Delta H_f^o(O_2)]$$

$$\Delta H^o = [2x\ x\Delta H_f^o(135,1) + 6x\Delta H_f^o(-242)] - [2x\Delta H_f^o(-46) + 2x\Delta H_f^o(-75) + 3x\Delta H_f^o(0)]$$

Respuesta = -940 kJ

Encuentre el ΔH para la reacción descrita, dadas las reacciones detalladas mas abajo y sus valores de ΔH asociados:

$HCl(g) + NaNO_2(s) \rightarrow HNO_2(l) + NaCl(s)$

$2NaCl(s) + H_2O(l) \rightarrow 2HCl(g) + Na_2O(s)$ $\Delta H = 507$ kJ

$NO(g) + NO_2(g) + Na_2O(s) \rightarrow 2NaNO_2(s)$ $\Delta H = -427$ kJ

$NO(g) + NO_2(g) \rightarrow N_2O(g) + O_2(g)$ $\Delta H = -43$ kJ

$2HNO_2(l) \rightarrow N_2O(g) + O_2(g) + H_2O(l)$ $\Delta H = 34$ kJ

Respuesta = -78,5 kJ

Bibliografía

- Petrucci, R. Química general: principios y aplicaciones modernas. (2011) 8aEd. Capitulo 7. “Termoquímica”