

## Розрахунково-графічне завдання

### Термохімія. Розрахунок теплового ефекту реакції.

Для заданої хімічної реакції:

1. Розрахувати стандартний тепловий ефект реакції  $\Delta H^0_{298}$ ;
2. Знайти зміну коефіцієнтів  $a, b, c, c'$  ( $\Delta a, \Delta b, \Delta c, \Delta c'$ );
3. Записати аналітичну залежність теплового ефекту реакції від температури  $\Delta H = f(T)$ ;
4. Розрахувати тепловий ефект реакції при заданій температурі  $T$ ;
5. Встановити, яким чином відрізняються теплові ефекти реакції при сталому тиску та об'ємі;
6. Розрахувати теплові ефекти реакції за температур  $T + 100$  К;  $T + 150$  К;  $T + 200$  К;  $T + 250$  К;  $T + 300$  К;
7. Побудувати графічну залежність теплового ефекту реакції від температури  $\Delta H = f(T)$ .
8. Зробити висновок.

№	Реакція	$T, K$	№	Реакція	$T, K$
1	$C_2H_5OH_{(r)} = C_2H_4 + H_2O_{(r)}$	340	11	$MgO + CO_2 = MgCO_3$	380
2	$COCl_{2(r)} = CO + Cl_2$	420	12	$PCl_{3(r)} + Cl_2 = PCl_{5(r)}$	580
3	$2H_2S = 2H_2 + S_{2(r)}$	500	13	$CH_4 + Cl_2 = CH_3Cl + HCl$	700
4	$HJ + CH_3J = CH_4 + J_{2(r)}$	460	14	$CO_2 + H_2 = HCOOH_{(r)}$	600
5	$CO + 3H_2 = CH_4 + H_2O_{(r)}$	760	15	$CO_2 + H_2 = H_2O_{(r)} + CO$	820
6	$C_2H_{6(r)} + CO = CH_3COCH_{3(r)}$	900	16	$4NO + 6H_2O = 4NH_3 + 5O_2$	960
7	$2C_2H_5OH_{(r)} = (C_2H_5)_2O_{(r)} + H_2O_{(r)}$	540	17	$C_2H_5OH_{(r)} = C_2H_4 + H_2O_{(r)}$	640
8	$4NO + 6H_2O = 4NH_3 + 5O_2$	920	18	$2SO_3 = 2SO_2 + O_2$	800
9	$CaO + CO_2 = CaCO_3$	480	19	$2C_{(граф)} + H_2 = C_2H_2$	860
10	$CH_4 + CO_2 = CH_3COOH_{(r)}$	520	20	$2HJ = H_2 + J_{2(r)}$	720

Номер варіанта повинен співпадати з номером студента в журналі групи!

У Додатках наведено алгоритм виконання РГР (Додаток 1) та приклад оформлення титульного аркушу (Додаток 2).

## Алгоритм виконання розрахунково-графічної роботи

Дано:  $2\text{H}_2\text{O}_{(г)} = 2\text{H}_2 + \text{O}_2$ ;  $T = 600 \text{ K}$

За допомогою [Краткий справочник физико-химических величин / Под ред. Мищенко К.С., Равделя А.А. – Л.: Химия, 1983. – 231 с. ] або “Таблиця термодинамических свойств” на сайті Кафедри фізичної хімії в розділі “Освіта”, підрозділ “Студентам” за посиланням [http://web.kpi.kharkov.ua/fchem/uk/studentam\\_ukr/](http://web.kpi.kharkov.ua/fchem/uk/studentam_ukr/) заносимо в таблицю термодинамічні дані для всіх учасників реакції:

Речовина	$\Delta H_{f,298}^0$ , кДж/моль	$C_p^0 = f(T)$ , Дж/(моль·К)				Температурний інтервал, К
		$a$	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^6$	$c' \cdot 10^{-5}$	
$\text{H}_2\text{O}_{(г)}$	-241,81	30	10,71	–	0,33	298–2500
$\text{H}_2$	0	27,28	3,26	–	0,5	298–3000
$\text{O}_2$	0	31,46	3,39	–	-3,77	298–3000

1. Визначаємо ізобарний тепловий ефект реакції при стандартних умовах, з урахуванням наслідку із закону Геса:

$$\begin{aligned} \Delta H_{298}^0 &= (2 \cdot \Delta H_{f,298}^0(\text{H}_2) + \Delta H_{f,298}^0(\text{O}_2)) - (2 \cdot \Delta H_{f,298}^0(\text{H}_2\text{O})) = \\ &= (2 \cdot 0 + 0) - (2 \cdot (-241,81)) = 483,62 \text{ кДж} \end{aligned}$$

2. Розраховуємо зміну емпіричних коефіцієнтів багаточленів  $C_p^0 = f(T)$  для продуктів реакції та вихідних речовин. За їх значенням розраховуємо коефіцієнти в рівнянні  $\Delta C_p^0 = f(T)$ .

$$\begin{aligned} \Delta a &= (2 \cdot a(\text{H}_2) + a(\text{O}_2)) - (2 \cdot a(\text{H}_2\text{O})) = (2 \cdot 27,28 + 31,46) - (2 \cdot 30) = 26,06 \\ \Delta b &= (2 \cdot b(\text{H}_2) + b(\text{O}_2)) - (2 \cdot b(\text{H}_2\text{O})) = -11,51 \cdot 10^{-3} \\ \Delta c &= (2 \cdot c(\text{H}_2) + c(\text{O}_2)) - (2 \cdot c(\text{H}_2\text{O})) = 0 \\ \Delta c' &= (2 \cdot c'(\text{H}_2) + c'(\text{O}_2)) - (2 \cdot c'(\text{H}_2\text{O})) = -3,43 \cdot 10^5 \end{aligned}$$

Теплоємність для робочого інтервалу температур виражається рівнянням:

$$\Delta C_p^0 = \sum n_i \cdot C_{p, \text{прод}}^0 - \sum n_i \cdot C_{p, \text{вих}}^0 = \Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^2 + \frac{\Delta c'}{T^2}$$

Інтервал температур, в якому справедливі розраховані коефіцієнти, визначається за найменшим з усіх температурних інтервалів для реагуючих речовин.

$$\Delta C_p^0 = 26,06 - 11,51 \cdot 10^{-3} \cdot T - 3,43 \cdot 10^5 / T^2$$

Це рівняння достовірне в інтервалі температур 298–2500 К.

3. Залежність  $\Delta H_T^0 = f(T)$  визначається за законом Кирхгоффа:

$$\left( \frac{d\Delta H^0}{dT} \right) = \Delta C_p^0$$

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^T \Delta C_p^0 dT = \Delta H_{298}^0 + \Delta a \cdot (T - 298) + \frac{\Delta b}{2} \cdot (T^2 - 298^2) + \frac{\Delta c}{3} \cdot (T^3 - 298^3) - \Delta c' \cdot \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{298} \right)$$

Підставляємо в рівняння Кирхгоффа значення ізобарного теплового ефекту при стандартних умовах  $\Delta H_{298}^0$  і коефіцієнтів  $\Delta a$ ,  $\Delta b$ ,  $\Delta c$  та  $\Delta c'$  та отримуємо аналітичну залежність теплового ефекту реакції від температури  $\Delta H = f(T)$  для даної реакції:

$$\Delta H_T^0 = 483620 + 26,06 \cdot (T - 298) - \frac{11,51 \cdot 10^{-3}}{2} \cdot (T^2 - 298^2) + 3,43 \cdot 10^5 \cdot \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{298} \right) =$$

$$= 475214,18 + 26,06 \cdot T - 5,755 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 + 3,43 \cdot 10^5 \cdot T^{-1}$$

4. Визначаємо тепловий ефект реакції  $\Delta H_T^0$  при  $T = 600$  К

$$\Delta H_{600}^0 = 475214,18 + 26,06 \cdot 600 - 5,755 \cdot 10^{-3} \cdot 600^2 + \frac{3,43 \cdot 10^5}{600} = 489350 \text{ Дж}$$

5. Тепловий ефект при постійному тиску дорівнює:  $\Delta H = \Delta U + P\Delta V$ , а для ідеальних газів:

$$\Delta H = \Delta U + \Delta nRT,$$

де  $\Delta n$  – зміна кількості молів газоподібних речовин під час проходження реакції.

Отже, різниця теплових ефектів хімічної реакції в ізобарному та ізохорному процесах визначається наступним чином:

$$\Delta H - \Delta U = \Delta nRT.$$

Визначаємо  $\Delta n$  для заданої реакції  $2\text{H}_2\text{O}_{(г)} = 2\text{H}_2 + \text{O}_2$  з урахуванням того, що всі речовини – гази:

$$\Delta n = (2 + 1) - (2) = 1, \text{ тоді}$$

$$\Delta H - \Delta U = 1 \text{ моль } 8,314 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К}) \cdot 600 \text{ К} = 4988,4 \text{ Дж}$$

6. Розраховуємо теплові ефекти реакції за температур  $T+100$  К;  $T+150$  К;  $T+200$  К;  $T+250$  К;  $T+300$  К:

$$\Delta H_{600+100}^0 = 475214,18 + 26,06 \cdot 700 - 5,755 \cdot 10^{-3} \cdot 700^2 + \frac{3,43 \cdot 10^5}{700} = 491126 \text{ Дж}$$

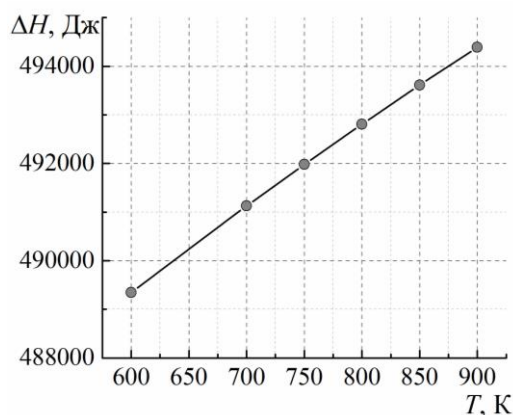
$$\Delta H_{600+150}^0 = 475214,18 + 26,06 \cdot 750 - 5,755 \cdot 10^{-3} \cdot 750^2 + \frac{3,43 \cdot 10^5}{750} = 491979 \text{ Дж}$$

$$\Delta H_{600+200}^0 = 475214,18 + 26,06 \cdot 800 - 5,755 \cdot 10^{-3} \cdot 800^2 + \frac{3,43 \cdot 10^5}{800} = 492808 \text{ Дж}$$

$$\Delta H_{600+250}^0 = 475214,18 + 26,06 \cdot 850 - 5,755 \cdot 10^{-3} \cdot 850^2 + \frac{3,43 \cdot 10^5}{850} = 493611 \text{ Дж}$$

$$\Delta H_{600+300}^0 = 475214,18 + 26,06 \cdot 900 - 5,755 \cdot 10^{-3} \cdot 900^2 + \frac{3,43 \cdot 10^5}{900} = 494388 \text{ Дж}$$

7. Будуємо графік залежності теплового ефекту реакції від температури  $\Delta H = f(T)$ :



8. Робимо висновок стосовно термохімічного ефекту даної реакції!

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
«ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»

Розрахунково-графічна робота  
з фізичної хімії

«ТЕРМОХІМІЯ. РОЗРАХУНОК ТЕПЛОВОГО ЕФЕКТУ РЕАКЦІЇ»

Виконав:  
студент 2 курсу, гр. 418а

---

(прізвище, ім'я, по батькові)

Перевірив:  
д.т.н., проф.. Близнюк О.М.