Ministry of Higher Education and Scientific Research

Al-Muthanna University

College of Science

Department of Chemistry

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة المثنى

كلية العلوم

قسم الكيمياء

Physical Chemistry

المحـــاضـرة 15

المرحلـة الثانــية

أ.د. حـســن صبـيح جـبر

Calculate the heat of reaction from band energies.

When the bonds consists of a reaction between atoms and at the some time break the bonds of other.

Know the energy bond of the molecule A – B

The energy required to break the molecule in to two atoms A, B

$N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$

$\therefore$ N ≡ N = 1 bond } R and N – H = 6 bond } P

H – H = 3 bond

$\therefore$ N ≡ N + H – H → H – N(H) – H

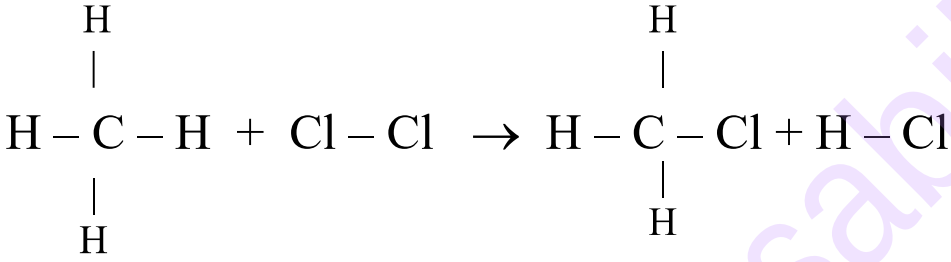
Example :- If the values of the enthalpy of the bonds

H – Cl , C – Cl , Cl – Cl , C – H

Of the following values 99, 58, 78, 103

Calculate ΔH for reaction

$$\underset{g}{CH_4} + \underset{g}{Cl_2} \rightarrow \underset{g}{CH_3Cl} + \underset{g}{HCl}$$



$\Delta H = 99 + 58 - (78 + 103)$

$\Delta H = -24$ Kcal/mol.

عند كسر الاصرة يكون الانثالبي موجباً

لكن عند تكوين الاواصر يكون الانثالبي سالباً.

Change the hat of reaction with temperature
Kirchoff Law

$$R \rightarrow P$$

$$\Delta H_r = \Delta H_p - \Delta H_R$$

بتفاضل طرفي المعادلة بدلالة الحرارة

$$\left(\frac{d\Delta H_r}{dT}\right)_P = \left(\frac{d\Delta H_P}{dT}\right)_P - \left(\frac{d\Delta H_R}{dT}\right)_P$$

$$C_p = \left(\frac{dH}{dT}\right)_P$$

$$\left(\frac{d\Delta H_r}{dT}\right)_P = Cp_p - Cp_R$$

$$\left(\frac{d\Delta H_r}{dT}\right)_P = \Delta C_p$$

∴ يعرف الفرق في السعة الحرارية للمواد الناتجة والمتفاعلة لحساب التغير لحرارة التفاعل مع درجة الحرارة بقانون كيرشوف.

اذا كان الفرق صغير جداً يمكن جعل ΔCp ثابتة

$$\int_{\Delta H_1}^{\Delta H_2} d(\Delta H_r) = \Delta C_p \int_{T_1}^{T_2} dT$$

$$\Delta H_2 - \Delta H_1 = \Delta C_p (T_2 - T_1)$$

حيث ان ΔH_2 حرارة التفاعل عند T_2 و ΔH_1 حرارة التفاعل عند T_1 .

Example:- The average heat capacity is recognized when the pressure of hydrogen, oxygen and water vapor over the temperature from $25C^o$ to $100C^o$ values of the following.

$$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$$

Cp (Cal/mol.deg)	
6.92	H_2 g
7.04	O_2 g
8.03	H_2O g

$25C^o$ at $\Delta H = 57.5$ = The heat of reaction

Calculate the heat of formation of water vapor at $100C^o$.

$$\Delta C_p = C_p(H_2O) - [C_p(H_2) + \frac{1}{2}C_p(O_2)]$$

$$= 8.03 - [\,6.92 + \frac{1}{2}\,(7.04)]$$

$$= 8.03 - 10.29$$

$$= -\,2.41 \text{ cal/mol. deg}$$

$$\Delta H_2 - \Delta H_1 = \Delta C_p\,(T_2 - T_1)$$

$$\Delta H_2 - (-575) = -\,2.41 \times 10^{-3}\,(373 - 298)$$

$$\therefore \Delta H_2 = -\,57.98 \text{ Kal/mol}$$