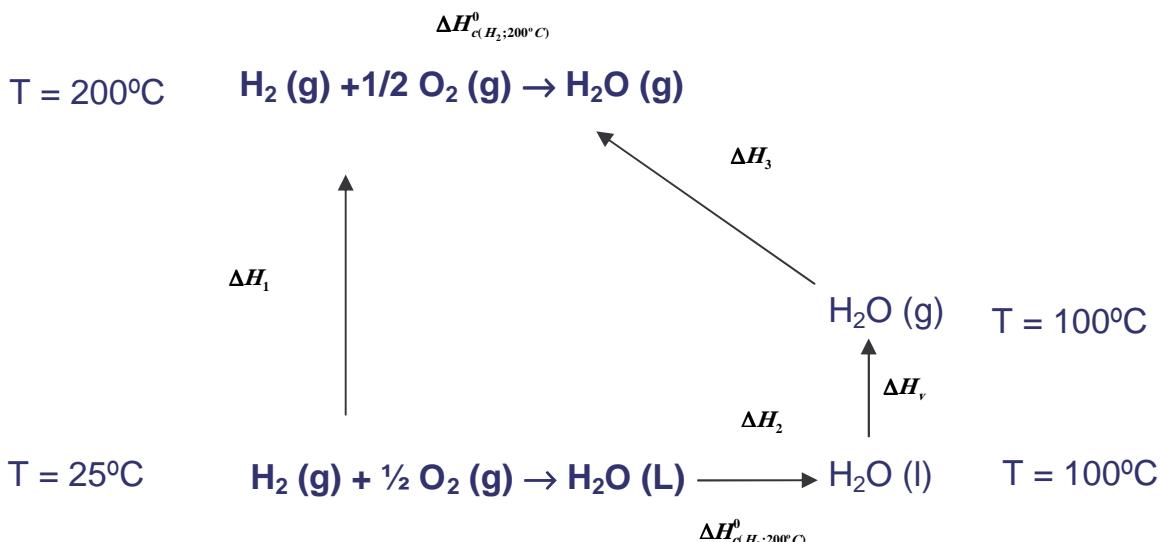




Tema 13.- Termoquímica

Problema 1

Calcule el calor de combustión estándar para el H₂ a 200°C, a partir de los siguientes datos: ΔH°_{comb}(H₂)_{25°C} = -68320 cal mol⁻¹, ΔH°_{vap}(H₂O)_{100°C} = 9720 cal mol⁻¹, c_p(H₂) = 6,62 + 0,81 10⁻³ T cal mol⁻¹ K⁻¹, c_p(O₂) = 6,76 + 0,61 10⁻³ T cal mol⁻¹ K⁻¹, c_p(H₂O)_l = 18 cal mol⁻¹ K⁻¹, c_p(H₂O)_g = 8,22 cal mol⁻¹ K⁻¹.



Donde $\Delta H_{c(H_2;200^\circ C)}^0$ y $\Delta H_{c(H_2;25^\circ C)}^0$ son los cambios de entalpía estándar de combustión del hidrógeno a 200 y 25 °C respectivamente; ΔH_1 , ΔH_2 y ΔH_3 son las variaciones de entalpía existentes en el aumento de temperatura de los reactivos de 25 a 200 °C, en el aumento de temperatura del agua líquida de 25 a 100°C, y en el aumento de temperatura del agua gas de 100 a 200°C y ΔH_v la variación de entalpía que sufre el agua al pasar de líquido a gas (cambio de estado, entalpía de vaporización) a 100°C.

Teniendo en cuenta que la entalpía es una función de estado (Ley de Hess) podremos decir que:

$$\Delta H_{c(H_2; 200^\circ C)}^0 = \Delta H_{c(H_2; 25^\circ C)}^0 + \Delta H_2 + \Delta H_v + \Delta H_3 - \Delta H_1$$

$$\Delta H_2 = \int_{298}^{373} C_p(H_2O)_r \cdot dT = 18 \cdot (100 - 25) = 1350 \text{ (cal} \cdot \text{mol}^{-1})$$

$$\Delta H_v = 9720 \text{ (cal} \cdot \text{mol}^{-1})$$

$$\Delta H_3 = \int_{373}^{473} C_p(H_2O)_g \cdot dT = 8.22 \cdot (473 - 373) = 822 \text{ (cal} \cdot \text{mol}^{-1})$$

$$\begin{aligned}\Delta H_1 &= \int_{298}^{473} \left[C_p(H_2) + \frac{1}{2} C_p(O_2) \right] \cdot dT = \int_{298}^{473} \left[(6.62 + 0.81 \times 10^{-3} \cdot T) + \frac{1}{2} (6.76 + 0.61 \times 10^{-3} \cdot T) \right] \cdot dT \\ &= \int_{298}^{473} (6.62 + \frac{1}{2} \cdot 6.76) \cdot dT + \int_{298}^{473} (0.81 + \frac{1}{2} \cdot 0.61) \times 10^{-3} \cdot T \cdot dT = 10 \cdot (473 - 298) + 1.115 \times 10^{-3} \cdot (473^2 - 298^2) = 1900.44 \text{ (cal} \cdot \text{mol}^{-1})\end{aligned}$$

$$\Delta H_{c(H_2; 200^\circ C)}^0 = -68320 + 1350 + 9720 + 822 - 1900.44 = 58328 \text{ cal} \cdot \text{mol}^{-1}$$

-58.33 kcal/mol