معادله ترموشیمیایی

یک معادله موازنه شده شیمیایی، که بر اساس شرح تغییر گرمای واکنش در آن نوشته شده باشد، معادلـه ترموشـیمیایی واکـنش نامیـده می شود. برای مثال،

$$C_2H_5OH(l) + 3O_2(g) \rightarrow 2CO_2(g) + 3H_2O(l) + 1367\ KJ$$

۱ مول ۳ مول ۲ مول ۳ مول

معادله ترموشیمیایی واکنش سوختن (مشتعل شدن) یک مول اتانول مایع در دما و فشار معین را شرح می دهد. ضریب ها در معادله موازنه شده ترموشیمیایی باید تعداد مول های هر یک از واکنش دهنده ها و فراورده ها را مشـخص کننـد. بنـابر ایـن، هنگـامی کـه یـک مـول $C_2H_5OH(l)$، با سه مول $O_2(g)$ واکنش می دهند و دو مول $CO_2(g)$ و سه مول $H_2O(l)$، تولید می شود، ۱۳۶۷ KJ گرما آزاد می شود. در واکنش این مقدار را با **مول واکنش** نشان می دهیم، که آن را به صورت کوتاه $mol\ rxn$، $[mol_{(واکنش)}]$ می نویسیم. این توصـیف بـه مـا اجازه می دهد تا ضریب های مناسب گوناگون را به کار ببریم.

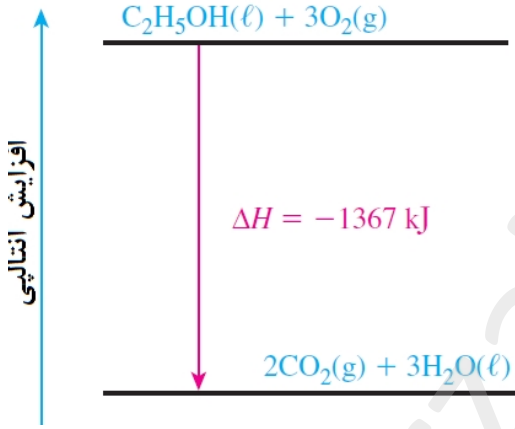
و به همین ترتیب ، $\frac{\text{گرمای آزاد شده } 1367\ KJ}{mol\ rxn}$ ، $\frac{2\ mol\ CO_2(g)}{mol\ rxn}$ ، $\frac{1\ mol\ C_2H_5OH(l)}{mol\ rxn}$

معادله ترموشیمیایی بیشتر به صورت زیر نوشته می شود.

$$C_2H_5OH(l) + 3O_2(g) \rightarrow 2CO_2(g) + 3H_2O(l) \qquad \Delta H = -1367\ KJ/mol\ rxn$$

علامت منفی نشانه یک واکنش گرماده است (با تولید گرما همراه است).

❖ گرمای آزاد شده در واکنش $HCl(aq)$ با $NaOH(aq)$ موجب افزایش دمای محلول می شود.



همواره ΔH را تغییر آنتالپی برای واکنش نوشته شده در نظر می گیریم؛ که برابر است با، (**مول واکنش**)/(تغییر آنتالپی)، در این جـا مـول واکنش، تعداد مول های هر ماده به وسیله ضریب ها در واکنش موازنه شده نشان داده شده است.

بنابر این، می توانیم از ضریب های گوناگون در تفسیر معادله ترموشیمیایی استفاده کنیم.

$$\frac{\text{تولید شده } 1367\ KJ}{\text{تولید شده } 3\ mol(l)} = \frac{\text{تولید شده } 1367\ KJ}{\text{تولید شده } 2\ mol\ CO_2} = \frac{\text{تولید شده } 1367\ KJ}{\text{مصرف شده } 3\ mol\ O_2(l)} = \frac{\text{تولید شده } 1367\ KJ}{\text{مصرف شده } mol\ C_2H_5OH(l)} = \frac{\text{تولید شده } 1367\ KJ}{\text{مول واکنش}}$$

واکنش برگشت در شرایط یکسان به ۱۳۶۷ KJ گرما نیاز دارد.

$$1367\ KJ + 2CO_2(g) + 3H_2O(l) \rightarrow C_2H_5OH(l) + 3O_2(g)$$

این یک واکنش گرماگیر با $\Delta H = +1367\ KJ$ می باشد.

$$2CO_2(g) + 3H_2O(l) \rightarrow C_2H_5OH(l) + 3O_2(g) \qquad \Delta H = +1367\ KJ/mol\ rxn$$

اهمیت دارد که قراردادهایی در مورد معادله های ترموشیمیایی را به یاد آوریم.

۱. ضریب های موازنه معادله ترموشیمیایی به تعداد مول های واکنش دهنده ها و فراورده ها در واکنش اشاره می کنند. در ترمودینامیک برای شرح معادله واکنش، هرگز تعداد مول ها تفسیر نمی شود. بنابر این طبق قرارداد، نوشتن ضریب ها به صورت کسری به جای اعداد صحیح قابل قبول است. اما بیشتر شیمی دان ها ترجیح می دهند از کوچک ترین اعداد صحیح برای ضریب ها استفاده کنند.

۲. مقدار عددی ΔH (یا هر تغییر ترمودینامیکی دیگر) به تعداد مول های مواد مشخص شده در معادله موازنه شده مربوط است. این مقدار تغییر برای یک **مول واکنش** در نظر گرفته می شود. بنابر این می توانیم ΔH را با واحد "انرژی/$mol\ rxn$" بیان کنیم. برای اختصار، واحد ΔH برخی اوقات به صورت KJ/mol یا حتی KJ نوشته می شود. اهمیت ندارد چه واحدهایی استفاده شوند، قطعا نظر شما تغییر ترمودینامیکی برای هر **مول واکنش** در معادله شیمیایی موازنه شده در حال بررسی است. اگر مقدارهای متفاوت ماده در واکنش شرکت کرده باشد، در این صورت ΔH (یا تغییرات دیگر) باید متناسب با آن اندازه گیری شود.

۳. حالت فیزیکی همه ذرات اهمیت دارد و باید مشخص شوند. وقتی تغییر فاز رخ می دهد گرمای داده شده یا جذب شده، همچنین تفاوت مقدار گرمای واکنش به فاز واکنش دهنده ها و فراورده ها بستگی دارد.

۴. مقدار ΔH معمولا با تغییر مختصر دما تغییر چندانی نمی کند.

تمرین معادله ترموشیمیایی

وقتی ۲/۶۱ گرم دی متیل اتر CH_3OCH_3، در فشار ثابت می سوزد، $82/5\ KJ$ گرما آزاد می کند. ΔH این واکنش را حساب کنید.

$$CH_3OCH_3(l) + 3O_2(g) \rightarrow 2CO_2(g) + 3H_2O(l)$$

راهکار مقدار گرمای آزاد شده در آزمایش را مطابق با مقدار CH_3OCH_3 در معادله موازنه شده واکنش مقایسه می کنیم.

راه حل

$$\frac{?KJ \text{ گرمای تولید شده}}{mol\ rxn} = \frac{82.5\ KJ \text{ گرمای تولید شده}}{2.61\ g\ CH_3OCH_3} \times \frac{46.0\ g\ CH_3OCH_3}{1\ mol\ CH_3OCH_3} \times \frac{1\ mol\ CH_3OCH_3}{mol\ rxn} \qquad \Delta H = -1450\ KJ/mol\ rxn$$

چون گرماده تولید شده است، می دانیم واکنش گرماده است بنابر این مقدار ΔH منفی می شود.

$$\Delta H = -1450\ KJ/mol\ rxn$$

تمرین معادله های ترموشیمیایی

۵۰/۰ میلی لیتر نمونه ای از محلول ۰/۴۰۰ مولار مس (II) سولفات با دمای $23/35^\circ C$ با ۵۰/۰ میلی لیتر محلول ۰/۶۰۰ مولار سدیم هیدروکسید در همان دمای $23/35^\circ C$ درون گرماسنج لیوانی مخلوط می شوند. پس از انجام واکنش، دمای نهایی به $25/23^\circ C$ می رسد. چگالی محلول نهایی $1/02\ g/mL$ است. معادله ترموشیمیایی را برای این واکنش بنویسید. فرض کنید ظرفیت گرمایی محلول تقریبا با آب خالص $4/184\ J/g.^\circ C$ برابر است. (راهنمایی: تمام $NaOH$ در واکنش مصرف می شود اما از $CuSO_4$ مقداری باقی می ماند.)

$$CuSO_4(aq) + 2NaOH(aq) \rightarrow Cu(OH)_2(s) + Na_2SO_4(aq)$$

راهکار چون NaOH به طور کامل در واکنش مصرف شده است، باید تعیین کنیم با انجام واکنش، چند مول از آن مصرف شده است. نخست حجم ها را بر حسب لیتر جمع می کنیم، غلظت محلول سدیم هیدروکسید بر حسب mol/L (مولاریته) از روی تعداد مول های آن در مخلوط تعیین می شود. مقدار گرمای آزاد شده در آزمایش را مطابق تعداد مول های NaOH در معادله موازنه شده واکنش مقایسه می کنیم.

$$؟\,\text{mol NaOH} = ۰/۰۵۰۰\ \text{L} \times \frac{0.600\ \text{mol NaOH}}{1.00\ \text{L}} = ۰/۰۳۰۰\ \text{mol NaOH}$$

$$\frac{?\text{KJ گرمای آزاد شده}}{\text{mol } rxn} = \frac{0.846\ \text{KJ گرمای تولید شده}}{0.0300\ \text{mol NaOH}} \times \frac{2\ \text{mol NaOH}}{\text{mol } rxn} = \frac{56.4\ \text{KJ گرمای تولید شده}}{\text{mol } rxn}$$

بنابراین وقتی واکنش به صورت نمایش داده شده به وسیله معادله موازنه شده شیمیایی انجام می شود، ۵۶/۴ KJ گرما آزاد می کند. یادآوری می کنیم واکنش گرماده مقدار ΔH منفی دارد، معادله ترموشیمیایی واکنش را می نویسیم.

$$CuSO_4(aq) + 2NaOH(aq) \rightarrow Cu(OH)_2(s) + Na_2SO_4(aq) \quad \Delta H_{rxn} = -۵۶/۴\ \text{KJ/mol } rxn$$

تمرین مقدار گرمای تولید شده

وقتی فلز آلومینیم در معرض اکسیژن هوا قرار گیرد (مثل درب و پنجره آلومینیومی)، به آلومینیم اکسید، اکسایش می یابد. چه مقدار گرما از اکسایش کامل ۲۴/۲ گرم آلومینیم در دمای ۲۵°C و فشار ۱ atm تولید می شود؟ معادله ترموشیمیایی واکنش به صورت زیر است.

$$4Al(s) + 3O_2(g) \rightarrow 2Al_2O_3(s) \qquad \Delta H = -۳۳۵۲\ \text{KJ/mol } rxn$$

راهکار معادله ترموشیمیایی به ما می گوید ۳۳۵۲ KJ گرما به ازای هر **مول واکنش** آزاد می شود، در معادله ۴ مول آلومینیم واکنش داده است. ۲۴/۲ گرم Al را به مول تبدیل می کنیم و سپس تعداد کیلوژول معادل با تعداد مول Al مورد استفاده به ازای آن را حساب می کنیم.

$$\frac{-3352\ \text{KJ}}{\text{mol rxn}} \quad \text{و} \quad \frac{1\ \text{mol } rxn}{4\ \text{mol Al}}$$

راه حل برای ۲۴/۲ g Al

$$؟\,\text{KJ} = ۲۴/۲\ \text{g Al} \times \frac{1\ \text{mol Al}}{27.0\ \text{g Al}} \times \frac{1\ \text{mol } rxn}{4\ \text{mol Al}} \times \frac{-3352\ \text{KJ}}{\text{mol}} = -۷۵۱\ \text{KJ}$$

این محاسبه به ما می گوید به ازای اکسایش ۲۴/۲ گرم آلومینیم ۷۵۱ KJ گرما در محیط آزاد می شود.

حل مسئله هایی از نوع مول واکنش

به خاطر داشته باشید معادله ترموشیمیایی می تواند ضریب های متفاوت (تعداد مول) از واکنش دهنده ها و فراورده های مختلف داشته باشد، که نیاز نیست برابر یک باشند. در تمرین بالا ***یک مول واکنش***، معادل ۴ مول Al(s)، ۳ مول O2(g)، و ۲ مول Al2O3(s) است.

تمرین ها

۱ چرا باید حالت فیزیکی همه واکنش دهنده ها و فراورده ها در معادله ترموشیمیایی واکنش نشان داده شود؟

۲ هر یک از فرایندهای زیر را به دو دسته گرماده و یا گرماگیر تقسیم بندی کنید.

آ) ذوب یخ ب) سوختن بنزین

پ) متراکم شدن بخار ت) واکنشی با $\Delta H = -۵۰\ KJ$

۳ مفهوم واکنش ترموشیمیایی زیر را توضیح دهید.

$$C_۲H_۴(g) + ۳O_۲(g) \rightarrow ۲CO_۲(g) + ۲H_۲O(l) \qquad \Delta H = -۱۴۱۱\ KJ$$

۴ توضیح دهید چرا نمی توان آنتالپی را به تنهایی اندازه گیری کرد و تغییر آنتالپی اندازه گیری می شود؟

۵ متان $CH_۴(g)$ و اوکتان $C_۸H_{۱۸}(l)$، مهمترین ترکیب هایی هستند که به عنوان سوخت فسیلی استفاده می شوند. تغییر آنتالپی سوختن ۱ مول متان $۸۹۰\ KJ-$ و برای ۱ مول اوکتان $۵۴۶۶\ KJ-$ است. کدام سوخت انرژی بیش تری به ازای سوختن یک گرم تولید می کند؟ تفاوت انرژی تولید شده به ازای سوختن یک گرم ترکیب چقدر است؟

۶ درون یک گرماسنج آمونیوم نیترات جامد$NH_۴NO_۳(s)$، به آب افزوده می شود. در نتیجه دمای محلول درون گرماسنج نسبت به دمای اولیه آب کاهش می یابد. که نشان می دهد این فرایند گرماگیر است.

$$NH_۴NO_۳(s) + \text{گرما} \rightarrow NH_۴^{+}(aq) + NO_۳^{-}(aq)$$

اگر گرماسنج کاملا ایزوله باشد، (هیچ گرمایی نگیرد و از دست ندهد) گرمایی که آمونیوم نیترات در فرایند انحلال در آب می گیرد از کجا تامین می شود؟

۷ تغییر آنتالپی برای واکنش زیر $۳۹۳/۵\ KJ-$ است.

$$C(s\text{، گرافیت}) + O_۲(g) \rightarrow CO_۲(g)$$

تغییر آنتالپی مشاهده شده وقتی ۳/۰۰ گرم کربن (گرافیت) در اکسیژن اضافی می سوزد چقدر است؟

پاسخ: پ) $۹۸/۳\ KJ-$

۸ معادله ترموشیمیایی واکنش سوختن متان که یکی از ترکیب های مهم تشکیل دهنده گاز طبیعی می باشد به صورت زیر است.

$$CH_۴(g) + ۲O_۲(g) \rightarrow CO_۲(g) + ۲H_۲O(g) \qquad \Delta H = -۸۹۰\ KJ$$

تغییر آنتالپی واکنش هنگامی که ۱/۰۰ گرم متان در اکسیژن اضافی می سوزد چقدر است؟

پاسخ: پ) $۵۵/۵\ KJ-$

۹ یکی از مراحل تهیه سولفوریک اسید تبدیل $SO_۲(g)$ به $SO_۳(g)$ است. معادله واکنش ترموشیمیایی در این فرایند به صورت زیر است.

$$SO_۲(g) + \frac{۱}{۲}O_۲(g) \rightarrow SO_۳(g) \qquad \Delta H = -۹۸/۹\ KJ$$

در مرحله دوم $SO_۳$ با $H_۲O$ ترکیب شده و $H_۲SO_۴$ تولید می کنند.

تغییر آنتالپی واکنش را برای تولید $۱/۰۰\ Kg$ گاز $SO_۳$ حساب کنید. پاسخ: آ) $۱۲۴۰\ KJ-$

۱۰ واکنش ترمیت با تولید مقدار زیادی گرما همراه است، همچنین در این واکنش فلز آهن به صورت مذاب تولید می شود.

$$۲Al(s) + Fe_۲O_۳(s) \rightarrow ۲Fe(s) + Al_۲O_۳(s) \qquad \Delta H = -۸۵۲\ KJ$$

تغییر آنتالپی واکنش اگر $۵۰/۰$ گرم Al با آهن (III) اکسید اضافی واکنش دهند چقدر است؟ پاسخ: $۷۸۹\ KJ-$

۱۱ از سوختن ۱/۰۰ مول اوکتان مایع $(C_۸H_{۱۸})$، یکی از ترکیب های اصلی سازنده بنزین، در اکسیژن اضافی طی یک واکنش گرماده مقدار $۵/۴۶ \times ۱۰^{۳}\ KJ$ گرما تولید می شود.

آ) معادله ترموشیمیایی را برای این واکنش بنویسید.

ب) تغییر آنتالپی واکنش را به ازای سوختن ۱۰/۰ گرم اوکتان حساب کنید. پاسخ: ب) $۴۷۸\ KJ-$

۱۲ یکی دیگر از واکنش هایی که برای پیش راندن موشک استفاده می شود واکنش زیر است.

$$2N_2H_4(g) + N_2O_4(g) \rightarrow 3N_2(g) + 4H_2O(g)$$

مزیت این واکنش این است که فراورده سمی تولید نمی کند، همچنین آلاینده های خطرناک انتشار نمی دهد. هنگامی که ۱۰/۰ گرم N_2O_4 مایع واکنش می دهد، ۱۲۴ KJ گرما آزاد می شود. تغییر آنتالپی، ΔH واکنش را برای حالتی که یک مول N_2O_4 در واکنش شرکت کند حساب کنید.

پاسخ: ب) $-1/14 \times 10^3$ KJ

۱۳ از واکنش یک مول $O_2(g)$ و یک مول $N_2(g)$، در یک واکنش گرماگیر با $\Delta H = +181/8$ KJ مقدار ۲ مول $NO(g)$ تولید می شود. تغییر آنتالپی واکنش را هنگامی که ۲/۲۰ گرم $N_2(g)$ با اکسیژن اضافی واکنش می دهند حساب کنید.

پاسخ: +۱۴/۳ Kj

۱۴ از واکنش ۲ مول $Fe(s)$ با ۱ مول $O_2(g)$، ۲ مول $FeO(s)$ به همراه ۵۴۴ KJ گرما تولید می شود. تغییر آنتالپی واکنش را به ازای تولید ۱۰۰/۰ گرم FeO به دست آورید.

پاسخ: -۳۷۹ KJ

۱۵ گازول، مخلوطی از الکل اتانول و بنزین پیشنهاد شده است به عنوان یک سوخت برای کمک به نگه داری منابع نفت خام. این سوخت به صورت محدود در دسترس است. معادله ترموشیمیایی سوختن اتانول به صورت زیر است.

$$C_2H_5OH(l) + 3O_2(g) \rightarrow 2CO_2(g) + 3H_2O(l) \quad \Delta H = 1366/8 \text{ KJ}$$

تغییر آنتالپی این واکنش را هنگامی که ۲/۰۰ گرم اتانول می سوزد حساب کنید. پاسخ: -۵۳/۹ KJ

۱۶ تغییر آنتالپی هنگامی که ۱ مول متان CH_4 می سوزد، برابر با ۸۹۰ KJ- است. اگر آنتالپی تبخیر ۱ مول آب ۴۴/۰ KJ باشد، چند گرم متان باید بسوزد تا ۱/۰۰ گرم آب را بخار کند؟

پاسخ: ۰/۰۴۴۰ گرم

۱۷ ۰/۴۷۰ گرم نمونه ای از منیزیم با ۲۰۰ گرم محلول رقیق HCl درون یک گرماسنج لیوانی واکنش می دهند. در این واکنش $MgCl_2(aq)$ و $H_2(g)$ تولید می شود. با انجام واکنش دمای درون گرماسنج به اندازه $10/9^\circ C$ افزایش می یابد. با فرض این که این مخلوط گرمای ویژه یکسان و برابر گرمای ویژه آب داشته باشد و جرم آن را ۲۰۰ گرم در نظر بگیریم؛

آ) تغییر آنتالپی واکنش را حساب کنید. این واکنش گرماده است یا گرماگیر؟

ب) معادله واکنش انجام را بنویسید و ΔH واکنش را به ازای مصرف یک مول Mg به دست آورید.

پاسخ: آ) ۹/۱۲ Kj- ، گرماده ب) -۴۷۲ KJ

۱۸ با انحلال ۶/۰۰ گرم کلسیم کلرید $CaCl_2$، در ۳۰۰ میلی لیتر آب دمای محلول به اندازه $3/43^\circ C$ افزایش می یابد. با فرض اینکه گرمای ویژه محلول $4/18\ J.g^{-1}.K^{-1}$ و جرم محلول ۳۰۶ گرم باشد

آ) تغییر آنتالپی انحلال $CaCl_2$ در آب را حساب کنید. این فرایند گرماده است یا گرماگیر؟

ب) ΔH مولی انحلال را برای فرایند زیر حساب کنید.

$$CaCl_2(s) \xrightarrow{H_2O} Ca^{2+}(aq) + 2Cl^-(aq)$$

۱۹ هنگامی که ۲/۳۰ گرم نمونه ای از منیزیم با هیدروکلریک اسید رقیق واکنش می دهند، ۱۶/۲۵ KJ گرما آزاد می شود. تغییر آنتالپی را برای واکنش ترموشیمیایی زیر تعیین کنید.

$$Mg(s) + 2HCl(aq) \rightarrow MgCl_2(aq) + H_2(g) \quad \Delta H = ?$$

پاسخ: -۱۷۲ KJ

۲۰ چند گرم اتن $C_2H_4(g)$، باید بسوزد تا ۳۴۲۰ KJ گرما تولید کند؟ آنتالپی مولی سوختن اتن $1410/1\ KJ.mol^{-1}$- می باشد.

پاسخ: ۶۸/۱ گرم