

Λύσεις 5^{ου} σετ ασκήσεων

ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι

(1) Η αντίδραση ωραγματωποιείται υπό συνθήκες σταθερής πίεσης,

$$q_p = \Delta_r H^\circ = -285,4 \text{ KJ}$$

Αλλαξιοδωσία $\Delta \nu_{\text{αερίου}} = +1 \text{ mol}$ στην σχέση:

$$\Delta_r U^\circ = \Delta_r H^\circ - \Delta \nu_{\text{αερίου}} \cdot RT$$

$$\Delta_r U^\circ = -285,4 \text{ KJ} - (1 \text{ mol}) \left(8,314 \cdot 10^{-3} \frac{\text{KJ}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \right) \cdot (298,15 \text{ K})$$

$$\Delta_r U^\circ = -285,4 \text{ KJ} - 2,479 \text{ KJ}$$

$$\Delta_r U^\circ = -287,9 \text{ KJ}$$

Ο υπολογισμός του W μπορεί να γίνει με 2 τρόπους:

$$W = \Delta_r U^\circ - \Delta_r H^\circ$$

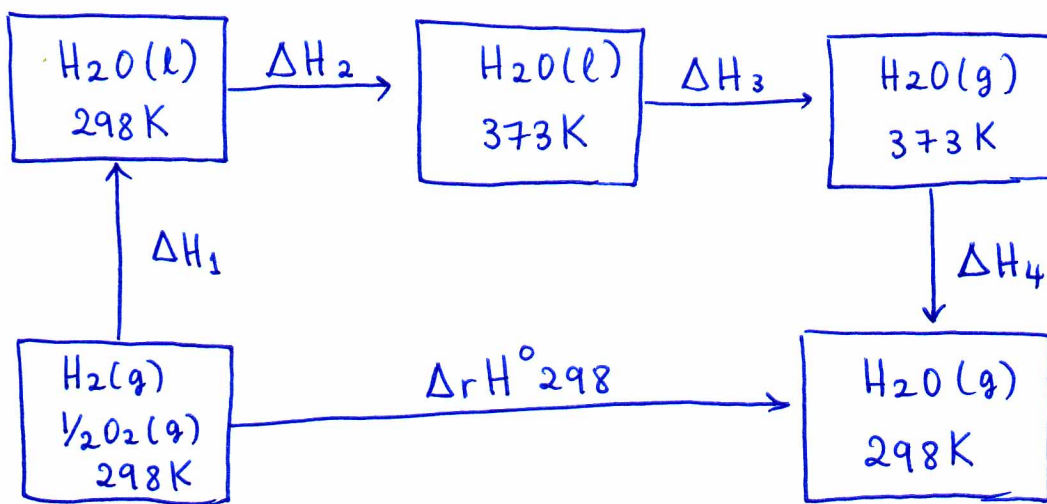
$$W = -287,9 \text{ KJ} - (-285,4 \text{ KJ}) = (-287,9 + 285,4) \text{ KJ}$$

$$W = -2,5 \text{ KJ}$$

2^{ος} τρόπος:

$$\begin{aligned} W &= -P_{\text{εξ.}} \Delta V = - (1.00 \text{ bar}) \cdot \Delta \left(\frac{nRT}{P} \right) \\ &= - \frac{(1.00 \text{ bar}) (8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}) (298 \text{ K}) (\Delta \gamma_{\text{αερίου}})}{1.00 \text{ bar}} \\ &= - (8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}) (298 \text{ K}) (3 \text{ mol} - 2 \text{ mol}) = \\ &= - 2479 \text{ J} = - 2,5 \text{ KJ} \end{aligned}$$

(2) Με βάση το πιο κάτω σχήμα:



$$\Delta_r H_{298}^{\circ} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4$$

$$\Delta H_1 = - 285,830 \text{ KJ} \quad (\text{δεδομένο})$$

$$\begin{aligned} \Delta H_2 &= C_p \Delta T = (75,291 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}) (1 \text{ mol}) (373 \text{ K} - 298 \text{ K}) \\ &= 5646,825 \text{ J} \cdot \frac{10^{-3} \text{ KJ}}{1 \text{ J}} = 5,647 \text{ KJ} \end{aligned}$$

$$\Delta H_3 = (40,883 \text{ KJ} \cdot \cancel{\text{mol}^{-1}}) \cdot 1 \cancel{\text{mol}} = 40,883 \text{ KJ}$$

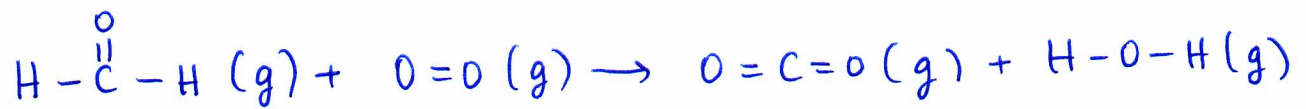
$$\Delta H_4 = C_p \cdot \Delta T = \left(33,577 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \right) (1 \text{ mol}) (298 \text{ K} - 373 \text{ K}) \cdot \frac{10^{-3} \text{ KJ}}{1 \text{ J}}$$

$$= -2,518 \text{ KJ}$$

$$\Delta_r H_{298}^\circ = (-285,830 + 5,647 + 40,883 - 2,518) \text{ KJ}$$

$$\Delta_r H_{298}^\circ = -241,818 \text{ KJ}$$

(3) Για την εξίσωση:



Απειραδοσώπας τα δεδομένα από τον πίνακα 4.3
στην πιο κάτω σχέση:

$$\Delta_r H^\circ = \left(-n_{\text{δεσμών}} \cdot E_{\text{δεσμοί}} \right)_{\text{προϊόντων}} + \left(n_{\text{δεσμών}} \cdot E_{\text{δεσμών}} \right)_{\text{αριθρ.}}$$

$$\Delta_r H^\circ = - \left[(2 \text{ mol}) \cdot E(\text{C}=\text{O}) + (2 \text{ mol}) \cdot E(\text{O}-\text{H}) \right] +$$
$$\left[(2 \text{ mol}) E(\text{C}-\text{H}) + (1 \text{ mol}) E(\text{C}=\text{O}) + (1 \text{ mol}) \cdot E(\text{O}=\text{O}) \right]$$

$$-527 \text{ KJ} = - \left[(2 \text{ mol}) \cdot \left(803 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}} \right) + (2 \text{ mol}) \left(464 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}} \right) \right] + \left[(2 \text{ mol}) \left(414 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}} \right) \right]$$
$$+ \left[(1 \text{ mol}) \cdot E(\text{C}=\text{O}) + (1 \text{ mol}) \left(498 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}} \right) \right]$$

$$\Rightarrow -527 \text{ KJ} = - (1606 + 928) + [825 + 498 + E(\text{C}=\text{O})]$$

$$-527 \text{ KJ} = -2534 + 1323 + E(\text{C}=\text{O})$$

$$E(\text{C}=\text{O}) = 1211 - 527 = \underline{\underline{684 \text{ KJ} \cdot \text{mol}^{-1}}}$$

(4) Υπό παρούσες συνθήκες, απευαισθητοποιώντας τα δεδομένα σου σας δίνονται στην σχέση:

$$\Delta_r S^\circ = \gamma(N_2O_4) \cdot S^\circ(N_2O_4) + \gamma(N_2) \cdot S^\circ(N_2) + \gamma(O_2) \cdot S^\circ(O_2)$$

$$\gamma(N_2O_4) = +1, \quad \gamma(N_2) = -1, \quad \gamma(O_2) = -2$$

$$\Delta_r S^\circ = (1 \text{ mol}) \left(304,29 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \right) - \left[(1 \text{ mol}) \left(191,61 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \right) + (2 \text{ mol}) \left(205,138 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \right) \right]$$

$$\Delta_r S^\circ = 304,29 - 191,61 - 410,276 = \underline{\underline{-297,60 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}}}$$

Αφού η αντίδραση υφαισθητοποιείται σε πίεση 0,500 bar

$$\Delta_r S_T = \Delta_r S_T^\circ - R \cdot \Delta n_g \cdot \ln \left(\frac{P}{(\text{bar})} \right)$$

$$\Delta n_g = 1 \text{ mol} - (1 \text{ mol} + 2 \text{ mol}) = -2 \text{ mol}$$

$$\Rightarrow \Delta_r S_T = -297,60 \frac{\text{J}}{\text{K}} - \left(8,314 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \right) (-2 \text{ mol}) \ln 0,500$$

$$\Delta_r S_T = -309,13 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$$

(5) Για την εξίσωση: $\text{CS}_2(\text{l}) \rightarrow \text{CS}_2(\text{g})$

$$\Delta_{\text{vap}}H^\circ = (1\text{mol}) \Delta_f H^\circ(\text{g}) - (1\text{mol}) \Delta_f H^\circ(\text{l})$$

$$\Delta_{\text{vap}}H^\circ = (1\text{mol}) \left(117,36 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) - (1\text{mol}) \left(89,70 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right)$$

$$\underline{\Delta_{\text{vap}}H^\circ = 27,66 \text{ kJ}}$$

$$\Delta_{\text{vap}}S^\circ = (1\text{mol}) S^\circ(\text{g}) - (1\text{mol}) S^\circ(\text{l})$$

$$\Delta_{\text{vap}}S^\circ = (1\text{mol}) \left(237,84 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}} \right) - (1\text{mol}) \left(151,34 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}} \right)$$

$$\underline{\Delta_{\text{vap}}S^\circ = 86,50 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}}$$

$$\Delta_{\text{vap}}G^\circ = \Delta_{\text{vap}}H^\circ - T \cdot \Delta_{\text{vap}}S^\circ$$

$$\Delta_{\text{vap}}G^\circ = 27,66 \text{ kJ} - (298,15 \text{ K}) \cdot \left(86,50 \frac{\text{J}}{\text{K}} \right) \cdot \frac{10^{-3} \text{ kJ}}{1 \text{ J}}$$

$$\boxed{\Delta_{\text{vap}}G^\circ = 1,87 \text{ kJ}}$$

$\Delta_{\text{vap}}G^\circ > 0 \Rightarrow$ Η αντίδραση δεν είναι αυθόρμητη
ως κατεύθυνση ουδέτερη, άρα η υγρή κατάσταση
του CS_2 είναι πιο σταθερή στους 25°C .