

距阵法求焓变

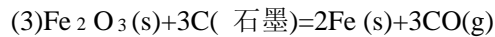
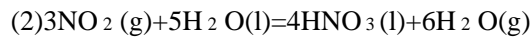
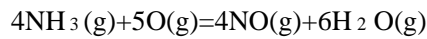
01 生物工程 金亮 (0162023)

相关文献: 王大伟, 诸平, 用矩阵法计算化学反应焓变, 渭南师范学院学报, 2002 (16) 2: 25-28

有关教学内容: 利用盖斯(Germai M Henri Hess)定律, 由给定热化学数据计算化学反应焓变的传统方法枯燥冗长. 而应用矩阵法计算不仅便于理解掌握. 而且可直接应用. 并举例说明了该方法在教学中的使用有关焓的计算。

应用实例:

应用附录有关物质在 25°C 时的标准摩尔生成焓的数据, 计算下列反应再 25°C 时的 $\Delta_r H_m^\theta$ 。(1)



解: (1) 25°C 时 查表得

$\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ 的 $\Delta_f H_m^\theta = -241.818 \text{ kJ/mol}$, $\text{NH}_3(\text{g})$ 的 $\Delta_f H_m^\theta = -46.11 \text{ kJ/mol}$, $\text{NO}(\text{g})$ 的

$\Delta_f H_m^\theta = 90.25 \text{ kJ/mol}$

行距阵 \times 列距阵 (详见逆阵的定义)

$$\Delta_r H_m^\theta =$$

$$[4 \quad 5 \quad 4 \quad 6] \begin{Bmatrix} 46.11 \\ 0 \\ 90.25 \\ -241.818 \end{Bmatrix} = 4 \times 46.11 + 5 \times 0 + 4 \times 90.25 + 6(-241.818) = -905.47 \text{ kJ/mol}$$

可以看出距阵法的式子与 $\Delta_r H_m^\theta = \sum \gamma_B(g) \Delta_f H_m^\theta(B)$ 本质上是相通的。

(2), (3) 同理也可求出。

(2) $\text{NO}_2(\text{g})$, $\text{H}_2\text{O}(\text{l})$, $\text{HNO}_3(\text{l})$, $\text{NO}(\text{g})$ 的 $\Delta_f H_m^\theta$ 分别为

33.18 kJ/mol, -285.830 kJ/mol, -174.10 kJ/mol, 90.25 kJ/mol

$$\Delta_r H_m^\theta = [-3 \quad -1 \quad 2 \quad 1] \begin{matrix} 33.18 \\ -285.830 \\ -174.10 \\ 90.25 \end{matrix} = -71.66 \text{ KJ/mol}$$

(3) $\text{Fe}_2\text{O}_3(\text{s})$, $\text{C}(\text{石墨})$, $\text{Fe}(\text{s})$, $\text{CO}(\text{g})$ 的 $\Delta_f H_m^\theta$ 分别为 -824.2 KJ/mol , 0 KJ/mol , 0 KJ/mol , -110.525

KJ/mol

$$\Delta_r H_m^\theta =$$

$$[-1 \quad -3 \quad 2 \quad 3] \begin{matrix} -824.2 \\ 0 \\ 0 \\ -110.525 \end{matrix} = 4 \times 46.11 + 5 \times 0 + 4 \times 90.25 + 6(-241.818) = -905.47 \text{ KJ/mol}$$