



Scuola di Ingegneria Industriale e dell'Informazione
Insegnamento di **Chimica Generale**
083424 - CCS *CHI* e *MAT*



POLITECNICO DI MILANO



Cicli Termochimici e Legge di Hess (Cap. 5)

Prof. Attilio Citterio

Dipartimento CMIC "Giulio Natta"

<http://iscamap.chem.polimi.it/citterio/it/education/general-chemistry-lessons/>



Cicli Termodinamici e Funzioni di Stato

- **Funzioni termodinamiche di Stato**
- **Cicli termodinamici**
- **Legge di Hess sui calori di reazione**
- **Entalpie di formazione e loro uso**
- **Energie di legame e loro uso**



Calcoli sulle Variazioni di Entalpia

- Calcolo delle variazioni di entalpia per trasformazioni fisiche e chimiche.
 - Valori tabulati di entalpie di reazione (diffusamente misurate con calorimetri).
- Legge di Hess – variazioni di entalpia per sequenze di reazioni.
 - Le variazioni di Entalpia che accompagnano una reazione è la stessa sia che la reazione avvenga in un unico stadio oppure in molti stadi.
 - L'entalpia è una funzione di stato del sistema (non dipende dal cammino per giungere dai reagenti ai prodotti).

Funzioni di Stato e Entalpia

Lo stato di un sistema è la descrizione delle variabili T , P , quantità e tipo delle sostanze nel sistema, ecc.. Lo stato definisce tutte queste quantità, e queste quantità sono specifiche per lo stato.

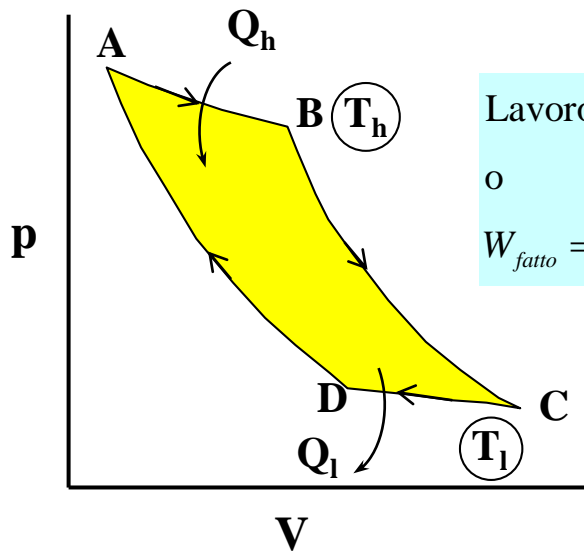
Una proprietà che ha un valore specifico per uno stato si indica col termine **funzione di stato**.

L'entalpia, H , ma anche l'energia interna, U , (e come vedremo l'entropia, S , e l'energia libera, G) è una funzione di stato, e la differenza ΔH si valuta tra stato finale e quello iniziale, indipendentemente dal cammino.

$$\Delta H = H_f - H_i$$

Questo concetto si applica alle reazioni che possono essere spezzate in sotto reazioni e coincide col dire che se si parte da un reagente e si ritorna ad esso per altra via chimica (ciclo chimico), **il bilancio energetico complessivo è nullo** ($\oint H = 0$).

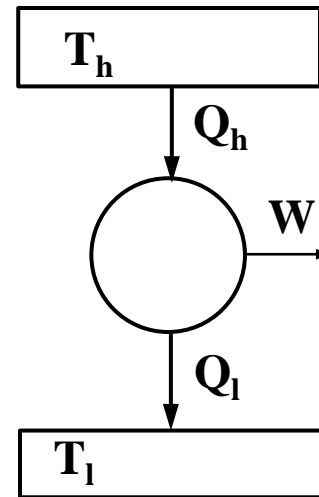
Ciclo di Carnot



$$\text{Lavoro totale} = -\oint pdV$$

o

$$W_{fatto} = \oint pdV$$



Ricordare che $dW = -p dV$ dalla 1^a legge della termodinamica essendo W il lavoro fatto sul sistema (sul motore).

Processo isoterma :

$$Q = -W = \int_1^2 p dV = RT \int_1^2 dV/V = RT \ln(V_2/V_1)$$

Processo adiabatico: Usare $pV^\gamma = \text{costante}$

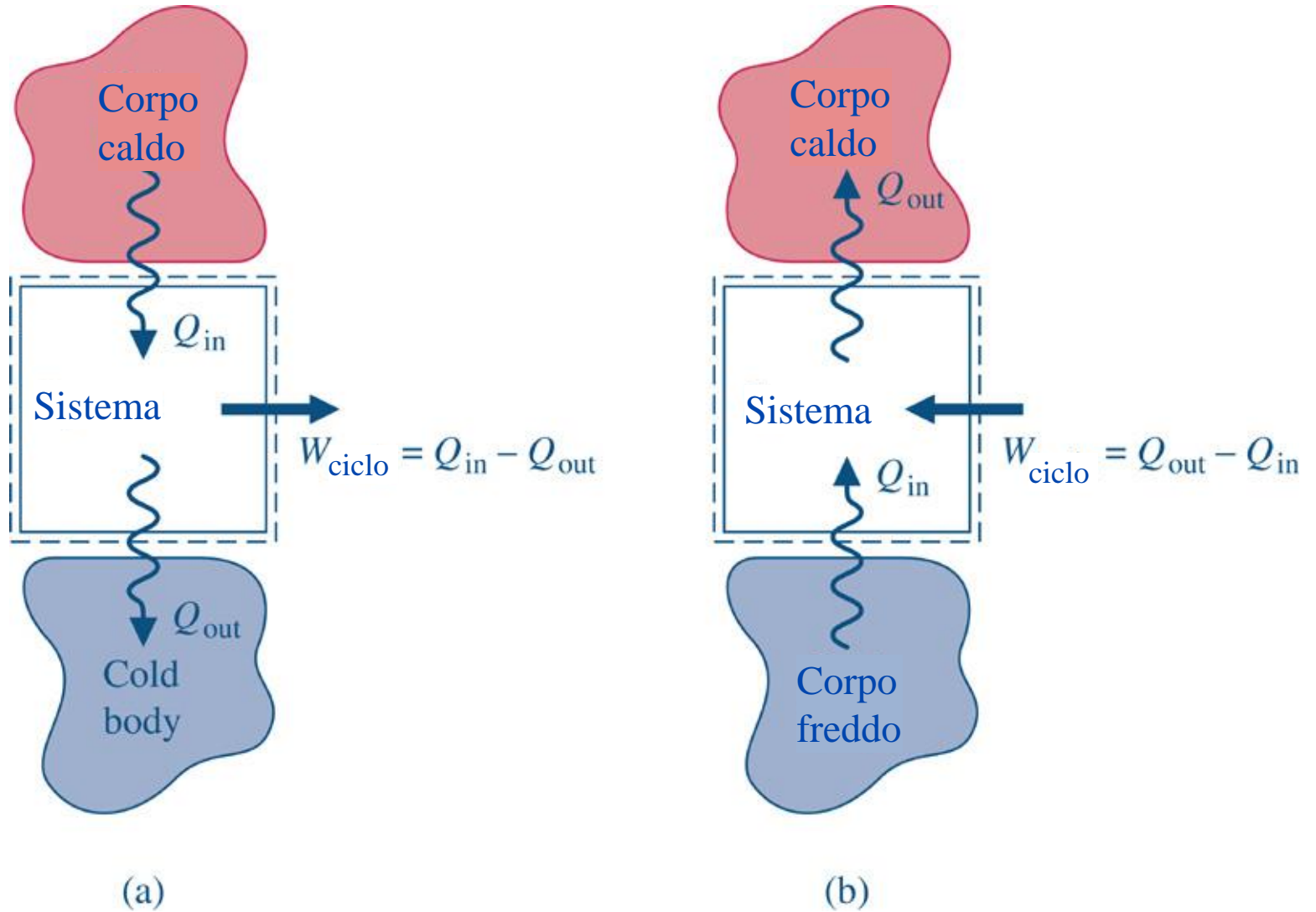
Calcolare il lavoro da:

$$W = -\int_1^2 p dV = -\int_1^2 dV (p_1 V_1^\gamma) / (V^\gamma)$$

e $PV = RT$, dove $R/C_V = \gamma - 1$; in alternativa:

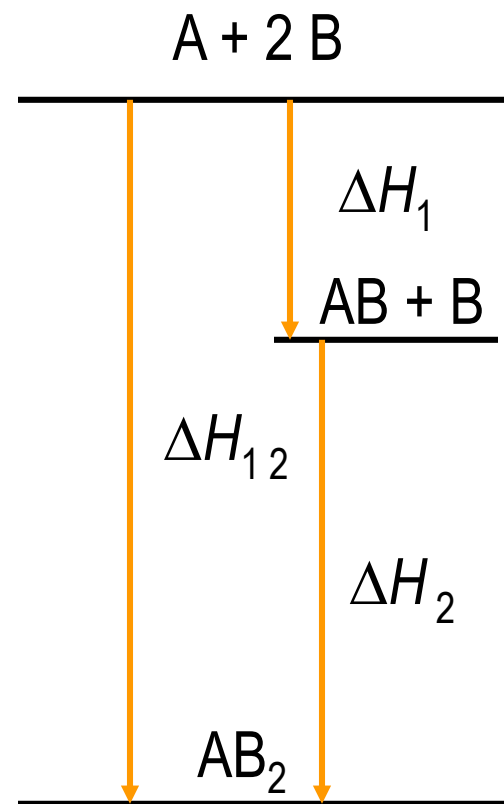
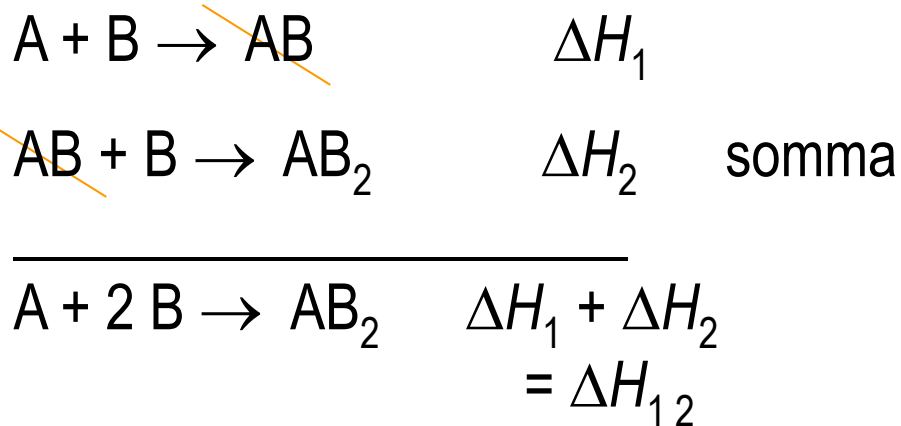
$$W = \Delta E = \int_{T_1}^{T_2} C_V dT$$

processo		Q	W	
A → B	esp. isot.	$Q_h = RT_h \ln \frac{V_B}{V_A} > 0$	$-Q_h$	
B → C	esp. adiab.	0	$C_V (T_l - T_h)$	$\frac{T_h}{T_l} = \left(\frac{V_C}{V_B}\right)^{\gamma-1}$
C → D	comp. isot.	$Q_l = RT_l \ln \frac{V_C}{V_D} < 0$	Q_l	
D → A	comp. adiab.	0	$C_V (T_h - T_l)$	$\frac{T_l}{T_h} = \left(\frac{V_A}{V_D}\right)^{\gamma-1}$
ABCD		$ Q_h - Q_l $	$- Q_h + Q_l $	



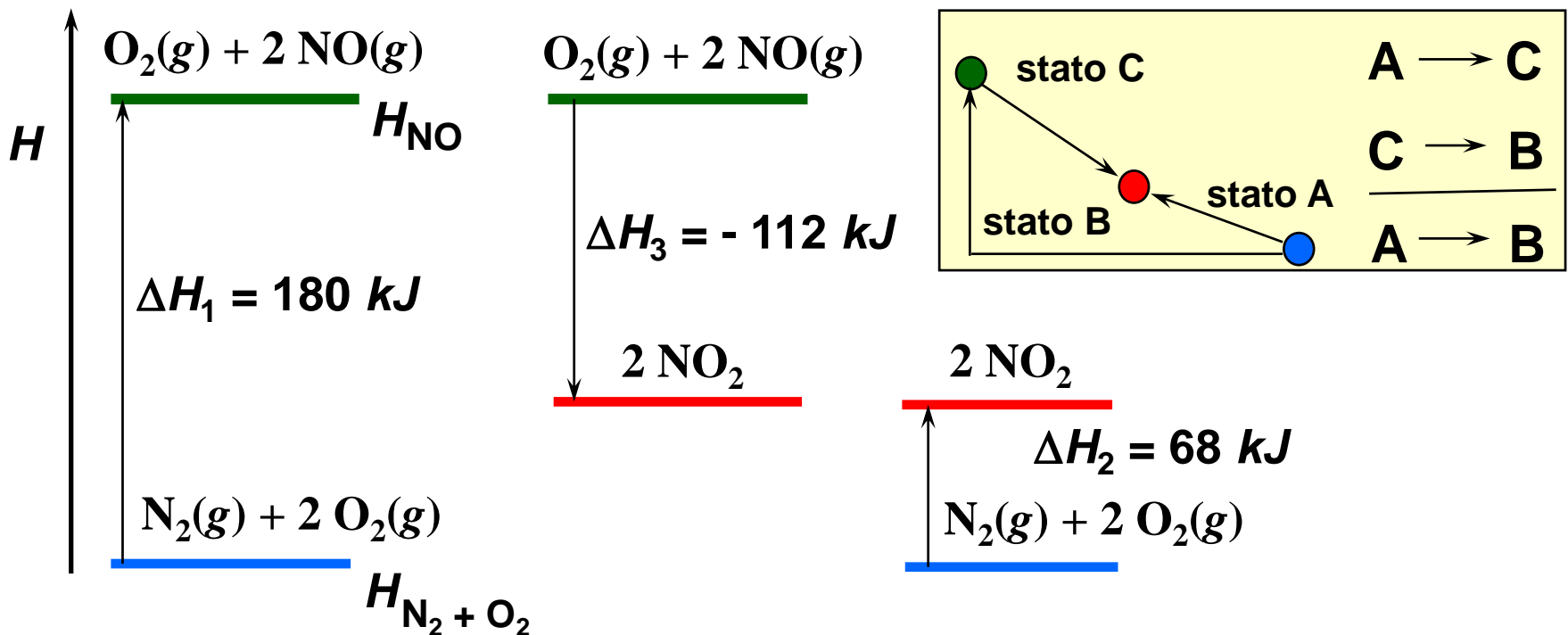
Legge di Hess e Funzione di Stato H

La variazione di entalpia del processo complessivo è la somma delle variazioni d'entalpia dei suoi singoli stadi.



Legge di Hess (H Funzione di Stato)

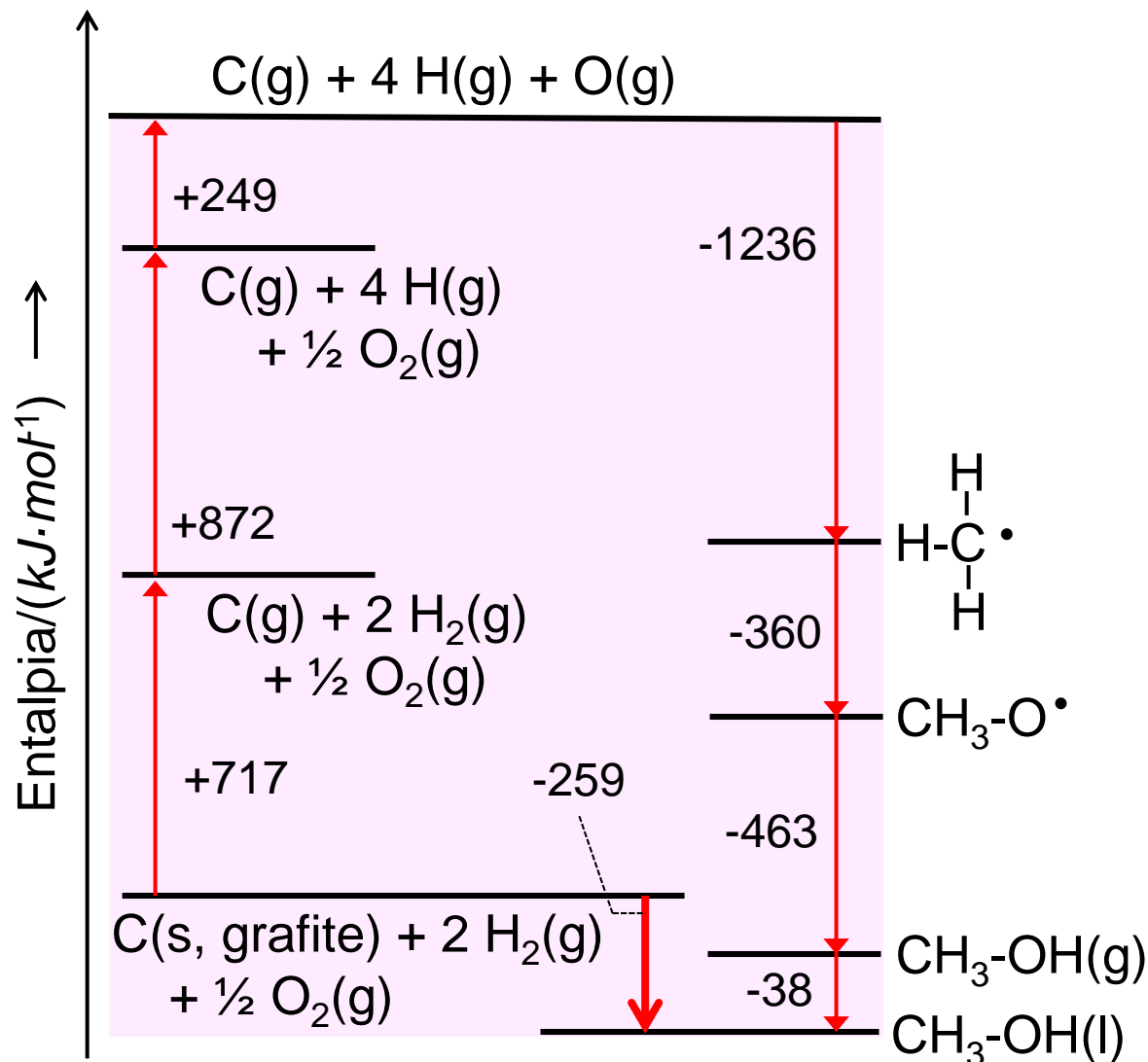
La variazione di entalpia del processo complessivo è la somma delle variazioni d'entalpia dei suoi singoli stadi.





Legge di Hess – Valida anche per Cicli Complessi

Stima dell'entalpia standard a 25°C di reazione per la formazione del metanolo liquido a partire dalle forme stabili degli elementi costituenti, C,H O.





Uso della Legge di Hess

Nell'applicare la legge di Hess:

- 1) Manipolare le equazioni termochimiche in modo tale da ottenere l'equazione complessiva desiderata.
- 2) Ricordare le regole per manipolare le equazioni termochimiche:
 - Specificare sempre gli stati fisici di reagenti e prodotti perché aiutano a determinare le effettive variazioni di entalpia.
 - Se si moltiplica un'equazione per un fattore (n), moltiplicare il valore di ΔH per lo stesso fattore.
 - Invertendo un'equazione si cambia il segno ma non il valore del ΔH .
- 3) Aggiungere il ΔH per ogni stadio dopo adatta manipolazione.
- 4) Il processo è utile per calcolare le entalpie che non si misurano direttamente.



Legge di Hess sulla Somma dei Calori - I

La variazione di entalpia del processo complessivo è la somma delle variazioni d'entalpia dei suoi singoli stadi.

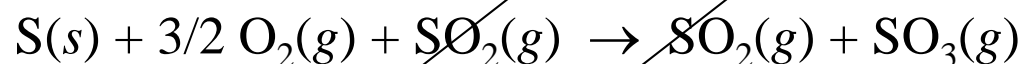
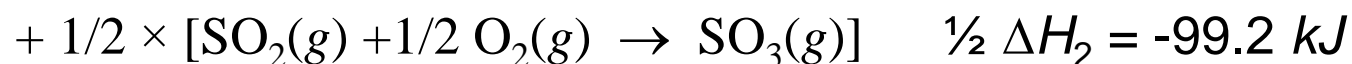
Problema: Calcolare l'energia implicata nell'ossidazione dello zolfo elementare a triossido di zolfo (eq. 3) dalle entalpie delle reazioni 1 e 2:



Legge di Hess sulla Somma dei Calori - II

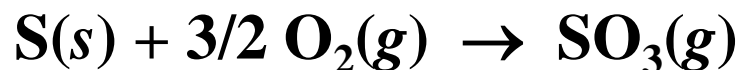
Soluzione.

Per ottenere l'equazione #3 si deve aggiungere la prima reazione a 1/2 della reazione #2, e sommarle:



$\begin{aligned} \Delta H_3 &= -296.8 + (-99.2) \\ &= -396.0 \text{ kJ} \end{aligned}$
--

Quindi:

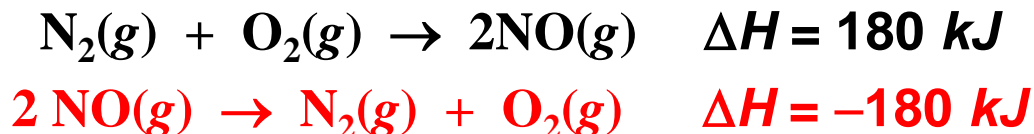


$$\Delta H_f(\text{SO}_3) = -396.0 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

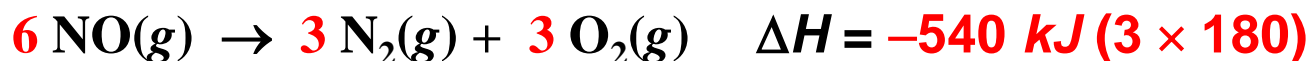


Calcoli Basati sulla Legge di Hess

1. Se si **inverte** una reazione, anche il ΔH inverte il segno.



2. Se si moltiplicano i coefficienti di una reazione per un intero, ΔH si moltiplica per lo stesso intero.





- Calore Standard di Reazione

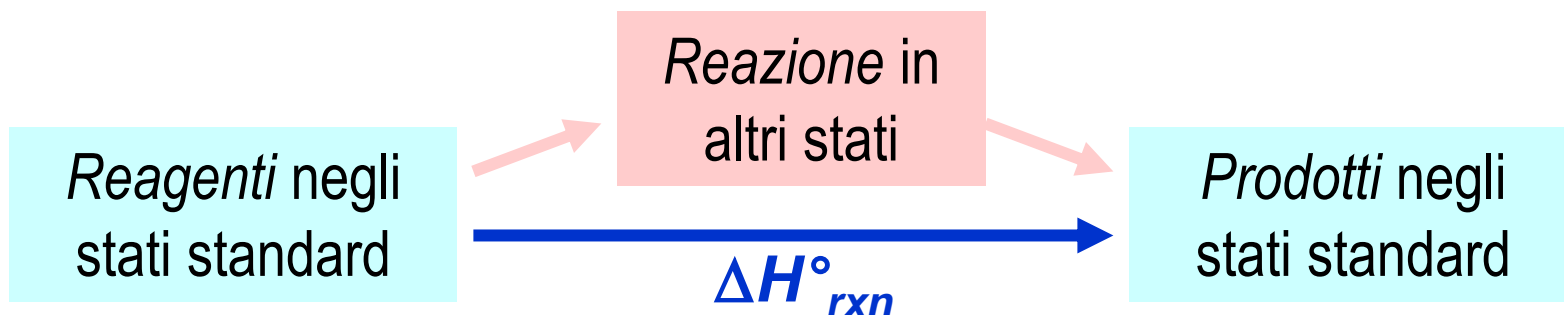
L'entalpia standard di formazione, ΔH_f° , è l'energia della reazione per la formazione di una sostanza nel suo **stato standard** dagli elementi atomici componenti nei loro stati standard.

Per convenzione, le entalpie degli elementi sono 0 nello stato standard, sono cioè prese come riferimento delle loro energie.

Cos'è il Calore “Standard” di Reazione?

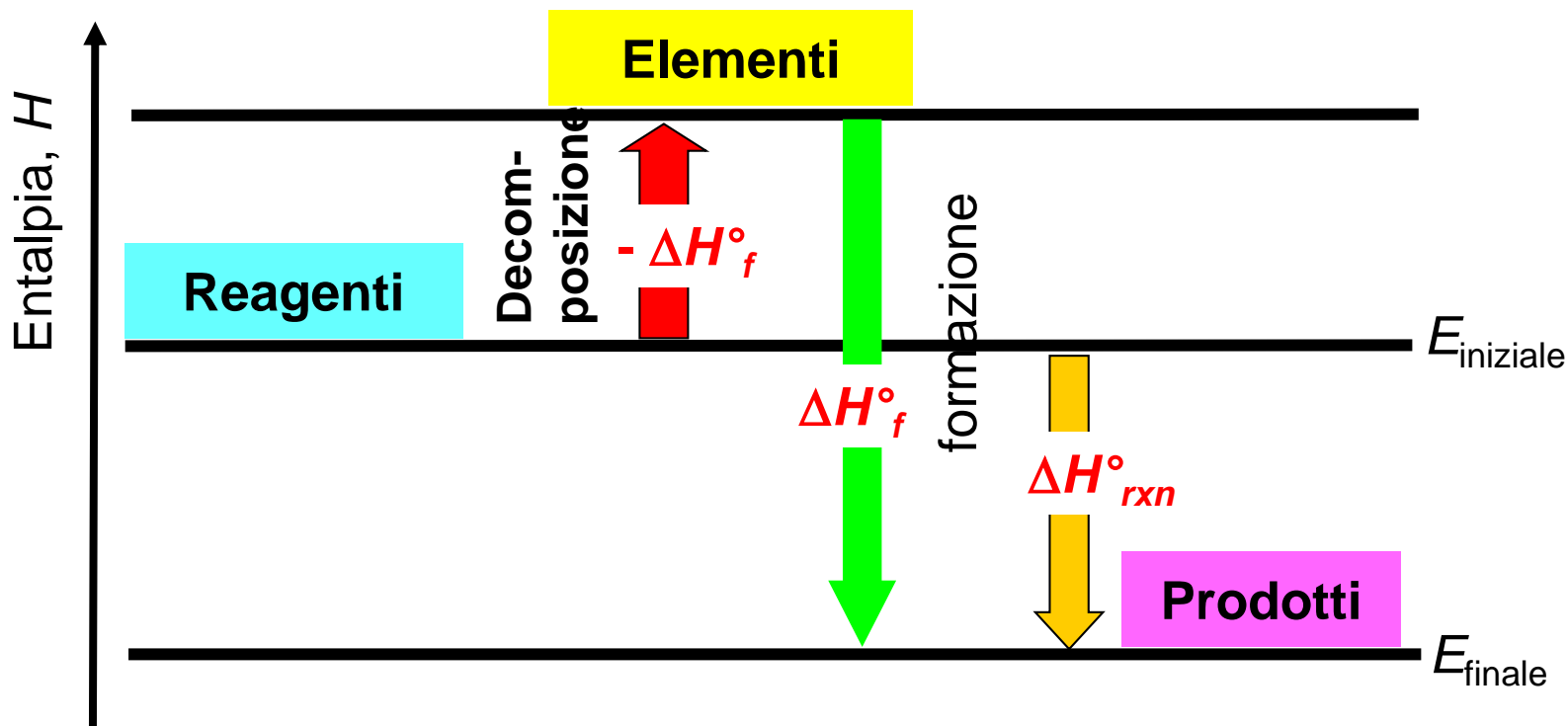
Le variabili Termodinamiche, come il ΔH , variano con le condizioni. Per confrontare i calori di reazione e altri dati termodinamici, si definiscono degli **stati standard**, un insieme particolare di condizioni/concentrazioni.

- Per un gas, lo stato standard è 1 *atm*.
- Per una sostanza in soluzione acquosa, lo stato standard corrisponde ad una concentrazione 1 *M* della soluzione (1 *mol·L⁻¹*).
- Per una sostanza pura, lo stato standard è normalmente la forma più stabile della sostanza ad una specifica temperatura. E' molto comune assumere la temperatura di interesse 25 °C (298.15 *K*).





Processo Generale per Determinare il ΔH°_{rxn} dai Valori di ΔH°_f

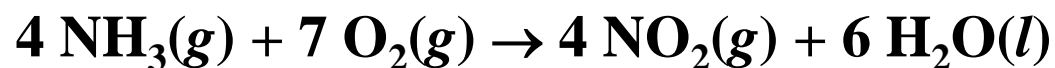


$$-\Delta H^{\circ}_{rxn} = \sum n_p H^{\circ}_{f(\text{prodotti})} - \sum n_r H^{\circ}_{f(\text{reagenti})}$$



Bilanci Entalpici in Reazioni Chimiche

Composto	$\Delta H_f^\circ (kJ \cdot mol^{-1})$
$NH_3 (g)$	- 45.9
$NO_2 (g)$	33.2
$H_2O (l)$	- 285.8
$Al_2O_3 (s)$	- 1676.0
$CO (g)$	- 110.5
$CO_2 (g)$	- 393.5
$NO (g)$	90.3
$C (s, \text{diamante})$	1.9
$C (s, \text{grafite})$	0



$$\begin{aligned}\Delta H &= \sum \Delta H_{f(\text{prodotti})}^0 - \sum \Delta H_{f(\text{reagenti})}^0 \\ &= 4\Delta H_{f(NO_2)}^0 + 6\Delta H_{f(H_2O)}^0 - 4\Delta H_{f(NH_3)}^0 \\ &= 4(+33.2) + 6(-285.8) - 4(-45.9) kJ \cdot mol^{-1} \\ &= -1398.4 kJ \cdot mol^{-1}\end{aligned}$$

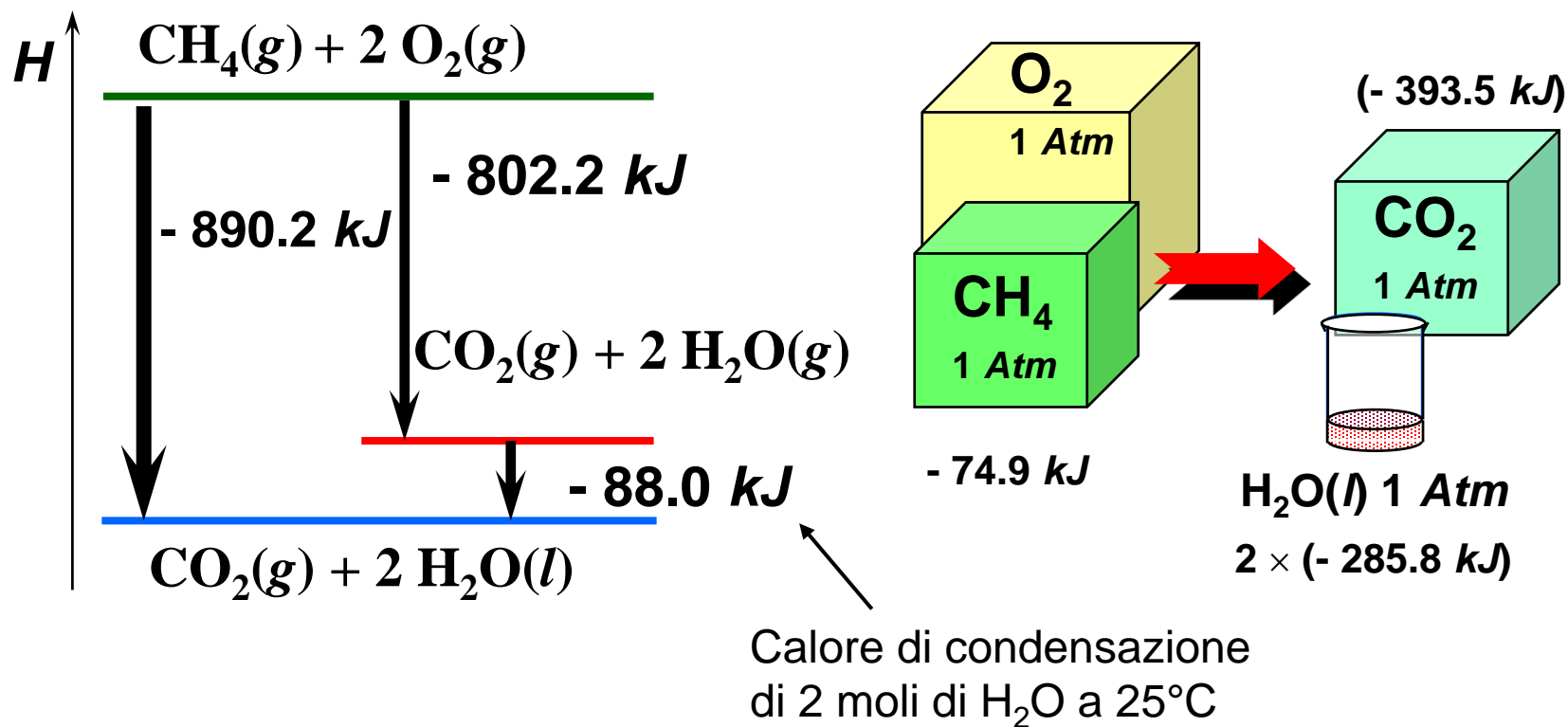
Le entalpie degli elementi sono 0 nei loro stati standard, per convenzione.

Alcuni Calori di Formazione Standard a 25°C (298K)

18

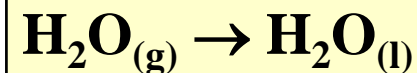
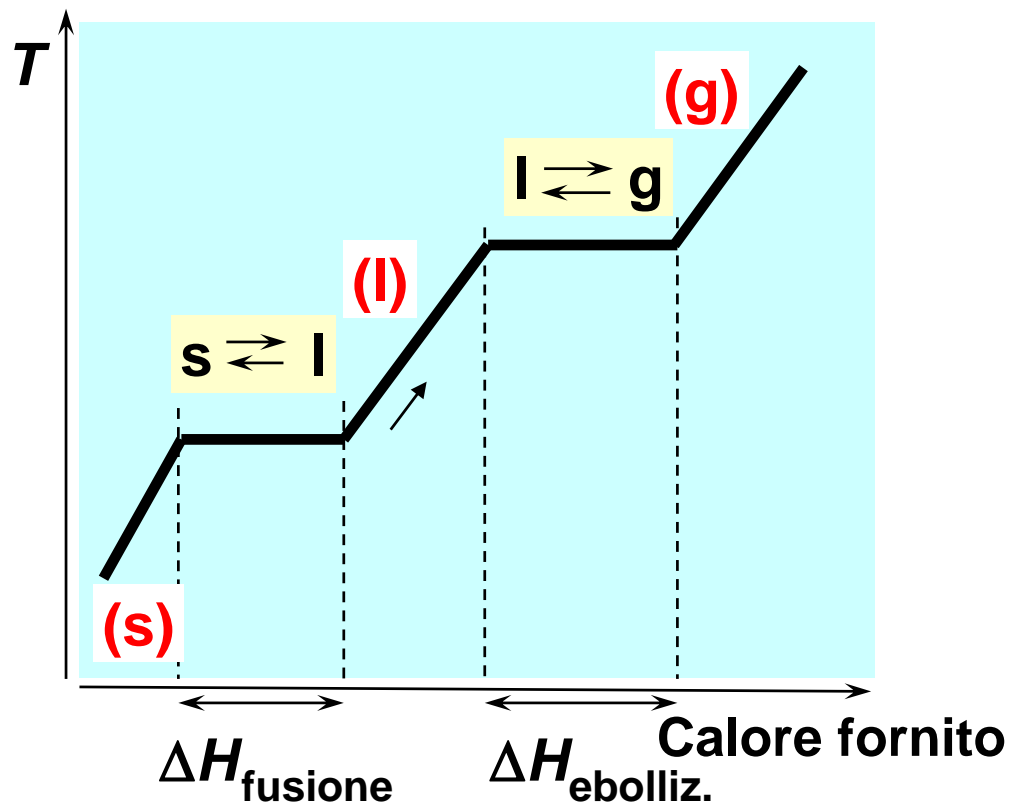
Formula	$\Delta H_f^0(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	Formula	$\Delta H_f^0(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	Formula	$\Delta H_f^0(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$
calcio		Cl ₂ (g)		argento	
Ca(s)	0	HCl(g)	-92.3	Ag(s)	0
CaO(s)	-635.1	idrogeno		AgCl(s)	-127.0
CaCO ₃ (s)	-1206.9	H(g)	218	sodio	
carbonio		H ₂ (g)	0	Na(s)	0
C(grafite)	0	azoto		Na(g)	107.8
C(diamante)	1.9	N ₂ (g)	0	NaCl(s)	-411.1
CO(g)	-110.5	NH ₃ (g)	-45.9	zolfo	
CO ₂ (g)	-393.5	NO(g)	90.3	S ₈ (rombico)	0
CH ₄ (g)	-74.9	ossigeno		S ₈ (monoclino)	2
CH ₃ OH(l)	-238.6	O ₂ (g)	0	SO ₂ (g)	-296.8
HCN(g)	135	O ₃ (g)	143	SO ₃ (g)	-396.0
CS _s (l)	87.9	H ₂ O(g)			
cloro		H ₂ O(l)			
Cl(g)	121.0				

Entalpia di Reazione e Stati di Aggregazione

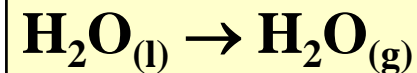




Variazione di Entalpia in Cambiamenti di Stato di Aggregazione



Entalpia di
condensazione
= - 40.7 kJ·mol⁻¹



Entalpia di
ebollizione
= + 40.7 kJ·mol⁻¹

At 100°C!!

$$\Delta H_{T_2-T_1} = \int_{T_1}^{T_2} c_p dT$$

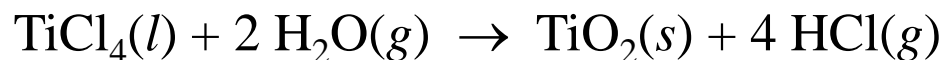
$$\Delta H_{\text{subl}} = \Delta H_{\text{fus}} + \Delta H_{\text{eb}}$$

Entalpia di Vaporizzazione dell'Acqua

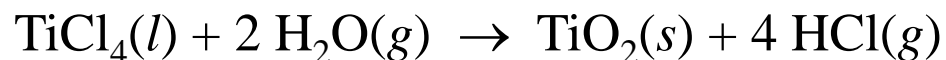
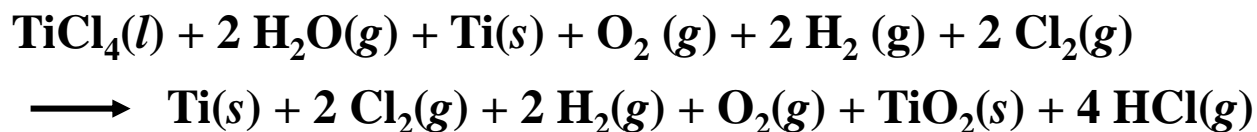
T [°C]	ΔH_{vap} [kJ·mol ⁻¹]	T [°C]	ΔH_{vap} [kJ·mol ⁻¹]
0	45.054	200	34.962
25	43.990	220	33.468
40	43.350	240	31.809
60	42.482	260	29.930
80	41.585	280	27.795
100	40.657	300	25.300
120	39.684	320	22.297
140	38.643	340	18.502
160	37.518	360	12.966
180	36.304	374	2.066

Handbook of Chemistry and Physics, 73rd Ed., Lide, D.R. Ed.; CRC Press: Boca Raton 1992; Chapter 6, pg. 11

Problema: Trovare il calore standard di reazione per il processo:



$\text{Ti}(s) + 2 \text{Cl}_2(g)$	\longrightarrow	$\text{TiCl}_4(l)$	$-\Delta H_f^\circ [\text{TiCl}_4(l)]$
$2 \text{H}_2\text{O}(g)$	\longrightarrow	$2 \text{H}_2(g) + \text{O}_2(g)$	$-2 \Delta H_f^\circ [\text{H}_2\text{O}(g)]$
$\text{Ti}(s) + \text{O}_2(g)$	\longrightarrow	$\text{TiO}_2(s)$	$\Delta H_f^\circ [\text{TiO}_2(s)]$
$2 \text{H}_2(g) + 2 \text{Cl}_2(g)$	\longrightarrow	$4 \text{HCl}(g)$	$4 \Delta H_f^\circ [\text{HCl}(g)]$





$$\Delta H_{rxn}^0 = \sum n_p \Delta H_f^0(\text{prodotti}) - \sum n_r \Delta H_f^0(\text{reagenti})$$

$$\Delta H_{rxn}^0 = 1 \left[\Delta H_f^0 \text{TiO}_2(s) \right] + 4 \left[\Delta H_f^0 \text{HCl}(g) \right] - \left[\Delta H_f^0 \text{TiCl}_4(l) \right] - 2 \left[\Delta H_f^0 \text{H}_2\text{O}(g) \right]$$

$$\Delta H_{rxn}^0 = (-945 \text{ kJ}) + 4(-92 \text{ kJ}) - [(-763 \text{ kJ}) + 2(-242 \text{ kJ})]$$

$$\Delta H_{rxn}^0 = -945 \text{ kJ} - 368 \text{ kJ} - [-763 \text{ kJ} - 484 \text{ kJ}]$$

$$\Delta H_{rxn}^0 = -1313 \text{ kJ} - (-1247 \text{ kJ})$$

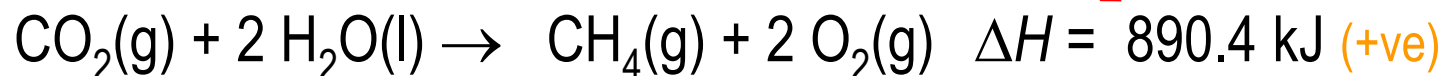
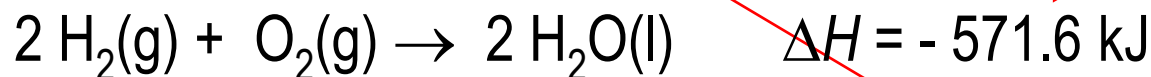
$$\Delta H_{rxn}^0 = -1313 \text{ kJ} + 1247 \text{ kJ} = -66 \text{ kJ}$$

Trovare l'Entalpia Standard di Formazione

L'entalpia di combustione per H_2 , $\text{C}(\text{grafite})$ e CH_4 sono -285.8 , -393.5 , e $-890.4 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ rispettivamente. Calcolare l'entalpia standard di formazione ΔH_f° per CH_4 .

Soluzione: $\text{C}(\text{grafite}) + 2 \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 \quad \Delta H_f^\circ = \underline{\hspace{2cm}}$

Combinando i dati

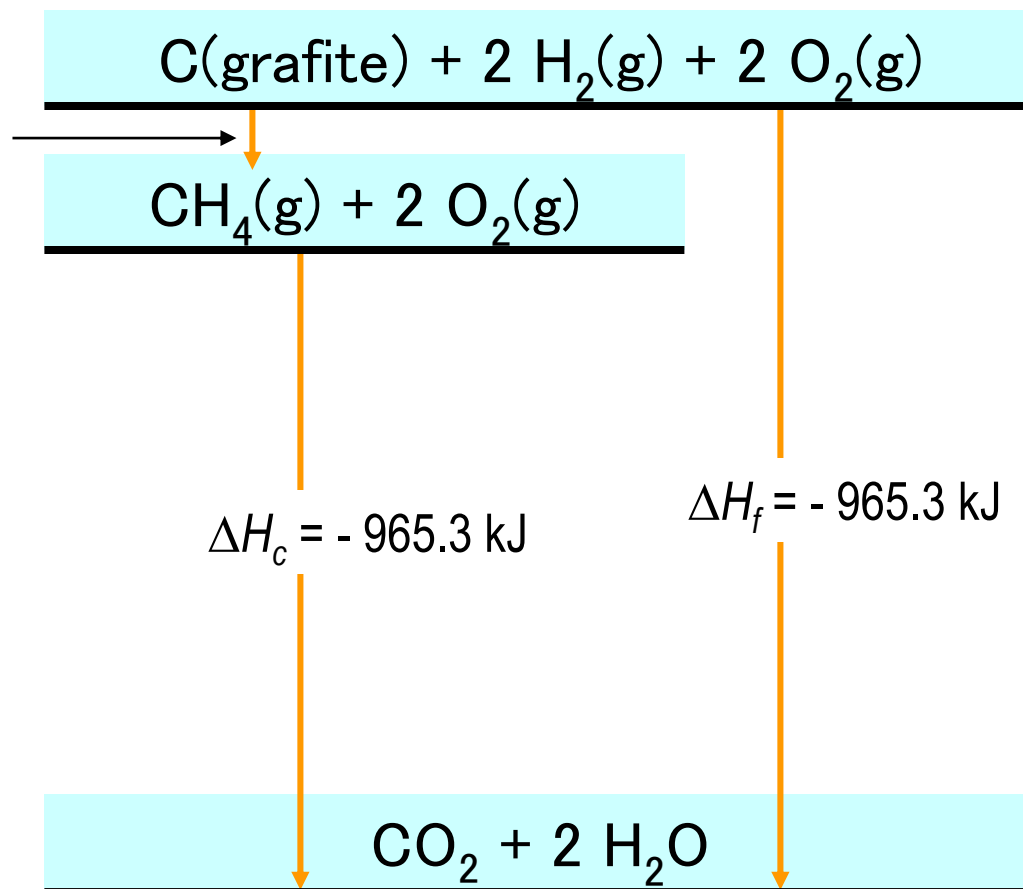


(1) + (2) + (3)

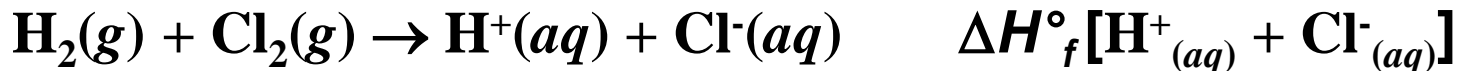


Diagramma dei Livelli Energetici


$$\Delta H_f^\circ = -74.7 \text{ kJ}$$



Se si conosce
due dei tre dati
termodinamici,
si può valutare
il terzo.



$$\Delta H_f^\circ [\text{H}^+(aq) + \text{Cl}^-(aq)] = -75.14 + (-92.30) = -167.44 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$


 $\Delta H_f^\circ \text{HCl}(aq)$

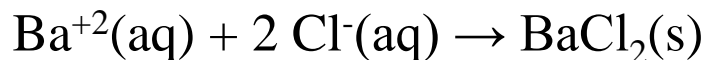
$$\Delta H_f^0 [\text{H}^+(aq)] = 0 \text{ kJ} \text{ (per definizione)}$$

$$\Delta H_f^\circ [\text{Cl}^-(aq)] = -75.14 + (-92.30) = -167.44 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$



Una soluzione contenente ioni bario viene mescolata con una soluzione contenente ioni cloruro. Qual è la variazione d'entalpia nella reazione?

Soluzione: Iniziare con scrivere l'equazione bilanciata per la reazione



Quindi, recuperare le entalpie di formazione di prodotti e reagenti

Sostanza	$\Delta H_f^0 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
$\text{Ba}^{+2}(\text{aq})$	-537.6
$\text{Cl}^{-}(\text{aq})$	-167.4
$\text{BaCl}_2(\text{s})$	-858.6

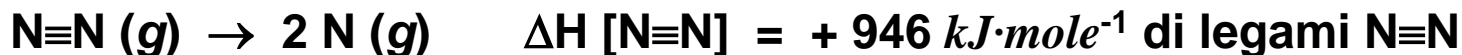
$$\Sigma \Delta H_f^0 \text{ reagenti} = \Delta H_f^0 \text{Ba}^{+2}(\text{aq}) + 2 \cdot \Delta H_f^0 \text{Cl}^{-}(\text{aq}) = -872.4 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\Sigma \Delta H_f^0 \text{ prodotti} = \Delta H_f^0 \text{BaCl}_2(\text{s}) = -858.6 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\Delta H^0 = \Sigma \Delta H_f^0 \text{ prod} - \Sigma \Delta H_f^0 \text{ reag} = -858.6 - (-872.0) = 13.8 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

Entalpie (Energie) di Legame

La variazione di entalpia standard associata alla rottura del legame in una molecola in fase gas con formazione di specie neutre:



è una misura della forza di quel legame (in questo caso triplo) ed è nota come **entalpia di legame** (energia di legame). Attenzione! è funzione del tipo di legame, è cioè diversa per legami singoli, doppi e tripli:

$$\Delta H [\text{N-N}] = + 391; \Delta H [\text{N=N}] = + 418; \Delta H [\text{N}\equiv\text{N}] = + 946 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

Fattori che influenzano le energie di Legame

- **Livelli energetici degli orbitali atomici molto vicini** significano legami più forti e più corti
- **Sovrapposizione**, popolazione frazionale di elettroni di legame sotto l'influenza dei nuclei leganti; migliore sovrapposizione, legame più forte
- **Repulsione da parte degli elettroni interni** (alta per O,F; scende nel 2° p.)
- **Repulsione da parte di elettroni di non-legame** (importante a brevissime distanze).

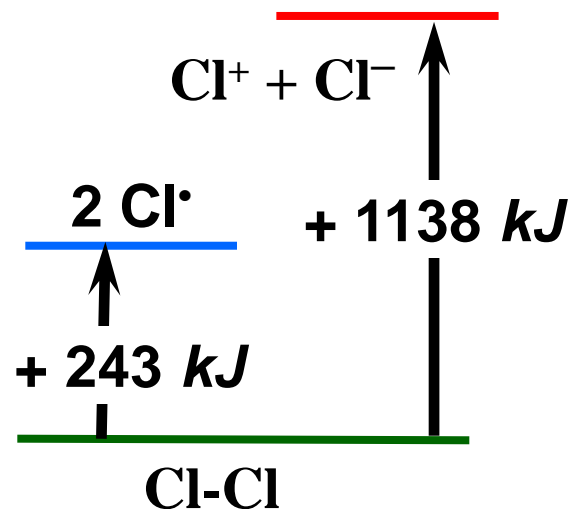
Entalpia di Dissociazione di Legame (ΔH)



Rottura di legame omolitica (ΔH°)



Rottura di legame eterolitica (ΔH°)



- In generale, è sempre vero che in fase gas l'energia di rottura di un legame a dare specie ioniche è sempre superiore a quella richiesta per generare specie neutre (radicali).
- L'energia di dissociazione omolitica di legame si indica spesso con la sigla BDE (Bond Dissociation Energy)



Entalpie Medie di Legame

Definire le entalpie di legame in molecole poliatomiche è più ambiguo! Si prenda in esame le energie dei singoli legami N-H in NH_3 . Studi spettroscopici hanno permesso di determinare le entalpie dei seguenti tre processi di rottura di legame:



Quale di questi tre valori si deve usare come entalpia del legame N-H?

In pratica come misura **dell'entalpia media del legame** N-H in NH_3 si usa la media aritmetica di questi tre valori.

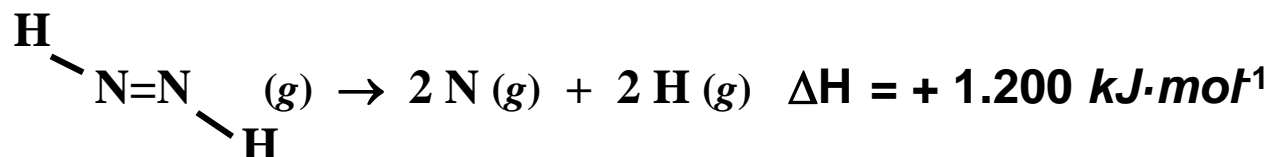
$$\Delta H_{\text{N-H media}} = (460 + 399 + 314)/3 = + 391 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} \text{ di legami N-H}$$



Utilità delle Entalpie Medie di Legame

L'utilità delle entalpie di legame sta nel fatto che si possono trasferire con un po' di approssimazione da un composto all'altro.

Per es.: si può usare l'entalpia del legame N-H sopra valutata per calcolare l'entalpia del doppio legame N=N nel composto diidrossina. Le variazioni di entalpia per la completa dissociazione della diidrossina negli atomi costituenti in fase gas è:



$$\begin{aligned} \Delta H &= + 1.200 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} = (1 \text{ mol}) \Delta H [\text{N}=\text{N}] + (2 \text{ mol}) \Delta H [\text{N}-\text{H}] \\ &= (1 \text{ mol}) \Delta H [\text{N}=\text{N}] + (2 \text{ mol}) (+ 391 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}) \end{aligned}$$

per cui l'entalpia del doppio legame N=N è :

$$\Delta H [\text{N}=\text{N}] = + 418 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$



				H-H	436				
B-B	308	C-C	347	N-N	158	O-O	144	F-F	158
-	-	Si-Si	226	P-P	198	S-S	266	Cl-Cl	243
Ga-Ga	113	Ge-Ge	188	As-As	178	Se-Se	192	Br-Br	193
In-In	100	Sn-Sn	146	Sb-Sb	141	Te-Te	126	I-I	151

- I valori assoluti delle energie di legame sono importanti, ma più importanti sono gli andamenti e le ragioni che li determinano
- H-H è il più forte; non esiste repulsione con elettroni interni
- Lungo il IV (14) gruppo, la forza di legame si riduce in relazione all'aumento della sovrapposizione e della repulsione con gli elettroni interni
- $\text{C-C} > \text{N-N} > \text{O-O} \approx \text{F-F}$
- $\text{F-F} \ll \text{Cl-Cl}$ importante la repulsione degli elettroni di non-legame
- Scorrendo la 2^a riga, lungo il periodo, irregolare, ragioni complesse!



Energie Medie di Legami Multipli Omeopolari ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)

33

C=C	602	N=N	418	O=O	494
....					
C≡C	835	N≡N	942		
....					
		P=P	481	S=S	425
		As=As	380	Se=Se	272
....					
		Sb=Sb	295	Te=Te	218
		Bi=Bi	192		

attenzione!
è $^1\text{O}_2$ non
 $^3\text{O}_2$.

- Nella 1^a riga, i legami multipli sono forti, buona sovrapposizione
- Ma, $\text{N}=\text{N} < \text{O}=\text{O}$ (attenzione! è il legame nell'ossigeno singoletto – una forma eccitata dell' O_2 che invece è una molecola a due elettroni spaiati) per la repulsione con gli elettroni di non-legame
- Lungo i gruppi, sovrapposizione inferiore per l'incremento del raggio della repulsione con gli elettroni interni
- La repulsione elettronica aumenta se il raggio diminuisce per migliorare la sovrapposizione.



B-H	389	C-H	411	N-H	386	O-H	456	F-H	565
		Si-H	318	P-H	321	S-H	364	Cl-H	432
		Ge-H	285	As-H	297	Se-H	313	Br-H	366
				Sb-H	257	Te-H	-270	I-H	298

- **Lungo il periodo**, BDE(E-H) aumenta: non si ha repulsione con gli elettroni interni, per cui la sovrapposizione può aumentare in relazione alla diminuzione del raggio covalente
- **Lungo il gruppo**, BDE(E-H) diminuisce: perché diminuisce la sovrapposizione, essendo peggiorata la condizione di corrispondenza tra i livelli energetici.



B-F	646	C-F	485	N-F	283	O-F	214	F-F	155
Al-F	580	Si-F	565	P-F	490	S-F	339	Cl-F	249
Ga-F	470	Ge-F	460	As-F	487	Se-F	310	Br-F	249
In-F	444	Sn-F	414	Sb-F	257	Te-F	335	I-F	278

- Lungo il periodo diminuisce, la repulsione con gli elettroni interni aumenta come gli atomi si rimpiccioliscono
- Lungo un gruppo deve diminuire in relazione alla diminuzione della sovrapposizione e all'aumento della repulsione con gli elettroni interni
- $\text{C-F} > \text{N-F} > \text{O-F} > \text{F-F}$ l'ordine è dovuto alla repulsione con gli elettroni di non-legame
- $\text{Si-F} > \text{C-F}$ a seguito del legame $d\pi-p\pi$ in Si-F, non possibile per C-F
- N-F vs P-F $d\pi-p\pi$ ma anche ridotta repulsione con elettroni di non-legame
- O-F vs S-F legame $d\pi-p\pi$



B=O	820	C=O (CO₂)	800	N=O	607				
B=S	522	CO (CO)	1072	P=O	544	S=O (SO₂)	532	Cl=O	220

		C=N	615	P=S	335	S=O (SO₃)	469		
		C≡N	887	As=O	389	Se=O	350		
		C=S	573			Te=O	330		
		Si=C	460						

		Si=O	638						
		Si≡O	805						
		Ge=O	500						

L'andamento è simile a quello delle energie dei legame omeopolari:

- Nel gruppo, l'energia di legame diminuisce per minor sovrapposizione
- Lungo il periodo, l'energia di legame diminuisce per la maggior repulsione con gli elettroni interni
- $(E=O) > (E=S)$, per la sovrapposizione e la repulsione interna
- $(E=O) > (E=N)$, per la maggiore polarità



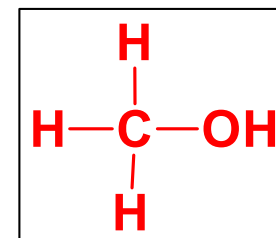
GeF₄	460	SeF₆	285	IF₇	231
GeF₂	481	SeF₄	310	IF₅	268
		SeF₂	351	IF₃	272
				IF	278
SnCl₄	323	SeCl₄	192		
SnCl₂	386	SeCl₂	243		
PbBr₄	201	SeBr₄	151		
PbBr₂	260	SeBr₂	201		
		SeI₂	151		

Sempre BDE(E-Alog.) diminuisce al crescere dello stato d'ossidazione:

- gli orbitali dell'atomo centrale si contraggono,
- migliora la sovrapposizione ma aumenta la repulsione con e^- interni
- BDE(E-F) diminuisce meno all'aumento dello stato di ossidazione, per cui lo stato di ossidazione più alto è il più probabile con il Fluoro.



Formazione del metanolo da atomi gassosi



$$\text{Rottura di 3 legami C-H} = 3 \times (411) \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} = 1233 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

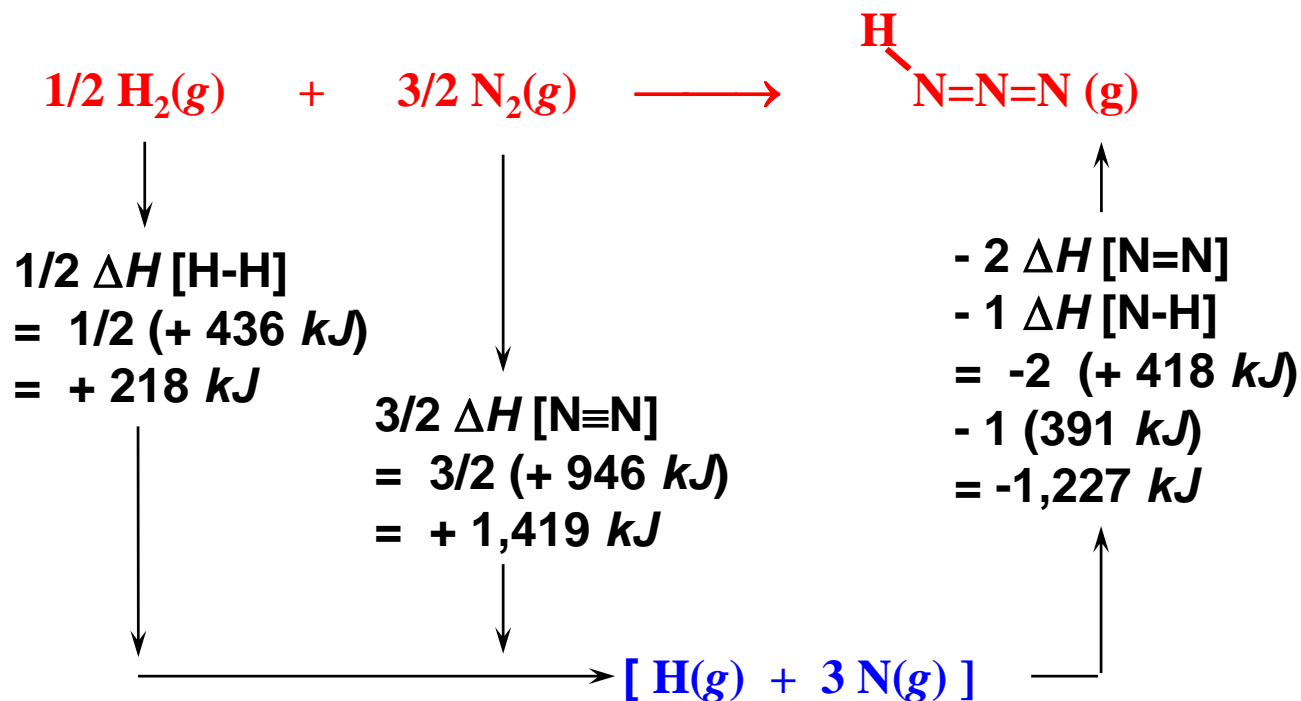
$$\text{Rottura di 1 legame C-O} = 1 \times (358) \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} = 358 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\text{Rottura di 1 legame O-H} = 1 \times (456) \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} = 456 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\text{Complessivamente} = 2047 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\Delta H^\circ_{rxn} = -2047 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} (\text{Entalpia di atomizzazione})$$

Esempio di Calcolo di ΔH_f



$$\Delta H_f [\text{HN}_3(\text{g})] = (+ 218 \text{ kJ}) + (+1,429 \text{ kJ}) + (-1,227 \text{ kJ}) = + 410 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$