

Entalpía de formación de cloruro de hidrogeno y bromuro de hidrógeno utilizando energías de enlace

Energía para disociar enlaces	678.98 kJ
	ENDOTÉRMICO
Energía para formar enlaces	-862.32 kJ
	EXOTÉRMICO
Cambio de entalpía o entalpía de reacción	-183.34 kJ
	RX EXOTÉRMICA
Ejemplo de combustión	
$Cl_2 + H_2 \rightarrow 2HCl$	
Enlaces Rotos	Enlaces Formados
1 enlaces Cl-Cl	2 enlaces H-Cl
1 enlaces H-H	

Energía para disociar enlaces	628.74 kJ
	ENDOTÉRMICO
Energía para formar enlaces	-732.56 kJ
	EXOTÉRMICO
Cambio de entalpía o entalpía de reacción	-103.82 kJ
	RX EXOTÉRMICA
Ejemplo de combustión	
$H_2 + Br_2 \rightarrow 2HBr$	
Enlaces Rotos	Enlaces Formados
1 enlaces H-H	2 enlaces H-Br
1 enlaces Br-Br	

Las diferencias notables al realizar cálculos termoquímicos en la formación de cloruro de hidrógeno y bromuro de hidrógeno empleando energías de enlace y entalpías de formación estándar, se comprueban porque a 298.15K y 1 atm de presión el hidrógeno, el cloro y el cloruro de hidrógeno son gases a esas condiciones, en cambio el bromo es un líquido y el bromuro de hidrógeno es un gas, por lo que utilizar energías de enlace para predecir la entalpía de reacción conlleva a grandes diferencias en los valores obtenidos y las energías de enlace no son una buena forma para calcular la entalpía de reacción para obtener HBr (g)

Resultados del efecto de la temperatura en la formación de cloruro de hidrógeno

Estado	Coeficiente Estequiométrico	Nombre	$\Delta H_{F,298}^{\circ}$ (kJ/mol)	$\Delta G_{F,298}^{\circ}$ (kJ/mol)	Constantes de C_p como función de T en J/molK			
					a	bT	cT ²	dT ³
gas	-1.00	Cloro	0	0	26.9300	3.384e-002	-3.869e-005	1.547e-008
gas	-1.00	Hidrógeno	0	0	27.1400	9.274e-003	-1.381e-005	7.645e-009
gas	2.00	Cloruro de Hidrógeno	-92.307	-95.286	30.6700	-7.201e-003	1.246e-005	-3.898e-009

300 K

Δa	ΔbT	ΔcT^2	ΔdT^3	Δn_g	0.00	
7.27	-5.752e-2	7.742e-5	-3.091e-8	T (K) referencia	298.15	
R (kJ/molK)	0.008314			T (K) a evaluar	300.00	
ΔH_{298}° (kJ)	-184.6140	Exotérmico		ΔH_T° (kJ)	-184.6211	Exotérmico
ΔG_{298}° (kJ)	-190.5720	Espontáneo		ΔG_T° (kJ)	-190.6090	Espontáneo
ΔS_{298}° (kJ/K)	0.0200	Aumento de desorden		ΔS_T° (kJ/K)	0.0200	Aumento de desorden
ΔU_{298}° (kJ)	-184.6140	No hay cambio en moles gaseosas		$\Delta U^{\circ}T$ (kJ)	-184.6211	

500 K

Δa	ΔbT	ΔcT^2	ΔdT^3	Δn_g	0.00	
7.27	-5.752e-2	7.742e-5	-3.091e-8	T (K) referencia	298.15	
R (kJ/molK)	0.008314			T (K) a evaluar	500.00	
ΔH_{298}° (kJ)	-184.6140	Exotérmico		ΔH_T° (kJ)	-185.6597	Exotérmico
ΔG_{298}° (kJ)	-190.5720	Espontáneo		ΔG_T° (kJ)	-194.6056	Espontáneo
ΔS_{298}° (kJ/K)	0.0200	Aumento de desorden		ΔS_T° (kJ/K)	0.0174	Aumento de desorden
ΔU_{298}° (kJ)	-184.6140	No hay cambio en moles gaseosas		$\Delta U^{\circ}T$ (kJ)	-185.6597	

1000 K

Δa	ΔbT	ΔcT^2	ΔdT^3	Δn_g	0.00	
7.27	-5.752e-2	7.742e-5	-3.091e-8	T (K) referencia	298.15	
R (kJ/molK)	0.008314			T (K) a evaluar	1000.00	
ΔH_{298}° (kJ)	-184.6140	Exotérmico		ΔH_T° (kJ)	-188.2571	Exotérmico
ΔG_{298}° (kJ)	-190.5720	Espontáneo		ΔG_T° (kJ)	-204.5972	Espontáneo
ΔS_{298}° (kJ/K)	0.0200	Aumento de desorden		ΔS_T° (kJ/K)	0.0137	Aumento de desorden
ΔU_{298}° (kJ)	-184.6140	No hay cambio en moles gaseosas		$\Delta U^{\circ}T$ (kJ)	-188.2571	

Resultados del efecto de la temperatura en la formación de bromuro de hidrógeno

Simulador termoquímico, efecto de la temperatura V2								
Instrucción: Insertar los datos correspondientes en las celdas de color amarillo, el coeficiente es negativo para reactivos y positivo para productos								
Estado	Coeficiente Estequiométrico	Nombre	$\Delta H^{\circ}_{F,298}$ (kJ/mol)	$\Delta G^{\circ}_{F,298}$ (kJ/mol)	Constantes de C_p como función de T en J/molK			
					a	bT	cT ²	dT ³
líquido	-1.00	Bromo	0	0	33.8600	1.125e-2	-1.192e-5	4.534e-9
gas	-1.00	Hidrógeno	0	0	27.1400	9.274e-003	-1.381e-005	7.645e-009
gas	2.00	Bromuro de Hidrógeno	-36.4	-53.45	27.5531	4.000e-3	6.626e-7	0.000e+0

300 K

Δa	ΔbT	ΔcT^2	ΔdT^3	Δn_g	1.00	
-5.8938	-1.252e-2	2.706e-5	-1.218e-8	T (K) referencia	298.15	
R (kJ/molK)	0.008314			T (K) a evaluar	300.00	
ΔH°_{298} (kJ)	-72.8000	Exotérmico		ΔH°_T (kJ)	-72.8140	Exotérmico
ΔG°_{298} (kJ)	-106.9000	Espontáneo		ΔG°_T (kJ)	-107.1116	Espontáneo
ΔS°_{298} (kJ/K)	0.1144	Aumento de desorden		ΔS°_T (kJ/K)	0.1143	Aumento de desorden
ΔU°_{298} (kJ)	-75.2788	Cambio en las moles gaseosas		ΔU°_T (kJ)	-75.2928	

500K

Δa	ΔbT	ΔcT^2	ΔdT^3	Δn_g	1.00	
-5.8938	-1.252e-2	2.706e-5	-1.218e-8	T (K) referencia	298.15	
R (kJ/molK)	0.008314			T (K) a evaluar	500.00	
ΔH°_{298} (kJ)	-72.8000	Exotérmico		ΔH°_T (kJ)	-74.2765	Exotérmico
ΔG°_{298} (kJ)	-106.9000	Espontáneo		ΔG°_T (kJ)	-129.9860	Espontáneo
ΔS°_{298} (kJ/K)	0.1144	Aumento de desorden		ΔS°_T (kJ/K)	0.1106	Aumento de desorden
ΔU°_{298} (kJ)	-75.2788	Cambio en las moles gaseosas		ΔU°_T (kJ)	-76.7553	

1000 K

Δa	ΔbT	ΔcT^2	ΔdT^3	Δn_g	1.00	
-5.8938	-1.252e-2	2.706e-5	-1.218e-8	T (K) referencia	298.15	
R (kJ/molK)	0.008314			T (K) a evaluar	1000.00	
ΔH°_{298} (kJ)	-72.8000	Exotérmico		ΔH°_T (kJ)	-76.8832	Exotérmico
ΔG°_{298} (kJ)	-106.9000	Espontáneo		ΔG°_T (kJ)	-187.1720	Espontáneo
ΔS°_{298} (kJ/K)	0.1144	Aumento de desorden		ΔS°_T (kJ/K)	0.1068	Aumento de desorden
ΔU°_{298} (kJ)	-75.2788	Cambio en las moles gaseosas		ΔU°_T (kJ)	-79.3620	

La formación de cloruro y bromuro de hidrógeno presenta liberación de energía y es más exotérmica en el caso del HCl (g), la cual se ve incrementada si aumenta la temperatura. La energía libre de Gibbs aumenta al incrementarse la temperatura a pesar de que la entropía de reacción disminuye, esto se debe a que el aumento de la entalpía de reacción tiene mayor influencia en la espontaneidad del proceso.

Debido a que el número de moles gaseosas solo se ve afectado en el caso de la formación de bromuro de hidrógeno, en este caso el cambio de entalpía es diferente al cambio de energía interna y debido a que este Δn es positivo, el cambio de energía interna es mayor que el cambio de entalpía.

Si se llevará a cabo el proceso inverso, es decir la descomposición de cloruro de hidrogeno y bromuro de hidrógeno la entalpía del proceso sería endotérmica y la energía libre de Gibbs tendría valores positivos, lo cual indica que el proceso no es espontáneo