

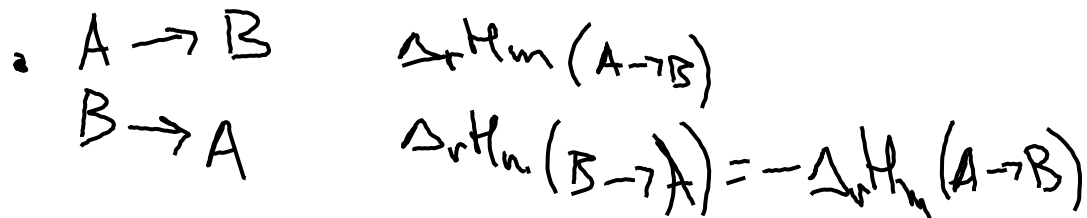
Termodinamika

= studium tepelného zabarvení chemických reakcí

$$Q_r \quad \underline{[P]} \quad Q_r = \Delta_r H_m^\phi(T)$$

• EXOTERMNÍ $\Delta_r H_m < 0$

ENDOTERMNÍ $\Delta_r H_m > 0$

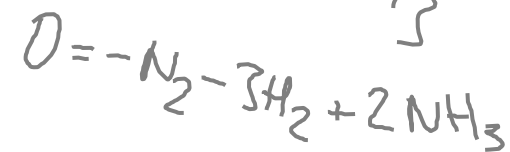
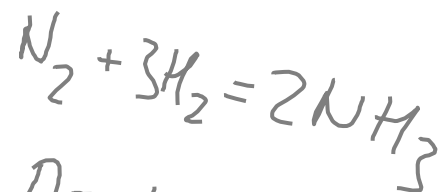


• $\rightarrow dP / S$

$$0 = \sum_i V_i L_i$$

$$V_i^{VL} < 0$$

$$V_i^P > 0$$

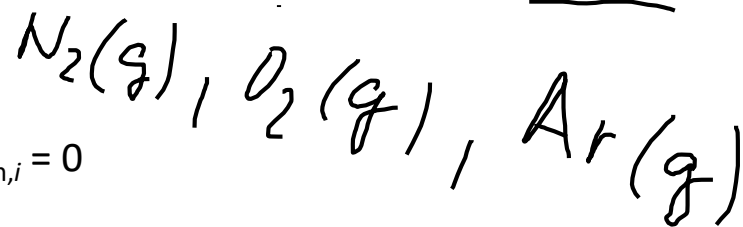
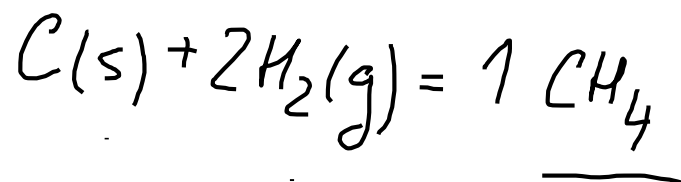
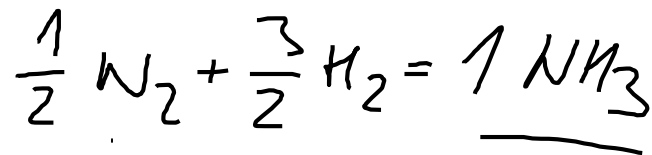


Termochemie

= studium tepelného zabarvení chemických reakcí

Slučovací reakce: vzniká 1 mol látky i z prvků

$$\Delta_r H_m^\circ(\text{sluč. rce}) = \Delta_{\text{sluč.}} H_{m,i}^\circ$$



Prvky v nejstabilnější modifikaci mají $\Delta_{\text{sluč}} H_{m,i} = 0$

$$\Delta_{\text{sluč}} H_m(\text{C(s)}) = 0 \text{ J/mol}$$

$$\Delta_r H_m^\circ = \sum_i \nu_i \Delta_{\text{sluč}} H_{m,i}^\circ$$

$$= H(\text{prod.}) - H(\text{vých. l.})$$

Termochemie

= studium tepelného zabarvení chemických reakcí

Hessův zákon:

$$R = \sum_i \alpha_i R_i$$

$$\Delta_r H(R) = \sum_i \alpha_i \Delta_r H(R_i)$$

$$R = R_1 - 2R_2$$

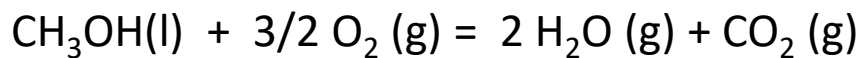
$$\Delta_r H(R) = \Delta_r H(R_1) - 2 \Delta_r H(R_2)$$

P16

Hess 1VTD 6

Vypočtete teplo, které získáme spálením 100 g kapalného methanolu ($M = 32,0 \text{ g/mol}$) ve spalovacím zařízení, které umožňuje spalování při 25°C za konstantního tlaku. Při výpočtu použijte následujících dat.

	$\text{CH}_3\text{OH (l)}$	$\text{O}_2 \text{ (g)}$	$\text{H}_2\text{O (g)}$	$\text{CO}_2 \text{ (g)}$
$\Delta_{\text{sl}}H^\circ (298,15 \text{ K}) / \text{kJ mol}^{-1}$	-238,57	0	-241,81	-393,51



A

B

C

[P]

D

$$m = 100 \text{ g}$$

$$Q = Q_r = \Delta_r H$$

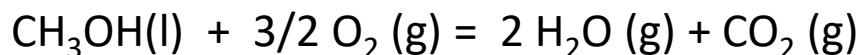
$$\Delta_r H_m = \sum_i \underline{V_i} \Delta_{\text{sluc}} H_{m,i} = V_A \Delta_{\text{sluc}} H_{m,A} + V_B \Delta_{\text{sluc}} H_{m,B} + \dots$$

$$= (-1)(-238,57) + \left(-\frac{3}{2}\right)(0) + (+2)(-241,81) + 1(-393,51) = -638,55 \text{ kJ/mol}$$

Hess 1VTD 6

Vypočtete teplo, které získáme spálením 100 g kapalného methanolu ($M = 32,0 \text{ g/mol}$) ve spalovacím zařízení, které umožňuje spalování při $25 \text{ }^{\circ}\text{C}$ za konstantního tlaku. Při výpočtu použijte následujících dat.

	$\text{CH}_3\text{OH (l)}$	$\text{O}_2 \text{ (g)}$	$\text{H}_2\text{O (g)}$	$\text{CO}_2 \text{ (g)}$
$\Delta_{\text{sl}}H^{\circ} (298,15 \text{ K}) / \text{kJ mol}^{-1}$	-238,57	0	-241,81	-393,51



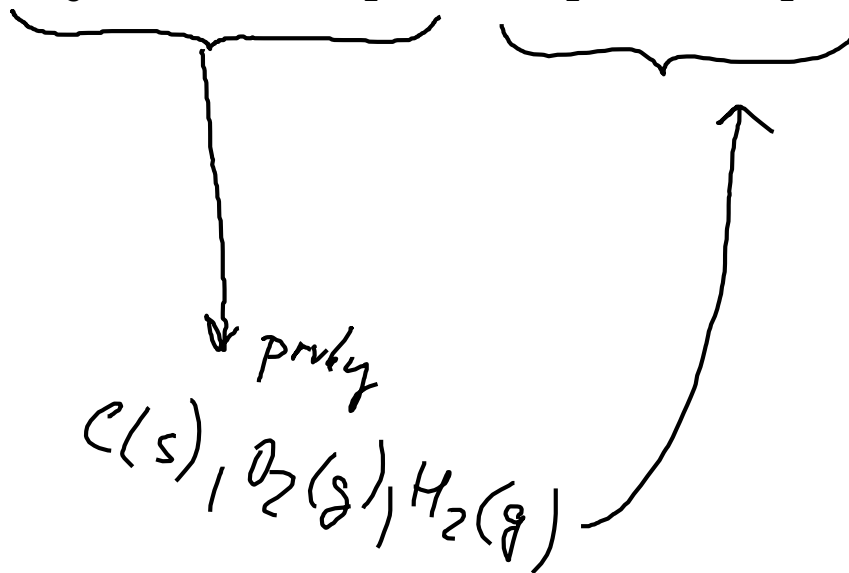
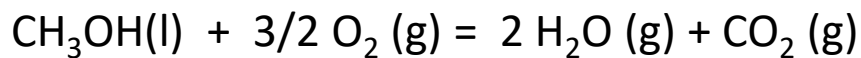
$$\Delta_r H^{\circ} = n_A \Delta_f H_m^{\circ} = \frac{m_A}{M_A} \Delta_r H_m^{\circ} = \frac{100}{32} (-638,55) =$$

$$= -1995,5 \text{ kJ} = -2 \text{ MJ}$$

Hess 1VTD 6

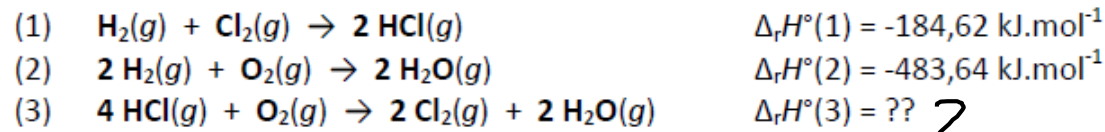
Vypočtete teplo, které získáme spálením 100 g kapalného methanolu ($M = 32,0 \text{ g/mol}$) ve spalovacím zařízení, které umožňuje spalování při 25°C za konstantního tlaku. Při výpočtu použijte následujících dat.

	$\text{CH}_3\text{OH} (\text{l})$	$\text{O}_2 (\text{g})$	$\text{H}_2\text{O} (\text{g})$	$\text{CO}_2 (\text{g})$
$\Delta_{\text{sl}}H^\circ (298,15 \text{ K}) / \text{kJ mol}^{-1}$	-238,57	0	-241,81	-393,51

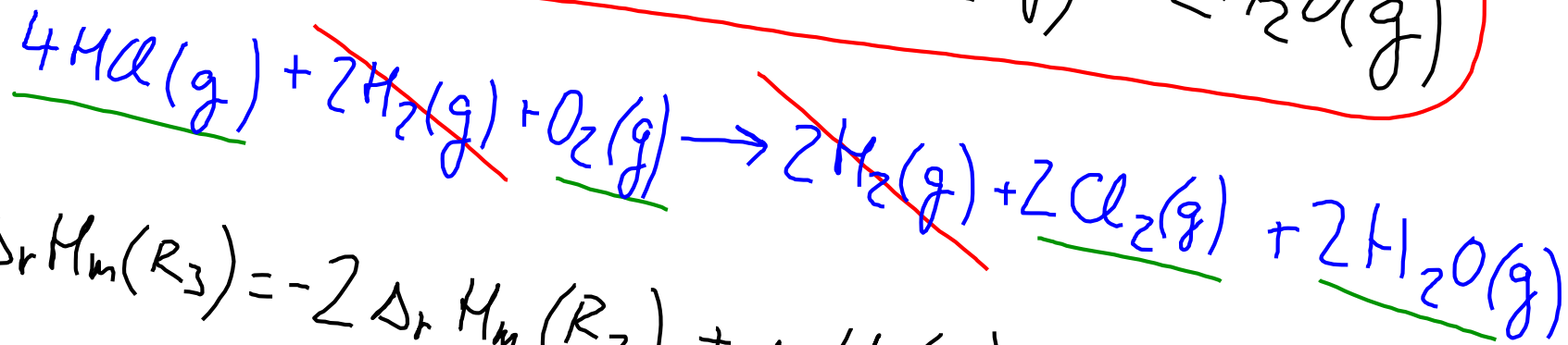
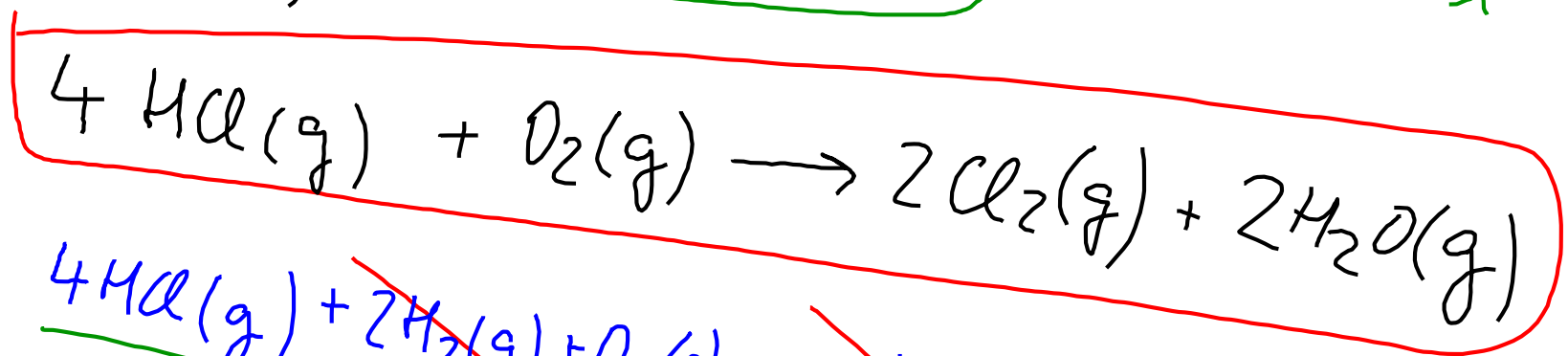


Z termochemických dat reakcí (1) a (2) vypočtete

- a) standardní reakční entalpii $\Delta_r H^\circ$ reakce (3),
 b) standardní slučovací entalpii $\text{HCl}(g)$ a $\text{H}_2\text{O}(g)$ při 298 K.



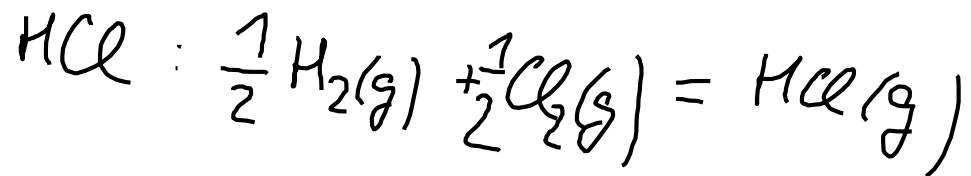
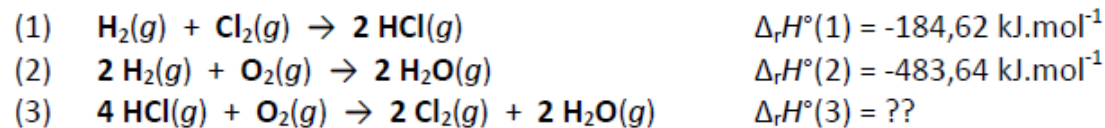
a) $\Delta_r H_m(R_3)$ $R_3 = -2R_1 + R_2$ $R = \sum \alpha_n R_n$



$$\Delta_r H_m(R_3) = -2 \Delta_r H_m(R_1) + \Delta_r H_m(R_2) = -2(-184,62) + (-483,64) = -114,44 \text{ kJ/mol}$$

Z termochemických dat reakcí (1) a (2) vypočtete

- a) standardní reakční entalpii $\Delta_r H^\circ$ reakce (3),
 b) standardní slučovací entalpii $\text{HCl}(g)$ a $\text{H}_2\text{O}(g)$ při 298 K.



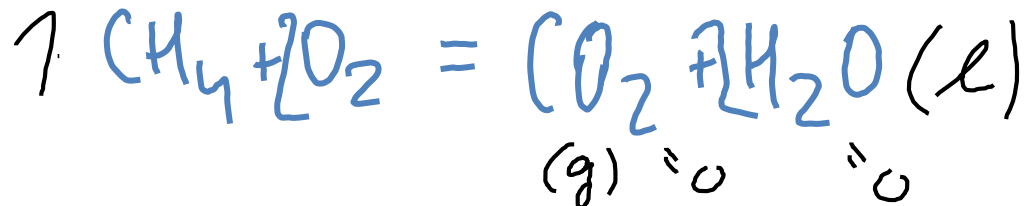
$$\Delta_{\text{slu}\bar{\text{c}}\text{H}}(\text{HCl}) = \frac{1}{2} \Delta_r H(R_1)$$



$$\Delta_{\text{slu}\bar{\text{c}}\text{H}}(\text{H}_2\text{O}) = \frac{1}{2} \Delta_r H(R_2)$$

Spalná reakce a spalná entalpie

- Spalná reakce: 1 mol dané látky i reaguje s $O_2(g)$ za vzniku $CO_2(g)$ a $H_2O(l)$



- Spalná entalpie ($\Delta_{\text{spal}} H_m$) je obdobou slučovací entalpie pro spalné reakce:
 $\Delta_r H_m (\text{spalná reakce}) = \Delta_{\text{spal}} H_{m,i}$

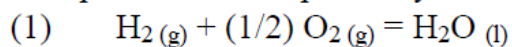
$$\Delta_{\text{spal}} H_m(CO_2(g)) = \Delta_{\text{spal}} H_m(H_2O(l)) = 0 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_r H_m^\theta = \sum_i \boxed{-} \nu_i \Delta_{\text{spal.}} H_{m,i}$$

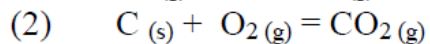
Analogie k:

$$\Delta_r H_m^\theta = \sum_i \nu_i \Delta_{\text{sluč.}} H_{m,i}$$

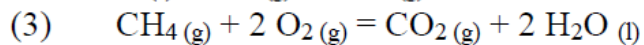
Z reakčních standardních entalpií dále uvedených reakcí určete standardní slučovací a spalné entalpie všech látek přítomných v reakcích (údaje platí pro 25°C a jsou zaokrouhleny):



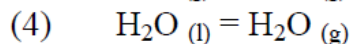
$$\Delta H_1^\circ = -286 \text{ kJ/mol}$$



$$\Delta H_2^\circ = -394 \text{ kJ/mol}$$



$$\Delta H_3^\circ = -891 \text{ kJ/mol}$$



$$\Delta H_4^\circ = 44 \text{ kJ/mol}$$

Pozn. Nejstabilnější fázi vody za daných podmínek je voda kapalná.

$$= \Delta_{\text{výř}} H_{\text{H}_2\text{O}}$$

Látka	$\Delta_{\text{sluč}} H^\circ_{\text{m,i}}$	$\Delta_{\text{spal}} H^\circ_{\text{m,i}}$
$\text{H}_2(\text{g})$	0	ΔH_1
$\text{O}_2(\text{g})$	0	Nemá význam
$\text{C}(\text{s})$	0	ΔH_2
$\text{CO}_2(\text{g})$	ΔH_2°	0
$\text{CH}_4(\text{g})$	$-\Delta_r H_3 + \Delta_r H_2 + 2\Delta_r H(1)$	ΔH_3
$\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	ΔH_1°	0
$\text{H}_2\text{O}(\text{g})$	$\Delta H_1 + \Delta H_4$	$-\Delta H_4$

Termochemie: Kirchhoffův zákon

= přepočet reakční entalpie na jinou teplotu

$$\Delta_r H_m^\circ = f(T)$$

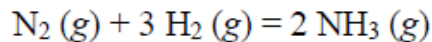
$$T_1 \longrightarrow T_2$$

$$\Delta_r H_m^\circ(T_2) = \Delta_r H_m^\circ(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \Delta_r C_{p,m} \cdot dT$$

$$\Delta_r C_{p,m} = \sum \nu_i C_{p,m,i} = C_{p,m}^{\text{prod}} - C_{p,m}^{\text{rk}}$$

Výchozí látky se z teploty T_2 ochladí (nebo ohřejí) na T_1 , při níž proběhne reakce, a produkty se následně ohřejí (nebo ochladí) zpět na teplotu T_2 . Změna entalpie tohoto děje je stejná, jako kdyby reakce proběhla přímo za teploty T_2 (změna entalpie nezávisí na cestě).

Vypočítejte standardní reakční entalpii reakce



při teplotě 1000 K. Standardní slučovací entalpie NH_3 při teplotě 300 K je $-46,0 \text{ kJ mol}^{-1}$. Předpokládejte, že hodnoty tepelných kapacit (v $\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$) jsou v uvažovaném teplotním intervalu nezávislé na teplotě a mají hodnoty $C_{pm}^\circ(\text{H}_2) = 29$; $C_{pm}^\circ(\text{N}_2) = 30$; $C_{pm}^\circ(\text{NH}_3) = 45$.

$$T_1 = 300 \text{ K} \quad \Delta_{SL} H_{m, \text{NH}_3} = -46 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_r H_m(T_2 = 1000 \text{ K}) = ?$$

$$\Delta_r H_m(T_1 = 300 \text{ K}) = \sum_i \nu_i \Delta_{SL} H_{m,i} = (-1) \cdot 0 + (-3) \cdot 0 + 2(-46) = -92 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$\Delta_r G_m = \sum_i \nu_i C_{pm,i} = (-1) \cdot 30 + (-3) \cdot 29 + 2 \cdot 45 = -27 \text{ J/K/mol}$$

$$\begin{aligned} \Delta_r H_m(T_2) &= \Delta_r H_m(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \Delta_r C_{pm} dT = \Delta_r H_m(T_1) + \Delta_r C_{pm}(T_2 - T_1) = \\ &= -92 + (-27 \cdot 10^{-3})(1000 - 300) = -110,9 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$