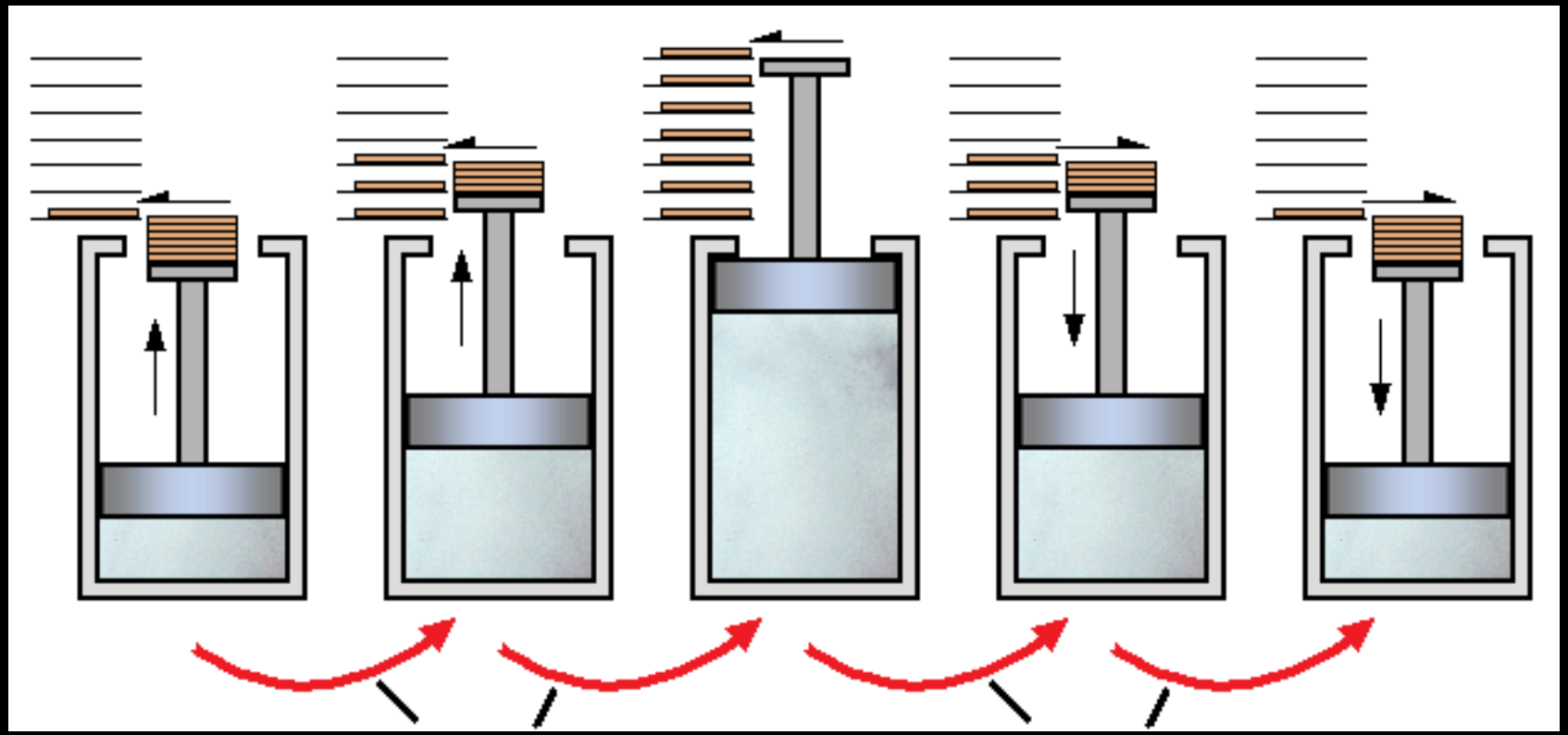
Přednáška 5
Energetika chemických reakcí: pojem Entalpie

Literatura: Atkins + de Paula, 8. vydání,
Fyzikální chemie / Physical Chemistry
Části 2.3-3.2 / Parts 2.3-3.2

Poznámka k ručně psaným poznámkám:
Na rozdíl od prezentací nebudou vkládány do ISu
Budou zaslány e-mailem na požádání
(nejlépe v odůvodněných případech)

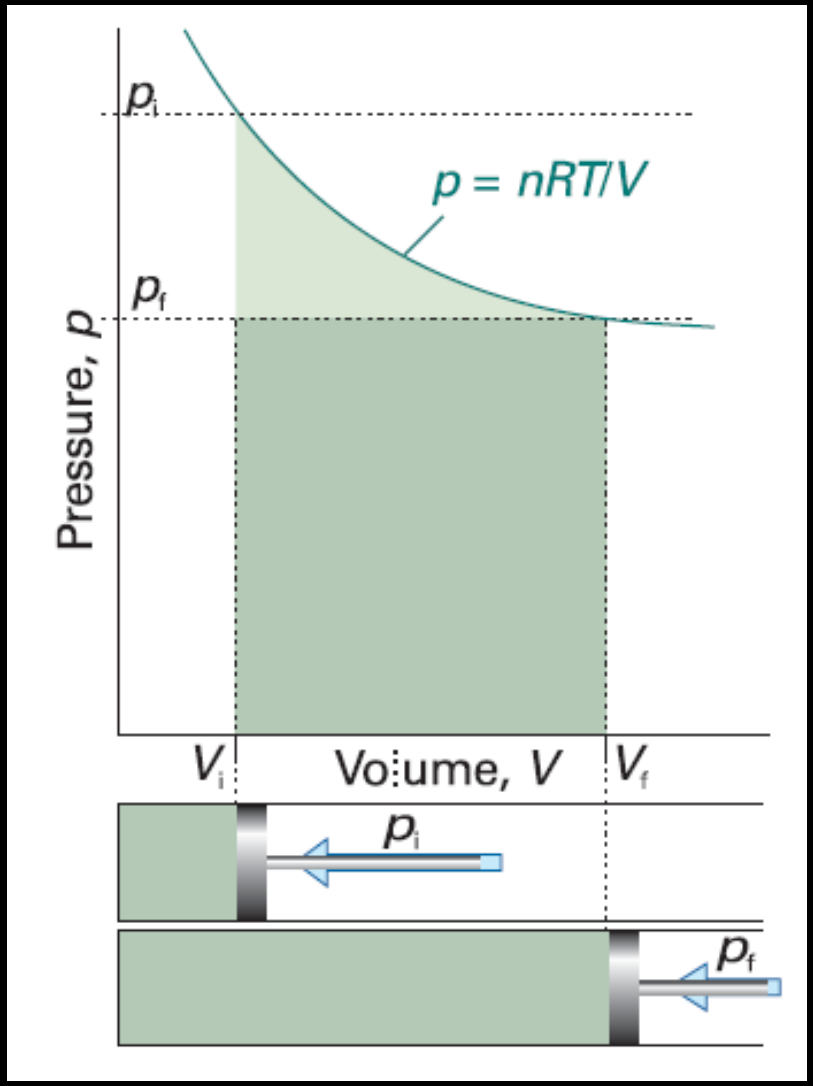
5.1 Vratná změna = změna, která může být obrácena infinitezimální modifikací některé proměnné.



původní proces zpětný proces

Δp = konečně velká změna , dp ... nekonečně malá změna.

5.2 Výpočet *w* při vratné izotermické expanzi id g



5.3 První věta TD pro izolovaný a uzavřený systém

Vnitřní energie U je tzv. extenzívní veličina.

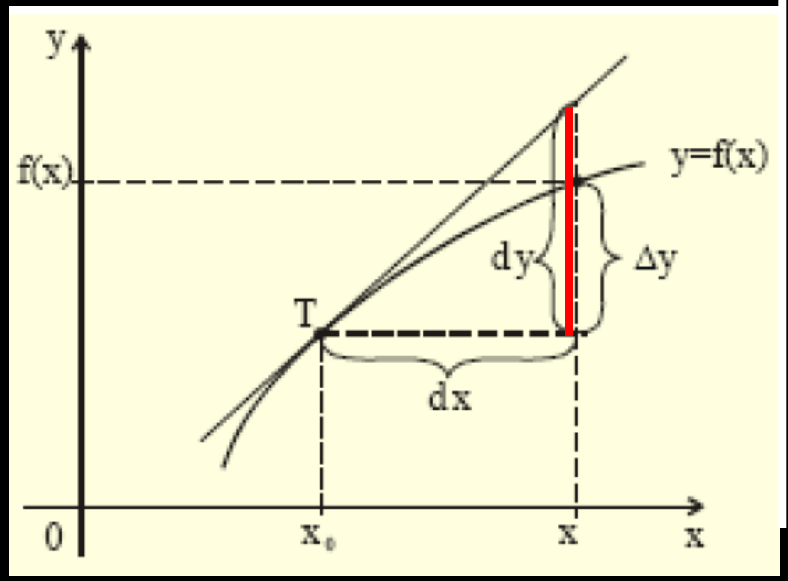
Jednotky U: 1 J = 1 N m

1 cal = 4.184 J

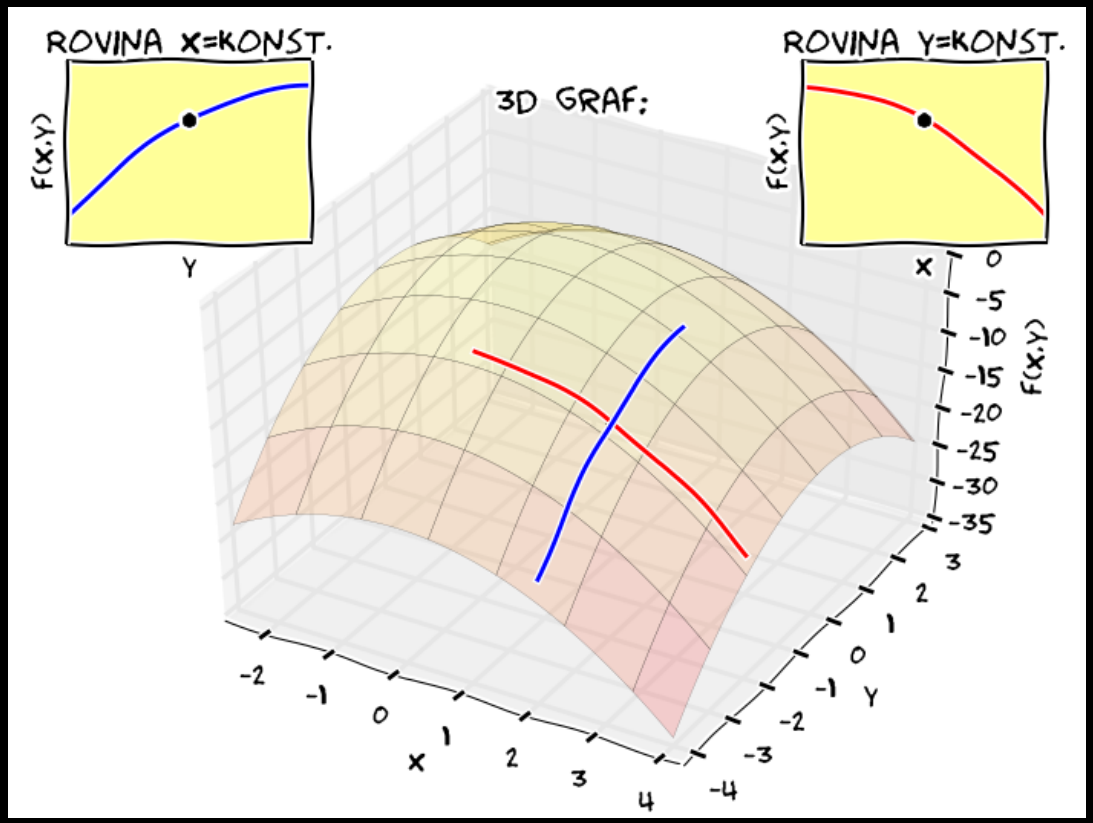
izolovaný systém:	$dU = 0$
uzavřený systém:	$dU = dq + dw$

5.4 Co znamená pojem diferenciál?

Funkce 1 proměnné



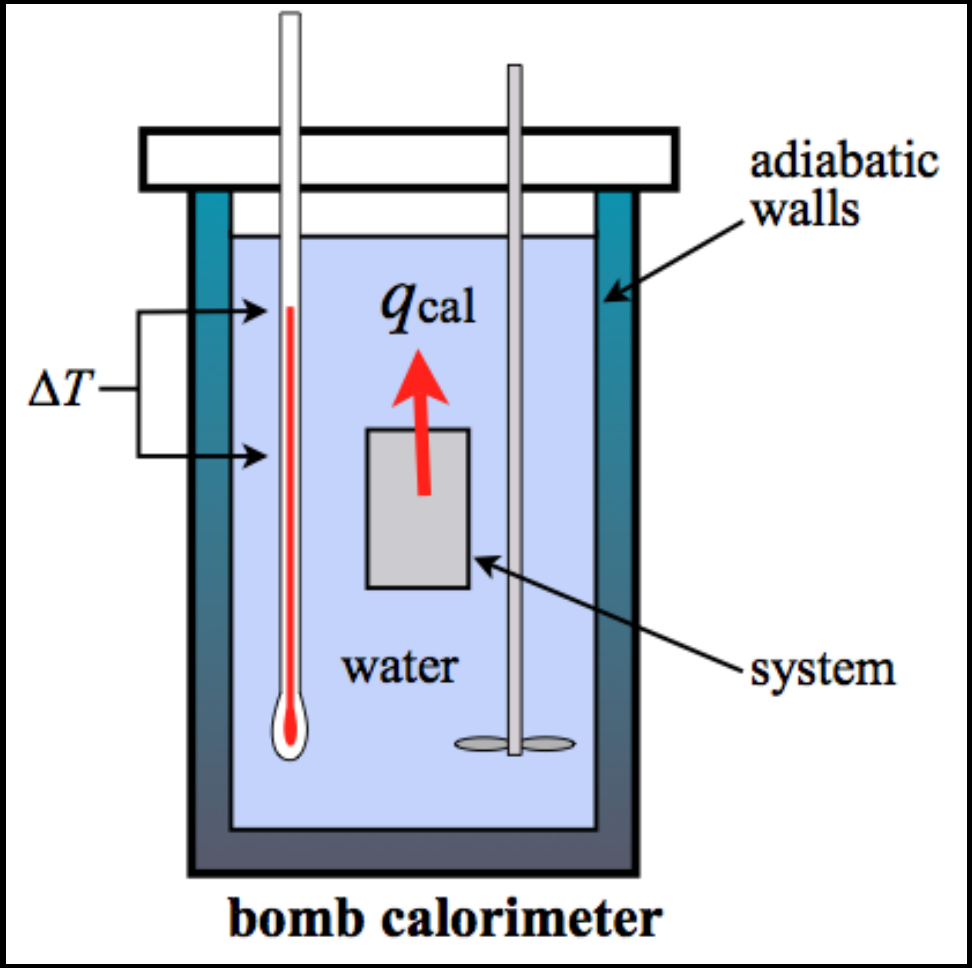
Funkce 2 proměnných



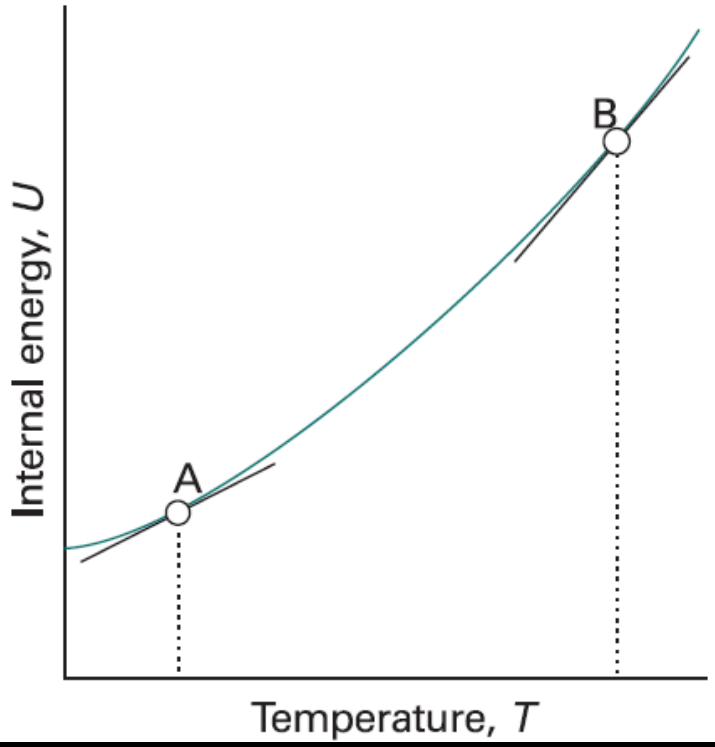
Přírůstek funkce na tečně, tzv. **diferenciál**

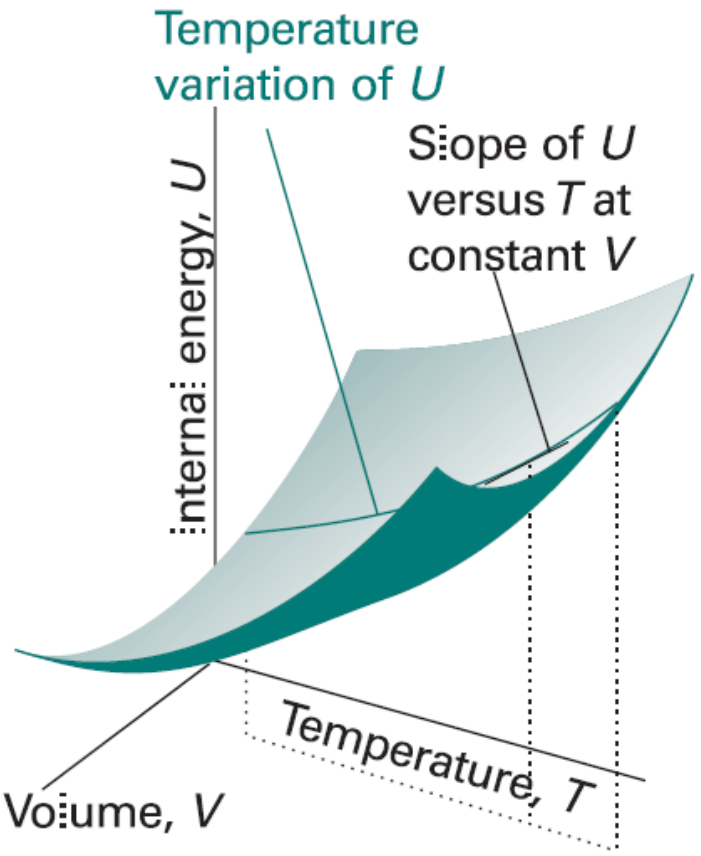
Přírůstek funkce na tečné rovině, tzv. totální (úplný) diferenciál.

5.5 Kalorimetrie

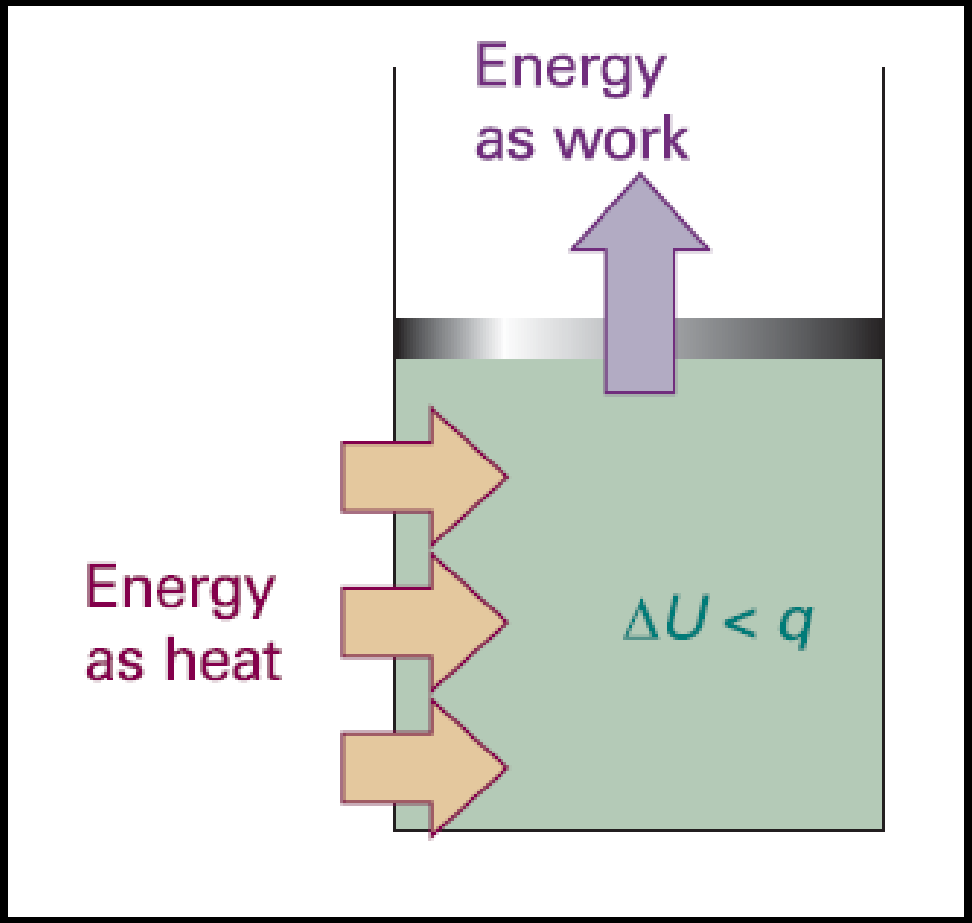


5.6 Tepelná kapacita a molární tepelná kapacita





5.7 Entalpie



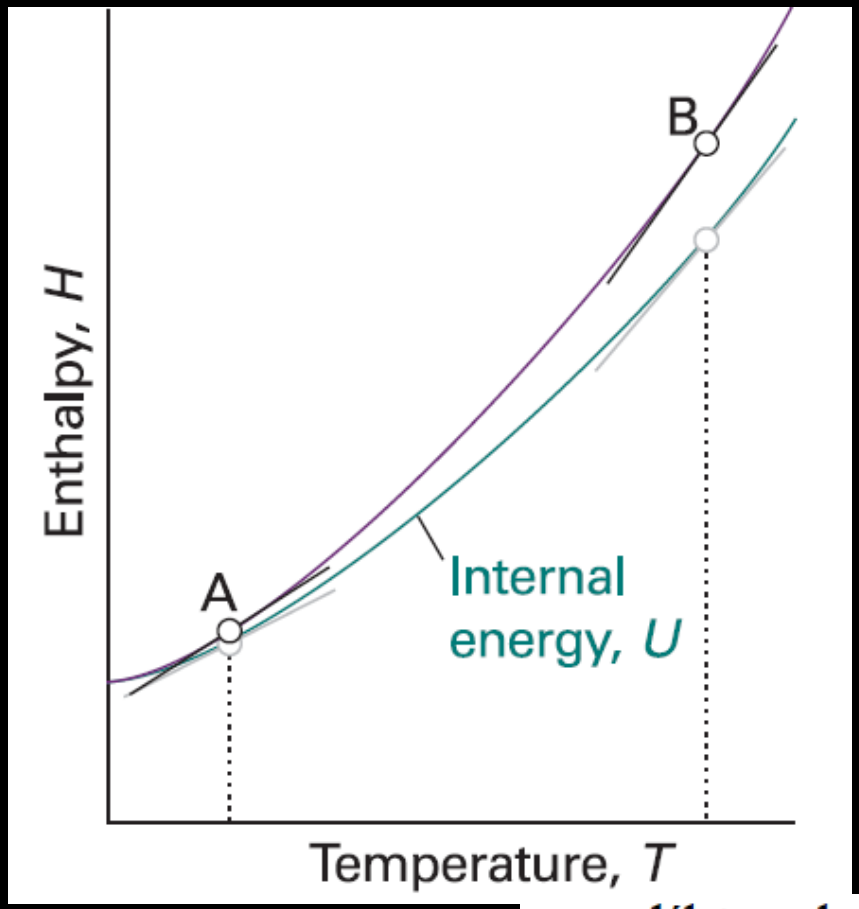
5.8 Vztah [redacted] a [redacted]

Příklad 1.

Rozdíl mezi [redacted] a [redacted] pro přechod kalcit -> aragonit.

Příklad 2:

Rozdíl mezi [redacted] a [redacted] pro reakci slučování vodíku s kyslíkem.



5.9 Změna H s T

rozdíl tepelných kapacit:

	$C_{m,V}$ / J K^{-1} mol^{-1}	$C_{m,p}$ / J K^{-1} mol^{-1}	$C_{m,p} - C_{m,V}$
He	12.48	20.79	8.31
N_2	20.74	29.12	8.38
CO_2	28.46	37.10	8.64

5.10 Termochemie, standardní reakční H

reakční entalpie:

REAKTANTY $\longrightarrow$ PRODUKTY ... $\Delta_r H$

slučovací entalpie:

PRVKY $\longrightarrow$ 1 mol SLOUČENINY ... $\Delta_f H$

formation

DEF: $\Delta_f H^{\ominus}_{\text{prvek}} \equiv 0$ pro prvky ve stavu referenční fáze při libovolné T

5.11 Definice standardního stavu

čistá („chemicky“) látka v čisté („fyzikálně“) formě (ne směs)
při tlaku 1 bar a specifikované teplotě

1 bar = 10^5 Pa („normální“ tlak: 101325 Pa)
nejčastěji T = 298.15 K

(s), (l), (g)

$p^{\ominus}, \Delta H^{\ominus}, \Delta G^{\ominus}, \ldots$

prvky ve stavu referenční fáze (většinou nejstabilnější modifikace)

5.12 Hessův zákon

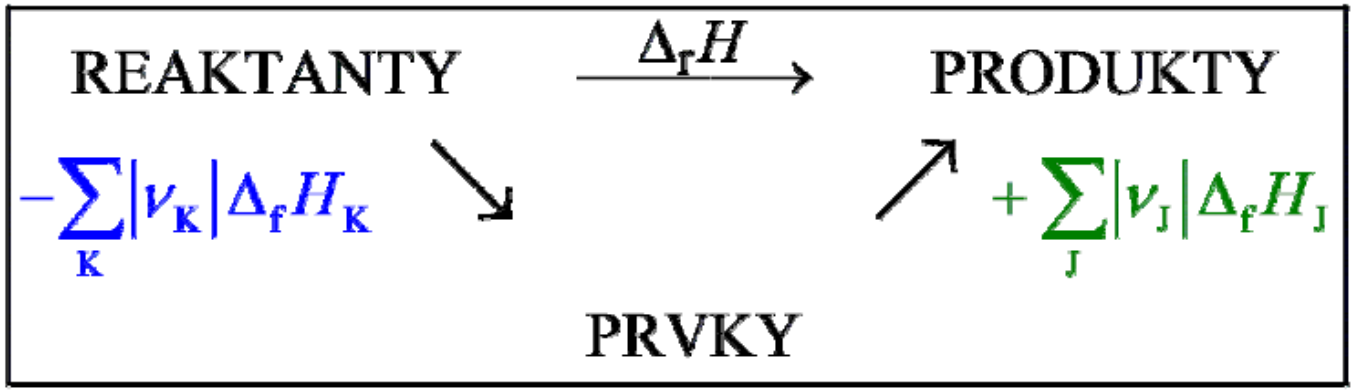
Standardní entalpie celkové reakce je dána součtem standardních entalpií reakcí, na které může být rozdělena.

1. Způsob použití Hessova zákona: pomocí tvorných entalpií

chemická reakce: $0 = \sum_J \nu_J J$

ν_J - stechiometrický koeficient pozitivní pro produkty

$$\Delta_r H^{\ominus} = \sum_J \nu_J \Delta_f H_J^{\ominus}$$



2. Způsob použití Hessova zákona: pomocí sekvence reakcí se známými standardními reakčními entalpiemi

Example 2.5 *Using Hess's law*

The standard reaction enthalpy for the hydrogenation of propene,

$$CH_2{=}CHCH_3(g) + H_2(g) \rightarrow CH_3CH_2CH_3(g)$$

is $-124\ kJ\ mol^{-1}$. The standard reaction enthalpy for the combustion of propane,

$$CH_3CH_2CH_3(g) + 5\ O_2(g) \rightarrow 3\ CO_2(g) + 4\ H_2O(l)$$

is $-2220\ kJ\ mol^{-1}$. Calculate the standard enthalpy of combustion of propene.

5.13 Standardní slučovací enthalpie

příklady standardních slučovacích entalpií $\Delta_f H^{\ominus}(298.15)$ / kJ mol^{-1}

$H_2O(l)$	–285.8	$H_2O(g)$	241.8
$H_2O_2(l)$	–187.8		
$NH_3(g)$	–46.1		
$N_2H_4(g)$	+50.6		
$NO_2(g)$	+33.2		
$N_2O_2(g)$	+9.2		
NaCl(s)	–411.2		
glukóza(s)	–1268		

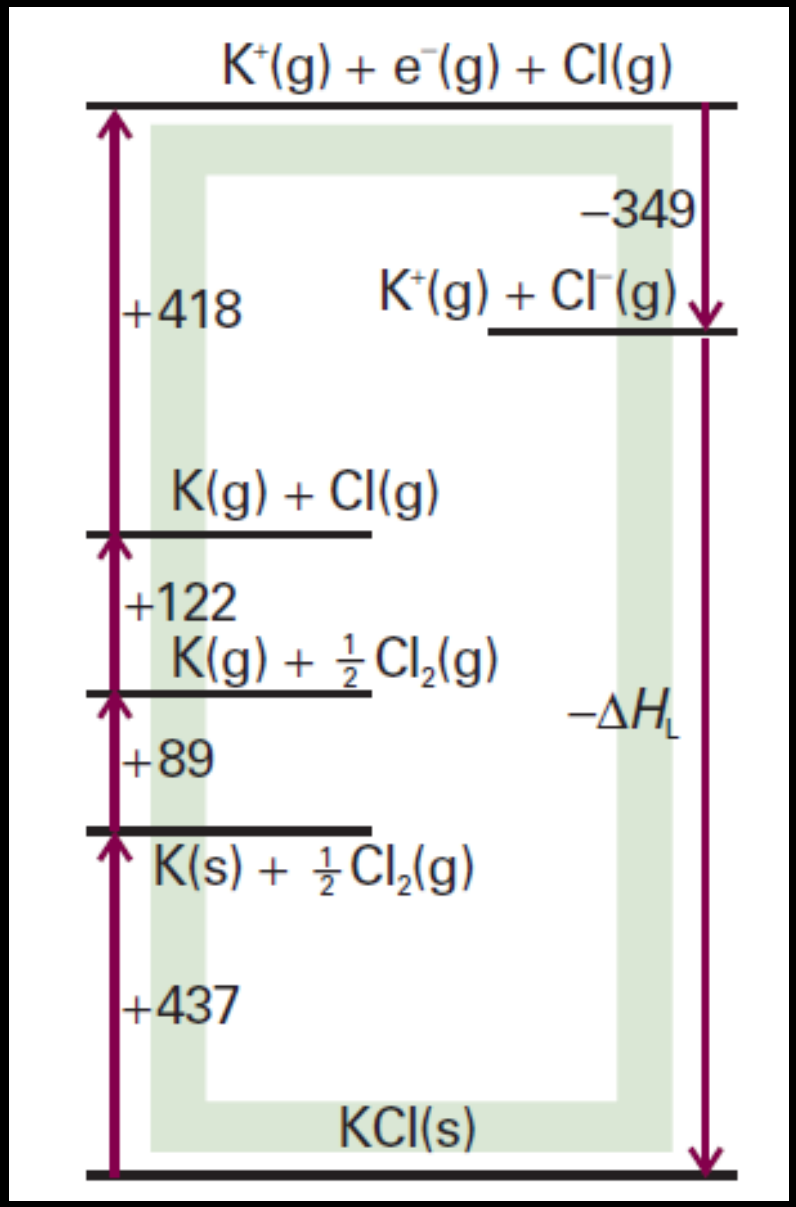
5.14 Mřížková entalpie a Born-Haberův cyklus

Příklad:

Vypočtěte mřížkovou entalpii ΔH_L, definovanou jako standardní enthalpii děje

$MX(s) \rightarrow M^+(g) + X^-(g)$,

pro KCl.

Využijte tzv. Born-Haberův cyklus na obrázku.

Změny *H* jsou v kJ/mol (při teplotě 298 K).