

# G Chemická rovnováha

# G.M.M. Reakce - G. Energie

$$G = H - TS$$



$$\Delta_r G^\ominus = \Delta_r H^\ominus - T \Delta_r S^\ominus$$

pro zvolenou reakci a  $P=P^\ominus$ ,  $T$ ;

**Číslo** (tabulky  $\Delta_f G^\ominus$  / Atkins)

$$\mu_j = \left( \frac{\partial G}{\partial n_j} \right)_{P, T, n'}$$

pro zvolenou reakci a  $P, T$ ;

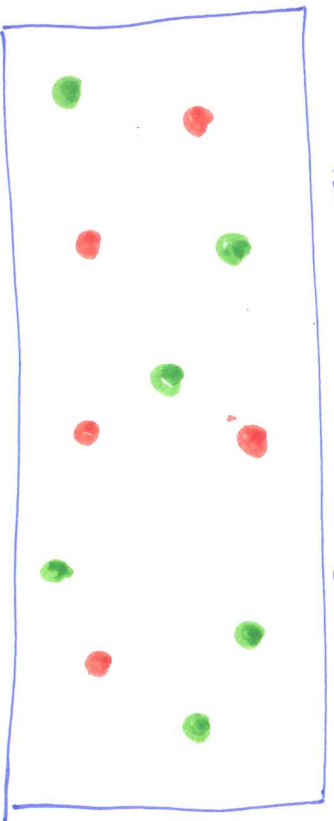
**Funkce** aktuálního složení směsi

$\mu_j$  charakterizuje potenciál složky  $J$

změnit - tj. zvýšit nebo snížit  $G$

svůj přechod na jinou látku.

izomerace  $A \rightleftharpoons B$



$n_A, \mu_A$

$n_B, \mu_B$

Co když  $\mu_A = \mu_B$  ?

Chemie zjistiť, v jakém stadiu

reakce nastane  $\mu_A = \mu_B$

Tj. kdy nastane  $\mu_B - \mu_A = 0$

Zajímavá nás tedy chováni funkce  $\mu_B - \mu_A$

← nice!

oznacíme  $\Delta r G = \mu_B - \mu_A$

Jak ji získaš / zjistiš?

(3)  $\Delta_f G^\ominus(A)$

(5)  $\Delta_r G^\ominus = \Delta_f G^\ominus(B) - \Delta_f G^\ominus(A)$

(7)  $G$  reakční směsi

(4)  $\Delta_f G^\ominus(B)$

poza A

(6)  $x_B = \frac{n_B}{n_A + n_B}$

poza B

(9)  $\frac{dG}{dx_B} < 0$

(8)  $\frac{dG}{dx_B} = 0$

(10)  $\frac{dG}{dx_B} > 0$

(2)

(1)

Tj. Zvānā Gibbsa reakcija Svēsi se složenim Svēsi  
 ja REAKCIĀ GIBBSOVA ENERĢIJA  
 (noloci STANDARTU ?)  
 ja zāsadu velicina pro posūzen

Tenduce Svēsi tvorit vīe produktā lepo vīe reaktantā.

uvuļ zapsat (2r)

Pro 2 složenou Svēsi :  $\Delta_r G = \left( \frac{\partial G}{\partial x_B} \right)_{P,T=konst.}$  *nie! (žādu -)*

Matem. lēpe :  $\Delta_r G = \left( \frac{\partial G}{\partial x_B} \right)_{P,T}$

Matem. lēpe a pro obarou Svēsi :  $\Delta_r G = \left( \frac{\partial G}{\partial \xi} \right)_{P,T}$

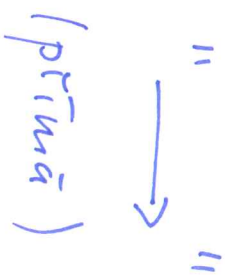
rozsañ valoa

# G. 1.1.2

v. Exergonická

$$\Delta_r G < 0$$

Samovolná je reakce

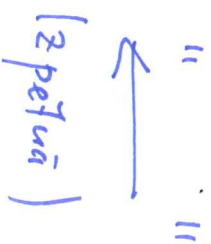


(přímá)

v. Endergonická

$$\Delta_r G > 0$$

Samovolná je reakce



(zpětná)

$$\Delta_r G = 0$$

reakce je v rovnováze.



6.1.2.1 Rovnováha



v ideálnim plyne

$P_{rel,B}$

$$\Delta_r G = \mu_B - \mu_A = \left( \mu_B^\ominus + RT \ln \frac{P_B}{P^\ominus} \right) -$$

$$- \left( \mu_A^\ominus + RT \ln \frac{P_A}{P^\ominus} \right) =$$

$$= \left( \mu_B^\ominus - \mu_A^\ominus \right) + RT \left( \ln P_{rel,B} - \ln P_{rel,A} \right) =$$

$$= \Delta_r G^\ominus + RT \ln$$

$$\frac{P_{rel,B}}{P_{rel,A}}$$

tzv.

eq:  $\ln K$

V rovnováze:  $0 = \Delta_r G^\ominus + RT \ln Q$   $\Delta_r G^\ominus = -RT \ln K$   $K$  spoe. pítřed rovnovážná k.  $K_{000}$  rovnovážná  $Q$

6.1.2.2 OBEČNĀ REAKCE

3

Obeaug zāpis

$$0 = \sum_j \nu_j J \quad (6.9)$$

Pro Ar B ke obeeug  
 Obeugit, ko juve ukezeer

Alg1 -> B1g  
 DENINI G.E. 6.10

$$\Delta_r G = \Delta_r G^\ominus + RT \ln Q$$

V LIB. STADIN DEE

idealni zidēy roztok

$$Q = \frac{\text{koncetrace produktu}^o}{\text{koncetrace reaktantu}^o}$$

$$= \prod_j [J]^{\nu_j} \quad \text{wso } Q = \prod_j x_j^{\nu_j}$$

1.5

Priklad 2



$$\nu_A = -2 \quad \nu_B = -3 \quad \nu_C = +1$$

$$\nu_D = +2$$

wso koncetrace wso  $x_C \cdot x_D^2 \cdot x_A^{-2} \cdot x_B^{-3}$

$$Q = [C]^1 \cdot [D]^2 \cdot [A]^{-2} \cdot [B]^{-3}$$

Madāni ar A, B, C, D  
 ut swāsi

$$= \frac{[C][D]^2}{[A]^2 \cdot [B]^3} \quad \text{wso } \frac{x_C \cdot x_D^2}{x_A^2 \cdot x_B^3}$$

JENOHZE - ZIVOT ANI REAKCIJ NEJISY IDEALNI...



vsuoka  $\Rightarrow$  5.4.2 Aktivita rozpustěné látky (vsuoka)

Chemický pot. rozpustěné látky v ideálním zředěném roztoku

$$5.53 \mu_B = \mu_B^* + RT \ln \frac{P_B}{P_B^*} = \mu_B^* + RT \ln K_B X_B$$

$\rightarrow$  Obvážek

nověno  $\mu_B^{\ominus}$  (5.53)   
 moku sprit do

(Henryho z.)

ideální zředění:  $\mu_B = \mu_B^{\ominus} + RT \ln X_B$  5.55

velký zředění (Odhady od H2)

Aktivita = efektivní koncentrace

DEF

$$a_B = \gamma_B X_B$$

5.58

aktivitní koeficient

DEF

$$\mu_B = \mu_B^{\ominus} + RT \ln a_B$$

15.56 / Aktivita

(5.56) 2 singly P<sub>B</sub>

6.12.2. Dokoučení:

$$Q = \prod_j a_j^{\nu_j}$$

DEFINICE REAKČNÍHO  
KOCIENTU

$$K = \left( \prod_j a_j^{\nu_j} \right)_{\text{rov}}$$

DEFINICE

ТЕРМОДИНАМИКЕ  
РОВНОВАЖЕ! КОНСТ.

popí.  $f_j$  (fugacity) pro plynné složky.

Výpočetní  
praxe:

$a_j \rightarrow$  molality

$$\frac{b_j}{b^\ominus}$$

$$b^\ominus = 1 \text{ mol kg}^{-1}$$

$\rightarrow$  látkové množství

$$\frac{c_j}{c^\ominus}$$

$$c^\ominus = 1 \text{ mol dm}^{-3}$$

$\rightarrow$  parciální tlak

$$\frac{p_j}{p^\ominus}$$

$$p^\ominus = 10^5 \text{ Pa}$$

Wtwe, ze

$$\Delta_r G = \Delta_r G^\ominus + RT \ln Q \quad [6.10]$$

Zuväve z dítivéřšäc

pro

$$\Delta_r G = 0 \quad \downarrow$$

dostavime

$$\Delta_r G^\ominus = -RT \ln K \quad \downarrow$$

eq.

K

EXAMEN

A ZÄSADNĚ TD

UZNAH PRO K

$$\Delta_r G^\ominus = -RT \ln K$$

=> předpokládáme rovnost reakční směsi



Osasus süsteemi v võimaldab, et te võistluse võita parel, se oadudate ar suuina,

Ettev minimalizatsio kivi kito Porsary

$$A \leftrightarrow B$$

shapra dis.  $\alpha$

$$X_A = \frac{(1-\alpha)u}{(1-\alpha)u + 2\alpha u} = \frac{1-\alpha}{1+\alpha}$$

$$X_B = \frac{2\alpha}{1+\alpha}$$

$\alpha=0$  ettev. in A  
(driver)

$\alpha=1$  ettev. Poral - koores

võin.k:  $\sqrt{P}$  shap. dis.

6.2.2. Zweis T

$E_{X0}$ : Zugs T ... we prosp. weakly.

$E_{Y0}$ : -11- Prod.

$$\frac{d\ln K}{dT} = \frac{\Delta_v H^\ominus}{RT^2}$$

$$\frac{d\ln K}{d(1/T)} = -\frac{\Delta_v H^\ominus}{R}$$

Vergl. Hells. Vorles

(Schnitts G-H Vorles)