

**Význam základních termodynamických funkcí na příkladu přeměn kalcit-aragonit**
**2a) Vztah mezi entalpií H a energií U**

Zjistěte změnu vnitřní energie při přechodu 1 mol kalcitu na aragonit při tlaku 1 bar a teplotě 25°C. Entalpie kalcitu je -1207,37 kJ a aragonitu -1207,43 kJ. Odpovídající hustoty jsou 2,71 g/cm<sup>3</sup> a 2,93 g/cm<sup>3</sup>. Molární hmotnost obou je 100.087 g.

**2b) Změny entropie při procesu**

Zjistěte změnu entropie systému, jeho okolí a celkovou změnu entropie při polymorfní přeměně 1 molu kalcitu na aragonit při tlaku 1 bar a teplotě 25°C. Entropie kalcitu je 91,71 J/mol K a aragonitu je 87,99 J/mol K.

**2c) Změny Gibbsovy funkce při procesu**

Zjistěte změnu Gibbsovy funkce a celkovou změnu entropie při polymorfní přeměně 1 molu kalcitu na aragonit při teplotě 25°C a tlaku 1 bar. Gibbsova funkce kalcitu je -1128842 J/mol a aragonitu -1127793 J/mol.

**2d) Fázová rovnováha**

Na základě údajů z příkladu 2a) až 2c) zjistěte pozici fázové rovnováhy mezi kalcitem a aragonitem (tzn. že budou oba v rovnováze a budou se vyskytovat spolu).

	<i>H</i> J/mol	<i>S</i> J/mol K	<i>G</i> J/mol	hustota g/cm <sup>3</sup>	mol. hm. g	<i>V</i> cm <sup>3</sup> /mol
kalcit	-1207370	91.71	-1128842	2.71	100.087	36.93
aragonit	-1207430	87.99	-1127793	2.93	100.087	34.16
$\Delta_{\text{aragonit-kalcit}}$	-60	-3.72	1049			-2.77

	<i>H</i> J/mol	<i>S</i> J/mol K	<i>G</i> J/mol	hustota g/cm <sup>3</sup>	mol. hm. g	<i>V</i> cm <sup>3</sup> /mol
kalcit	-1207370	91.71	-1128842	2.71	100.087	36.93
aragonit	-1207430	87.99	-1127793	2.93	100.087	34.16
$\Delta_{\text{aragonit-kalcit}}$	-60	-3.72	1049			-2.77