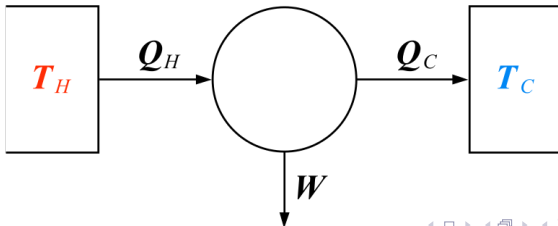


Termodynamika

Vnitřní energie, entalpie, entropie, termochemie

21. listopadu 2017



Energetické přeměny při chemických a fyzikálních procesech, přenos energie mezi látkami, vzájemné přeměny různých druhů energie.

- ▶ Rozhoduje pouze počáteční a konečný stav.
- ▶ Nezávisí na mechanismu změny.
- ▶ Předpověď směru, samovolnosti a rozsahu reakcí.
- ▶ Nepočítá s časem, neurčí rychlost nebo mechanismus děje.

- ▶ Extenzivní veličiny - závisí na příspěvcích od jednotlivých částí soustavy, jsou aditivní - hmotnost, elektrický náboj, látkové množství, ...
- ▶ Intenzivní veličiny - nejsou aditivní - teplota, tlak, viskozita, koncentrace, hustota, ...
- ▶ Stav systému - je popsán intenzivními veličinami (T , p , c).
- ▶ Stavová funkce - fyzikální charakteristika, jejíž hodnota závisí na stavu soustavy.

- ▶ Izolovaný systém - nevyměňuje s okolím ani energii, ani hmotu.
- ▶ Uzavřený systém - vyměňuje s okolím energii.
- ▶ Otevřený systém - vyměňuje s okolím energii i hmotu.
- ▶ Teplota - pravděpodobnostní veličina, popisuje makroskopické systémy.
- ▶ Teplo - část vnitřní energie.

- ▶ Nultý: Jsou-li dvě a více těles v termodynamické rovnováze s tělesem dalším, pak jsou všechna tato tělesa v rovnováze.
- ▶ První: Celkové množství energie (všech druhů) izolované soustavy zůstává zachováno.
- ▶ Druhý
 - ▶ Teplo nemůže při styku dvou těles různých teplot samovolně přecházet z tělesa chladnějšího na těleso teplejší.
 - ▶ Nelze sestavit periodicky pracující tepelný stroj, který by trvale konal práci pouze tím, že by ochlazoval jedno těleso, a k žádné další změně v okolí by nedocházelo.
- ▶ Třetí: Čistou pevnou látku nelze konečným pochodem ochladit na teplotu absolutní nuly (0 K ; $-273,15\text{ °C}$), k této teplotě se lze pouze přiblížit.

Termodynamika

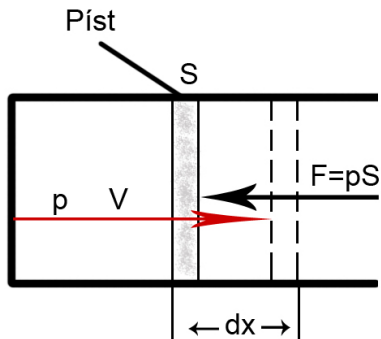
Vnitřní energie

- ▶ Stavová veličina - závisí na stavu systému, ale ne na tom, jak se systém do tohoto stavu dostal.
- ▶ Součet kinetické a potenciální energie systému, jde o energii všech částic, ze kterých se systém skládá.
- ▶
$$U = \sum_{i=0}^n \frac{1}{2} m_i v_i^2 + E_p$$
- ▶ Její absolutní hodnotu nelze změřit ani vypočítat, pouze její změny.
- ▶ $\Delta U = U_2 - U_1$
- ▶ V termodynamice platí tzv. znamková konvence: *To, co snižuje vnitřní energii systému, má zápornou hodnotu a to, co ji zvyšuje, má hodnotu kladnou.*

Termodynamika

Objemová práce W

- ▶ Práce vykonaná nebo přijatá při změně objemu systému.
- ▶ $W = Fdx = pSdx = pdV$
- ▶ $dV = Sdx$; S - plocha pístu
- ▶ Pokud systém práci koná ($dV < 0$), je $W < 0$; pokud ji přijímá ($dV > 0$) je $W > 0$.



- ▶ **Entalpie** (H) vyjadřuje množství energie uložené v systému.
- ▶ $\Delta H = \Delta U + p\Delta V$
- ▶ Za izobarických podmínek je entalpie rovna množství tepelné energie v systému.
- ▶ $\Delta H = Q$
- ▶ $dH(S, p) = TdS + Vdp$
- ▶ **Entropie** (S) popisuje neuspořádanost systému, resp. počet stavů, které může systém nabýt.
- ▶ $S = -k \sum_i P_i \ln P_i$
- ▶ $\Delta S > 0$ - Spontánní proces
- ▶ $\Delta S < 0$ - Proces probíhá v opačném směru
- ▶ $\Delta S = 0$ - Rovnováha

- ▶ ΔG je stavová funkce
- ▶ ΔG^0 - Gibbsova volná energie za standardních podmínek
 - ▶ 298,15 K (25 °C)
 - ▶ 100 000 Pa (1 bar) pro plyny
 - ▶ Koncentrace roztoků 1 mol.dm⁻³
- ▶ Hodnoty ΔG^0 jsou tabelovány
- ▶ $C + O_2 \longrightarrow CO_2$
- ▶ $\Delta G_{sluc}^0 = -394,4 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
- ▶ $\Delta G^0 = \Delta H^0 - T \Delta S^0$
- ▶ $\Delta G_{reak}^0 = \sum \nu_{prod} \Delta G_{sluc}^0 (prod) - \sum \nu_{reakt} \Delta G_{sluc}^0 (reakt)$
- ▶ ν - stechiometrický koeficient

- ▶ Reakční teplo dané reakce a reakční teplo opačné reakce jsou až na znaménka stejná.
- ▶ Výsledná hodnota reakčního tepla nezáleží na průběhu chemické reakce, ale pouze na jeho počátečním a konečném stavu.

Endotermní reakce $\Delta H > 0$

Exotermní reakce $\Delta H < 0$

Atermická reakce $\Delta H = 0$

- ▶ Pro správný výpočet reakčního tepla je nutné znát skupenství všech látek reakci.
- ▶ $\text{CH}_4(\text{g}) + 2 \text{O}_2(\text{g}) \longrightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2 \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \quad \Delta H = -802 \text{ kJ}$
- ▶ $\text{CH}_4(\text{g}) + 2 \text{O}_2(\text{g}) \longrightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2 \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \quad \Delta H = -890 \text{ kJ}$

- ▶ Standardní spalné teplo - teplo, při kterém se spálí 1 mol látky v nadbytku kyslíku. Spalná tepla prvků jsou nenulová.
- ▶ $\Delta H_{298}^0 = \sum(\Delta H_{sp}^0)_{reakt} - \sum(\Delta H_{sp}^0)_{prod}$
- ▶ Standardní slučovací teplo - teplo, při kterém vzniká 1 mol látky přímo z prvků, reakční látky musí být ve standardním stavu. Standardní slučovací tepla prvků jsou rovna nule.
- ▶ $\Delta H_{298}^0 = \sum(\Delta H_{sl}^0)_{reakt} - \sum(\Delta H_{sl}^0)_{prod}$

látka	skupenství	$\Delta H_f^0 [kj.mol^{-1}]$
I_2	(s)	0
I_2	(g)	+62
O_2	(g)	0
O_3	(g)	+142,7