

# ***KÉMIA***

## Termokémia

# Reakciók hőszinezete

---

- kémiai reakció – kémiai kötés változása
- kötésváltozás – energiaváltozás
- reakciók hőszinezete
  - exoterm – hőfelszabadulás
    - szén égése
  - endoterm – hőelnyelés
    - gyümölcscukor fotoszintézissel

# Energia és entalpia

---

- hőmennyiség mérése kaloriméterrel
  - zárt – állandó térfogat
    - energia
  - nyitott – állandó nyomás
    - entalpia
      - térfogati munka

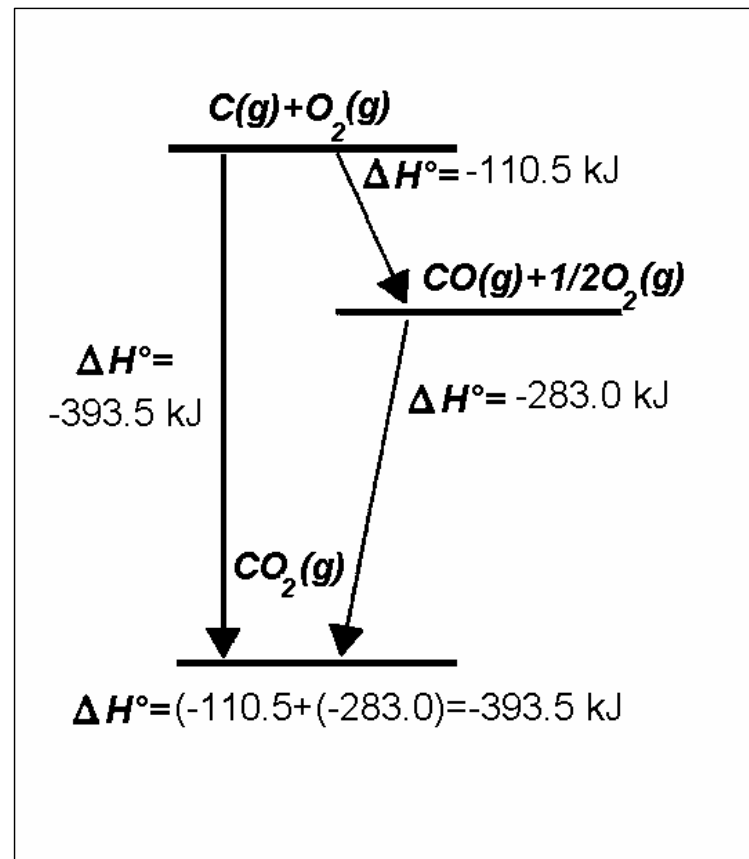
# Termokémiai egyenlet

---

- reakcióhő
  - vég- és kezdeti állapot különbsége
    - exoterm reakció negatív reakcióhő
    - endoterm reakció pozitív reakcióhő
- standard entalpiaváltozás ( $\Delta H^\circ$ )
  - 25 °C, 1 bar
- termokémiai egyenlet
  - $\text{N}_2(\text{g}) + 3\text{H}_2(\text{g}) = 2\text{NH}_3(\text{g}) \quad \Delta H^\circ = -92,38 \text{ kJ}$

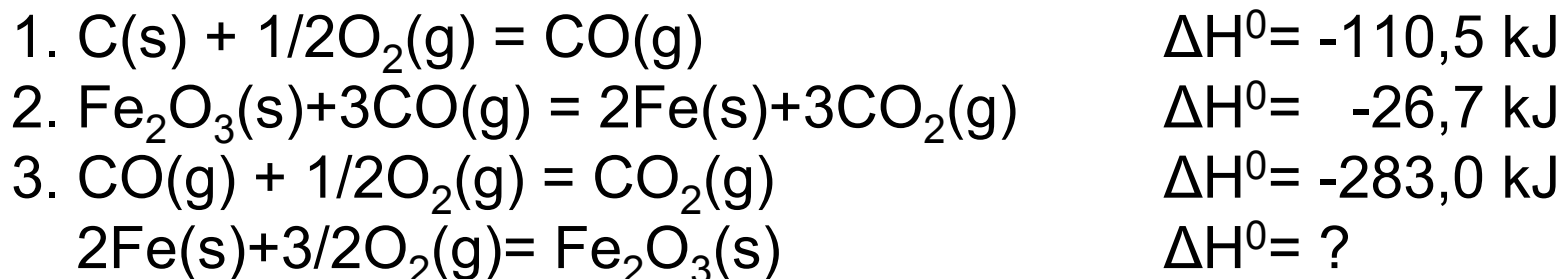
# Hess tétele

- a reakcióhő független az úttól
- Egylépéses reakció:  
 $\text{C(s)} + \text{O}_2(\text{g}) = \text{CO}_2(\text{g})$   
 $\Delta H^0 = -393,5 \text{ kJ}$
- Kétlépéses reakció:  
 $\text{C(s)} + 1/2\text{O}_2(\text{g}) = \text{CO(g)}$   
 $\Delta H^0 = -110,5 \text{ kJ}$
- $\text{CO(g)} + 1/2\text{O}_2(\text{g}) = \text{CO}_2(\text{g})$   
 $\Delta H^0 = -283,0 \text{ kJ}$



# Hess tétel alkalmazása

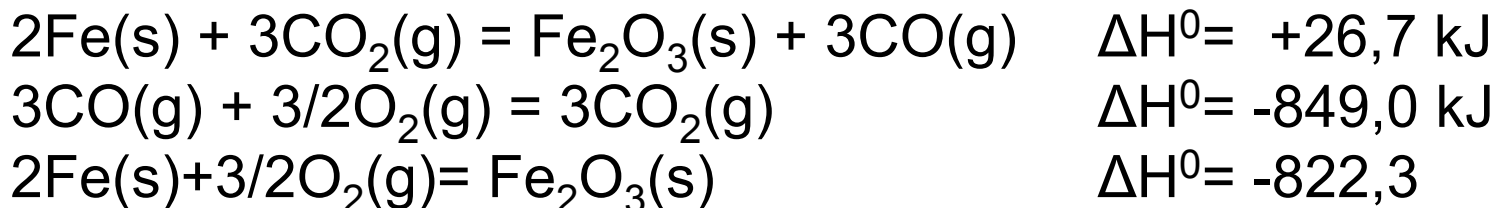
- vas oxidációja a vasgyártás adataiból



Megoldás

2. egyenlet megfordítása

3. egyenlet végigszorozva 3-mal



# Képződési entalpia ( $\Delta H^\circ_f$ )

---

- standard képződéshő
  - 1 mól anyag standard állapotú elemekből
- elemek képződéshője = 0
- használata a reakcióhő számítására

# Reakcióhő számítása

---



- $$\Delta H^0 = \sum_i \Delta H_{fi,t}^0 - \sum_i \Delta H_{fi,k}^0$$

$$\begin{aligned} \Delta H^0 &= (-1131 \text{ kJ}(\text{Na}_2\text{CO}_3)) + \\ &\quad + (-285,9 \text{ kJ}(\text{H}_2\text{O})) + (-393,5 \text{ kJ}(\text{CO}_2)) - \\ &\quad - 2(-947,7 \text{ kJ}(\text{NaHCO}_3)) = \\ &= +85 \text{ kJ endoterm reakció} \end{aligned}$$



# Reakciók termodinamikája

---

- belső energia (E) (teljes energiatartalom)
  - zárt rendszerben

$$\Delta E = Q_v$$

- nyílt rendszerben
  - térfogati munka

$$\Delta E = Q_p - p\Delta V$$

# Reakciók spontaneitása

---

- entrópia – a rendszer rendezetlensége
- folyamat entrópiaváltozása

$$\Delta S = S_{\text{termék}} - S_{\text{reagens}}$$

- spontán folyamatban a világmindenség entrópiája növekszik (II. törvény)
- 0 K, tökéletes kristály –  $S^0=0$
- folyamatra

$$\Delta S^0 = \sum S_{\text{termék}} - \sum S_{\text{reagens}}$$

# Szabadentalpia

- entalpia és entrópia
  - erősen hőfokfüggők
- reakció lejátszódása
  - alig hőfokfüggő!

$$G = H - TS$$

$$\Delta G = \Delta H - \Delta(TS)$$

		$\Delta H$	
		+	-
$\Delta S$	+	Csak magas hőmérsékleten spontán a folyamat	Minden hőmérsékleten spontán a folyamat
	-	Semmilyen hőmérsékleten sem spontán a folyamat	Csak alacsony hőmérsékleten spontán a folyamat

## Példa a szabadentalpiára

---

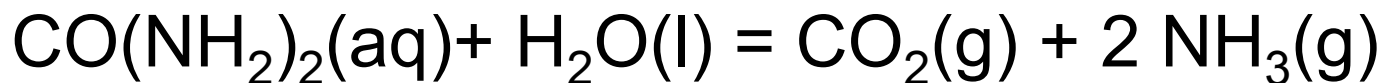
- Hány foktól spontán a karbamid bomlása?
- táblázatból

$$\Delta H^\circ = 119,2 \text{ kJ} \quad \Delta S^\circ = 354,8 \text{ J/K}$$

$$\Delta G^\circ = 119,2 - 298,15 \cdot 0,3548 = 13,4 \text{ kJ}$$

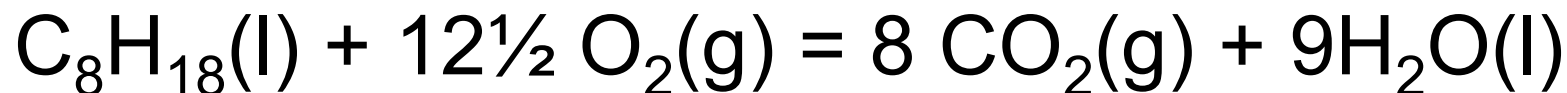
spontán, ha  $\Delta G < 0$

$$T > \frac{119,2}{0,3548} = 335,8 \text{ K} = 62,6 \text{ }^\circ\text{C}$$



## Benzin égése

---



- szabadentalpia=maximálisan munkává alakítható energia

$$\Delta G^\circ = [8 \cdot (-394,4) + 9 \cdot (-237,2) - 17,3] = - 5307 \text{ kJ}$$