

### 1.3. Termochemie

zabývá se tepelnými efekty při chemických reakcích a dějích jako je např. rozpouštění látek či skupenské přeměny.

Děje - endotermické - jsou provázeny pohlcováním tepla

- exotermické - teplo se při nich uvolňuje.

**Reakční teplo** - definuje se tak, aby bylo stavovou funkcí  $\Rightarrow$

- reakční teplo při konstantním objemu  $\Delta_r U$

- reakční teplo při konstantním tlaku  $\Delta_r H$

Reakční teplo je vztaženo na jednotkový rozsah reakce (1 mol reakčních přeměn)  $\Rightarrow$  jednotka  $\text{J mol}^{-1}$ .

#### Termochemické zákony

1) Reakční teplo dané reakce se až na znaménko rovná reakčnímu teplu reakce opačné -

tzv. I. termochemický zákon (Laplace, Lavoasiere - 1780)

2) Reakční teplo nezávisí na reakční cestě, musí být stejné, probíhá-li reakce z daných výchozích látek na produkty přímo, či přes nějaké meziprodukty - Hessův zákon (1840)

#### Standardní stav látky

- za standardní stav látky byla zvolena čistá látka při standardním tlaku ( $p^\circ = 101\,325 \text{ Pa}$ ).

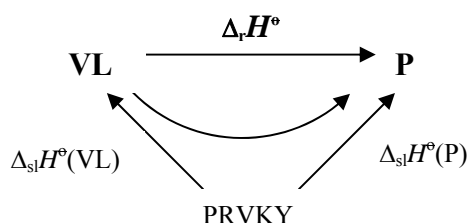
**Standardní reakční teplo**  $\Delta H_T^\circ$ ,  $\Delta U_T^\circ$  je reakční teplo reakce u níž jsou výchozí látky i produkty při dané teplotě ve svém standardním stavu.

**Standardní slučovací teplo** dané látky  $X$   $\Delta_f H_T^\circ(X)$  je standardní reakční teplo reakce, při které vznikne 1 mol této látky přímo z prvků, přičemž dané prvky jsou při zvolené teplotě a standardním tlaku ve své nejstálejší podobě. Standardní slučovací teplo prvků v jejich nejstálejší podobě je podle konvence nulové při všech teplotách.

**Standardní spalné teplo** dané látky  $X$   $\Delta_{\text{sp}}H^{\circ}_{\text{T}}(X)$  je standardní reakční teplo reakce, při které dojde ke spálení 1 molu této látky na konečné spalné produkty.

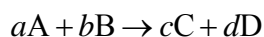
### Výpočet reakčního tepla reakce ze slučovacích a spalných tepel složek dané reakce

#### 1) Využití slučovacích tepel



$$\Delta_{\text{r}}H^{\circ} = -\Delta_{\text{sl}}H^{\circ}(\text{VL}) + \Delta_{\text{sl}}H^{\circ}(\text{P})$$

Pro reakci



$$\Delta_{\text{r}}H^{\circ} = c\Delta_{\text{sl}}H^{\circ}(\text{C}) + d\Delta_{\text{sl}}H^{\circ}(\text{D}) - a\Delta_{\text{sl}}H^{\circ}(\text{A}) - b\Delta_{\text{sl}}H^{\circ}(\text{B})$$

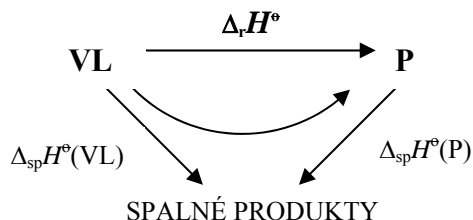
Pro obecný zápis stechiometrické rovnice

$$\sum_i \nu_i L_i = 0 \quad \nu_i > 0 \text{ pro produkty}$$

$\nu_i < 0$  pro výchozí látky

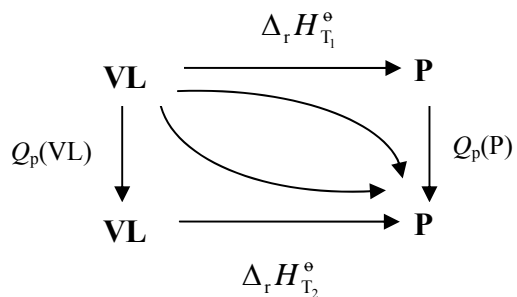
$$\Delta_{\text{r}}H^{\circ} = \sum_i \nu_i \Delta_{\text{sl}}H^{\circ}(L_i)$$

#### 2) Využití spalných tepel



$$\Delta_{\text{r}}H^{\circ} = -\sum_i \nu_i \Delta_{\text{sp}}H^{\circ}(L_i)$$

## Závislost reakčního tepla na teplotě - Kirchhoffova rovnice



$$Q_{\text{VL}} + \Delta_r H_{T_2}^\circ = \Delta_r H_{T_1}^\circ + Q_P$$

Pro reakci  $\sum_i \nu_i L_i = 0$

$$\Delta_r H_{T_2}^\circ = \Delta_r H_{T_1}^\circ + \int_{T_1}^{T_2} \sum_i \nu_i c_{p,m}(L_i) dT$$