

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 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 ($p^\ominus = 101\,325 \text{ Pa}$).

Standardní reakční teplo ΔH_T^\ominus , ΔU_T^\ominus je reakční teplo reakce u níž jsou výchozí látky i produkty při dané teplotě ve svém standardním stavu.

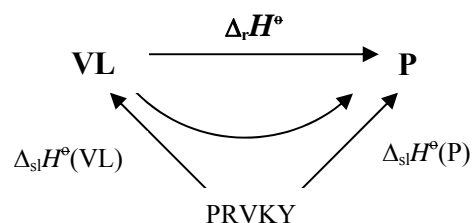
Standardní slučovací teplo dané látky X, $\Delta_f H_T^\ominus(X)$, je standardní reakční teplo reakce, při které vznikne 1 mol této látky přímo z prvků, přičemž dané prvky jsou při zvolené teplotě a standardním tlaku ve své nejstálější podobě. Standardní

slučovací teplo prvků v jejich nejstálější 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.

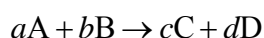
Výpočet reakčního tepla reakce ze slučovacích a spalných tepel složek dané reakce

1) Využití slučovacích tepel



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

Pro reakci



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

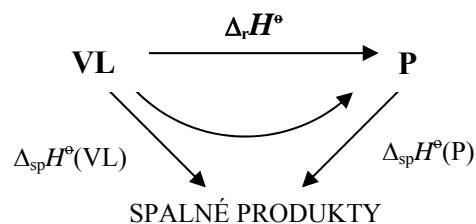
Pro obecný zápis stechiometrické rovnice

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

$\nu_i < 0$ pro výchozí látky

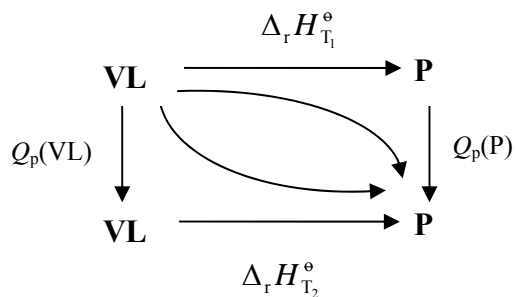
$$\Delta_r H^\circ = \sum_i \nu_i \Delta_{\text{sl}} H^\circ(L_i)$$

2) Využití spalných tepel



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

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 $\sum_i \nu_i L_i = 0$

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