TERMOCHEMIE

Reakční entalpie při izotermním průběhu reakce, rozsah reakce

1

Kolik tepla se uvolní (nebo spotřebuje) při výrobě 2,2 kg acetaldehydu

$$C_2H_5OH(g) = CH_3CHO(g) + H_2(g)$$

(a) při teplotě 298 K, (b) při teplotě 700 K

Látka	$\Delta_{sl}H^{\ominus}(298)$ /(kJ mol^{-1})	M /(g mol^{-1})	C_{pm} /(J K^{-1} mol^{-1})
$C_2H_5OH(g)$	–250,0	46	$32{,}9 + 0{,}12 \cdot T$
$CH_3CHO(g)$	–175,0	44	$27{,}3 + 0{,}09 \cdot T$
$H_2(g)$			$28 + 0{,}003 \cdot T$

[$Q(298)$ =3,75 MJ , $Q(700)$ = 3,93 MJ]

2

Ethylen reaguje s vodní párou podle rovnice

$$C_2H_2(g) + H_2O\ (g) = C_2H_5OH(g)\ .$$

Při teplotě 700 K reakce proběhne ze 72 %. Kolik tepla je nutno odvádět z reaktoru na 1 mol přiváděného ethylenu, má-li být teplota vstupních i výstupních látek 700 K a reakce probíhá za standardního tlaku? Potřebná data jsou v připojené tabulce.

Látka	$\Delta_{sl}H^{\ominus}$ (298,15 K) (kJ mol^{-1})	$C^{\ominus}_{pm}$ (J mol^{-1} K^{-1})
ethylen (g)	52,4	$24{,}85 + 82{,}56.10^{-3}\ T – 17{,}1.10^{-6}\ T^2$
voda (g)	–241,81	$28{,}87 + 14{,}59.10^{-3}\ T – 1{,}7.10^{-6}\ T^2$
ethanol (g)	–234,80	$38{,}45 + 123{,}6.10^{-3}\ T – 25{,}8.\ 10^{-6}\ T^2$

[Q = –33,812 kJ ($\Delta_rH^{\ominus}$(298,15 K) = -45390 J mol^{-1}, $\Delta_rH^{\ominus}$(700 K) = -46961,3 J mol^{-1})]]

3

Kolik energie se uvolní, jestliže vypijete jeden litr vodky, který obsahuje 312,8 g ethanolu (M = 46 g mol^{-1}). Předpokládejte, že ethanol se při 37ºC spaluje na oxid uhličitý a kapalnou vodu:

$$C_2H_5OH\ (\ell) + 3\ O_2\ (g) = 3\ H_2O(\ell) + 2\ CO_2\ (g)$$

Reakce proběhne z 85 %. Při této teplotě mají slučovací entalpie hodnoty:

látka	C_2H_5OH (ℓ)	CO_2 (g)	$H_2O(\ell)$	O_2 (g)
$\Delta_{sl}H^{\ominus}$ / (kJ mol^{-1})	–278	–393	–286	–
C_{pm} /(J K^{-1} mol^{-1})	128	47	75	37

Kolik energie by se uvolnilo, kdyby spalování ethanolu probíhalo při teplotě o 20° vyšší? Je tato energie menší nebo větší než při teplotě 37°C?

[Q(310,15) = 7895,48 kJ; Q(330,15) = 7886,232 kJ]

4

Určete, kolik litrů HCN (měřeno za normálních podmínek; předpokládejte ideální chování) je možno získat, jestliže při výrobě kyanovodíku reakcí amoniaku s oxidem uhelnatým

$$NH_3(g) + CO(g) = HCN(g) + H_2O(\ell)$$

za konstantní teploty 370 K dodáme teplo 47 kJ. Reakce za těchto podmínek kvantitativně.

Data:

látka	$\Delta_{sl}H^{\ominus}$ (300) /(kJ mol^{-1})	C_{pm} /(J K^{-1} mol^{-1})
NH_3(g)	–46	36
CO(g)	–110	28
HCN(g)	+135	37
H_2O(ℓ)	–286	75

[V_{HCN} = 126 dm^3]

5

Amoniak lze v laboratoři připravit reakcí

$$2\ NH_4Cl\ (s) + CaO\ (s) = CaCl_2\ (s) + H_2O\ (\ell) + 2\ NH_3\ (g) \qquad (1)$$

Vypočítejte teplo vyměněné s okolím při přípravě 155 dm^3 plynného amoniaku při tlaku 106,2 kPa a teplotě (a) 298 K , (b) 360 K. Je dáno

- standardní reakční entalpie reakce

$$CaO\ (s) + Cl_2\ (g) = CaCl_2\ (s) + ½\ O_2\ (g) \qquad (2)$$
$$\Delta_r H_2^{\ominus} / (\text{kJ mol}^{-1})\ (298\ \text{K}) = -150{,}7\ \text{kJ mol}^{-1}$$

- standardní reakční entalpie reakce

$$\Delta_{sl}H^{\ominus}\ (NH_3, g, 298\ K) / (\text{kJ mol}^{-1}) = -46{,}2\ \text{kJ mol}^{-1}$$

- standardní spalné teplo vodíku (vzniká kapalné voda)

$$\Delta_{spal}H^{\ominus}\ (H_2, g, 298\ K) / (\text{kJ mol}^{-1}) = -285{,}9\ \text{kJ mol}^{-1}$$

Střední molární tepelné kapacity mají hodnoty

C_{pm} (CaO, s) = 51 J K^{-1} mol^{-1} C_{pm} (NH_4Cl, s) = 95 J K^{-1} mol^{-1}
C_{pm} ($CaCl_2$, s) = 112 J K^{-1} mol^{-1} C_{pm} (NH_3, g) = 38 J K^{-1} mol^{-1}
C_{pm} (H_2O, ℓ) = 75 J K^{-1} mol^{-1}

[(a) Q(298) = 338,18 kJ , (b) Q(360) = 344,528 kJ]

6

Butadien se vyrábí z ethanolu reakcí v plynné fázi

$$2\ C_2H_5OH\ (g) = C_4H_6\ (g) + 2\ H_2O\ (g) + H_2\ (g)$$

při teplotě 600 K. Vypočítejte, kolik tepla se uvolní nebo spotřebuje, jestliže je do reaktoru uvedeno 2,714 kg ethanolu (M = 46 g mol^{-1}) a směs opouštějící reaktor obsahuje 0,414 kg nezreagovaného ethanolu, vše při teplotě 600 K. Data:

Látka	$\Delta_{sl}H^{\ominus}$ (300) /(kJ mol^{-1})	C_{pm} /(J K^{-1} mol^{-1})
C_2H_5OH (g)	–234	108
C_4H_6 (g)	110	133
H_2O (g)	–242	37
H_2 (g)		29

[Q(600) = 2,5 MJ

Izotermní průběh reakce za konstantního tlaku a za konstantního objemu

7

Při spálení 1,5 g pevné šťavelové kyseliny v kalorimetru při 25°C přejde do okolí teplo 4,226 kJ (při spalování vzniká kapalná voda). Vypočtěte $\Delta_{spal}H_m^{\ominus}$ a $\Delta_{spal}U_m^{\ominus}$ kyseliny šťavelové. Molární hmotnost kyseliny šťavelové je 90 g/mol,

[$\Delta_{spal}U_m^{\ominus}$ = –253,56 kJ mol^{-1}; $\Delta_{spal}H_m^{\ominus}$ = –249,841 kJ mol^{-1}]

8

V kalorimetrické bombě obsahující 3 mol CO a 2 mol O_2 proběhla kvantitativně reakce

$$2\ CO(g) + O_2(g) = 2\ CO_2(g).$$

Aby teplota systému zůstala na hodnotě 25°C, bylo nutno odebrat teplo 545,25 kJ. Vypočítejte z těchto údajů změnu entalpie pro výše uvedenou reakci. O plynech předpokládáme, že se chovají podle stavové rovnice ideálního plynu.

[$\Delta H_m = 361021{,}2\ J\ mol^{-1}$]

9

Vzorek kapalného acetonu o hmotnosti 1,22 g byl spálen v kalorimetrické bombě za vzniku kapalné vody a plynného oxidu uhličitého. Tepelná kapacita kalorimetrické bomby včetně vzorku činila 7086 J K^{-1}. Při pokusu bylo zaznamenáno zvýšení teploty z 22,87 na 25,67°C . Určete spalná tepla acetonu za konstantního tlaku a objemu. M(aceton) = 58,08 g mol^{-1}.

[$\Delta_{spal}U_m = -944800\ J\ mol^{-1}$; $\Delta_{spal}H_m = -947272{,}75\ J\ mol^{-1}$]

10

Formaldehyd vzniká podle reakce

$$CH_3OH\ (g) = CH_2O\ (g) + H_2\ (g)$$

při teplotě 200°C. Vypočítejte teplo, které je nutno dodat do reaktoru na 1 mol získaného formaldehydu (a) za konstantního tlaku, (b) za konstantního objemu. Data:

látka	$\Delta_{sl}H^{\ominus}$ (298,15) /(kJ mol^{-1})	C_{pm} /(J K^{-1} mol^{-1})
CH_3OH (g)	–201	$22 + 0{,}076 \cdot T$
CH_2O (g)	–115,9	$22 + 0{,}045 \cdot T$
H_2 (g)	–	$28 + 0{,}003 \cdot T$

[$\Delta_r H^{\ominus}(473{,}15) = 88410{,}315\ J\ mol^{-1}$; $\Delta_r U^{\ominus}(473{,}15) = 84476{,}56\ J\ mol^{-1}$]

Izotermní průběh simultánních reakcí, rozsah reakce

11

Při pyrolýze propanu za vyšších teplot probíhají reakce

$$C_3H_8\ (g) = C_3H_6\ (g) + H_2\ (g)$$
$$C_3H_8\ (g) = C_2H_4\ (g) + CH_4\ (g)$$

Vypočítejte množství tepla, které je nutno do reaktoru přivést, aby v něm za konstantní teploty proběhl rozklad čtyř molů propanu. Produkty rozkladu obsahují 22 mol. % methanu. Za uvažované teploty mají slučovací entalpie tyto hodnoty:

$\Delta_{sl}H^{\ominus}$ (C_3H_8 , g) = –102,6 kJ mol^{-1}, $\Delta_{sl}H^{\ominus}$ (C_2H_4 , g) = 53,1 kJ mol^{-1}

$\Delta_{sl}H^{\ominus}$ (C_3H_6 , g) = 20,8 kJ mol^{-1}, $\Delta_{sl}H^{\ominus}$ (CH_4 , g) = –75,7 kJ mol^{-1}

[$Q = 417{,}216$ kJ]

12

Při přípravě acetaldehydu probíhá současně s exotermickou oxidací i endotermická dehydrogenace ethanolu:

$$C_2H_5OH\ (g) + ½\ O_2\ (g) = CH_3CHO\ (g) + H_2O(g) \quad (1)$$
$$C_2H_5OH\ (g) = CH_3CHO\ (g) + H_2(g) \quad (2)$$

Vypočítejte, kolik procent acetaldehydu vzniká podle reakce (2), jestliže syntéza acetaldehydu probíhá při konstantní teplotě 500°C za adiabatických podmínek. Standardní slučovací entalpie jednotlivých složek mají při této teplotě hodnoty

$$\Delta_{sl}H^{\ominus}\,(C_2H_5OH\,,\,g) = -250\ \text{kJ mol}^{-1},$$
$$\Delta_{sl}H^{\ominus}\,(CH_3CHO\,,\,g) = -175\ \text{kJ mol}^{-1}$$
$$\Delta_{sl}H^{\ominus}\,(H_2O\,,\,g) = -250\ \text{kJ mol}^{-1}$$

[70 % acetaldehydu vzniká reakcí (2)]

13

Při přípravě kyseliny dusičné z ledku mohou současně probíhat tyto reakce:

$$KNO_3(s) + H_2SO_4(\ell) = KHSO_4(s) + HNO_3(g) \qquad (1)$$
$$2\ KNO_3(s) + H_2SO_4(\ell) = K_2SO_4(s) + 2\ HNO_3(g) \qquad (2)$$

Kolik tepla se uvolní (nebo spotřebuje) při výrobě 1,26 kg kyseliny dusičné za konstantní teploty 370 K a normálního tlaku, jestliže 80 % tohoto množství vzniká podle reakce (1)? Data:

	$\Delta_{sl}H^{\ominus}$ (298) /(kJ mol^{-1})	C_{pm} /(J K^{-1} mol^{-1})
KNO_3 (s)	–494,6	102
$KHSO_4$ (s)	–1146,4	128
HNO_3 (g)	–134,3	94
H_2SO_4 (ℓ)	–814	167
K_2SO_4 (s)	–1425,1	120

[Q =602,184 kJ ($\Delta_rH_1^{\ominus}(370)$ = 24,516 kJ mol^{-1} ; $\Delta_rH_2^{\ominus}(370)$ = 104,964 kJ mol^{-1})]

14

Oxid uhelnatý se vyrábí přeháněním směsi CO_2 a O_2 přes rozžhavený uhlík o teplotě 1200 K za normálního tlaku. Probíhají současně tyto reakce:

$$C(s) + CO_2\,(g) = 2\ CO\ (g) \qquad \Delta_rH_1^{\ominus}\,(298{,}15\ \text{K}) = 172{,}45\ \text{kJ mol}^{-1},$$
$$C(s) + \tfrac{1}{2}\,O_2\,(g) = CO\ (g) \qquad \Delta_rH_2^{\ominus}\,(298{,}15\ \text{K}) = -110{,}53\ \text{kJ mol}^{-1},$$

přičemž reaktanty v plynném stavu mají teplotu 1200 K. Určete poměr látkového množství O_2 a CO_2, aby úhrnné reakční teplo bylo nulové. Použijte následující tepelné kapacity (v J K^{-1} mol^{-1}).

$$C_{pm}\,(CO) = 27 + 0{,}0042\cdot T \qquad C_{pm}\,(CO_2) = 33{,}4 + 0{,}019\cdot T$$
$$C_{pm}\,(O_2) = 27 + 0{,}0042\cdot T \qquad C_{pm}\,(C) = 4{,}0 + 0{,}017\cdot T$$

[$(n_{O_2})_0/\,(n_{CO_2})_0$ = 0,753 ($\Delta_rH_1^{\ominus}$ (1200 K) = 168775,44 J mol^{-1}, $\Delta_rH_2^{\ominus}$ (1200 K) = –112028,17 J mol^{-1}]

Neizotermní průběh reakce - obecná entalpická bilance

15 Neizotermní neadiabatický průběh

Vypočtěte teplo, které získáme spálením 100 g kapalného methanolu (M (CH_3OH) = 32,0 g mol^{-1}) za standardního tlaku za vzniku H_2O(g):
(a) při teplotě 25ºC za konstantního tlaku,
(b) ve spalovacím zařízení, do kterého přichází kapalný methanol a vzduch o teplotě 25ºC,
(c) v zařízení do kterého přichází methanol o teplotě 25ºC a vzduch předehřátý na teplotu 150ºC.
V případech (b) a (c) odcházejí spaliny s teplotou 200ºC. Pro spalování se používá dvojnásobného množství vzduchu (předpokládejte, že obsahuje 20 mol. % O_2 a zbytek N_2). Pro výpočet máte k dispozici následující data:

	$CH_3OH(\ell)$	$O_2(g)$	$H_2O(g)$	$CO_2(g)$	$N_2(g)$
$\Delta_{sl}H^{\ominus}(298{,}15\ )/(\text{kJ mol}^{-1})$	–238,57	0	–241,81	–393,51	0
$C_{pm}^{\ominus}/(\text{J K}^{-1}\ \text{mol}^{-1})$	–	30,5	33,0	39,1	29,0

[a) $Q = -1995{,}5$ kJ, b) $Q = -1722{,}7$ kJ, b) $Q = -1894{,}4$ kJ (nCH3OH = $\xi = 3{,}125$)]

16 Neizotermický adiabatický a neadiabatický průběh

Pro reakci A = B při teplotě 300 K platí $\Delta_r H^{\ominus} = -50\ \text{kJ mol}^{-1}$. Izobarické tepelné kapacity látek jsou $\bar{C}_{pm}^{\ominus}$ (A) = 100 J K^{-1} mol^{-1}, $\bar{C}_{pm}^{\ominus}$ (B) = 125 J K^{-1} mol^{-1}. Na základě těchto dat vypočtěte:

(a) Adiabatickou teplotu reakce, přichází-li látka A do reaktoru s teplotou 300 K
(b) Adiabatickou teplotu reakce, přichází-li do reaktoru látka A předehřáta na teplotu 500 K.
(c) Adiabatickou teplotu, jestliže tepelné ztráty přepočtené na 1 mol zreagované látky A dosahují hodnoty 10 kJ mol^{-1}.
(d) Adiabatickou teplotu reakce, přichází-li do reaktoru látka A s teplotou 300 K a přeměna A na B probíhá pouze z 80 %.
(e) Teplo, které vymění reaktor s okolím, jestliže vstupuje-li do reaktoru 1 mol látky A při teplotě 500 K a látka B odchází s teplotou 800 K.
(f) Kolik musíme přidat dusíku (inert) k 1 molu látky A, aby adiabatická teplota reakce dosáhla maximálně hodnoty 500 K. Vstupní teplota látky A a dusíku je 300 K ($\bar{C}_{pm}^{\ominus}(N_2)$ = 29 J K^{-1} mol^{-1}).

Ve všech případech, s výjimkou bodu (d), předpokládejte úplnou přeměnu látky A na B.

[a) $T = 700$ K, b) $T = 860$ K, c) $T = 620$ K, d) $T = 633{,}3$ K, e) $Q = -7500$ J mol^{-1}, f) $n_{N_2} = 4{,}31$ mol]

17 Neizotermní adiabatický průběh, T_{ad}

Vypočtěte teplotu plamene, dosaženou při spalování ethanu dvojnásobným množstvím vzduchu (80 mol. % N_2 a 20 mol.% O_2). Počáteční teplota plynu je 25°C a spalování na oxid uhličitý a vodu probíhá adiabaticky. K disposici jsou pouze data uvedená v tabulce:

	$C_2H_6(g)$	$CO_2(g)$	$H_2O(g)$	$N_2(g)$	$O_2(g)$
$\Delta_{sl}H^{\ominus}$ (298,15 K)/ (kJ mol^{-1})	–84,52	–393,7	–241,94	0	0
$\bar{C}_{pm}^{\ominus}$ /(J mol^{-1} K^{-1})		60	39,8	34,8	33,7

[T = 1370,8 K ($\Delta_r H^{\ominus}$ (298,15 K) = –1428,7 kJ mol^{-1})]

18 Neizotermní adiabatický průběh, T_{max}

V 1 m^3 vzduchu (t = 25ºC, p = 100 kPa, 21 obj. % kyslíku a 79 obj. % dusíku) je 60 g uhelného prachu (předpokládejte, že se jedná o čistý uhlík). Vypočtěte maximální teplotu, které by mohlo být dosaženo při adiabatickém spálení tohoto prachu na CO_2 za konstantního tlaku. Při výpočtu použijte tato data:

	$CO_2(g)$	$N_2(g)$	$O_2(g)$
$\Delta_{sl}H^{\ominus}(298{,}15)$ / (kJ mol^{-1})	–393,52	0	0
$\bar{C}_{pm}^{\ominus}$ (J K^{-1} mol^{-1})	52,6	35,5	34,3

[T = 1598,2 K (n_{vzduch} = 40,3418 mol)]

19 Neizoermní adiabatický průběh, T_0

Propan se spaluje za adiabatických podmínek dvojnásobným množstvím vzduchu (21 mol.% kyslíku, 78 mol.% dusíku, 1 mol.% argonu). Vypočtěte na jakou teplotu je zapotřebí předehřát vzduch,

aby adiabatická teplota reakce dosáhla hodnoty 1650 K. Propan vstupuje do reaktoru s teplotou 25°C. Uvažujte, že všechny látky jsou v plynném stavu a předpokládejte úplné spálení propanu. Pro jednotlivé látky jsou zadány slučovací entalpie a střední tepelné kapacity:

Látka	Propan	CO_2 (g)	H_2O (g)	O_2 (g)	N_2 (g)	Ar (g)
$\Delta_{sl}H^{\ominus}(298{,}15)$ / (kJ/mol)	–103,85	–393,51	–241,81	0	0	0
$\bar{C}^{\ominus}_{pm}$ / (J mol^{-1} K^{-1})	142,9	48,05	38,73	32,78	31,35	20,78

[T_{vzduch} = 410,96 K ($\Delta_r H^{\ominus}$ (298,15 K) = –2043,92 kJ mol^{-1})

20 Neizotermní neadiabatický průběh, T_{kon}

Zemní plyn se mísí se vzduchem (vzduch je v 50 % přebytku a obsahuje 79 obj. % N_2 a 21 obj. % O_2) o teplotě 25ºC před hořákem kotle, ve kterém se methan spaluje. Na každý 1 m^3 zemního plynu (měřeno při teplotě 15ºC a tlaku 101,32 kPa) se z kotle odebere 30 MJ tepla. Určete teplotu spalin. Zemní plyn obsahuje 95 mol. % methanu a zbytek je dusík. U zemního plynu předpokládejte ideální chování. Data:

Látka	CH_4 (g)	CO_2 (g)	H_2O (g)	O_2 (g)	N_2 (g)
$\Delta_{sl}H^{\ominus}(298{,}15)$ / (kJ/mol)	–74,69	–393,51	–241,81	0	0
$\bar{C}^{\ominus}_{pm}$ /(J mol^{-1} K^{-1})	60,8	48,05	38,73	32,78	31,35

[T = 406,7 K ($\Delta_r H^{\ominus}$ (298,15 K) = –802,44 kJ mol^{-1}, n_{CH_4} = 40,18 mol]

21 Neizotermní neadiabatický průběh, T_0

Propen reaguje v plynné fázi s vodní párou za vzniku 2-propanolu.

$$C_3H_6\,(g) + H_2O\,(g) = C_3H_7OH\,(g)$$

Vypočítejte, při jaké teplotě byla do reaktoru byla přivedena směs *dvou* molů propenu a *čtyř* molů vodní páry, jestliže teplota produktů byla 560 K a na úplné zreagování těchto dvou molů propenu bylo nutno dodat 80 kJ tepla. Data:

Látka	$\Delta_{sl}H^{\ominus}$ (298) /(kJ mol^{-1})	$\bar{C}^{\ominus}_{pm}$ /(J K^{-1} mol^{-1})
H_2O (g)	–241	52
C_3H_6 (g)	+20	75
C_3H_7OH (g)	–273	102

[T_0 = 456,4 K]

22 Neizotermní adiabatický průběh, složení výchozí směsi

Čistý methan se spaluje s přebytkem vzduchu (21 obj. % kyslíku a 79 obj. % dusíku). Teplota výchozích látek je 25°C. Teplota spalin nesmí být z technologických důvodů větší než 1500 K. Jaký minimální přebytek vzduchu je nutno použít, aby při adiabatickém uspořádání nebyla uvedená teplota překročena. Předpokládejte, že plyny se chovají ideálně. Data:

Látka	CH_4 (g)	CO_2 (g)	H_2O (g)	O_2 (g)	N_2 (g)
$\Delta_{sl}H^{\ominus}(298{,}15)$ / (kJ mol^{-1})	–74,69	–393,51	–241,81	0	0
$\bar{C}^{\ominus}_{pm}$ /(J mol^{-1} K^{-1})	60,8	48,05	38,73	32,78	31,35

[n_{vzduch} / n_{CH_4} = 2,016 ($\Delta_r H^{\ominus}$ (298,15 K) = –802,44 kJ mol^{-1}]