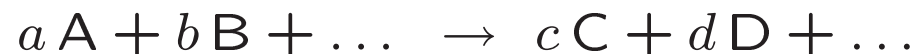


Zápis reakce:



nebo ($\nu_{\text{produkty}} > 0$, $\nu_{\text{vých.látky}} < 0$)

$$0 = \sum_{i=1}^k \nu_i R_i$$

Reakční obrat: zreaguje a mol látky A a b mol látky B ...

Reakční teplo Q_r je množství tepla vyměněné s okolím při izotermickém průběhu reakce, vztažené na reakční obrat.

Rozměr: $[Q_r] = \text{J mol}^{-1}$

Reakční entalpie z entalpií složek:
$$\Delta_r H = \sum_{i=1}^k \nu_i H_i$$

Standardní reakční entalpie $\Delta_r H_m^\ominus$ je reakční teplo reakce probíhající za dané teploty a standardního tlaku $p^{\text{st}} = 101,325 \text{ kPa}$. Látky jsou ve svých standardních stavech, plyny se chovají ideálně.

Nověji $p^{\text{st}} = 100 \text{ kPa}$.

Synonyma: standardní reakční teplo, standardní změna reakční entalpie, izobarické reakční teplo, reakční teplo, tepelné zabarvení reakce.

Standardní reakční vnitřní energie

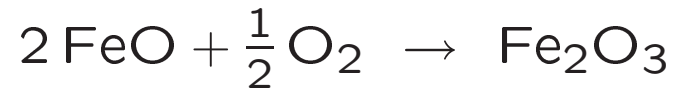
Standardní reakční vnitřní energie $\Delta_r U_m^\ominus$ je reakční teplo reakce probíhající za dané teploty a daného konstantního objemu. Látky jsou ve svých standardních stavech, plyny se chovají ideálně.

Přepočet reakční entalpie a reakční vnitřní energie ^{s.3}_{B03}

Zanedbáme objem kondenzovaných fází:

$$\Delta_r U_m^\ominus = \Delta_r H_m^\ominus - \Delta_r(pV_m) = \Delta_r H_m^\ominus - \nu^{(g)} RT \quad \nu^{(g)} = \sum_{(g)} \nu_i$$

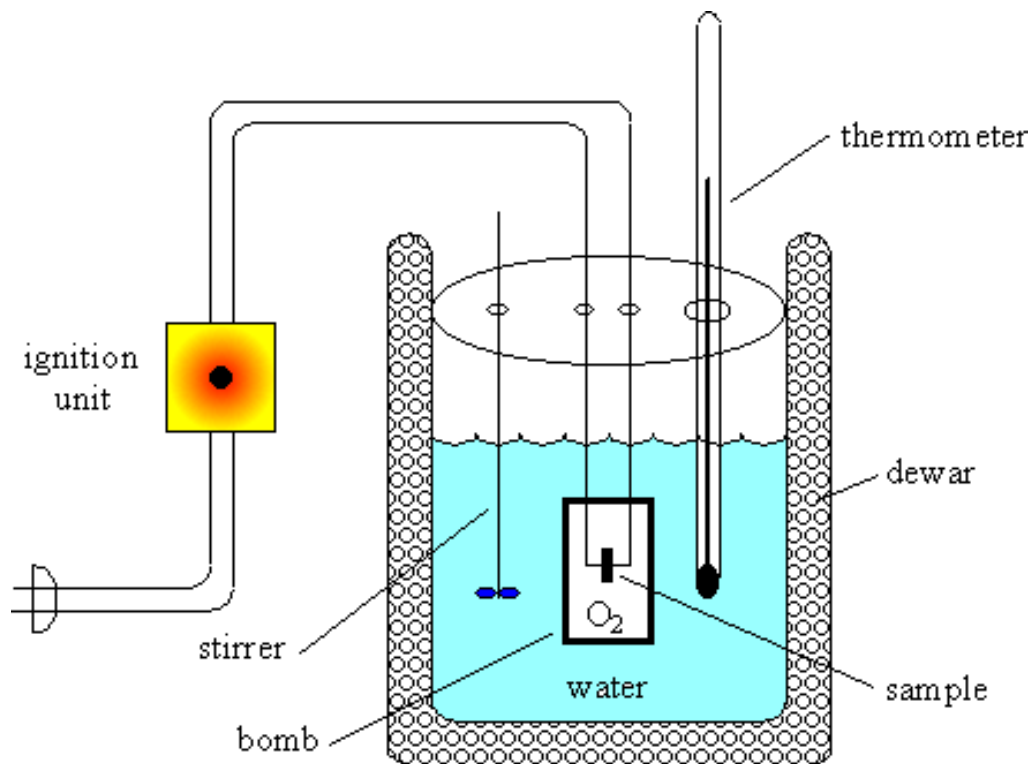
Příklad. Standardní reakční entalpie reakce



je $\Delta_r H_m^\ominus = -281.41 \text{ kJ mol}^{-1}$ za teploty 298.15°C . Vypočtete standardní reakční vnitřní energii.

$-280.17 \text{ kJ mol}^{-1}$

[V] \Rightarrow měří se $\Delta_r U$



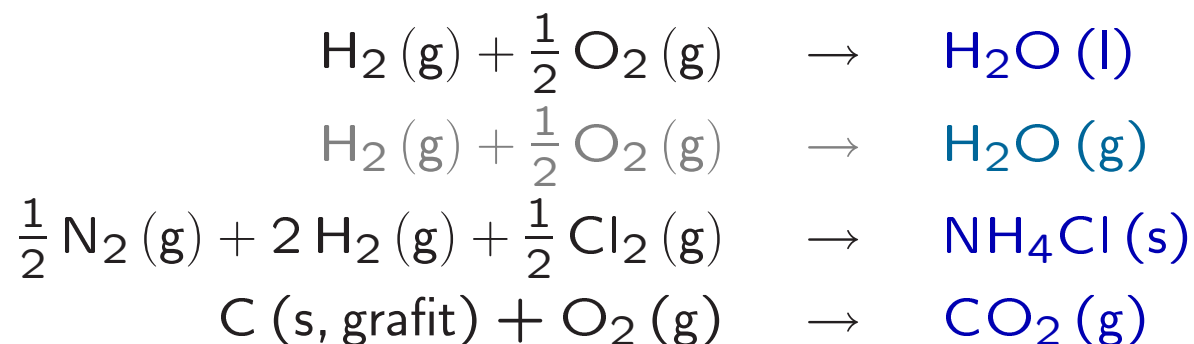
kalorimetrická bomba



kalorická bomba

Slučovací reakce látky A je reakce, při které vzniká **jeden mol** této látky z prvků.

Prvky jsou zpravidla ve skupenství a molekulové formě, která je při dané T (obv. 298,15 K) a p^{st} nejstabilnější.

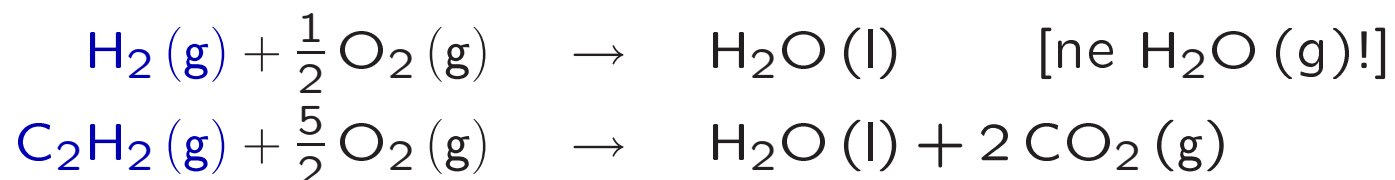


Standardní slučovací entalpie $\Delta_{\text{sl}}H_{\text{m}}^{\ominus}$ je standardní reakční entalpie slučovací reakce.

Anglicky: Standard enthalpy of formation, $\Delta_{\text{f}}H_{\text{m}}^{\ominus}$

\Rightarrow Standardní slučovací entalpie prvků v nejstabilnější modifikaci je rovna nule

Spalná reakce látky A je reakce, při které z 1 molu látky vzniká reakcí s kyslíkem H_2O , CO_2 , SO_2 , N_2 ...



Standardní spalná entalpie $\Delta_{\text{spal}}H_m^\ominus$ je standardní reakční entalpie spalné reakce.

Anglicky: Standard enthalpy of combustion, $\Delta_c H_m^\ominus$

Výhřevnost = $|\Delta_{\text{spal}}H_m^\ominus|$, vzniká $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$

Jestliže reakce R je lineární kombinací reakcí R_1, R_2, R_3, \dots , pak standardní reakční entalpie reakce R je stejnou lineární kombinací standardních reakčních entalpií reakcí R_1, R_2, R_3, \dots

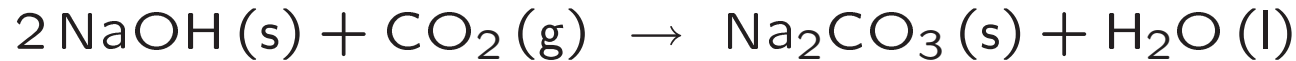
$$\Delta_r H = \sum_{i=1}^k \nu_i H_i$$

$$\Delta_r H_m^\ominus = \sum_{i=1}^k \nu_i \Delta_{sl} H_{mi}^\ominus$$

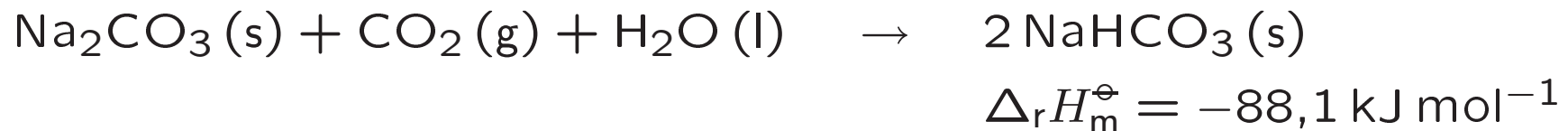
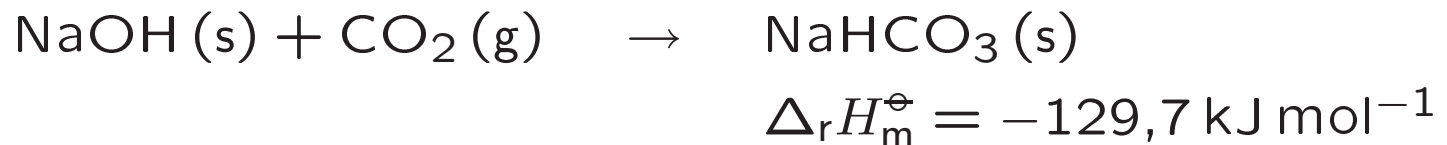
$$\Delta_r H_m^\ominus = - \sum_{i=1}^k \nu_i \Delta_{spal} H_{mi}^\ominus$$

Příklady

Příklad. Vypočtete $\Delta_r H_m^\ominus$ pro reakci ($T = 298,15 \text{ K}$)



Z následujících údajů



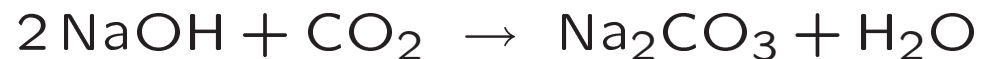
$$\Delta_r H_m^\ominus = -171,3 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Příklad. Jaká je výhřevnost methanu? Jaká je maximální teoretická účinnost kondenzačního kotle na zemní plyn (\approx methan)?

Data: Standardní spalná entalpie methanu je $-890.6 \text{ kJ mol}^{-1}$, výparná entalpie vody je 44.0 kJ mol^{-1} .

$$-802.6 \text{ kJ mol}^{-1}, 111\%$$

Vypočtete $\Delta_r H_m^\ominus$ ($T = 298,15 \text{ K}$) pro reakci



Z následujících standardních slučovacích entalpií

látka	$\Delta_{\text{sl}} H_m^\ominus / \text{kJ mol}^{-1}$
$\text{Na}_2\text{CO}_3(\text{s})$	-1130,8
$\text{NaOH}(\text{s})$	-425,9
$\text{NaHCO}_3(\text{s})$	-949,1
$\text{CO}_2(\text{g})$	-393,5
$\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	-285,8

$$\Delta_r H_m^\ominus = -171,3 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Závislost entalpie na teplotě

Za konstantního tlaku [p]:

Bez fázového přechodu:

$$H_m(T) = H_m(T_0) + \int_{T_0}^T C_{pm}(T') dT'$$

S fázovým přechodem kapalina/pára (NBV = normální bod varu):

$$H_m(T) = H_m(T_0) + \int_{T_0}^{T_{\text{NBV}}} C_{pm}^{(l)}(T') dT' + \Delta_{\text{výp}} H_m(T_{\text{NBV}}) + \int_{T_{\text{NBV}}}^T C_{pm}^{(g)}(T') dT'$$

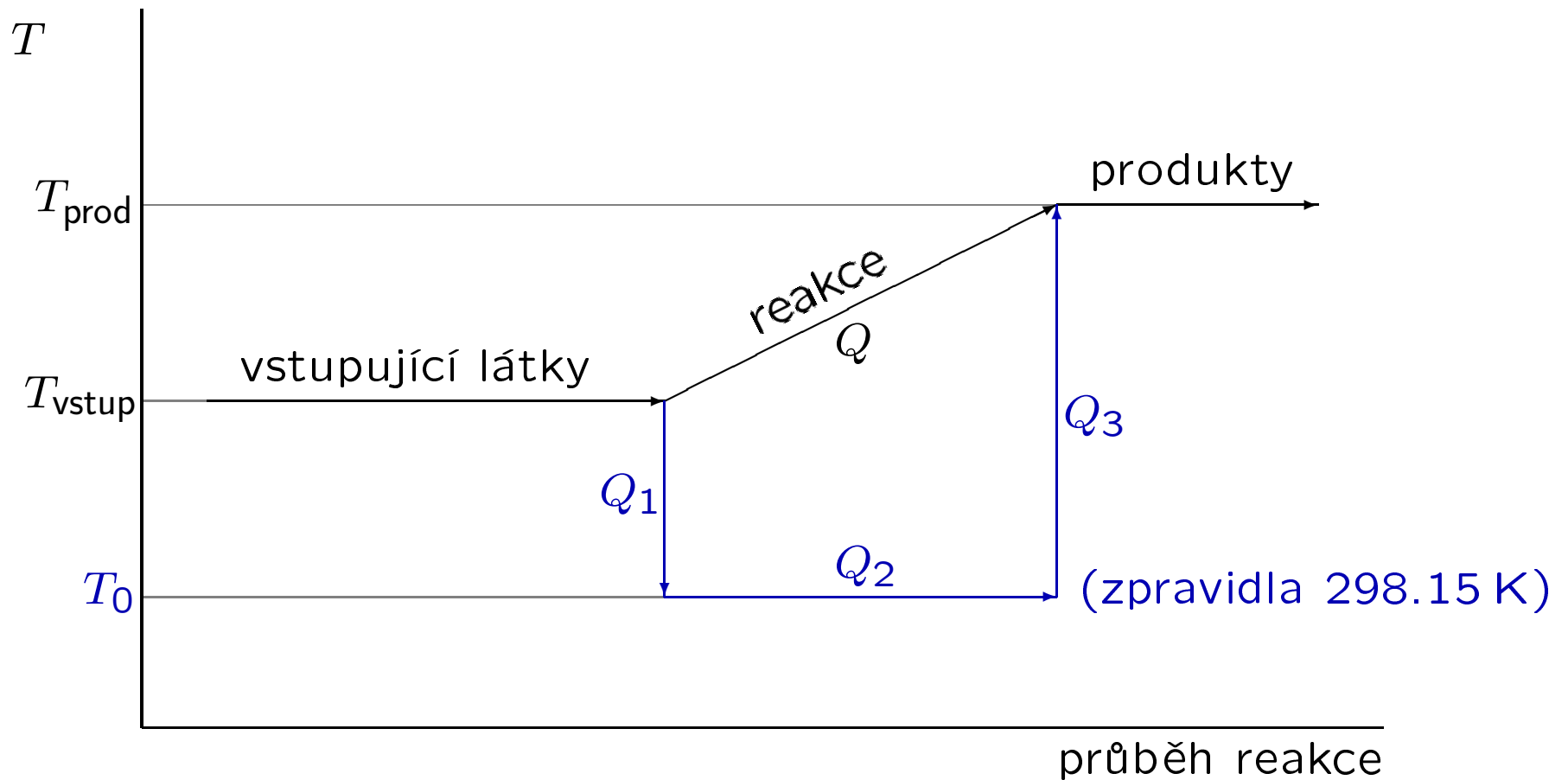
Příklad. Entalpii vody za teploty 0 °C položíme rovnu nule. Jaká bude entalpie vodní páry za teploty 150 °C (ve stavu ideálního plynu)?

Data:

$$C_{pm}^{(l)} = 75.6 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\Delta_{\text{výp}} H_m^{\ominus}(100 \text{ }^{\circ}\text{C}) = 40.65 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$C_{pm}^{(g)} / (\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}) = 28.9 + 0.0146(T/\text{K})$$



$$Q = Q_1 + Q_2 + Q_3$$

$$Q_1 = \int_{T_{\text{vstup}}}^{T_0} \sum_{i=\text{vstup}} C_{p,i} dT$$

$$Q_2 = \Delta_r H(T_0)$$

$$Q_3 = \int_{T_0}^{T_{\text{prod}}} \sum_{i=\text{prod}} C_{p,i} dT$$

Adiabatický průběh: $Q = Q_1 + Q_2 + Q_3 = 0$

Příklad. Vypočtete teoretickou teplotu plamene methanu spalovaného ve 100% přebytku vzduchu. Methan i vzduch jsou předehřívány na 400 K.

Data (všechny látky jsou v plynném stavu):

$$\Delta_{\text{spal}} H_m^\ominus(\text{CH}_4, 298 \text{ K}) = -802 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$C_{pm}^\ominus(\text{H}_2\text{O}) = 38 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$C_{pm}^\ominus(\text{CO}_2) = 46 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$C_{pm}^\ominus(\text{CH}_4) = 56 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$C_{pm}^\ominus(\text{O}_2) = 32 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$C_{pm}^\ominus(\text{N}_2) = 31 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$(298 - 400) \cdot 680 - 802000 + (T - 298) \cdot 682 = 0 \Leftrightarrow T = 1576 \text{ K}$$

Entalpická bilance: Kirchhoffova věta

s.13
B03

Určit $\Delta_r H_m^\ominus(T)$, znáte-li $\Delta_r H_m^\ominus(T_0)$ (zpravidla $T_0 = 298,15 \text{ K}$)

$$\Delta_r H_m^\ominus(T) = \Delta_r H_m^\ominus(T_0) + \int_{T_0}^T \Delta_r C_{pm}^\ominus(T) dT$$

kde

$$\Delta_r C_{pm}^\ominus(T) = \sum_{i=1}^k \nu_i C_{pmi}^\ominus(T)$$

Diferenciální forma:

$$\left(\frac{\partial \Delta_r H_m^\ominus}{\partial T} \right)_p = \Delta_r C_{pm}^\ominus$$

Příklad

Vypočtete standardní reakční entalpii reakce



při 1000 K. Reakce probíhá v plynné fázi.

Data:

$$\Delta_{\text{sl}} H_{\text{m}}^{\ominus}(\text{NH}_3, 300 \text{ K}) = -46 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Tepelné kapacity C_{pm}^{\ominus} [$\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}, \text{K}$]:

$$\text{H}_2: 23.4 + 0.0152 T$$

$$\text{N}_2: 25.9 + 0.0104 T$$

$$\text{NH}_3: 19.0 + 0.058 T$$

$$-105.4 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Entalpická bilance: kalorimetrická rovnice

Příklad. V kalorimetru o tepelné kapacitě 35 J K^{-1} je 100 g vody o teplotě $25.0 \text{ }^\circ\text{C}$. Po vhození železného přemětu o teplotě $80 \text{ }^\circ\text{C}$ a hmotnosti 30 g byla naměřena teplota $27.1 \text{ }^\circ\text{C}$. Vypočtete měrnou a molární tepelnou kapacitu železa.

Data: měrná tepelná kapacita vody je $4.2 \text{ J K}^{-1} \text{ g}^{-1}$, $M(\text{Fe}) = 56 \text{ g mol}^{-1}$

$$C_{\text{sp}} = 0.602 \text{ J K}^{-1} \text{ g}^{-1}, C_{\text{m}} = 33.6 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$