

Výpočet tepla při změnách systému

- změna teploty
- změna skupenství
- změna složení (chemická reakce)

Změna teploty:

$$Q = \Delta H = \int_{T_1}^{T_2} C_p dT = n \int_{T_1}^{T_2} C_{pm} dT \quad [p]$$

Je-li C_{pm} konstantní

$$Q = \Delta H = nC_{pm}(T_2 - T_1), \quad [p]$$

Je-li $C_{pm} = a + bT$

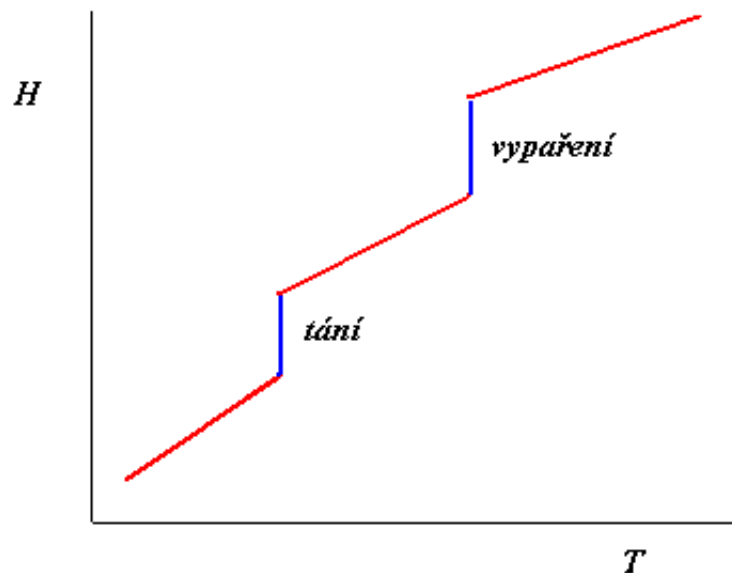
$$Q = \Delta H = a(T_2 - T_1) + b/2(T_2^2 - T_1^2), \quad [p]$$

Změna skupenství:

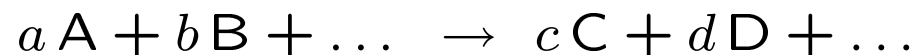
$$l \rightarrow g \quad Q = \Delta_{\text{výp}} H$$

$$s \rightarrow l \quad Q = \Delta_{\text{taní}} H$$

$$s \rightarrow g \quad Q = \Delta_{\text{subl}} H$$



Zápis reakce:



nebo

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

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

4
03

Standardní reakční entalpie $\Delta_r H_m^{\text{st}}$ 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.

Reakční vnitřní energie

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

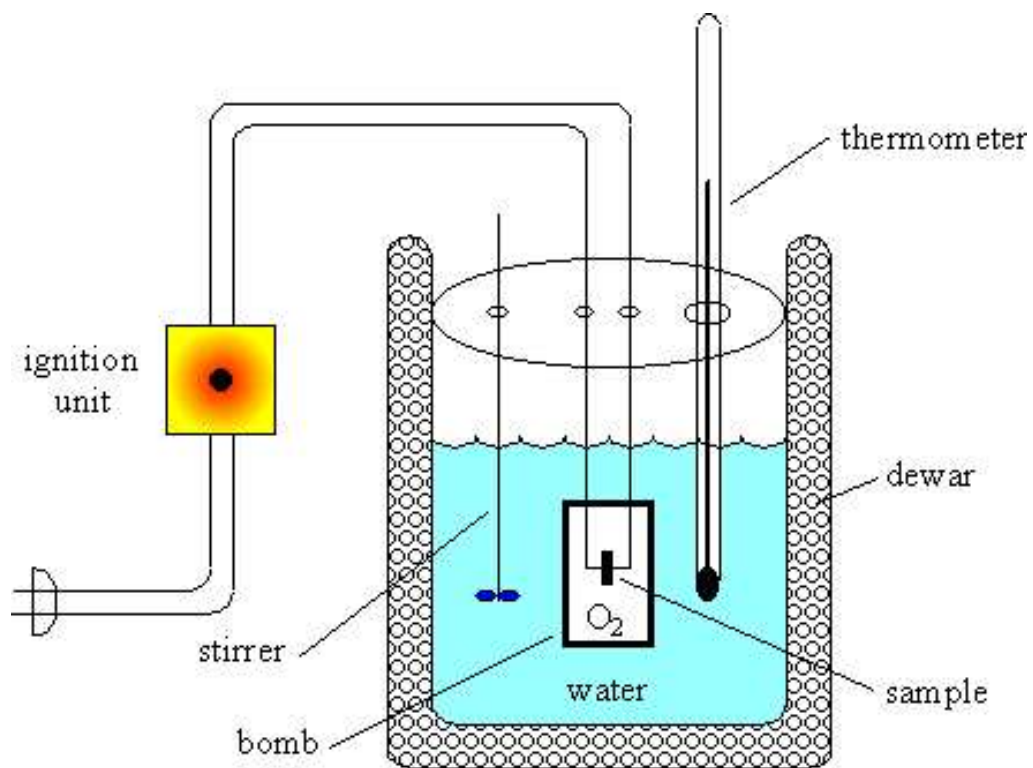
Zanedbáme objem kondenzovaných fází:

$$\Delta_r U_m^{\text{st}} = \Delta_r H_m^{\text{st}} - \Delta_r(pV) = \Delta_r H_m^{\text{st}} - \nu^{(\text{g})} RT \quad \nu^{(\text{g})} = \sum_{(\text{g})} \nu_i$$

Kalorimetrická bomba

5
03

[V] \Rightarrow měří se $\Delta_r U$



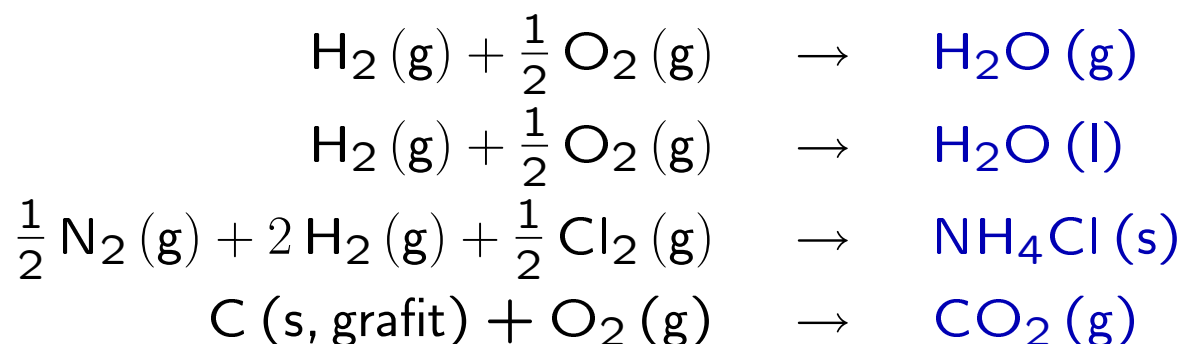
kalorimetrická bomba



kalorická bomba

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

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



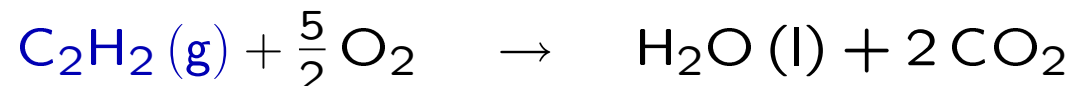
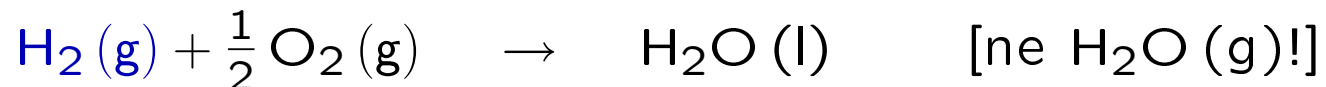
Standardní slučovací entalpie $\Delta_{\text{sl}}H_{\text{m}}^{\text{st}}$ je standardní reakční entalpie slučovací reakce.

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

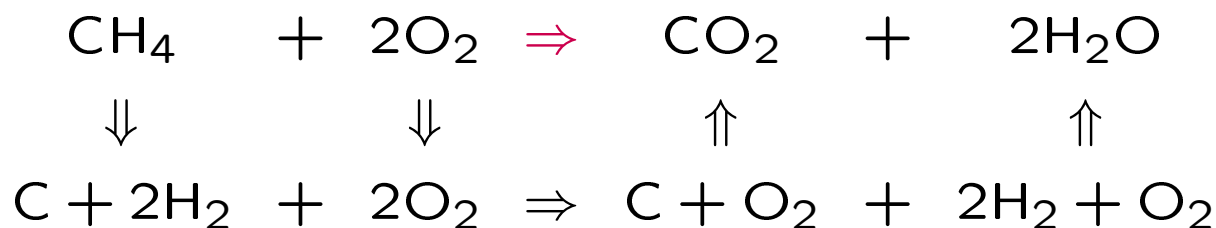
Standardní spalná entalpie

7
03

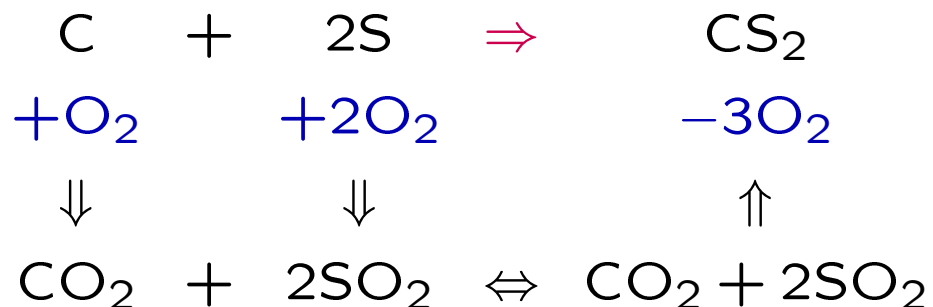
Spalná reakce látky A je reakce, při které z 1 molu látky vzniká reakcí s kyslíkem H_2O , CO_2 , SO_2 , N_2 . . .



Standardní spalná entalpie $\Delta_{\text{spal}}H_{\text{m}}^{\text{st}}$ je standardní reakční entalpie spalné reakce.



$$\Delta_r H_m^{\text{st}} = -\Delta_{\text{sl}} H_m^{\text{st}}(\text{CH}_4) + \Delta_{\text{sl}} H_m^{\text{st}}(\text{CO}_2) + 2\Delta_{\text{sl}} H_m^{\text{st}}(\text{H}_2\text{O})$$



$$\Delta_r H_m^{\text{st}} = \Delta_{\text{spal}} H_m^{\text{st}}(\text{C}) + 2\Delta_{\text{spal}} H_m^{\text{st}}(\text{S}) - \Delta_{\text{spal}} H_m^{\text{st}}(\text{CS}_2)$$

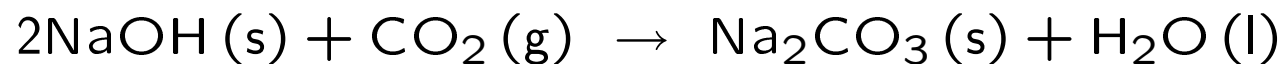
Jestliže reakce R je lineární kombinací reakcí R_1, R_2, R_3, \dots , pak standardní reakční entalpie reakce R je stejnou lineární kombinací standardních reakčních entalpií reakcí R_1, R_2, R_3, \dots

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

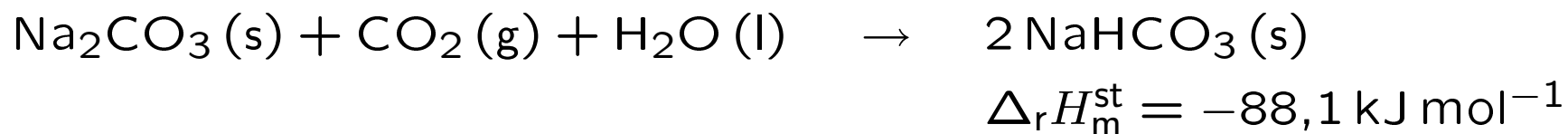
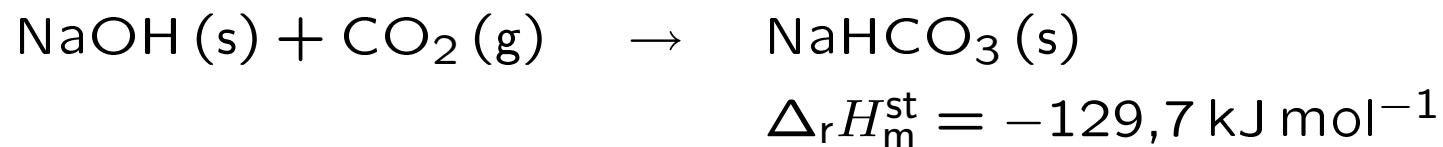
$$\Delta_r H_m^{\text{st}} = \sum_{i=1}^k \nu_i \Delta_{\text{sl}} H_{mi}^{\text{st}}$$

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

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

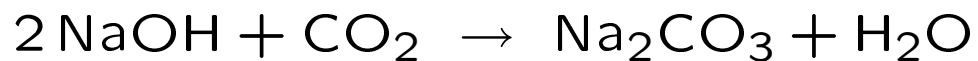


Z následujících údajů



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

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

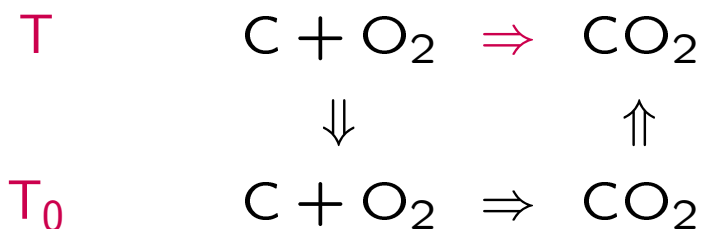


Z následujících standardních slučovacích entalpií

látká	$\Delta_{\text{sl}} H_m^{\text{st}} / \text{kJ mol}^{-1}$
$\text{Na}_2\text{CO}_3(\text{s})$	-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

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

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



$$\Delta_r H_m^{\text{st}}(T) = \int_T^{T_0} [C_{pm}^{\text{st}}(\text{C}) + C_{pm}^{\text{st}}(\text{O}_2)] dT + \Delta_r H_m^{\text{st}}(T_0) + \int_{T_0}^T C_{pm}^{\text{st}}(\text{CO}_2) dT$$

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

kde

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

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

Vypočtete teoretickou teplotu plamene methanu spalovaného ve 100% přebytku vzduchu (1 mol O₂ na 4 mol N₂) při teplotě 298 K.

Data:

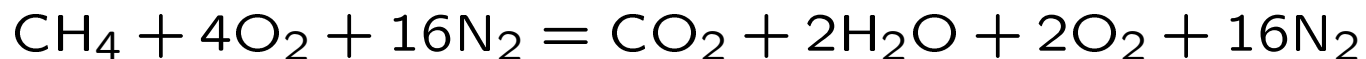
$$\Delta_{\text{spal}} H_m^{\text{st}}(\text{CH}_4, 298 \text{ K}) = -802 \text{ kJ mol}^{-1}$$

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

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

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

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



$$(-802000 + (T - 298) \cdot 682 = 0 \Rightarrow T = 1473 \text{ K}$$