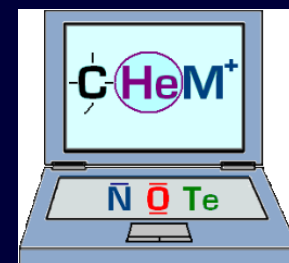


8. Chemické reakce

Energetika - Termochemie

- **TERMOCHEMIE** – oddíl termodynamiky
- Tepelné zabarvení chemických reakcí
- Samovolnost chemických reakcí



Evropský sociální fond
Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti

8. Chemické reakce

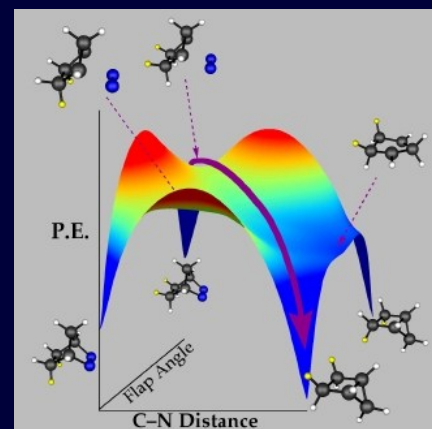
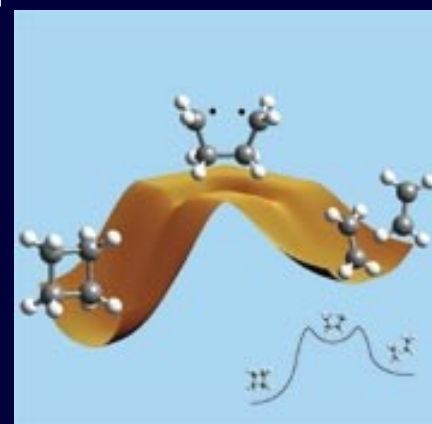
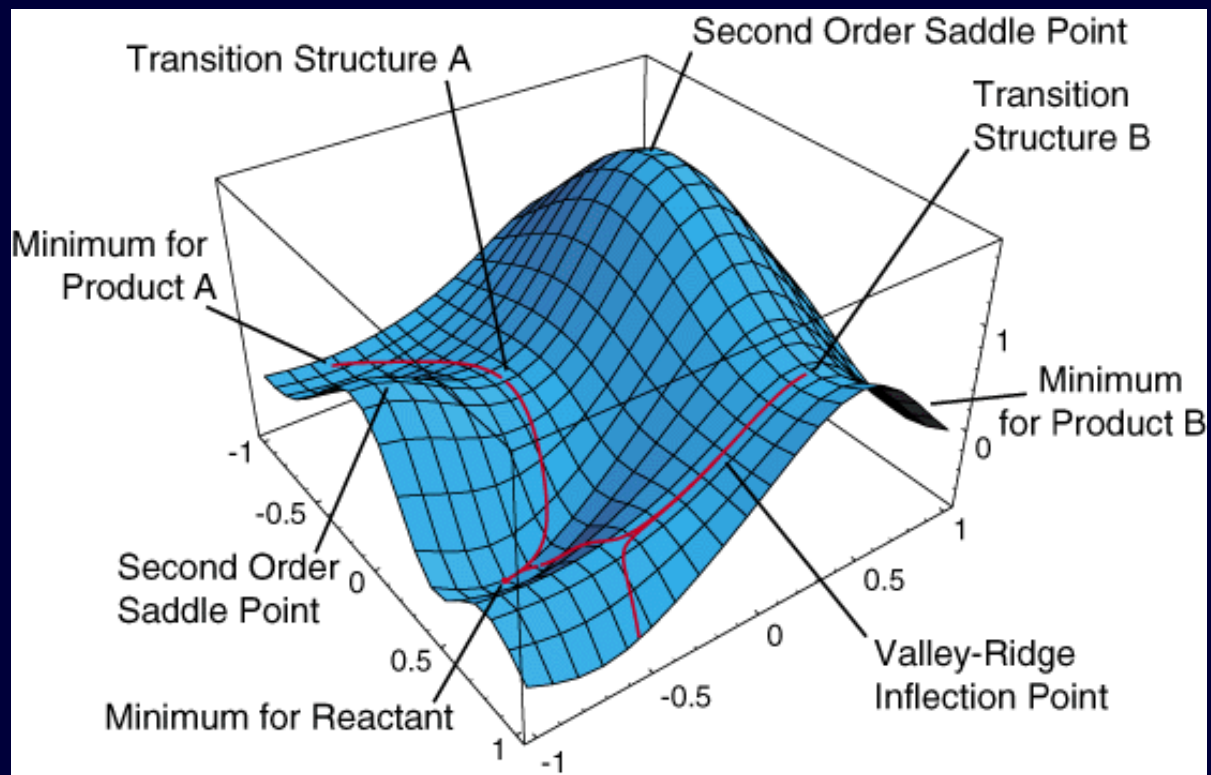
Energetika - Termochemie

- **TERMOCHEMIE** – oddíl termodynamiky
 - tepelné jevy při chemických reakcích
 - makroskopický pohled
 - (reakční) soustava a okolí – výměna tepla
 - reakční teplo – molární
 - stavové funkce – funkcí stavu (cyklický děj)
- vnitřní energie $U = Q + W + konst.$
 - entalpie (enthalpie) $H = U + pV$
 - Helmholtzova energie $A = U - TS$
 - Gibbsova energie $G = H - TS = A + pV$

$$\oint dX = 0$$

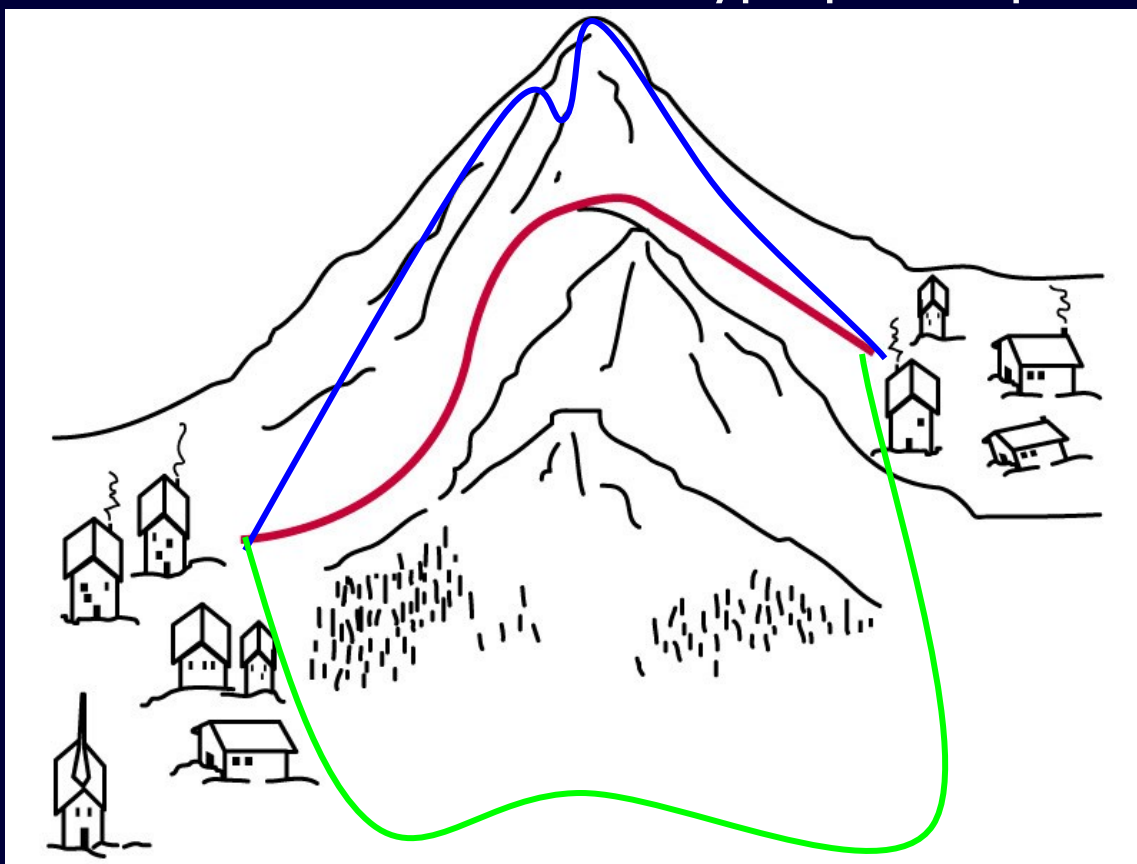
8. Chemické reakce Energetika

- chemické reakce – reorganizace uspořádání vazeb
 - hyperplocha potenciální energie



8. Chemické reakce Energetika

- chemické reakce - hyperplocha potenciální energie

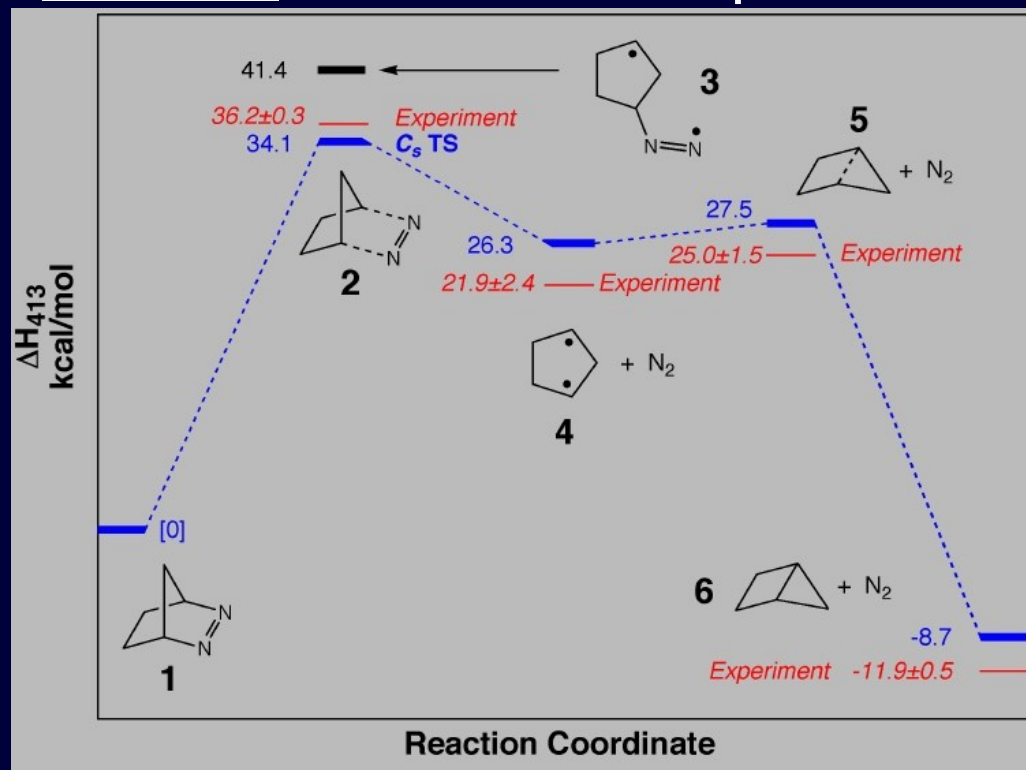
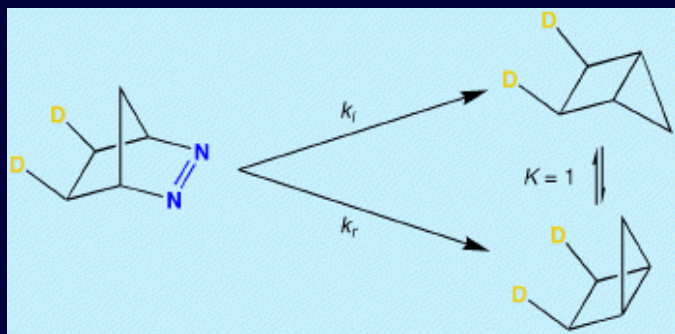


8. Chemické reakce

Energetika

- aktivační energie

- energetická bariéra na cestě od reaktantů k produktům
- reakční koordináta



8. Chemické reakce

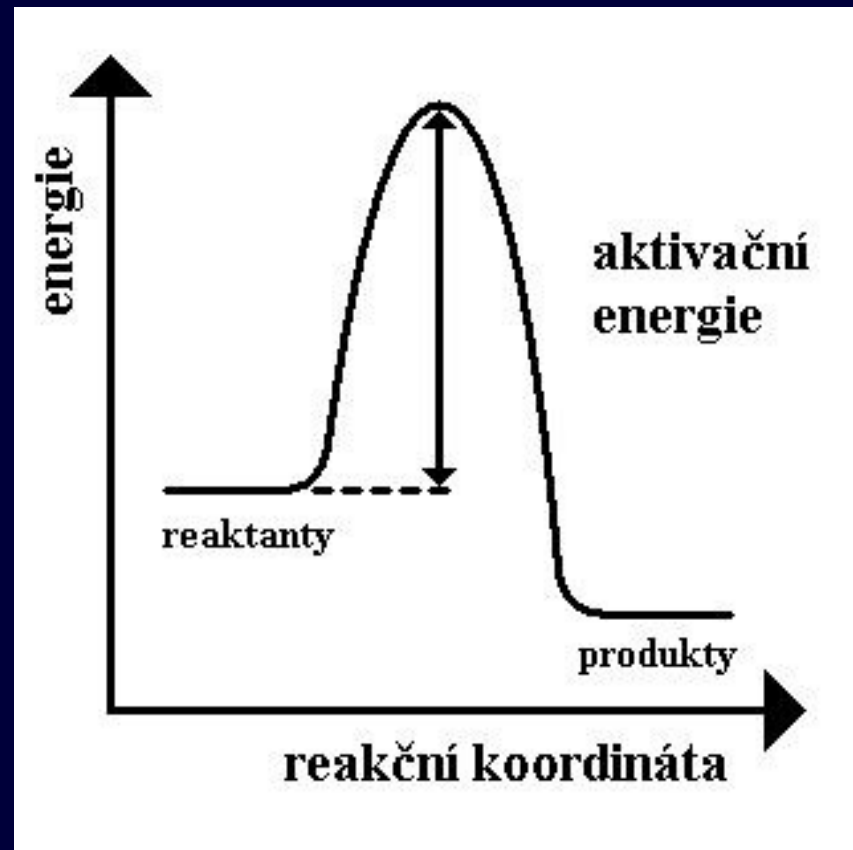
Energetika - Termochemie

- aktivační energie
 - energetická bariéra **na cestě** od reaktantů k produktům
- reakční teplo – **stav** reaktantů a produktů
 - cesta mne nezajímá, ale teplo není stavová funkce
 - reakce exotermní (exotermické)
 - reakce endotermní (endotermické)

8. Chemické reakce

Energetika

- aktivační energie
 - cesta děje
- reakční teplo
- samovolnost průběhu
 - jak exotermní,
tak endotermní



8. Chemické reakce

Energetika

- reakční teplo
 - taková cesta děje, aby vyměněné teplo odpovídalo změně stavové veličiny
 - podmínky průběhu reakce
 - **izotermický** – stejná teplota výchozích látek a produktů
 - **izobarický** – změna enthalpie
 - **izochorický** – změna vnitřní energie
 - (**adiabatický** – tepelně izolovaná soustava, bez výměny tepla s okolím – „reakční teplo převezmou produkty“)

8. Chemické reakce Energetika



- reakční teplo
- **Prvý termochemický zákon** - zákon Lavoisierův a Laplaceův (1780):
 - "Hodnota reakčního tepla přímých a zpětných reakcí se liší pouze znaménkem."
 - Původní formulace "teplo potřebné k rozložení chemické sloučeniny na prvky je stejně velké jako teplo uvolněné při tvorbě této sloučeniny z prvků".

8. Chemické reakce

Energetika



- reakční teplo
- **Druhý termochemický zákon**
 - zákon Hessův (1840):
 - "Celkové reakční teplo reakce, kterou vzniká určitý produkt, nezávisí na způsobu, jak tento produkt z výchozích látek vzniká. "
 - Přesnější formulace "Tepelné zabarvení dané reakce se rovná součtu tepelných zabarvení postupně prováděných reakcí, jež vycházejí ze stejných výchozích látek a poskytují stejné konečné zplodiny, jaké vystupují při reakci prováděné v jednom stupni. "

8. Chemické reakce

Energetika

- reakční teplo – možnost výpočtů a tabelovaná data
- specifikovat skupenský stav výchozích látek i produktů
- (standardní) slučovací teplo
 - 1 mol sloučeniny přímo z prvků (v nejstálejší podobě) (standardní tlak)
- (standardní) spalné teplo
 - 1 mol sloučeniny v nadbytku kyslíku zoxiduje na nejstabilnější oxidační produkty (oxidy) (stand. tlak)

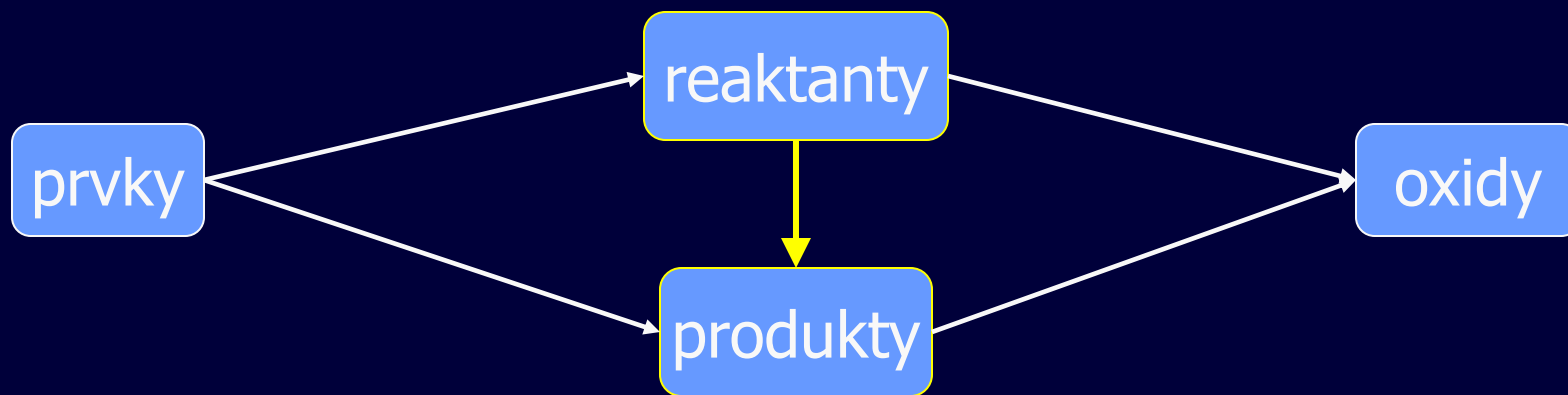
8. Chemické reakce

Energetika

- reakční teplo – možnost výpočtů a tabelovaná data konst. tlak

$$\Delta H^r = \sum_{\text{prod.}} |v| (\Delta H^0)_{\text{sluč.}} - \sum_{\text{reakt.}} |v| (\Delta H^0)_{\text{sluč.}}$$

$$\Delta H^r = \sum_{\text{reakt.}} |v| (\Delta H^0)_{\text{spal.}} - \sum_{\text{prod.}} |v| (\Delta H^0)_{\text{spal.}}$$



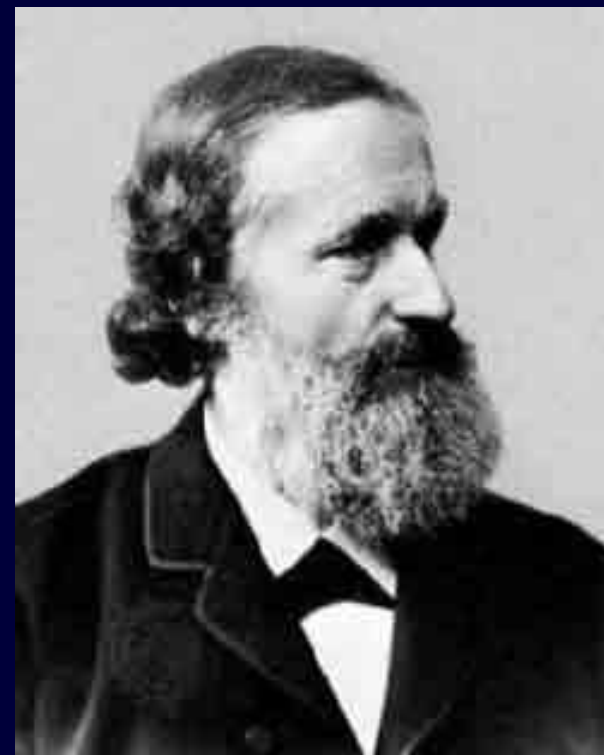
8. Chemické reakce Energetika

- reakční teplo
 - závislost na teplotě
 - Kirchhoffova rovnice

$$\left(\frac{\partial \Delta H_r}{\partial T} \right)_p = \Delta C_p$$

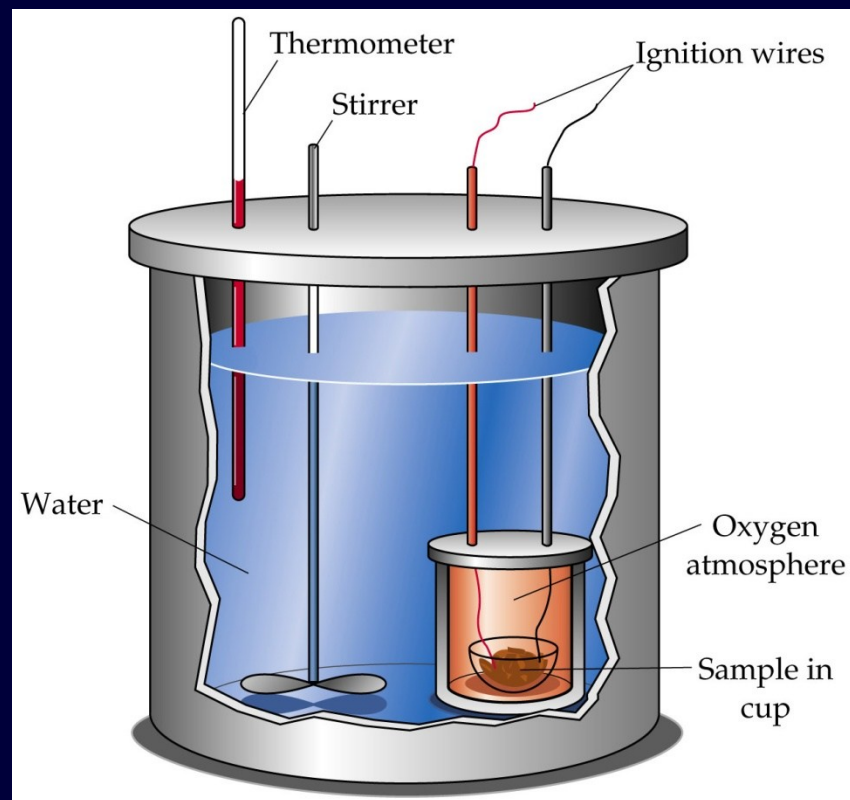
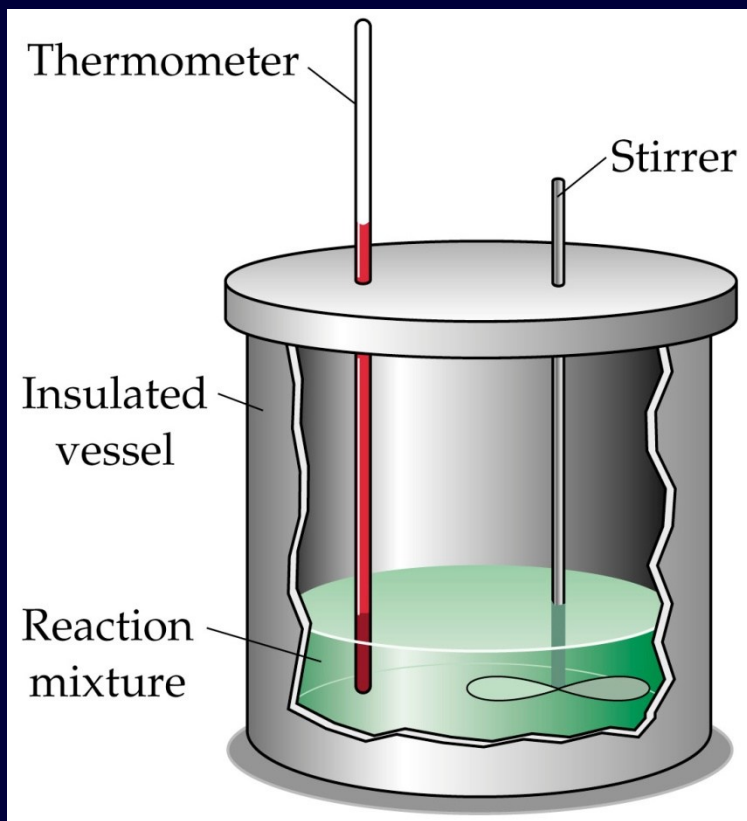
$$\Delta H_r(T_2) = \Delta H_r(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p dT$$

$$\Delta C_p = r(C_{p,m})_R + s(C_{p,m})_S + \dots - a(C_{p,m})_A - b(C_{p,m})_B - \dots$$



8. Chemické reakce Energetika

- reakční teplo – měření - KALORIMETRIE



8. Chemické reakce

Energetika

- **reakce a samovolný průběh**

- ΔG – děje izobarické

- $\Delta G < 0$ – samovolné děje ($-\Delta G$ chemická afinita)

- v rovnováze $\Delta G = 0$

- $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ (izotermický děj)

- entalpický a entropický člen

- ΔA – děje izochorické

- $\Delta A < 0$ – samovolné děje

- v rovnováze $\Delta A = 0$

8. Chemické reakce

Energetika

- **reakce a samovolný průběh**

- $\Delta G < 0$ – samovolné děje (izobarický děj)

- $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ (izotermický děj)

- entalpický a entropický člen

- exotermní ($\Delta H < 0$)

- $\Delta S > 0$ – vždy samovolné

- $\Delta S < 0$ – vliv teploty – rostoucí T reakci zastaví

- endotermní ($\Delta H > 0$)

- $\Delta S > 0$ – vliv teploty – rostoucí teplota – pozitivní vliv na samovolnost děje

- $\Delta S < 0$ – nikdy samovolné

8. Chemické reakce

Energetika

- **reakce a samovolný průběh**

- $\Delta A < 0$ – samovolné děje (izochorický děj)

- $\Delta A = \Delta U - T\Delta S$ (izotermický děj)

- exotermní ($\Delta U < 0$)

- $\Delta S > 0$ – vždy samovolné

- $\Delta S < 0$ – vliv teploty – rostoucí T reakci zastaví

- endotermní ($\Delta U > 0$)

- $\Delta S > 0$ – vliv teploty – rostoucí teplota – pozitivní vliv na samovolnost děje

- $\Delta S < 0$ – nikdy samovolné