

Reakčné teplo

- každú chemickú reakciu, fázovú premenu, alebo zmenu koncentrácií v sústave sprevádza uvoľňovanie tepla (exotermický proces) alebo pohlcovanie tepla (endotermický proces)

Hessov zákon

- reakčné teplo pri konštantnom tlaku nezávisí od spôsobu priebehu chemickej reakcie, ale len od začiatočného a konečného stavu

Ak pri chemickej reakcii vzniká zlúčenina z prvkov, zmenu entalpie označujeme ako zlučovacia entalpia, ktorá závisí od teploty, tlaku, látkového množstva a stavu reaktantov a produktov reakcie.

Ak pri chemickej reakcii vzniká látkové množstvo jedného mólu zlúčeniny z prvkov pri takých podmienkach, že zlúčenina a reaktanty sú vo svojich štandardných stavoch (25°C, 101 325 Pa), reakčné teplo nazývame štandardná mólová zlučovacia entalpia a označujeme ju ΔH^0 .

Štandardná mólová zlučovacia entalpia pri teplote 298 K:

$$\Delta H_{298}^{0,r} = \sum_{i=1}^m n_i \cdot \Delta H_{298, \text{produktov}, i}^0 - \sum_{j=1}^k n_j \cdot \Delta H_{298, \text{reaktantov}, j}^0 \quad (\text{J} \cdot \text{mol}^{-1})$$

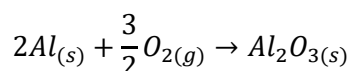
Štandardná mólová zlučovacia entalpia pri teplote T:

$$\Delta H_T^{0,r} = \Delta H_{298}^{0,r} + \int_{298}^T (\sum \Delta c_p) dT \quad (\text{J} \cdot \text{mol}^{-1})$$

Mólová tepelná kapacita:

$$\sum \Delta c_p = \Delta a + \Delta b \cdot T + \frac{\Delta c}{T^2} \quad (\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$$

Príklad: Vypočítajte hodnotu reakčného tepla pri teplote 298 K nasledovnej reakcie:



Vypíšeme si hodnoty zlučovacích entalpií jednotlivých prvkov a zlúčenín, ktoré sa zúčastňujú uvedenej reakcie.

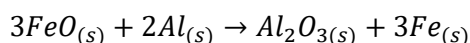
$$\Delta H_{298, \text{Al}}^0 = 0, \Delta H_{298, \text{O}_2}^0 = 0, \Delta H_{298, \text{Al}_2\text{O}_3}^0 = -1678170$$

$$\Delta H_{298}^{0,r} = \sum_{i=1}^m n_i \cdot \Delta H_{298, \text{produktov}, i}^0 - \sum_{j=1}^k n_j \cdot \Delta H_{298, \text{reaktantov}, j}^0$$

$$\Delta H_{298}^{0,r} = 1 \cdot \Delta H_{298, \text{Al}_2\text{O}_3}^0 - \left(2 \cdot \Delta H_{298, \text{Al}}^0 + \frac{3}{2} \cdot \Delta H_{298, \text{O}_2}^0 \right)$$

$$\Delta H_{298}^{0,r} < 0 \rightarrow \text{reakcia je pri danej teplote exotermická, teplo sa pri nej uvoľňuje.}$$

Príklad: Vypočítajte hodnotu reakčného tepla pri teplote 298 K nasledovnej reakcie:



Vypíšeme si hodnoty zlučovacích entalpií jednotlivých prvkov a zlúčenín, ktoré sa zúčastňujú uvedenej reakcie.

$$\Delta H_{298,FeO}^0 = -264840, \Delta H_{298,Al}^0 = 0, \Delta H_{298,Al_2O_3}^0 = -1678170, \Delta H_{298,Fe}^0 = 0$$

$$\Delta H_{298}^{0,r} = \sum_{i=1}^m n_i \cdot \Delta H_{298,produktov,i}^0 - \sum_{j=1}^k n_j \cdot \Delta H_{298,reaktantov,j}^0$$

$$\Delta H_{298}^{0,r} = (1 \cdot \Delta H_{298,Al_2O_3}^0 + 3 \cdot \Delta H_{298,Fe}^0) - (3 \cdot \Delta H_{298,FeO}^0 + 2 \cdot \Delta H_{298,Al}^0)$$

$$\Delta H_{298}^{0,r} = (-1678197 + 3 \cdot 0) - (3 \cdot (-264840) + 2 \cdot 0) = -883650 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta H_{298}^{0,r} < 0 \rightarrow \text{reakcia je pri danej teplote exotermická, teplo sa pri nej uvoľňuje.}$$

Príklad: Pre reakciu $PbS_{(s)} + 2PbO_{(s)} \rightarrow 3Pb_{(s)} + SO_{2(g)}$ stanovte:

1. Štandardnú zlučovaciu entalpiu pri teplote 298 K - $\Delta H_{298}^{0,r}$
2. Štandardnú zlučovaciu entalpiu pri teplote 600 K - $\Delta H_{600}^{0,r}$
3. Závislosť štandardnej zlučovacej entalpie od teploty - $\Delta H_T^{0,r} = f(T)$

Vypíšeme si hodnoty zlučovacích entalpií jednotlivých prvkov a zlúčenín, ktoré sa zúčastňujú uvedenej reakcie.

$$\Delta H_{298,PbS}^0 = -98370, \Delta H_{298,PbO}^0 = -219800, \Delta H_{298,Pb}^0 = 0, \Delta H_{298,SO_2}^0 = -296950$$

1. $\Delta H_{298}^{0,r} = \sum_{i=1}^m n_i \cdot \Delta H_{298,produktov,i}^0 - \sum_{j=1}^k n_j \cdot \Delta H_{298,reaktantov,j}^0$
 $\Delta H_{298}^{0,r} = (3 \cdot \Delta H_{298,Pb}^0 + \Delta H_{298,SO_2}^0) - (\Delta H_{298,PbS}^0 + 2 \cdot \Delta H_{298,PbO}^0)$
 $\Delta H_{298}^{0,r} = (3 \cdot 0 + 1 \cdot (-296950)) - ((-98370) + 2 \cdot (-219800)) = 241020 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$
2. $\Delta H_T^{0,r} = \Delta H_{298}^{0,r} + \int_{298}^T (\sum \Delta c_p) dT \rightarrow \Delta H_{600}^{0,r} = \Delta H_{298}^{0,r} + \int_{298}^{600} (\sum \Delta c_p) dT$

Pre výpočet výslednej mólovej tepelnej kapacity reakcie: $\sum \Delta c_p = \Delta a + \Delta b \cdot T + \frac{\Delta c}{T^2}$

si najprv určíme mólovú tepelnú kapacitu pre jednotlivé zložky reakcie:

$$Pb_{(s)}: c_p = 23,59 + \frac{9,76}{10^3} \cdot T \text{ pre rozsah (298 – 600K)}$$

$$SO_{2(g)}: c_p = 43,49 + \frac{10,64}{10^3} \cdot T - \frac{5,95 \cdot 10^5}{T^2} \text{ pre rozsah (298 – 1800K)}$$

$$PbS_{(s)}: c_p = 44,67 + \frac{16,42}{10^3} \cdot T \text{ pre rozsah (298 – 1387K)}$$

$$PbO_{(s)}: c_p = 37,92 + \frac{26,82}{10^3} \cdot T \text{ pre rozsah (298 – 1163K)}$$

$$\sum \Delta c_p = \Delta a + \Delta b \cdot T + \frac{\Delta c}{T^2}$$

$$\sum \Delta c_p = (3 \cdot a_{Pb} + a_{SO_2} - a_{PbS} - 2 \cdot a_{PbO}) + \left((3 \cdot b_{Pb} + b_{SO_2} - b_{PbS} - 2 \cdot b_{PbO}) \cdot \frac{T}{10^3} \right) + \left((3 \cdot c_{Pb} + c_{SO_2} - c_{PbS} - 2 \cdot c_{PbO}) \cdot \frac{10^5}{T^2} \right)$$

$$\sum \Delta c_p = (3 \cdot 23,59 + 43,49 - 44,67 - 2 \cdot 37,92)$$

$$+ \left((3 \cdot 9,76 + 10,64 - 16,42 - 2 \cdot 26,82) \cdot \frac{T}{10^3} \right) - 5,95 \cdot \frac{10^5}{T^2}$$

$$\sum \Delta c_p = -6,25 - 30,14 \cdot \frac{T}{10^3} - 5,95 \cdot \frac{10^5}{T^2} \text{ Môžeme vypočítať: } \Delta H_{600}^{0,r}$$

$$\Delta H_{600}^{0,r} = 241020 + \int_{298}^{600} \left(-6,25 - 30,14 \cdot \frac{T}{10^3} - 5,95 \cdot \frac{10^5}{T^3} \right) dT$$

$$\Delta H_{600}^{0,r} = 241020 + \left[-6,25 \cdot T - \frac{30,14}{2} \cdot \frac{T^2}{10^3} - \left(-5,95 \cdot \frac{10^5}{T} \right) \right]_{298}^{600}$$

$$\Delta H_{600}^{0,r} = 241020 - 6,25 \cdot (600 - 298) - \frac{15,07}{10^3} \cdot (600^2 - 298^2) + 5,95 \cdot 10^5 \cdot \left(\frac{1}{600} - \frac{1}{298} \right)$$

$$\Delta H_{600}^{0,r} = 241020 - 1887,5 - 4086,9237 - 1004,9776 = 234040,6 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta H_{600}^{0,r} > 0 \rightarrow \text{reakcia je pri danej teplote endotermická, teplo sa pri nej spotrebuje}$$

$$3. \Delta H_T^{0,r} = f(T)$$

$$\Delta H_T^{0,r} = \Delta H_{298}^{0,r} + \int_{298}^T \left(\sum \Delta c_p \right) \cdot dT$$

$$\Delta H_T^{0,r} = 241020 + \int_{298}^T \left(-6,25 - 30,14 \cdot \frac{T}{10^3} - 5,95 \cdot \frac{10^5}{T^2} \right) dT$$

$$\Delta H_T^{0,r} = 241020 + \left[-6,25 \cdot T - \frac{30,14}{2} \cdot \frac{T^2}{10^3} - \left(-5,95 \cdot \frac{10^5}{T} \right) \right]_{298}^T$$

$$\Delta H_T^{0,r} = 241020 - 6,25 \cdot (T - 298) - \frac{15,07}{10^3} \cdot (T^2 - 298^2) + 5,95 \cdot 10^5 \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298} \right)$$

$$\Delta H_T^{0,r} = 242224 - 6,25 \cdot T - 15,07 \cdot \frac{T^2}{10^3} + 5,95 \cdot \frac{10^5}{T}$$

Táto tepelná závislosť platí len pre rozsah teplôt (298 - 600K).