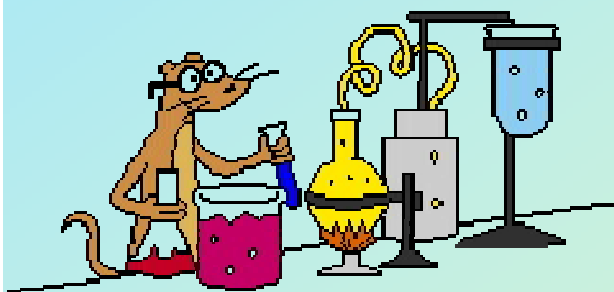


Termokémia



Hess, Germain Henri (1802-1850)



A bemutatót összeállította: Fogarasi József, Petrik Lajos SZKI, 2011

A reakcióhő fogalma

A reakcióhő tehát a kémiai változásokat kísérő energiaváltozást jelenti. Hogyan értelmezzük az anyagok energiaváltozását?

Minden anyag adott állapotában rendelkezik valamekkora energiával. Azonban ennek abszolút értékét nem ismerjük, mert nem ismerjük az abszolút zérus ponthoz tartozó energia értékét.

Mivel egy folyamatban a reakcióhő csak a változáshoz tartozó energiaváltozást jelöli, a belső energia abszolút értékére nincs is szükség.

A reakcióhő méréseknél elegendő a kezdeti és végállapot energiakülönbségét mérni, nincs is szükség a nullpont energia pontos értékére, a számításnál az úgy is kiesik.

A reakcióhő ún. állapotfüggvény, értéke csak a kezdeti és a végállapottól függ:

Reakcióhő = végállapot energiatartalma – kezdeti állapot energiatartalma.

Állapodjunk meg egy tetszőleges alappontban, és mindent ehhez viszonyítsunk!

A képződéshő fogalma

Vizsgáljuk az anyagok energiatartalmát! Ehhez állapotodjunk meg a körülményekben. Legyen ez az ún. standard állapot.

A standard állapot fogalma:

1 bar (101 325 Pa) nyomáshoz és 25 °C hőmérséklethez tartozó állapot.

Minden anyag képződéshőjét standard körülmények között definiáljuk. Természetesen az ettől eltérő körülmények energiatartalma az anyag tulajdonságainak ismeretében számítható.

Első megállapodás: Elemek képződéshője standard körülmények között nulla.

Tehát pl. a hidrogén, a nátrium, a neon stb. képződéshője légköri nyomáson és 25 °C hőmérsékleten nulla. Ezért az elemek képződéshőjét semmilyen táblázatban ne keressük, hiszen az megállapodás alapján nulla.

Vannak elemek, amelyek légköri nyomáson és 25 °C hőmérsékleten különböző állapotban létezhetnek. Pl. a kén kristálymódosulata lehet rombos vagy monoklin, az oxigén lehet O₂ vagy O₃ (ózon), a foszfor lehet fehér (P₄) vagy vörös foszfor állapotban. Ezért az elemek képződéshőjének definícióját pontosítani kell:

Első megállapodás: Elemek standard körülmények között stabil módosulatának képződéshője nulla.

Így tehát nulla a képződéshője a rombos állapotú kénnek, az O₂ molekulának és a vörös foszfornak.

Vegyületek képződéshője

Miután megállapodtunk abban, hogy az elemek képződéshőjét nullának tekintjük, következik a vegyületek képződéshőjének értelmezése.

Ehhez csak elemeiből kell előállítani az adott vegyületet, és mérni a reakció lejátszódásakor bekövetkező energiaváltozást, azaz a felszabaduló, vagy elnyelődő hőmennyiséget.

Pl. a CO₂ előállítható grafitból és oxigénből:



Ez tehát azt jelenti, hogy 1 mol CO₂ elemi szénből és oxigéngázból történő előállításakor 394 kJ hőenergia szabadul fel. **A CO₂ képződéshője tehát –394 kJ/mol.**

Második megállapodás: Vegyületek képződéshője az a reakcióhő amelyet akkor mérhetünk, ha az adott vegyület 1 mólját eleminek standard körülmények között stabil módosulatából állítottuk elő.

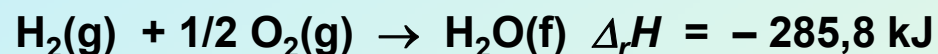
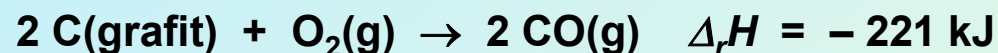
A vegyületek képződéshőjét táblázatban találhatjuk meg. Pl. az NH₄Cl képződéshője –314 kJ/mol, ami tehát annak a reakciónak az energiaváltozását jelenti, amikor nitrogéngázból, klórgázból és hidrogéngázból ammónium-kloridot állítunk elő: $2 \text{H}_2 + 0,5 \text{N}_2 + 0,5 \text{Cl}_2 \rightarrow \text{NH}_4\text{Cl}$.

Ez a reakció persze így közvetlenül nem játszódik le, de ez a definíció szempontjából lényegtelen.

A termokémiai egyenlet

A kémiai reakciókat reakcióegyenletekkel írjuk le. Tapasztalhatjuk, hogy a reakciók során a reakciók a kémiai átalakulás mellett energia változás is történik: a rendszer felmelegszik, vagy lehűl. A reakciókat kísérő energiaváltozásokat **reakcióhőnek** nevezzük.

A kémiai reakciókat kísérő energiaváltozásokat a **termokémiai egyenletekkel** írjuk le. Ebben felt kell tüntetni a kémiai folyamatban lejátszódó anyagok halmazállapotát és a reakcióhőt is:

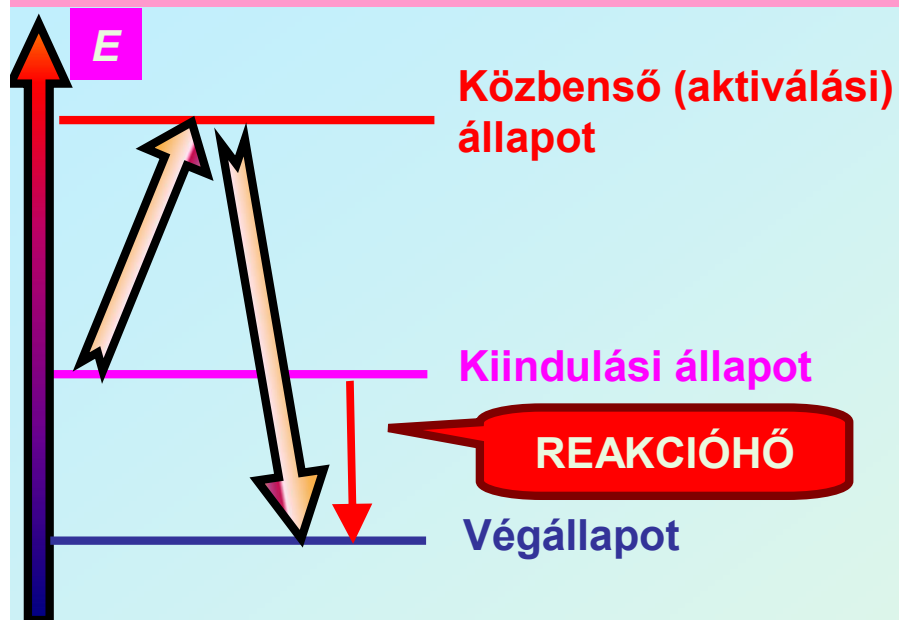


Szigorúan véve fel kell tüntetni az anyagok pontos állapotát (nyomását, hőmérsékletét, kristálmódosulatát, hidratált állapotát stb.) vagyis minden olyan körülményt, ami az adott anyag energiaállapotát meghatározza. A halmazállapotok feltüntetése azonban elkerülhetetlen, mivel a halmazállapot-változást kísérő átalakulási hő (olvadáshő, forráshő) igen jelentős érték.

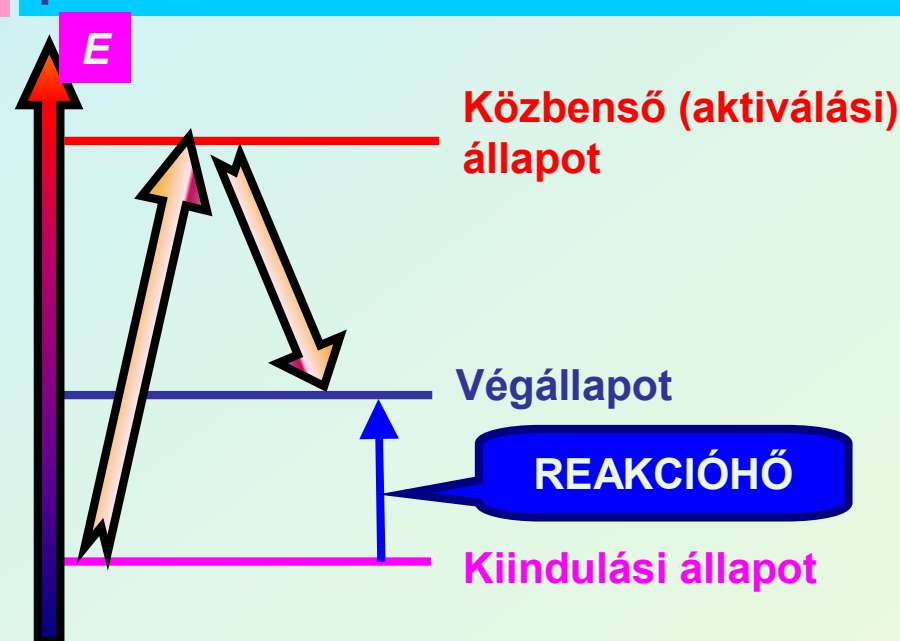
A reakciók hőszínezete

Ha a folyamat során hő fejlődik, tehát a rendszer ad le hőt a környezetnek, **exoterm** változásról, ha a rendszer vesz fel hőt a környezetből, **endoterm** változásról beszélünk.

Az **exoterm** reakció esetén a rendszer energiája csökken, ezért a reakcióhő értéke **negatív**.



Az **endoterm** reakció esetén a rendszer energiája nő, ezért a reakcióhő értéke **pozitív**.



A reakcióhő mértékegysége: J/mol

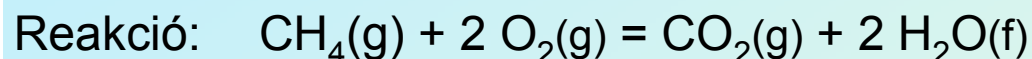
A reakcióhő számítása

A reakcióhő állapotfüggvény, értéke csak a kiindulási és a végállapottól függ. Nem függ a reakció időbeli lefolyásától, (a reakciósebességtől), a részfolyamatok sorrendjétől. Ez a termokémia főtétele, amit alkotójáról, Germain Henri Hess-ről, **Hess-tételnek** nevezünk.

Ezért számításához elegendő ismerni reakciót, a kiindulási és a végállapotban szereplő anyagok képződéshőit:

A reakcióhő = a végállapotban szereplő anyagok képződéshőinek összegéből kivonjuk a kiindulási állapotban szereplő anyagok képződéshőinek összegét.

Példa: Mennyi hő szabadul fel 1 m³ standard nyomású és 25 °C hőmérsékletű metánból tökéletes égést feltételezve, valamint ha a keletkezett víz folyadék halmazállapotú?



$$\Delta_r H = \Delta_r H(\text{CO}_2) + 2 \cdot \Delta_r H(\text{H}_2\text{O}(\text{f})) - [(\Delta_r H(\text{CH}_4) + 2 \cdot \Delta_r H(\text{O}_2))]$$

Képződéshők:

$$\text{CH}_4(\text{g}) : -74 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{O}_2(\text{g}) : 0 \text{ kJ/mol (megállapodás!)}$$

$$\text{CO}_2(\text{g}) : -394 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{H}_2\text{O}(\text{f}) : -286 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_r H = -394 + 2 \cdot (-286) - [-74 + 2 \cdot 0]$$

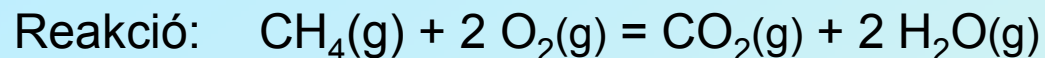
$$\Delta_r H = -892 \text{ kJ/mol}$$

$$n(\text{CH}_4) = \frac{1000 \text{ dm}^3}{24,5 \text{ dm}^3/\text{mol}} = 40,82 \text{ mol}$$

Összes felszabaduló energia: 40,82 mol · (-892) kJ/mol = -36408 kJ

A reakcióhő számítása

Példa: Mennyi hő szabadul fel 1 m³ standard nyomású és 25 °C hőmérsékletű metánból tökéletes égést feltételezve, valamint ha a keletkezett víz **gőz** halmazállapotú?



Képződéshők:

$$\text{CH}_4(\text{g}) : -74 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{O}_2(\text{g}) : 0 \text{ kJ/mol (megállapodás!)}$$

$$\text{CO}_2(\text{g}) : -394 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{H}_2\text{O}(\text{g}) : -242 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_r H = \Delta_r H(\text{CO}_2) + 2 \cdot \Delta_r H(\text{H}_2\text{O}(\text{g})) - [(\Delta_r H(\text{CH}_4) + 2 \cdot \Delta_r H(\text{O}_2))]$$

$$\Delta_r H = -394 + 2 \cdot (-242) - [-74 + 2 \cdot 0]$$

$$\Delta_r H = -804 \text{ kJ/mol}$$

$$n(\text{CH}_4) = \frac{1000 \text{ dm}^3}{24,5 \text{ dm}^3/\text{mol}} = 40,82 \text{ mol}$$

Összes felszabaduló energia: 40,82 mol · (-804) kJ/mol = -32816 kJ