

Dr. Hornyánszky Gábor

egyetemi docens

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Termokémia



Termokémia - alapfogalmak

- Intenzív mennyiségek (független a tömegtől)
Pl.: sűrűség, hőmérséklet, nyomás (kiegyenlítődnek)
- Extenzív mennyiségek (arányosak a tömeggel)
Pl.: térfogat, hő (összeadódnak)
- Fajlagos hőkapacitás (fajhő) c_v , c_p ($c_p > c_v$)

Az a hő, amely 1 g anyag hőmérsékletét 1 °C emeli

$$\Delta E = Q + W \quad \Delta E = \Delta H - p\Delta V$$

(Termodinamika 1. főtétel)

Termokémia - alapfogalmak

- **Képződéshő**

Az a hőmennyiség, amely 1 mól anyag elemi állapotú összetevőiből való képződését kíséri.

- **Reakcióhő**

Egy adott reakciót kísérő – a kémiai egyenletben feltüntetett minőségű, mennyiségű és állapotú anyagok átalakulását kísérő - hőváltozás.

Jele: ΔH_r Mértékegysége: kJ

(kJ/mol, amennyiben 1 mól anyag átalakulása valósul meg.)

Termokémia – hőváltozások típusai

Endoterm folyamat

- A vizsgált rendszer energiája nő
- A környezetből energiát vesz fel a rendszer
- A reakcióhő előjele pozitív

$$\Delta H_r > 0$$

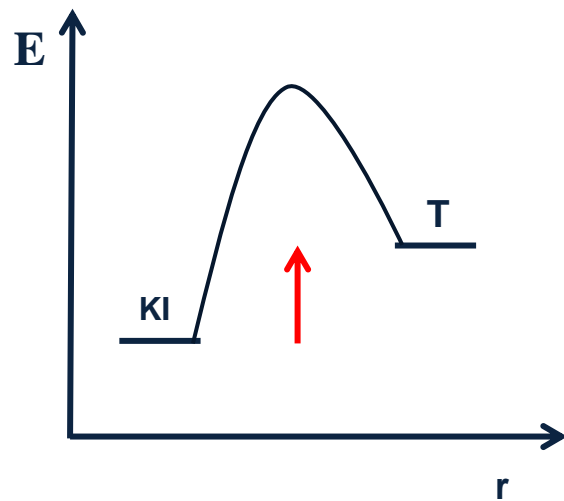
Exoterm folyamat

- A vizsgált rendszer energiája csökken
- A környezetnek energiát ad át a rendszer
- A reakcióhő előjele negatív

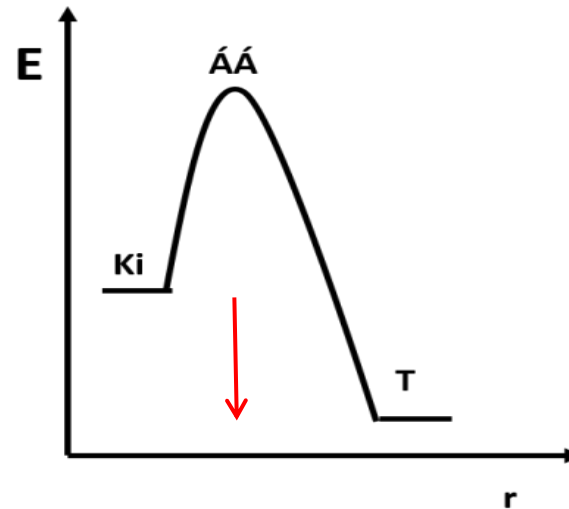
$$\Delta H_r < 0$$

Termokémia – hőváltozások típusai

Endoterm reakció



Exoterm reakció



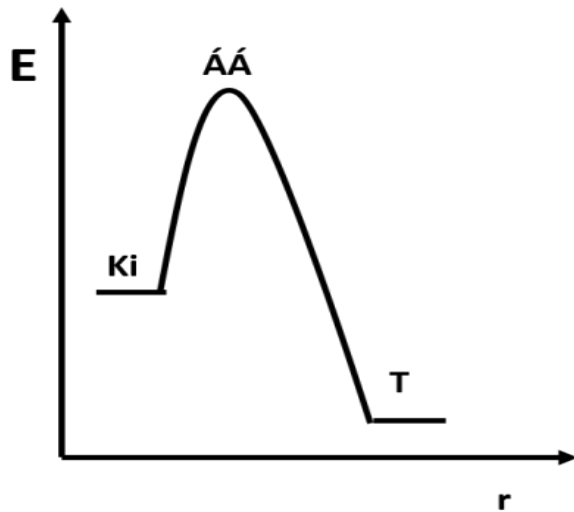
Egy kémiai folyamatot kísérő hőváltozás független a részfolyamatok sorrendjétől, csak attól függ, hogy milyen kiindulási anyagok alakulnak át, és milyen termékek keletkeznek, illetve milyen azok állapota.

Következmények:

- Egy megfordítható kémiai reakcióban az oda és a visszaalakulás hőváltozása azonos nagyságú, de ellentétes irányú.
- A reakcióhő értéke többféleképpen is kiszámítható.

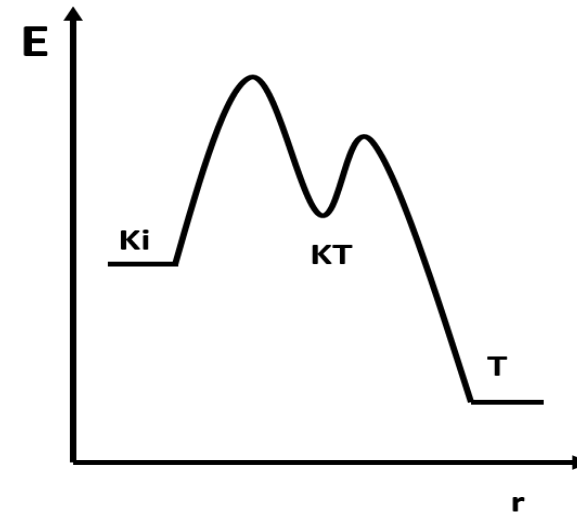
Termokémia – A kémiai reakciók energiaviszonyai

Egylépéses reakció



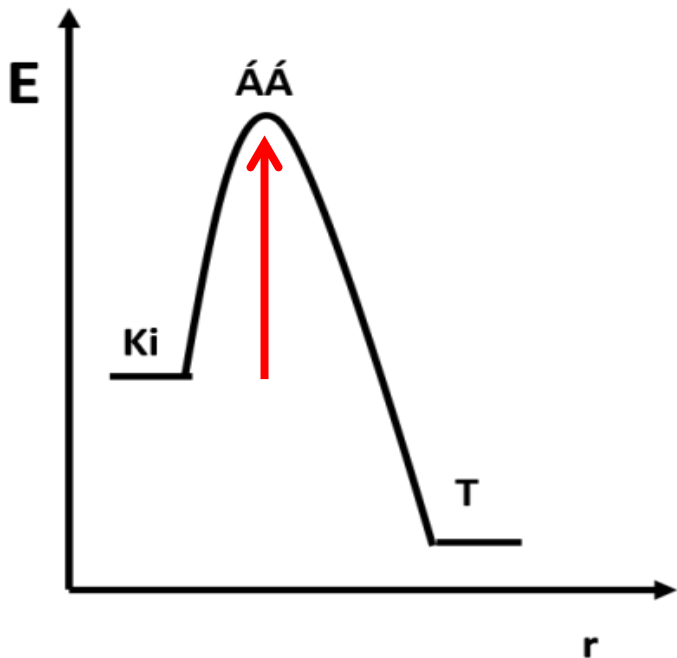
- **Aktivált komplex** - Átmeneti állapot (élettartama egy molekularezgés - 10^{-14} s)

Többlépéses reakció



- **Köztitermék**: valós létidővel rendelkező képződmény (létezése kimutatható)

Termokémia – A kémiai reakciók energiaviszonyai



- **Aktiválási energia**

1 mól aktivált komplex létrehozásához szükséges energia.

Jele: E_a mértékegysége: kJ/mol

Az aktiválási gát átugrása szükséges feltétele egy kémiai reakció végbemenetelének.

(Kinetikai feltétel)

A reakcióhő meghatározása

A legtöbbször alkalmazott módszer a **képződéshők felhasználásával** történő számítás:

$$\Delta H_r = \sum \Delta H_{k(\text{termékek})} - \sum \Delta H_{k(\text{kiindulási anyagok})}$$

A reakcióhő meghatározható a **kötési energiák segítségével** is:

$$\Delta H_r = \sum D_{(\text{kiindulási anyagok})} - \sum D_{(\text{termékek})}$$

Például az ammónia szintézis esetében:

$$\Delta H_r = 3 D_{\text{HH}} + D_{\text{NN}} - 6 D_{\text{NH}}$$

- **Kötési energia**

1 mól molekulában, két atom közötti kötés képződését vagy felszakítását kísérő energiaváltozás.

A reakcióhő meghatározása

A reakcióhő meghatározható **körfolyamatok alkalmazásával** is figyelembe véve a Hess-tételt.



A folyamatot kísérő hőváltozás független az úttól, azaz tetszőleges lépéseket felhasználhatunk.

Pl.: $2 \text{ Na (sz)} \longrightarrow 2 \text{ Na (g)}$ rácsenergia befektetése

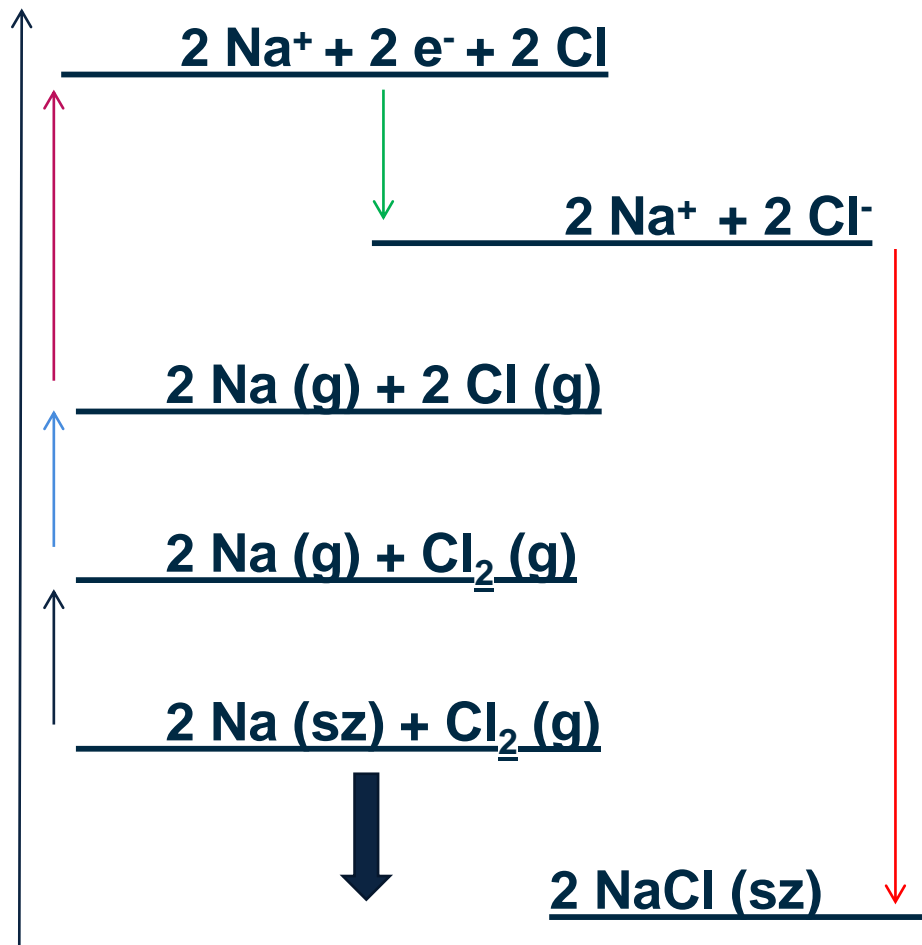
$2 \text{ Na (g)} \xrightarrow{\text{red}} 2 \text{ Na}^+ + 2 \text{ e}^-$ ionizációs energia befektetése

$\text{ Cl}_2 \text{ (g)} \longrightarrow 2 \text{ Cl}$ kötési energia befektetése

$2 \text{ Cl} + 2 \text{ e}^- \xrightarrow{\text{green}} 2 \text{ Cl}^-$ elektronaffinitás

$2 \text{ Na}^+ + 2 \text{ Cl}^- \xrightarrow{\text{red}} 2 \text{ NaCl}$ rácsenergia visszanyerése

A reakcióhő meghatározása energiadiagrammal



- **Ionizációs energia**

1 mól szabad (gázhalmazállapotú) atom legkönnyebben leszakítható elektronjának eltávolításához szükséges energia.

Jele: E_i mértékegysége: kJ/mol

- **Elektronaffinitás**

1 mól atomból egyszeresen negatív töltésű ion képződését kísérő energiaváltozás

Hőváltozás meghatározása energiadiagrammal

• Rácsenergia

1 mól kristályos anyag felbontását kísérő energiaváltozás.

Jele: E_r mértékegysége: kJ/mol

• Oldáshő

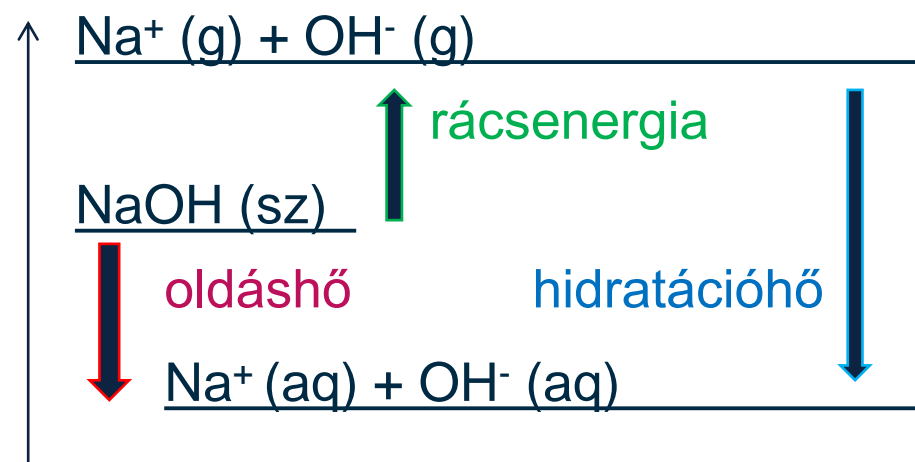
1 mól oldandó anyagból való *nagyon híg* oldat készítését kísérő energiaváltozás.

Jele: $\Delta_{sz}^{aq}H$

• Hidratációs energia

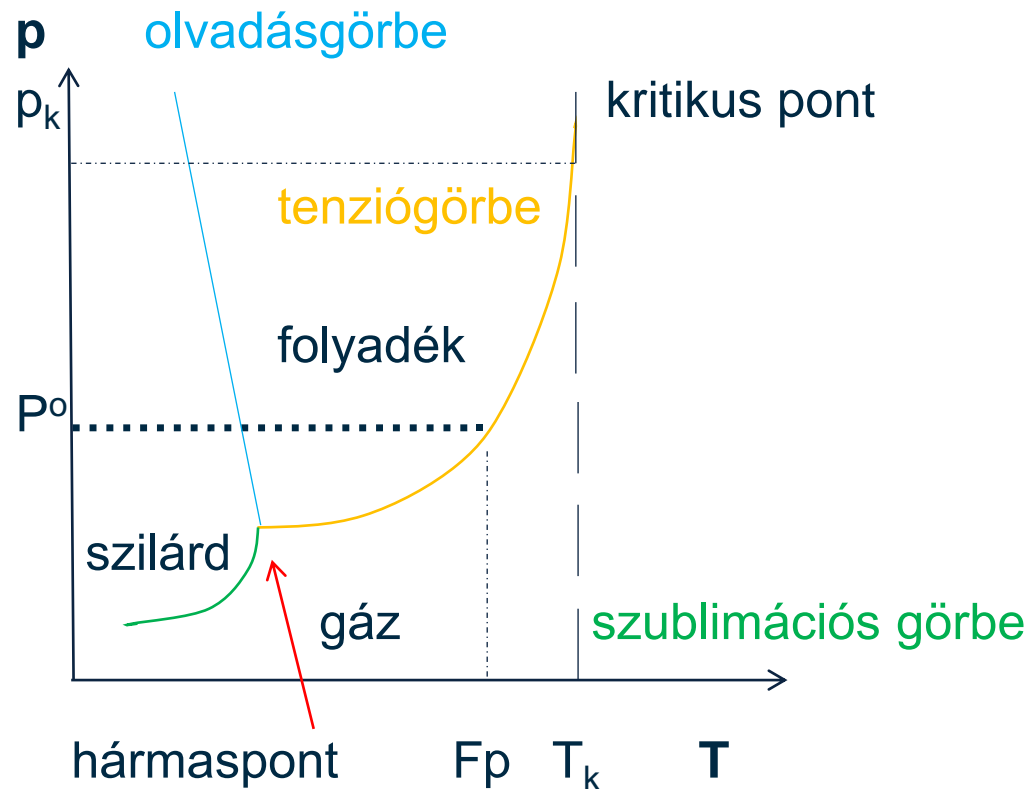
1 mól szabad (gázhalmazállapotú) ion hidratációját kísérő energiaváltozás.

Értéke mindig negatív ($E_h < 0$ kJ/mol)



Halmazállapot-változást kísérő energiaváltozások

Fázisdiagram:



- **Olvadáshő**
- **Fagyáshő**
- **Párolgáshő**
- **Forráshő**
- **Lecsapódáshő**
- **Szublimációs hő**

Köszönöm a figyelmet!