

10. A termokémia és kémiai kinetika alapjai

A termokémia alapjai

A fizikai és kémiai folyamatokat hőváltozás kíséri.

Kísérlet: égés, endoterm oldás

Endoterm folyamat: a folyamat során hő nyelődik el.

Exoterm folyamat: a folyamat során hő termelődik.

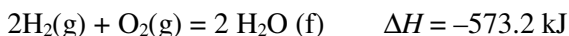
Leggyakrabban állandó nyomáson mennek a folyamatok, ekkor a hőváltozást entalpia változásnak mondjuk.

Az entalpiaváltozás jele: ΔH

A kémiai reakciókat is kíséri energiaváltozás.

Kiegészítjük a reakcióegyenletet a hőváltozást leíró résszel:

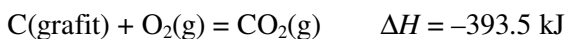
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2 \text{H}_2\text{O}$ helyett



Az energiaváltozás szempontjából fontos, hogy az egyes anyagok milyen állapotban vannak, ezért ezt meg kell adni az egyes anyagok képlete után. Az adott reakcióegyenletre vonatkozik!

Az előjel rendben van? Ebben a folyamatban hő termelődik és – az előjel. Igen, rendszer központúság!

A képződéshő olyan folyamat reakcióhője, amely során egy vegyület 1 mólja képződik standard állapotú, stabilis elemekből.



Így a szén-dioxid képződéshője $\Delta_f H = -393.5 \text{ kJ/mol}$.

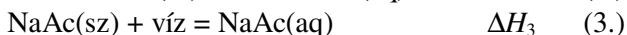
Hess-tétel: egy reakciót kísérő teljes entalpiaváltozás csak a kezdeti és végállapottól függ, független a részfolyamatok minőségétől, sorrendjétől, időbeli lefolyásától.

Mire jó ez?

A 1 mol nátrium-acetát három mol kristályvízzel kristályosodik. Mennyi az ezt leíró folyamat során a hőváltozás?



Sokkal könnyebb megmérni a kristályvízmentes és kristályvizes nátrium-acetát oldáshőjét:



$$(1.) + (2.) = (3.)$$

Hess-tétele értelmében ez igaz a reakciók entalpiaváltozására is:

$$\Delta H_1 + \Delta H_2 = \Delta H_3$$

$$\Delta H_1 = \Delta H_3 - \Delta H_2$$

$$\Delta H_3 = -19,5 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_3 = 17,1 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_1 = \Delta H_3 - \Delta H_2 = -19,5 \text{ kJ/mol} - 17,1 \text{ kJ/mol} = -36,6 \text{ kJ/mol}$$

A reakciókinetika alapjai

Három fő kérdéskör:

1. a reakciók időbeli lefutása
2. a reakciók mechanizmusa
3. a reakciók dinamikája

1. a reakciók időbeli lefutása

gyors reakciók – lassú reakciók

kvantitatív jellemzés: a reakció sebessége

sokféle definíció, a legegyszerűbben: a reakcióban résztvevő anyag mennyiségének (vagy koncentrációjának) megváltozása osztva az eltelt idővel

$\Delta n/\Delta t$ vagy $\Delta c/\Delta t$

analógia az autó sebességével; átlagsebesség, pillanatnyi sebesség

2. a reakciók mechanizmusa

Elemi reakció: olyan reakció, amely nem bontható további lépésekre

Összetett reakciók: nem elemi reakciók, azaz további lépésekre bonthatók

A legtöbb reakció összetett.

Például $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2 \text{H}_2\text{O}$

5 köztitermék, mintegy 40 reakciólépés...

3. a reakciók dinamikája

egy elemi reakció hogyan megy végbe

A katalizátorok:

Olyan anyagok amelyek új reakcióutat nyitva gyorsabbá teszik a reakciót.

Részt vesznek a reakcióban, de a reakció végén visszanyerhetők (a gyakorlatban némi veszteség mindig van).

Nagyon fontosak az iparban!

Katalizátorok használatával:

Ugyanannyi idő alatt több termék képződik.

Ugyanannyi termék rövidebb idő alatt képződik.

DE! Az egyensúly helyét nem változtatja meg! Egyensúlyi reakcióban ugyanolyan lesz a termékarány, csak hamarabb érjük el az egyensúlyt.