

10. A termokémia és kémiai kinetika alapjai

| | |
|----------------------|--|
| Tanulási célok | <ul style="list-style-type: none"> - meg tudja állapítani, hogy egy folyamat endoterm vagy exoterm - fel tud írni egy termokémiai reakcióegyenletet - ki tudja számolni egy reakció reakcióhőjét képződéshőkből - alkalmazni tudja a Hess-tételt |
| Fogalmak | endoterm, exoterm folyamat, termokémiai reakcióegyenlet, reakcióhő, képződéshő, Hess-tétel, reakciósebesség, elemi reakció, összetett reakció |
| Kapcsolódó feladatok | Példatár 17. fejezet |

A termokémia alapjai

A fizikai és kémiai folyamatokat hőváltozás kíséri.

Bizonyos esetekben ez nagyon látványos (például égés), más esetekben kevésbé (például NaCl oldódása).

Endoterm folyamat: a folyamat során hő nyelődik el.

Exoterm folyamat: a folyamat során hő termelődik.

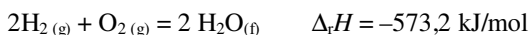
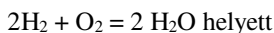
A viszonyítás központja mindig a rendszer!

Leggyakrabban állandó nyomáson mennek a folyamatok, ekkor a hőváltozást entalpiaváltozásnak nevezzük.

Az entalpiaváltozás jele: ΔH

A kémiai reakciókat mindig kíséri energiaváltozás.

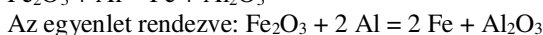
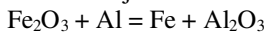
Egészítsük ki a reakcióegyenletet a hőváltozást leíró résszel:



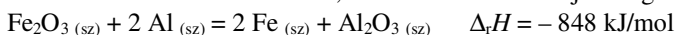
Az energiaváltozás szempontjából fontos, hogy az egyes anyagok milyen állapotban vannak, ezért ezt meg kell adni az egyes anyagok képlete után. A reakcióhő (jele $\Delta_r H$) az adott reakcióegyenletre vonatkozik!

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

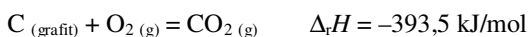
Feladat: Írjuk fel a termite reakció termokémiai egyenletét, ha tudjuk, hogy 1,00 mol vas(III)-oxid redukciójakor 848 kJ hő szabadul fel!



A reakció során hő szabadul fel, ezért a hőváltozás előjele negatív:



A **képződéshő** olyan folyamat reakcióhője, amely során egy vegyület 1 mólja képződik standard állapotú, stabilis elemekből. Jele: $\Delta_k H$.



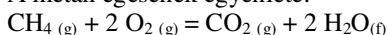
Így a szén-dioxid képződéshője $\Delta_k H = -393,5 \text{ kJ/mol}$.

A definícióból következik, hogy standard állapotú, stabilis elemek képződéshője nulla.

A reakciót kísérő hőváltozás, a reakcióhő kiszámítható a reakcióegyenletben szereplő anyagfajták képződéshője segítségével:

Adottak a következő képződéshők: $\Delta_k H(\text{CO}_2, \text{g}) = -394 \text{ kJ/mol}$, $\Delta_k H(\text{H}_2\text{O}, \text{f}) = -286 \text{ kJ/mol}$, $\Delta_k H(\text{CH}_4, \text{g}) = -75 \text{ kJ/mol}$

A metán égésének egyenlete:



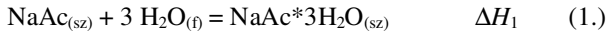
$\Delta_r H = ?$

$$\Delta_r H = \Delta_k H(\text{CO}_2, \text{g}) + 2 * \Delta_k H(\text{H}_2\text{O}, \text{f}) - 2 * \Delta_k H(\text{O}_2, \text{g}) - \Delta_k H(\text{CH}_4, \text{g}) = -394 \text{ kJ/mol} + 2 * (-286 \text{ kJ/mol}) - 2 * 0 \text{ kJ/mol} - (-75 \text{ kJ/mol}) = -891 \text{ kJ/mol}$$

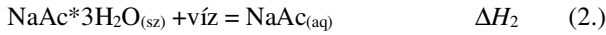
Hess-tétel: egy reakciót kísérő teljes entalpiaváltozás csak a kezdeti és végállapottól függ, független a részfolyamatok minőségétől, sorrendjétől, időbeli lefolyásától.

Mire jó ez?

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



ΔH_1 nem jól mérhető, sokkal könnyebb megmérni a kristályvízmentes és kristályvizet nátrium-acetát oldáshőjét:



A 3. reakció gondolatban felbontható két lépésre, az 1. és a 2. reakcióra: (1.) + (2.) = (3.)

Hess-tétele értelmében ez igaz a reakciók entalpiaváltozására is:

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

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

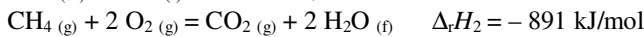
Kísérleti értékek:

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

$$\Delta H_2 = 17,1 \text{ kJ/mol}$$

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

Feladat: 1,00 kg jég megolvasztásához elvileg mekkora térfogatú 25 °C-os, 1 atm nyomású (standard állapotú) metángáz elégetése biztosít elegendő hőt?



$$m_{\text{jég}} = 1,00 \text{ kg} = 1000 \text{ g}$$

$$n_{\text{jég}} = m_{\text{jég}} / M_{\text{jég}} = 1000 \text{ g} / 18 \text{ g/mol} = 55,56 \text{ mol}$$

$$Q_1 = n_{\text{jég}} * \Delta H_1 = 55,56 \text{ mol} * 6,03 \text{ kJ/mol} = 335 \text{ kJ}$$

Így 335 kJ hőt kell termelni metán elégetésével, ami $-335 \text{ kJ} / \Delta H_2 = 0,376 \text{ mol}$ metán elégetését jelenti.

$$pV = nRT$$

$$101325 \text{ Pa} * V = 0,376 \text{ mol} * 8,314 \text{ J} / (\text{mol} * \text{K}) * (273,15 + 25) \text{ K}$$

$$V = 0,00920 \text{ m}^3 = 9,20 \text{ dm}^3$$

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

Pillanatnyi sebesség esetén a véges változások helyett deriváltakat használunk: dn/dt vagy dc/dt

A reakciósebesség értéke anyagmennyiség változással vagy koncentráció változással felírva függhet az anyagfajta kiválasztásától (elég csak arra gondolni, hogy termék esetén pozitív, reaktáns esetén negatív számot kapunk). Ennek kiküszöbölésére érdemes azt a reakciókoordináta változásával kifejezni, illetve átírni a következő alakokba: $\Delta\xi/\Delta t$ vagy $d\xi/dt$
 $\frac{1}{\nu_i} \frac{dn_i}{dt}$ vagy $\frac{1}{\nu_i} \frac{dc_i}{dt}$, ahol i az anyagfajta indexe.

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.