

## Az entalpia

A természeti folyamatok állandó nyomáson játszódnak le!

$$H \equiv U + pV \quad \text{Entalpia (Joule, J)}$$

Állapotfüggvény  $\Delta H = H_{\text{vég}} - H_{\text{kezdet}} = \int_{\text{kezdet}}^{\text{vég}} dH$

$$dH = dU + d(pV) = dU + pdV + Vdp = dQ + dW + pdV + Vdp$$

$$dW = -pdV \quad \rightarrow \quad dH = dQ + Vdp$$

Állandó nyomáson  $dH = dQ$

Állandó nyomáson (ha nincs egyéb munka) az entalpia megváltozása a hővel egyenlő.

19

## Az entalpia változása hőcsere révén

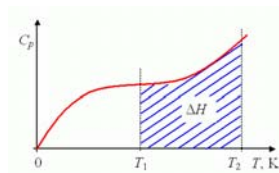
1- Izobár melegítés/hűtés ( $p=\text{áll.}$ )

$$\Delta H = Q_p = m \int c(T) dT$$

$$\Delta H = Q_p = n \int c_m(T) dT$$

$[C_m] = \text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$  moláris fajhő

$$C = a + bT + cT^{-2} + dT^2 \quad \text{a, b, c, d értéke adatbázisokból}$$



$C_p > C_v$ : állandó nyomáson térfogati munkavégzés is van, azt is fedezi

2- Fázisátalakulás: izobár, izoterm **látens vagy fázisátalakulási hő**

- párolgáshő – kondenzációs hő
- olvadáshő - fagyáshő
- szublimációs hő – kondenzációs hő

3- **Kémiai reakciók**  $\Delta H = \text{reakcióhő}$

20

### 3. Kémiai átalakulások hőeffektusai

$$\Delta_r H, \Delta_r H_m$$

Mivel  $H$  állapotfüggvény: a reakcióhő független attól, milyen közbülső termékeken keresztül jutunk el a termékhez:

egy kémiai reakció során bekövetkező entalpiaváltozás

=

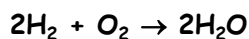
a tetszőleges részreakciók során bekövetkező entalpiaváltozások összege

a reakcióhő számítással is meghatározható !!!!!

### TERMOKÉMIA

**Reakcióhő:** állandó  $T$ , a reakcióegyenlet által definiált mennyiségű anyag átalakulását kísérő hőmennyiség  
függ:  $T$ ,  $p$ , koncentráció

**Standard reakcióhő:** a reakcióegyenlet által definiált mennyiségű anyag átalakulását kísérő hőmennyiség, miközben  $p^0 = 1$  bar nyomású **tiszta** reagensekből ugyanilyen nyomású és azonos hőmérsékletű **tiszta** termékek keletkeznek



$$\Delta_r H = 2H_m(\text{H}_2\text{O}) - 2H_m(\text{H}_2) - H_m(\text{O}_2)$$

Meg kell adni a reakcióegyenletet és a résztvevő anyagok halmazállapotát.

$$\sum \nu_k M_k = \sum \nu_t M_t$$

$$\Delta_r H = \sum \nu_t H_{m,t} - \sum \nu_k H_{m,k}$$

nyomás

$$1 \text{ Pa} = 1 \text{ N/m}^2$$

légkör: **1 bar =  $10^5$  Pa** (kPa, Mpa)    **1 bar standard nyomás,  $p^0$**

$$1 \text{ atm} = 1,013 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ Hgmm} \cong 1 \text{ torr}$$

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ torr}$$

**Termodinamikai hőmérséklet: K skála:  $^{\circ}\text{C} + 273$**

Táblázatokban: standard entalpiák 298 K-en  
moláris hőkapacitás ( $C_{m,p}$ ) függvények

**Exoterm (hőtermelő) reakcióban energia szabadul fel.**

**Endoterm (hőt emésztő) reakcióhoz energiára van szükség.**

**Előjelkonvenció:  
központban a rendszer**

**A rendszer változása**

|                 | <u>adiabatikus (<math>\Delta Q=0</math>)</u> | <u>izoterm (<math>T=\text{áll.}</math>)</u> |
|-----------------|--|---|
| <b>exoterm</b>  | <b>felmelegszik</b>                          | <b>hőleadás</b>                             |
| <b>endoterm</b> | <b>lehűl</b>                                 | <b>hőfelvétel</b>                           |

Az anyagokhoz entalpiaértéket rendelünk:

**STANDARD ENTALPIÁK:**  $H^0$ ,  $H_m^0$

Standard nyomás:  $p^0 = 10^5 \text{ Pa}$

**1. Elemek esetén** (stabilis módosulat)

$$H_m^0(298,15\text{K}) = 0$$

**Stabilis módosulatok (allotrópia)**

|          |          |
|----------|----------|
| Bróm     | folyadék |
| Szén     | grafit   |
| Hidrogén | gáz      |
| Jód      | szilárd  |
| Higany   | folyadék |
| Nitrogén | gáz      |
| Oxigén   | gáz      |

**2. Vegyületek esetén = Képződéshő ( $\Delta_f$ )**

= az elemekből (az adott hőmérsékleten legstabilabb módosulat) végbemenő képződési reakció reakcióhője,

Példa: a kéntrioxid standard képződéshője az



Reakció standard reakcióhője.

**Néhány vegyület standard moláris képződéshője 25 °C-on, kJ/mol**

|                     |   |         |
|---------------------|---|---------|
| Ammónia             | $\text{NH}_3(\text{g})$                       | -46,11  |
| Szénmonoxid         | $\text{CO}(\text{g})$                         | -110,53 |
| Széndioxid          | $\text{CO}_2(\text{g})$                       | -393,51 |
| Dinitrogén tetroxid | $\text{N}_2\text{O}_4(\text{g})$              | +9,16   |
| Dinitrogén oxid     | $\text{N}_2\text{O}(\text{g})$                | +82,05  |
| Nitrogénoxid        | $\text{NO}(\text{g})$                         | +90,25  |
| Nitrogéndioxid      | $\text{NO}_2(\text{g})$                       | +33,18  |
| Konyhasó            | $\text{NaCl}(\text{s})$                       | -411,15 |
| Víz                 | $\text{H}_2\text{O}(\text{l})$                | -285,83 |
|                     | $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$                | -241,82 |
| Benzol              | $\text{C}_6\text{H}_6(\text{l})$              | +49,0   |
| Etán                | $\text{C}_2\text{H}_6(\text{g})$              | -84,68  |
| Etanol              | $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{l})$     | -277,69 |
| Metán               | $\text{CH}_4(\text{g})$                       | -74,81  |
| Metanol             | $\text{CH}_3\text{OH}(\text{l})$              | -238,86 |
| Glükóz              | $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(\text{s})$ | -1268   |

Alkalmazott kémia 1.

27

**Adatbázisokban gyakori: standard égéshők ( $\Delta_c$ )**  
kísérletileg viszonylag egyszerűen meghatározható

**( $\Delta_c H$ ), kJ/mol**

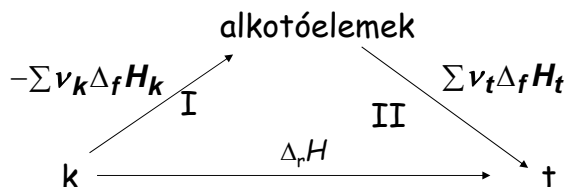
|   |       |
|---|-------|
| Benzol                                      | -3268 |
| Etán  | -1560 |
| Glükóz                                      | -2808 |
| Metán                                       | -890  |
| Metanol                                     | -726  |
| Hidrogén ( $\text{H}_2\text{O}(\text{l})$ ) | -286  |
| Oktán                                       | -5471 |
| Ciklohexán                                  | -3902 |

Alkalmazott kémia 1.

28

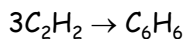
$\Delta_r H$  meghatározása képződéshőkből ( $\Delta_f H$ ) formation

$$[\Delta_f H] = \text{J/mol}$$



$$\Delta_r H = \Delta_r H(I) + \Delta_r H(II) = \sum v_t \Delta_f H_t - \sum v_k \Delta_f H_k = \Delta_r(\Delta_f H)$$

a termékek képződéshőinek összegéből kivonjuk a kiindulási anyagok képződéshőinek összegét

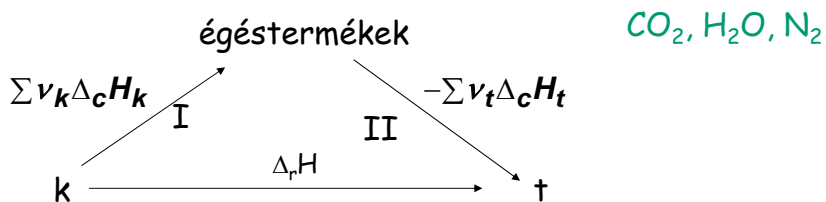


$$\Delta_r H = \Delta_f H_{\text{C}_6\text{H}_6} - 3 \cdot \Delta_f H_{\text{C}_2\text{H}_2}$$

Alkalmazott kémia 1.

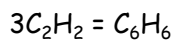
29

$\Delta_r H$  meghatározása égéshőkből ( $\Delta_c H$ ) combustion



$$\Delta_r H = \Delta_r H(I) + \Delta_r H(II) = \sum v_k \Delta_c H_k - \sum v_t \Delta_c H_t = -\Delta_r(\Delta_c H)$$

a kiindulási anyagok égéshőinek összegéből kivonjuk a termékek égéshőinek összegét



$$\Delta_r H = 3\Delta_c H_{\text{C}_2\text{H}_2} - \Delta_c H_{\text{C}_6\text{H}_6}$$

Alkalmazott kémia 1.

30

## Standard reakcióhő kiszámítása $T$ hőmérsékleten:

1. Kiszámítjuk minden egyes résztvevő standard entalpiáját  $T$  K-en.

$$H_m^0(T) = H_m^0(298) + \int_{298}^{T_{olv}} C_{m,p}(s) dT + \Delta H_m^0(olv) + \int_{T_{olv}}^{T_{forr}} C_{m,p}(\ell) dT + \Delta H_m^0(pár) + \int_{T_{forr}}^T C_{m,p}(g) dT$$

2. Képezzük a  $\Delta_r H^0 = \sum \nu_t H_{m,t}^0 - \sum \nu_k H_{m,k}^0$  különbséget.

Alkalmazott kémia 1.

31

## A SZABADentalpia

KINYERHETŐ-E A RENDSZER teljes ENTALPIÁJA?

$$H - TS \equiv G \quad \text{szabadentalpia}$$

teljes tárolt energia
molekulák véletlenszerű mozgása által tárolt energia

A szabadentalpia állapotfüggvény

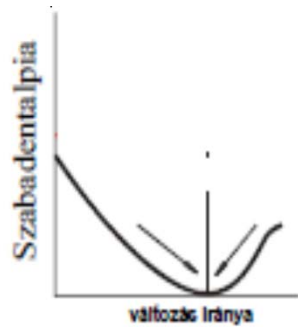
A szabadentalpia extenzív mennyiség

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

32

## A szabadentalpia változása

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$



Ha nincsen egyéb munka,  
állandó hőmérsékleten és nyomáson,  
zárt rendszerben

- spontán folyamatban csökken,
- egyensúlyban minimuma van.

! Spontaneitás = átalakulás sebessége !

$$G_{\text{maradt}} - G_{\text{egyensúly}} = -3\text{kJ/mol}$$