

Kémiai változások



Energia

Energia: munkavégző, vagy hőközlő képesség.

Kinetikus energia: a mozgási energia

Potenciális (helyzeti) energia: a részecskék kölcsönhatásából származó energia.

Energiamegmaradás törvénye:

Az energia nem keletkezik, nem is szűnik meg, csak átalakul.

A világegyetem energiája állandó.

Rendszer és környezet

Rendszer-nek nevezzük a világnak azt a képzelt, vagy valós határfelülettel elkülönített részét, amelynek tulajdonságait vizsgáljuk.

Mindent, ami a rendszeren kívül van **környezet**-nek hívjuk.

Zárt rendszer: nincs anyagátadás
energiaátadás lehetséges

Izolált rendszer: nincs anyagátadás
nincs energiaátadás

Belső energia

A rendszert felépítő részecskék összenergiája (kinetikus és potenciális) a **belső energia** (U).

Részei:

1. Termikus (molekulák mozgásával kapcsolatos)
2. Intermolekuláris (molekulák közötti erőkkel kapcsolatos)
3. Kémiai (kémiai kötések létesítésével, felbontásával kapcs.)
4. Mag (magenergiával kapcs.)

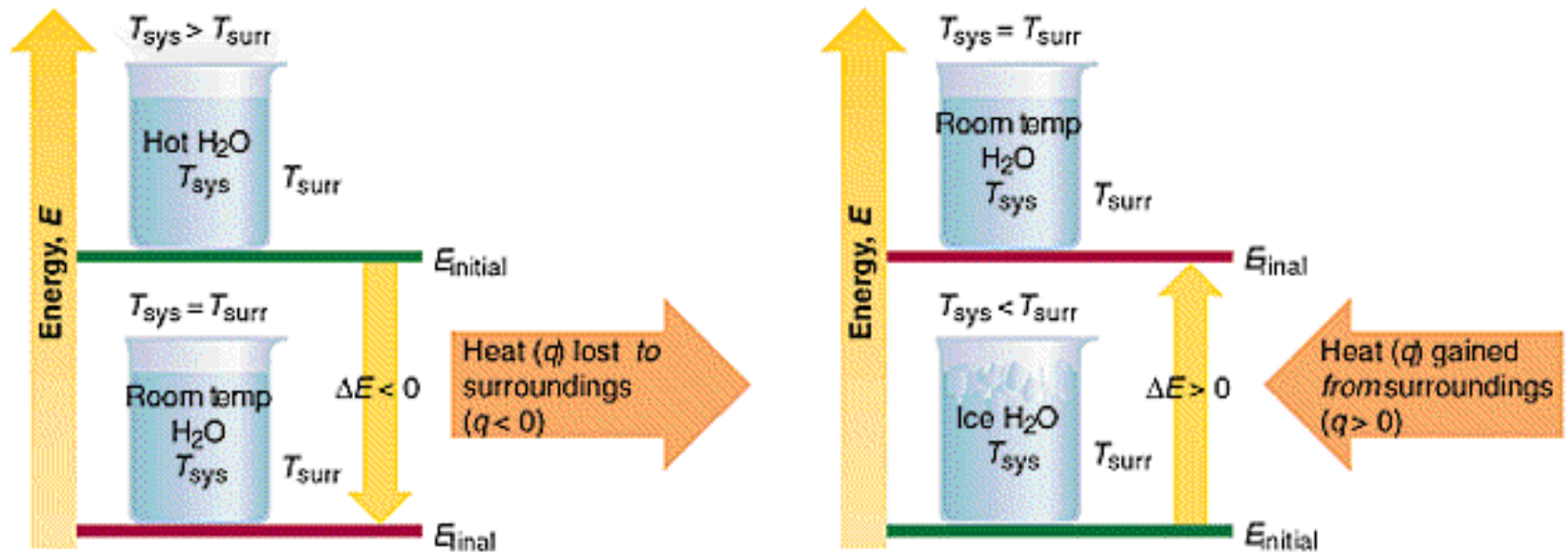
A termodinamika első főtétele: \Rightarrow

Elszigetelt (izolált) rendszer belső energiája állandó.

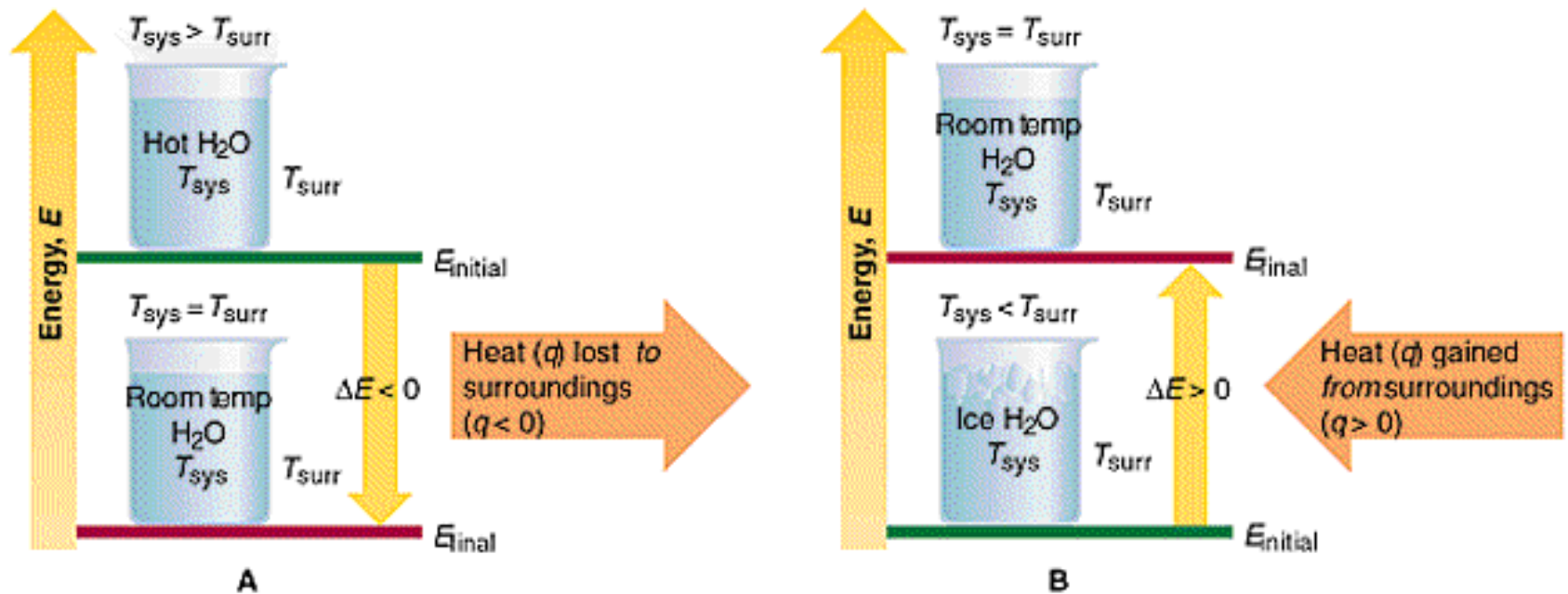
Zárt rendszer: a belső energia hő, vagy munka hatására változik

$$\Delta E (\Delta U) = Q + W$$

Q -hő, W -munka (*előjel!!!*)



A **hő** a rendszer és környezete között a hőmérséklet különbségéből eredően átadott energia



Munka: energia átadás, kivéve hőt,
 leggyakrabban térfogati munka.

$$dW_{\text{tf}} = -p_k dV$$

Ha a p nyomás állandó. $W_{\text{tf}} = -p(V_2 - V_1) = -p\Delta V$

$$H = U + pV \quad H: \text{ entalphy}$$

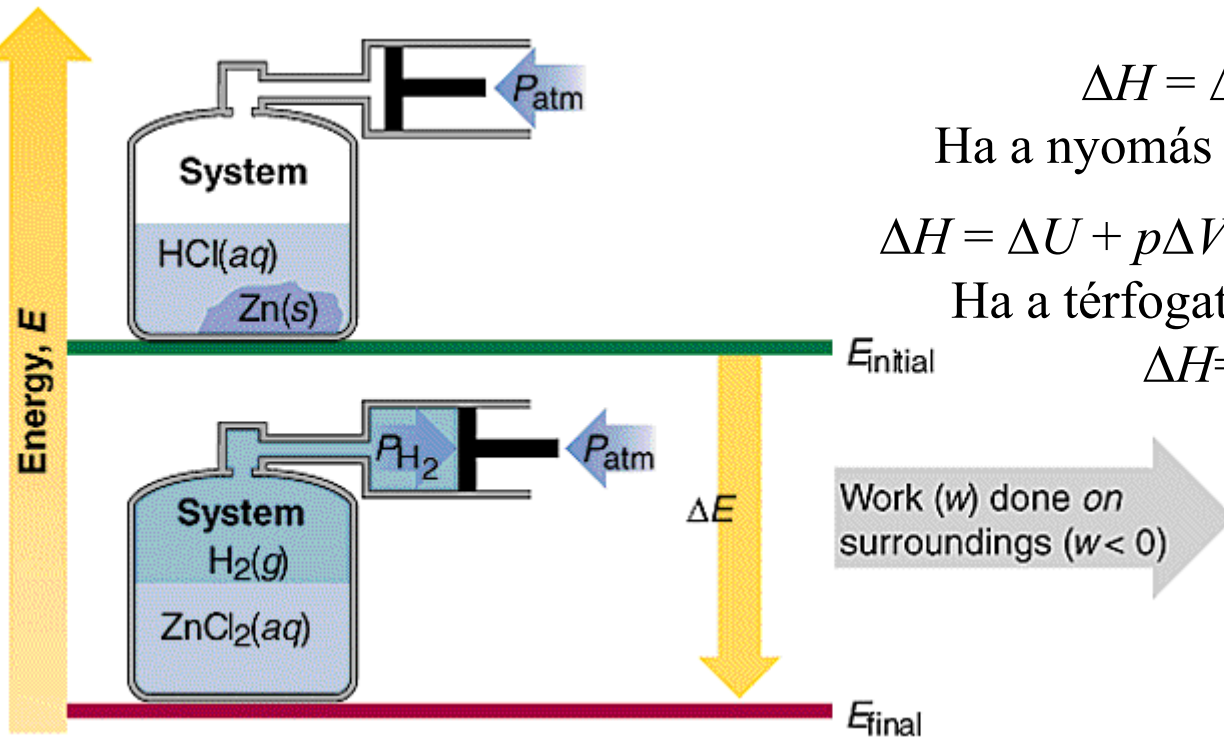
$$\Delta H = \Delta U + \Delta(pV)$$

Ha a nyomás állandó és $W = W_{\text{tf}}$

$$\Delta H = \Delta U + p\Delta V = Q - p\Delta V + p\Delta V = Q$$

Ha a térfogat állandó: $\Delta V = 0$

$$\Delta H = \Delta U = Q$$



Hőkapacitás

A hőmérséklet változása a közölt hő mennyiségével egyenesen arányos:

$$Q = C * \Delta T$$

C = hőkapacitás

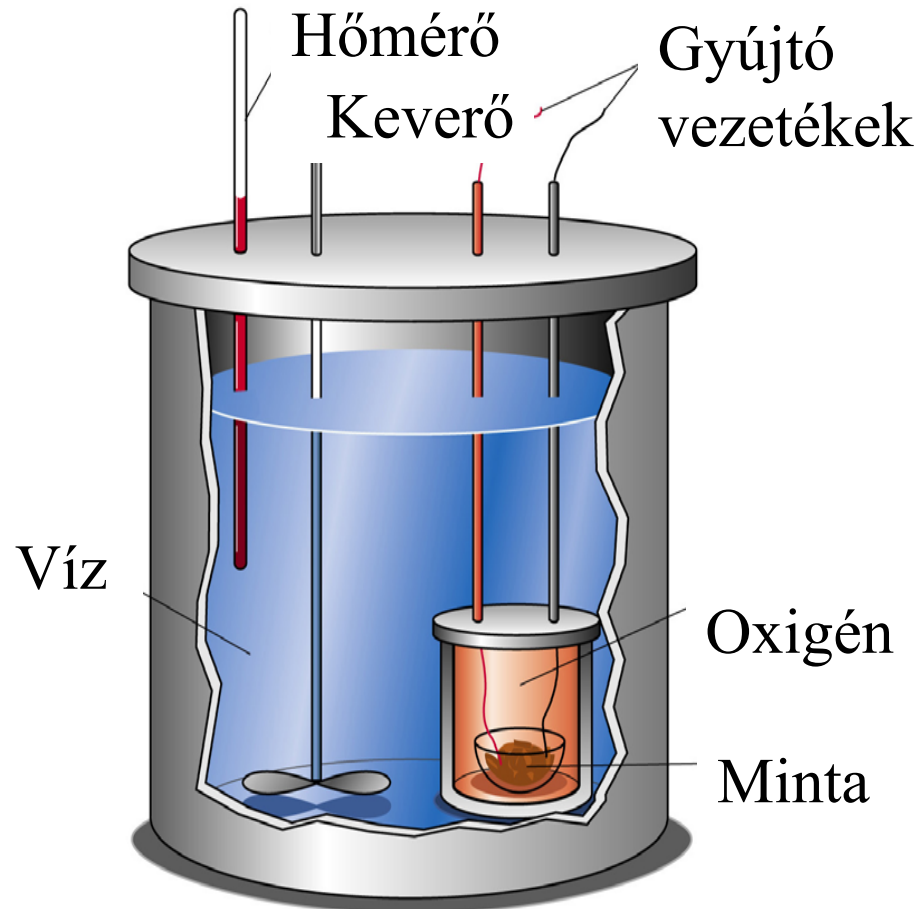
$$Q = n * C_m * \Delta T ; Q = m * c * \Delta T$$



moláris
hőkapacitás



1 g-ra
(fajhő)



Látens hő

Látens hő: az energiaátadás nem jár hőmérsékletváltozással

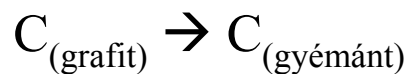
Olvadáshő, fagyáshő, párolgáshő (kondenzációs hő), szublimációs hő

$$\text{VÍZ: } \Delta H_{\text{olv}} = 6,0 \text{ kJ/mol} \quad (273,15 \text{ K})$$

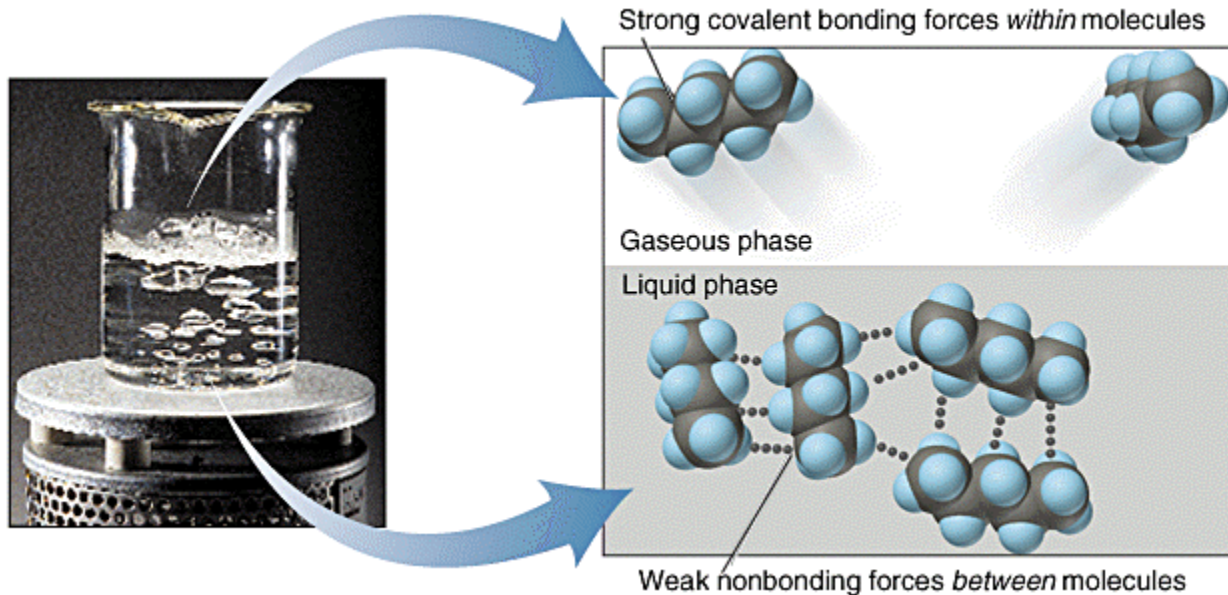
$$\Delta H_{\text{pár}} = 40,7 \text{ kJ/mol} \quad (373,15 \text{ K})$$

$$\Delta H_{\text{szubl}} = 16,2 \text{ kJ/mol} \quad (183 \text{ K})$$

Módosulat változás:



$$\Delta H = 1,9 \text{ kJ/mol} \quad (298 \text{ K})$$



Megoldandó feladat:

A szén-tetraklorid (CCl_4) forrásponjtján az anyag párolgáshője $29,92 \text{ kJ/mol}$. Ha 50 g CCl_4 -ot a forrásponjtján, normál légköri nyomáson elpárologtatunk, számítsuk ki Q , W , ΔU és ΔH értékeit ! A CCl_4 forrásponjtja $76,8 \text{ }^\circ\text{C}$.

Megoldás

$$n = 50 \text{ g} / 154 \text{ g/mol} = 0,325 \text{ mol}$$

$$Q = n \cdot L = 0,325 \text{ mol} \cdot 29,92 \text{ kJ/mol} = 9,71 \text{ kJ}$$

$$p\Delta V = \Delta n \cdot RT = 0,325 \cdot 8,314 \cdot (273,15 + 76,8) = 945,45 \text{ J}$$

Nyomás állandó $\Rightarrow Q = \Delta H$

$$\Delta H = 9,71 \text{ kJ}$$

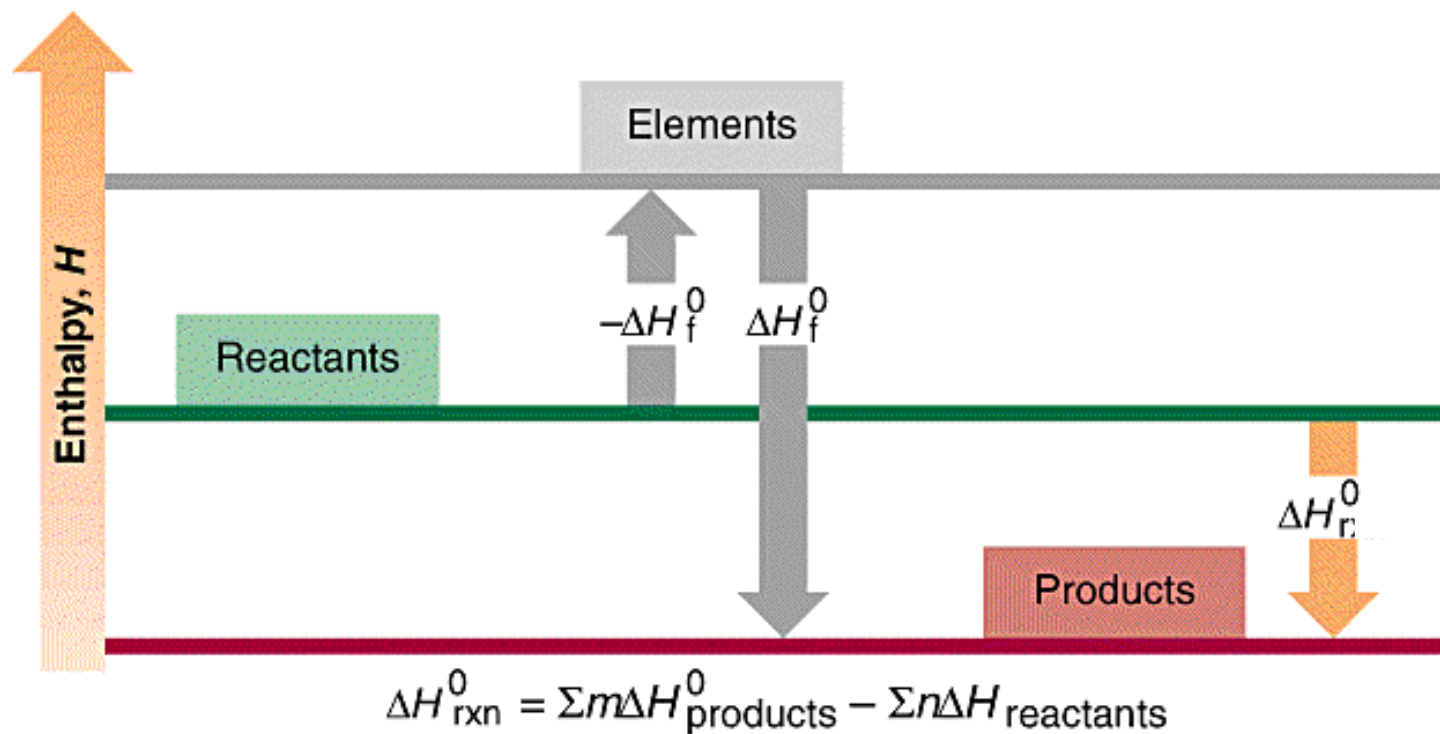
$$\Delta U = \Delta H - p \Delta V = 9,71 - 0,945 \text{ kJ} = 8,765 \text{ kJ}$$

A kémiai reakciók entalpiaváltozása

Reakcióhő:

a bekövetkező entalpiaváltozás (ΔH)

(pontosan a reakcióegyenletnek megfelelően)



Egy anyag **standard állapotán** azt értjük, hogy tiszta állapotban van és a nyomás 1 atm (101,325 kPa) és a hőmérséklet 25 °C (298,15 K).

A **standard reakcióhő** az az entalpiaváltozás, amit akkor mérhetünk, ha a reagáló anyagok és a termékek is standard állapotban vannak.

$$\Delta H^0_{298,15 \text{ K}}$$

Hess tétel:

Mindegy, hogy milyen úton jutunk a kezdeti állapotból a végállapotba, a reakció entalpiaváltozása, csak a kezdeti és végállapottól függ.

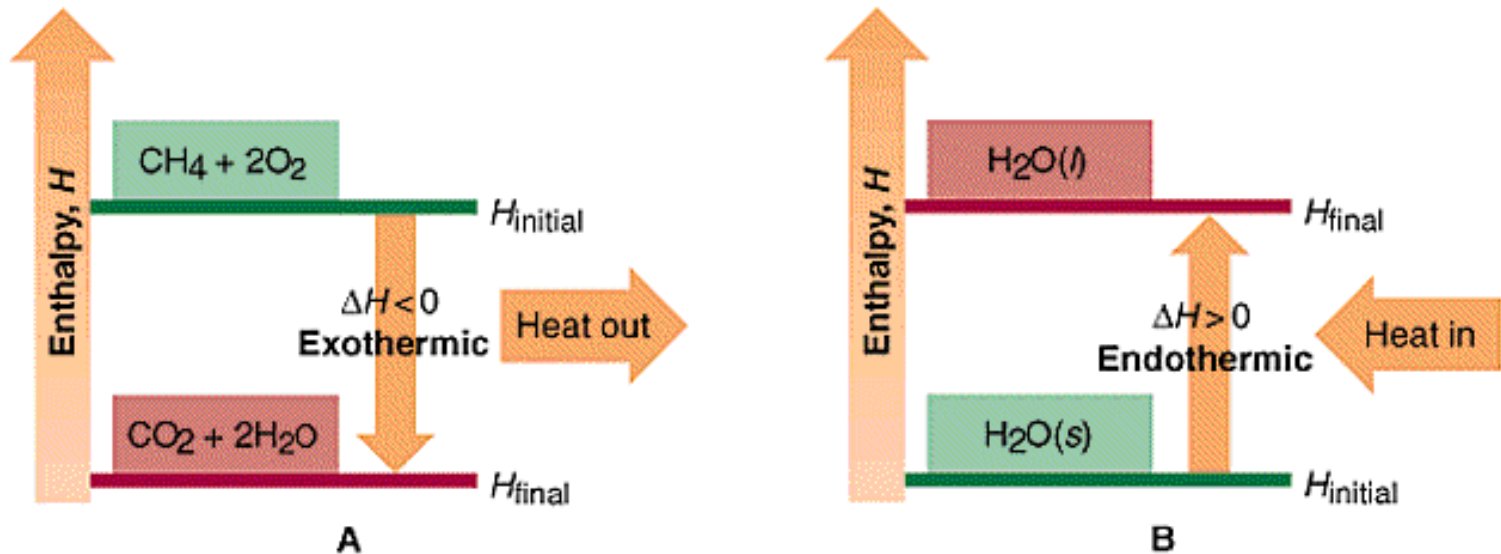
Az entalpia állapotfüggvény, változása csak a kezdeti és végállapottól függ.

Egy vegyület **standard képződéshője** (ΔH_f^0) annak a reakciónak az entalpiaváltozása egy móltra vonatkoztatva, ahol a vegyület standard állapotú elemeiből képződik.

Az elemek képződéshője nulla.

Exotherm folyamat: hőleadás.

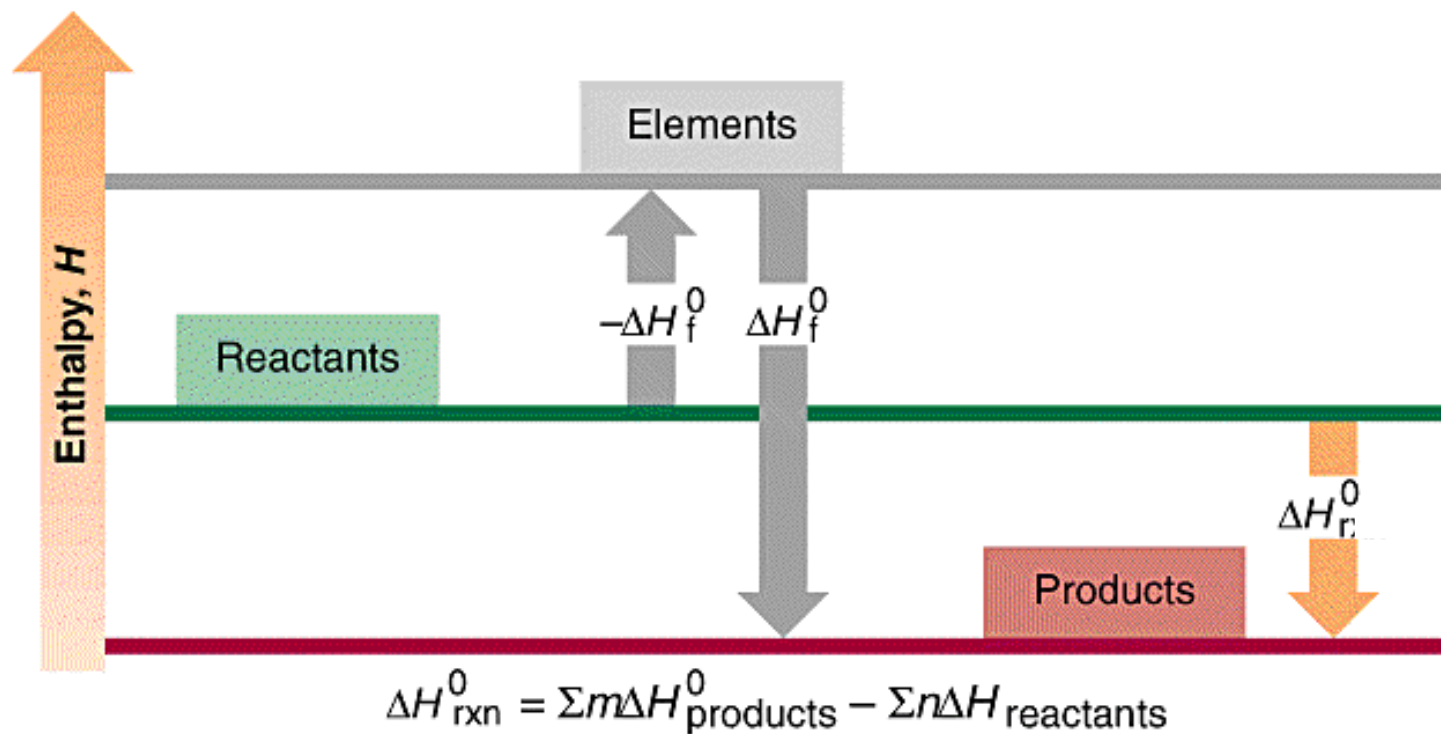
Endotherm folyamat: hőfelvétel.



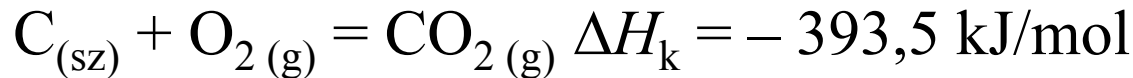
Standard képződéshők kombinálása

A reakcióhő:

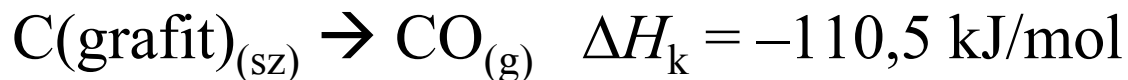
$$\Delta H_f^0 = \Sigma \Delta H_f^0(\text{termékek}) - \Sigma \Delta H_f^0(\text{reaktánsok})$$



Reakcióhő

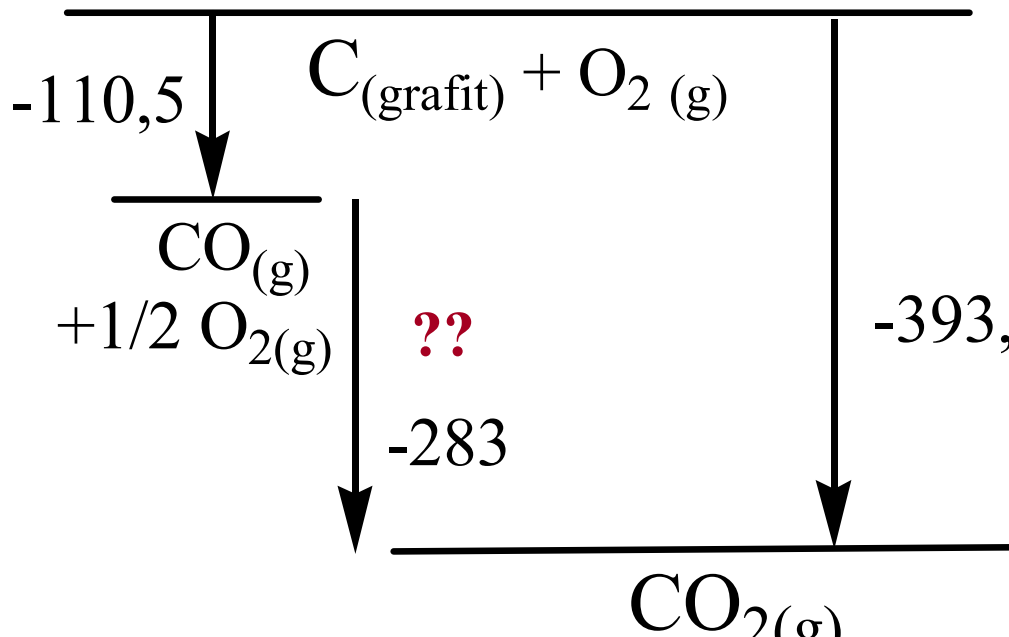


grafit



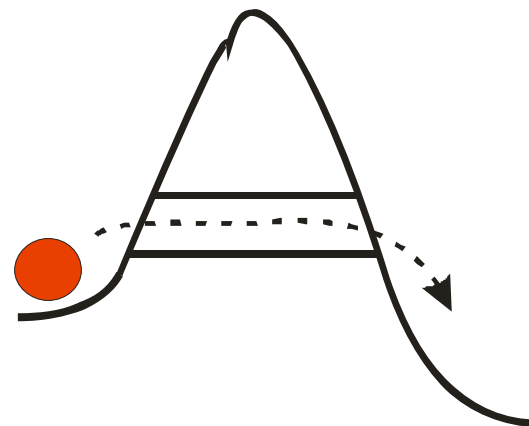
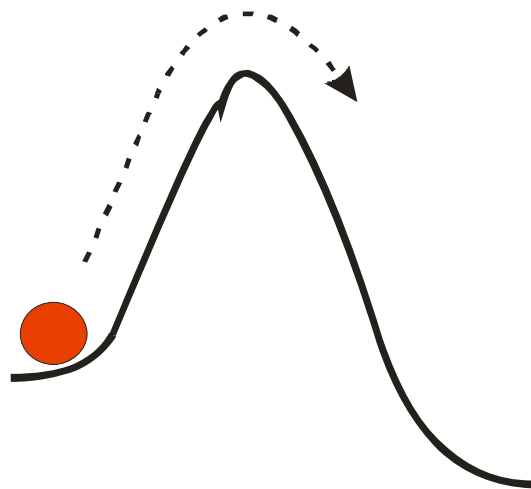
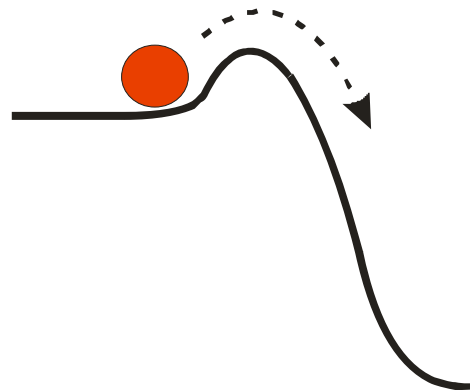
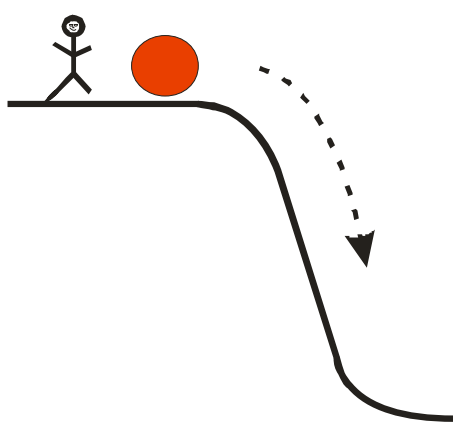
$$\Delta H_{\text{r}} = \Delta H_{\text{k}}(\text{CO}_2) - \Delta H_{\text{k}}(\text{CO})$$

$$\Delta H_{\text{r}} = -283,0 \text{ kJ/mol}$$

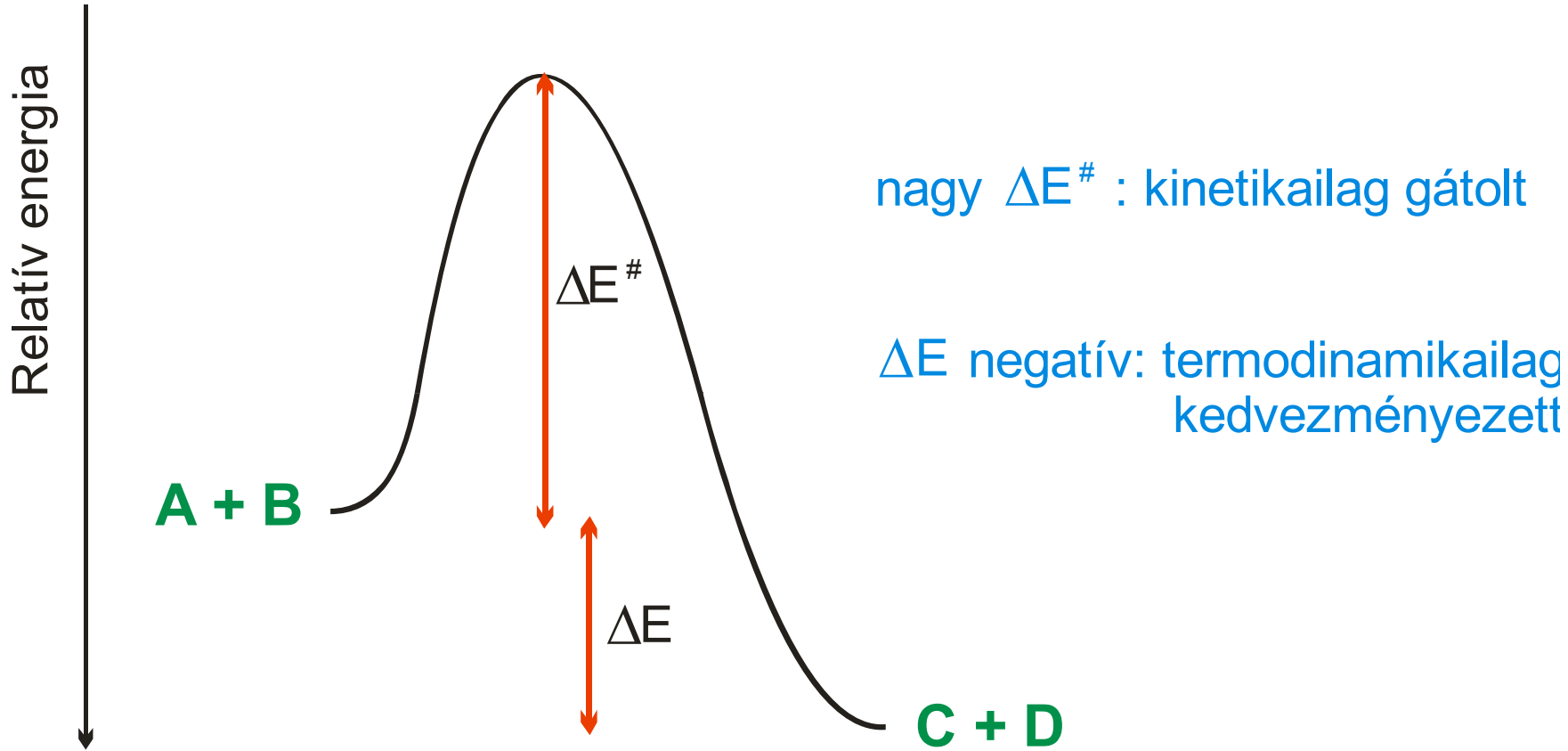


Kémiai reakciók lejátszódásának feltétele

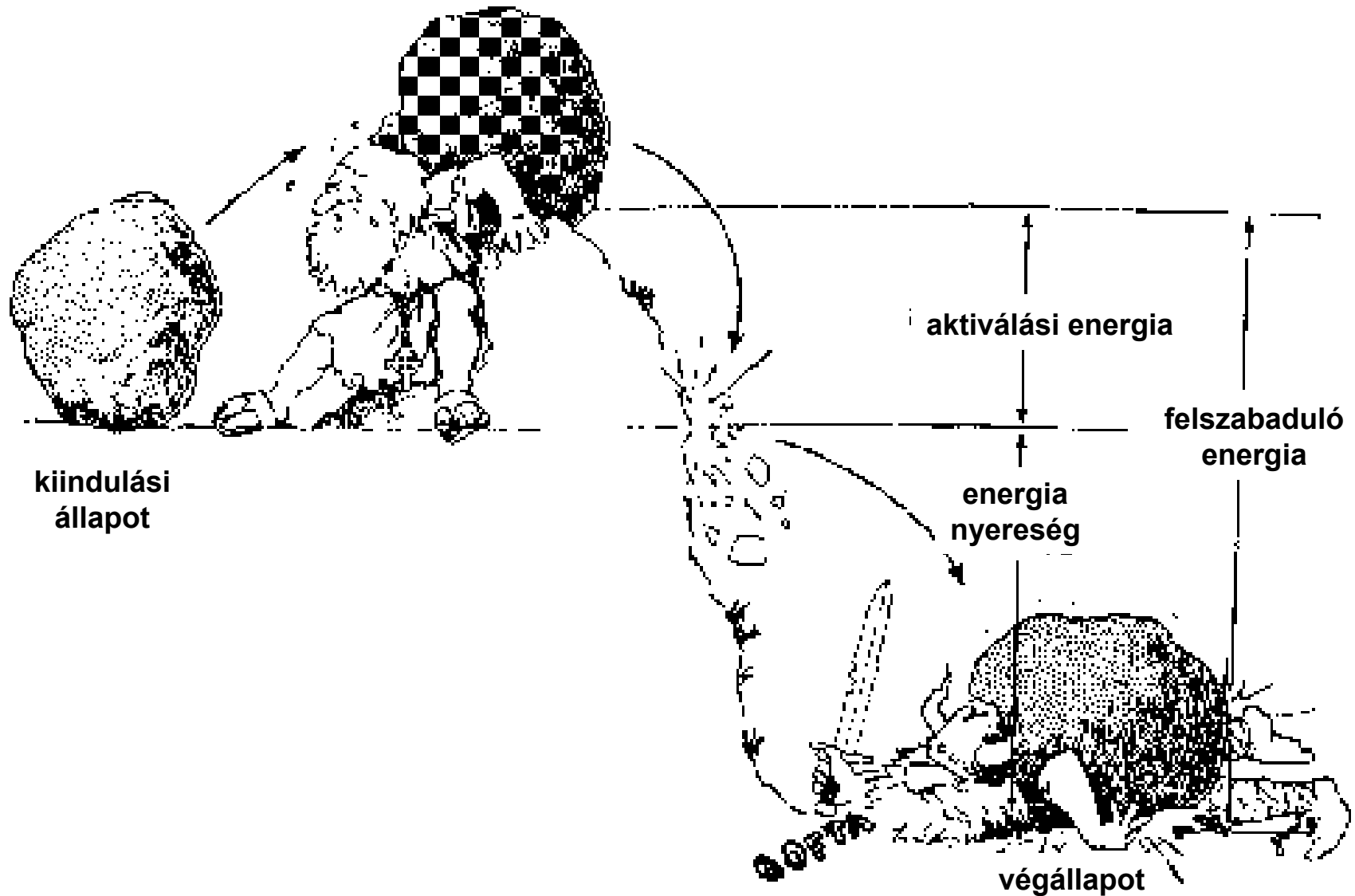
egy analógia



Kémiai reakciók lejátszódásának feltétele

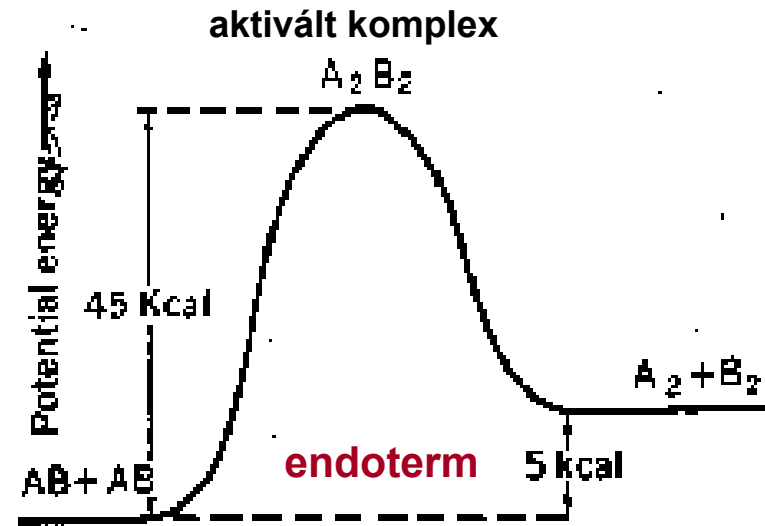
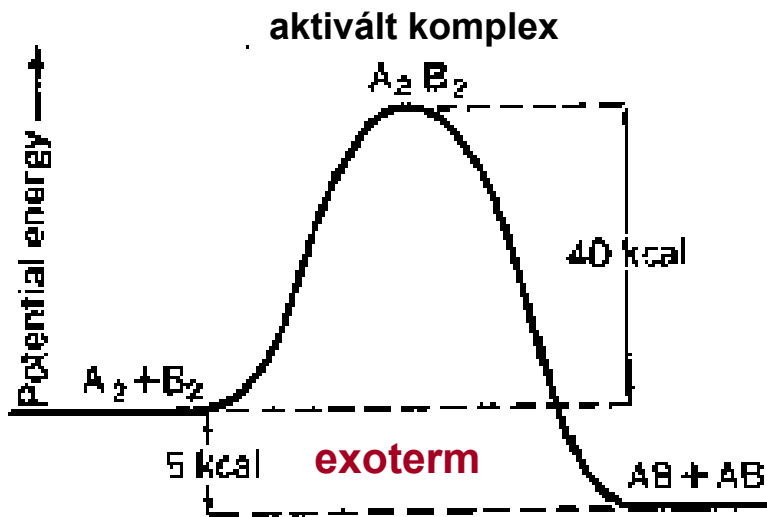
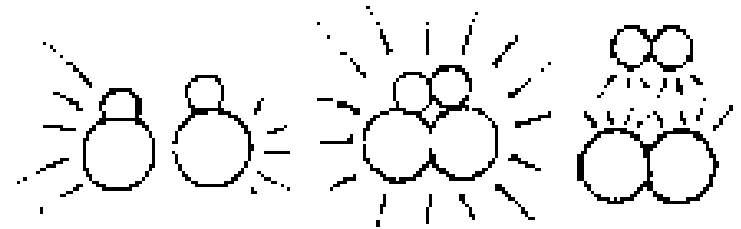
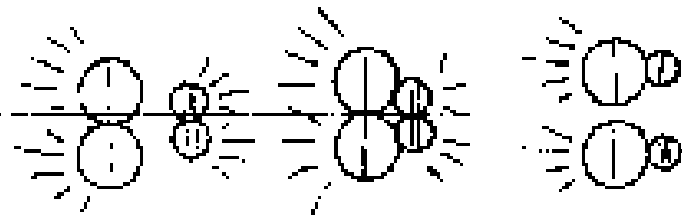


Egy analógia



Reakciókinetika

Elemi reakció: egy ütközés következtében végbemenő átalakulás
kellő sebességgel, megfelelő irányból!!



Kémiai reakciók lejátszódásának feltétele

Kinetikus energiagát (megszabja a reakció sebességét):

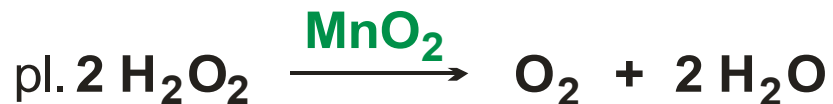
nincs ill. kicsi: gyors, spontán reakciók

pl. CrO_3 + metanol

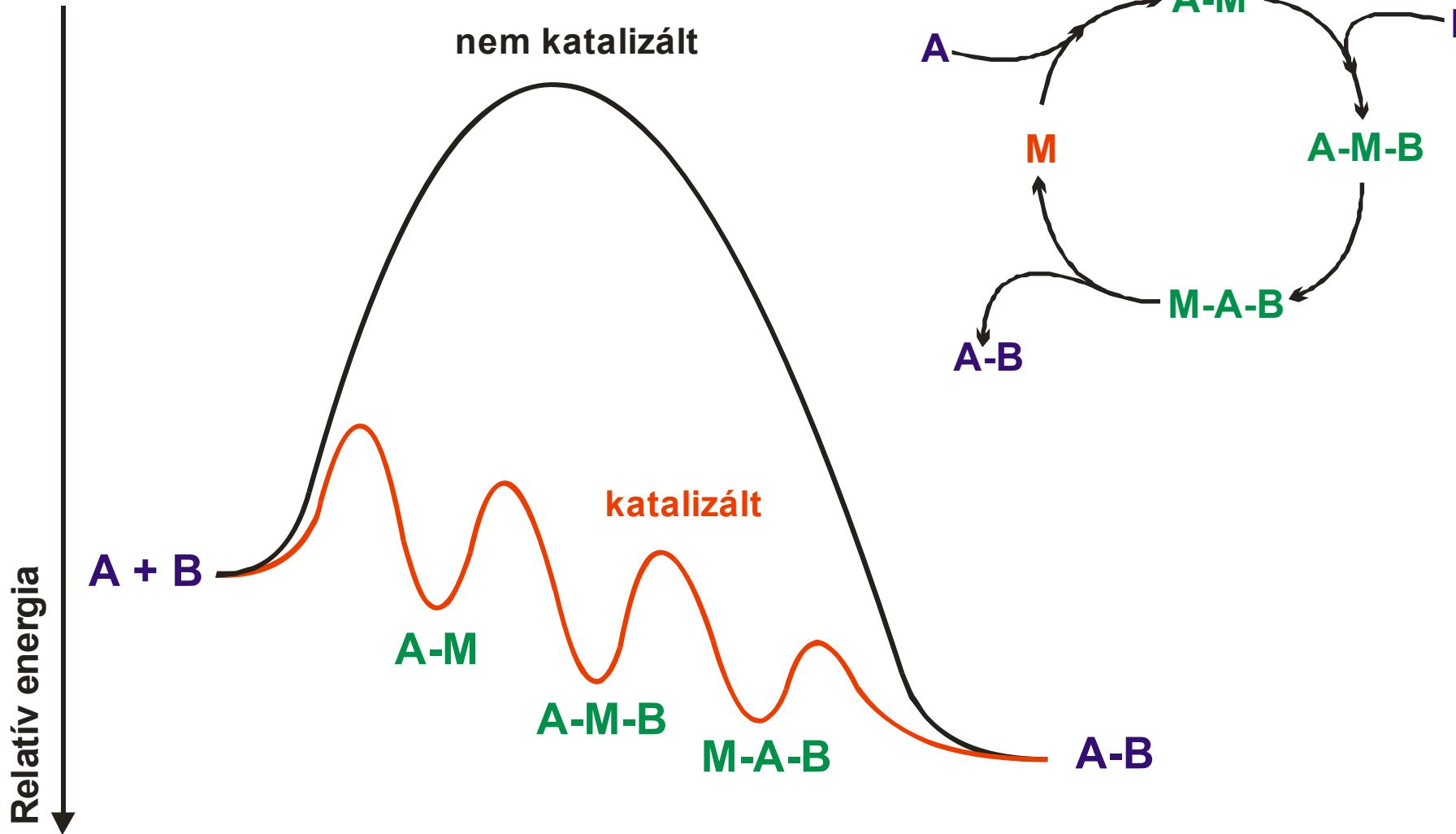
nagy: nincs reakció
lejátszódhat magasabb hőmérsékleten

pl. peroxiaceton égése

lejátszódhat katalizátor alkalmazásával



Katalizált reakciók



Katalizátor - Iniciátor

- **Katalizátor:** olyan anyag, mely a reakció sebességét gyorsítja és egy meghatározott irányba vezeti a nélkül, hogy a reakció végtermékében megjelenne. A katalizátor a reakcióban „látszólag” nem vesz részt és a reakció lejátszódása után visszkapjuk.
 - **Homogén katalízis:** a katalizátor ugyanabban a fázisban van, mint a reakciórendszer.
 - **Heterogén katalízis:** a katalizátor és a reagáló anyagok egymással érintkező különböző fázisokban vannak.
- **Iniciátor:** reakciókat, rendszerint láncreakciókat megindító anyagok. A katalizátorokkal ellentétben az iniciátorok megváltoznak a reakció során, beépülnek vagy megváltozott állapotban maradnak vissza.