

Termokémia

F35. A maleinsav ($C_4H_4O_4$) $25\text{ }^\circ\text{C}$ -ra és állandó térfogatra vonatkozó égéshője -1363 kJ mol^{-1} . Számolja ki az égéshőt állandó nyomásra.



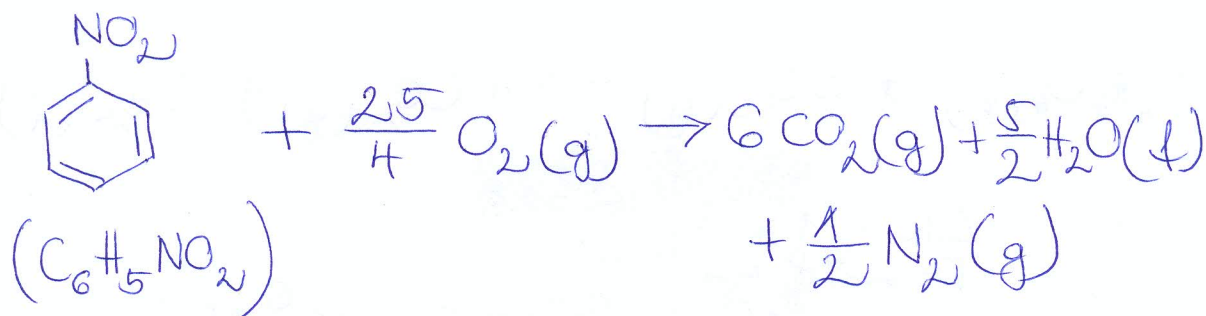
$$\Delta n = 1\text{ mol}$$

$$T = 298\text{ K}$$

$$\Delta U = -1363\text{ kJ/mol} = -1,363 \cdot 10^6\text{ J/mol}$$

$$\begin{aligned}\Delta H &= \Delta U + \Delta(pV) = \Delta U + \Delta nRT = -1,3605 \cdot 10^6\text{ J/mol} \\ &= \underline{\underline{-1360,5\text{ kJ/mol}}}\end{aligned}$$

- F36. 11,5 g nitrobenzolt kaloriméterbombában (állandó térfogaton) elégetve 25 °C-on –290 kJ égéshőt állapítottak meg. Számolja ki a nitrobenzol standard képződéshőjét, ha a szén dioxidé –393,5 kJ mol⁻¹, a vízé pedig –285,8 kJ mol⁻¹. (Ilyen körülmények között az égés során a molekulában lévő nitrogén nem oxidálódik, nitrogéngáz keletkezik.)



$$\Delta n = 6 + \frac{1}{2} - \frac{25}{4} = 0,25 \text{ mol}$$

T = 298 K

$$\Delta U(11,5 \text{ g nitrobenzol}) = -290 \text{ kJ}$$

$$M_{\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2} = 123,12 \text{ g/mol}$$

$$n = \frac{11,5 \text{ g}}{123,12 \text{ g/mol}} = 0,0934 \text{ mol}$$

$$\Delta U_{\text{moláris}} = \frac{-290 \text{ kJ}}{0,0934 \text{ mol}} = -3104,76 \text{ kJ/mol} = -3,10476 \cdot 10^6 \text{ J/mol}$$

$$\Delta H_{\text{égés}} = \Delta U + \Delta n \Delta T = -3,10414 \cdot 10^6 \text{ J/mol} = -3104,14 \text{ kJ/mol}$$

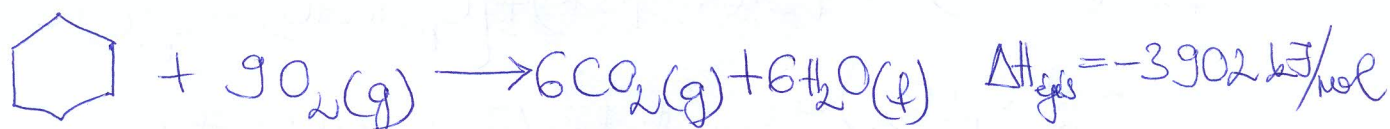
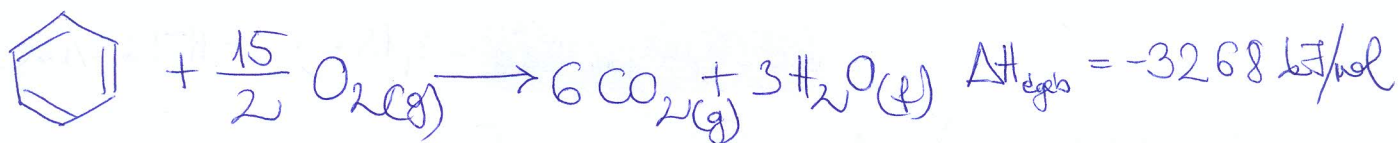
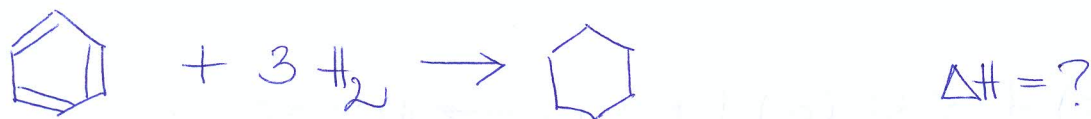
$$\Delta H_{\text{égés}} = 6 \cdot \Delta H_{\text{form}}(\text{CO}_2, \text{g}) + \frac{5}{2} \Delta H_{\text{form}}(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) - \Delta H_{\text{form}}(\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2)$$

$$\Delta H_{\text{form}}(\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2) = \underline{\underline{281,64 \text{ kJ/mol}}}$$

Rearraíró = termékek képződéshői – kiindulási anyagok képz. hői

Ez a Hess-tétel egy speciális esete (Hess-tétel: ΔH csak a kezdeti- és végállapottól függ.)

F37. Számítsa ki a benzol hidrogénezésének standard reakcióentalpiáját 25 °C-on a standard égési entalpiák ismeretében: benzol: $-3268 \text{ kJ mol}^{-1}$; ciklohexán: $-3902 \text{ kJ mol}^{-1}$; hidrogén: $-285,8 \text{ kJ mol}^{-1}$.



$$\begin{aligned} \Delta H &= \Delta H_{\text{égés}}(\text{benzol}) - \Delta H_{\text{égés}}(\text{ciklohex.}) + 3 \Delta H_{\text{égés}}(\text{H}_2) = \\ &= \underline{\underline{-223 \text{ kJ/mol}}} \end{aligned}$$

Reakcióhő = kiindulási anyagok — termékek
 égéshője égéshője

(Hess-tétel egy újabb speciális esete.)

- F38. Számolja ki a formaldehid (HCHO) 330 K-re vonatkozó képződéshőjét. A standard képződéshő értéke -119 kJ mol^{-1} . Az állandó nyomásra vonatkozó C_p mólhő értékek: formaldehid: $19,3 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$; hidrogén: $28,9 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$; szén: $4,2 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$; oxigén: $26,4 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$.



$$\Delta_{\text{form}} \text{H} (298,15 \text{ K}) = -119 \text{ kJ/mol}$$

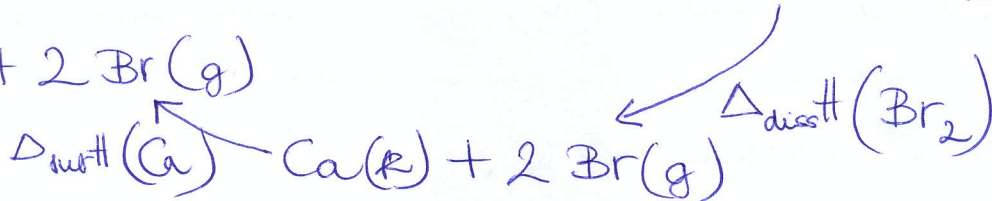
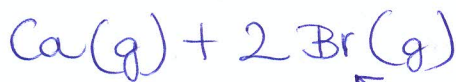
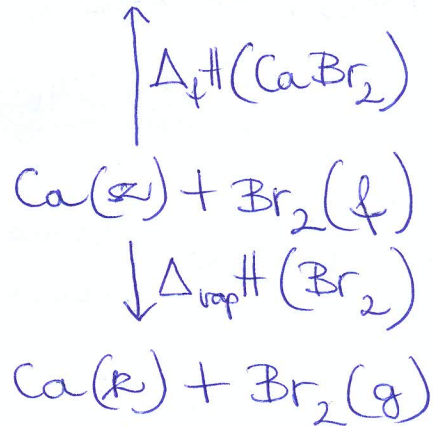
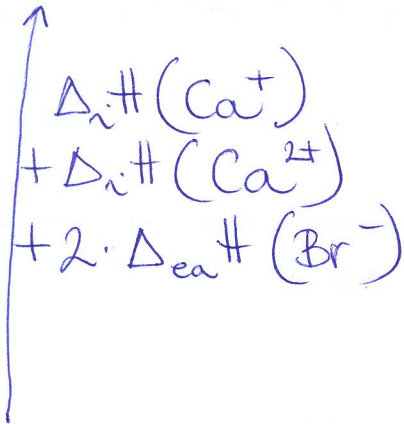
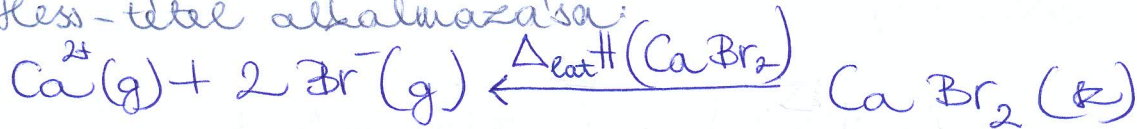
$$\Delta_{\text{form}} \text{H} (330 \text{ K}) = \Delta_{\text{form}} \text{H} (298,15 \text{ K}) + \left[C_p(\text{HCHO}) - C_p(\text{C}) - \frac{1}{2} C_p(\text{O}_2) - C_p(\text{H}_2) \right] \cdot \Delta T = -120 \text{ kJ/mol}$$

Kirchhoff-törvény

A képletbe történő behelyettesítésnél vagy a $\Delta_{\text{form}} \text{H} (298,15 \text{ K})$ értéket kell átvaltani J/mol -ba vagy a C_p értékeket $\text{kJ/(mol}\cdot\text{K)}$ -be.

F39. Számítsa ki a CaBr_2 standard rácsentalpiáját a következő termodinamikai adatokból:
 $\Delta_f H^\circ(\text{CaBr}_2) = -682,8 \text{ kJ mol}^{-1}$, $\Delta_{\text{sub}} H^\circ(\text{Ca}) = 178,2 \text{ kJ mol}^{-1}$, $\Delta_i H^\circ(\text{Ca} \rightarrow \text{Ca}^+) = 589,7 \text{ kJ mol}^{-1}$,
 $\Delta_i H^\circ(\text{Ca}^+ \rightarrow \text{Ca}^{2+}) = 1145,0 \text{ kJ mol}^{-1}$, $\Delta_{\text{diss}} H^\circ(\text{Br}_2) = 193,0 \text{ kJ mol}^{-1}$,
 $\Delta_{\text{ea}} H^\circ(\text{Br}^-) = -324,5 \text{ kJ mol}^{-1}$, $\Delta_{\text{vap}} H^\circ(\text{Br}_2) = 15,5 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Hess-tétel alkalmazása:



Born-Haber ciklus

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{cat}} H^\circ(\text{CaBr}_2) &= \Delta_i H^\circ(\text{Ca}^+) + \Delta_i H^\circ(\text{Ca}^{2+}) + 2 \Delta_{\text{ea}} H^\circ(\text{Br}^-) + \Delta_{\text{sub}} H^\circ(\text{Ca}) + \\ &+ \Delta_{\text{diss}} H^\circ(\text{Br}_2) + \Delta_{\text{vap}} H^\circ(\text{Br}_2) - \Delta_f H^\circ(\text{CaBr}_2) = \\ &= \underline{\underline{2155,2 \text{ kJ/mol}}} \end{aligned}$$

F40. Adottak $T^\circ = 298,15 \text{ K}$ hőmérsékleten és $p^\circ = 0,100 \text{ MPa}$ nyomáson a következő $\Delta_f H^\circ(T^\circ)$ standard képződési entalpiák: $\text{H}_2\text{O}(l)$: $-285,83 \text{ kJ mol}^{-1}$, $\text{CO}_2(g)$: $-393,51 \text{ kJ mol}^{-1}$. A szőlőcukor égési reakciójának $\Delta_c H^\circ(T^\circ)$ standard entalpiája $-2801 \text{ kJ mol}^{-1}$. A Hess-tétel alkalmazásával számítsa ki a szőlőcukor $\Delta_f H^\circ(T^\circ)$ standard képződési entalpiáját.

$$\Delta H_{\text{égés}} = 6 \cdot \Delta_{\text{form}} H(\text{CO}_2) + 6 \cdot \Delta_{\text{form}} H(\text{H}_2\text{O}) - \Delta_{\text{form}} H(\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6)$$

$$\Delta_{\text{form}} H(\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6) = \underline{\underline{-127504 \text{ kJ/mol}}}$$

Reakcióhő = termékek képződéshője — kiindulási anyagok képződéshője

A „standard” jelölés (\ominus) nem mond semmit a hőmérsékletről, csak a nyomatról (1 bar).

Reakt T° értéke 25°C .

F41. Egy $C = 641 \text{ J K}^{-1}$ hőkapacitású, állandó térfogatú bombakaloriméterben $0,3212 \text{ g}$ szőlőcukrot ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, $M = 180,16 \text{ g mol}^{-1}$) elégetve a hőmérséklet $7,793 \text{ K}$ -nel nőtt. Ezekből az adatokból számítsa ki a szőlőcukor égési reakciójának $\Delta_c U^\circ(T^\circ)$ standard belső energiáját és $\Delta_c H^\circ(T^\circ)$ standard entalpiáját.

ami némi pozitív, az a rendszerre vonatkozó, -

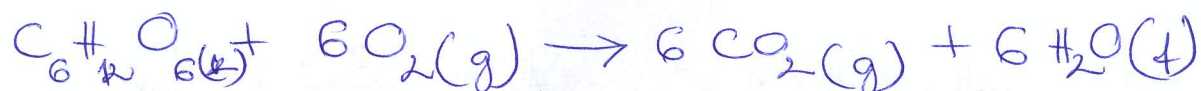
$$\Delta U = -C_v \cdot \Delta T = 641 \text{ J/K} \cdot 7,793 \text{ K} = -4995 \text{ J}$$

$$M_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6} = 180,16 \text{ g/mol}$$

$$n = \frac{m}{M} = \frac{0,3212 \text{ g}}{180,16 \text{ g/mol}} = 0,001783 \text{ mol}$$

moláris:

$$\Delta_c U^\circ = \frac{\Delta U}{n} = -2,801 \cdot 10^6 \text{ J/mol} = \underline{\underline{-2801 \text{ kJ/mol}}}$$



$$\Delta n = 0 \text{ mol}$$

$$\Delta_c H^\circ = \Delta_c U^\circ + \Delta n \cdot RT = \underline{\underline{-2801 \text{ kJ/mol}}}$$

- F42. Számolja ki a $2 \text{CO} + 4 \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ reakció 18°C -ra vonatkozó reakcióhőjét, ha ezen a hőmérsékleten a szén-monoxid égéshője -282 kJ mol^{-1} , a hidrogéné -285 kJ mol^{-1} , az etanolé pedig $-1365 \text{ kJ mol}^{-1}$.



$$\Delta H_1 = -282 \text{ kJ/mol}$$



$$\Delta H_2 = -285 \text{ kJ/mol}$$



$$\Delta H_3 = -1365 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H = -\Delta H_3 + 4\Delta H_2 + 2\Delta H_1 = \underline{\underline{-339 \text{ kJ/mol}}}$$

Reakcióhő = kiindulási anyagok — termékek
 égéshője — égéshője

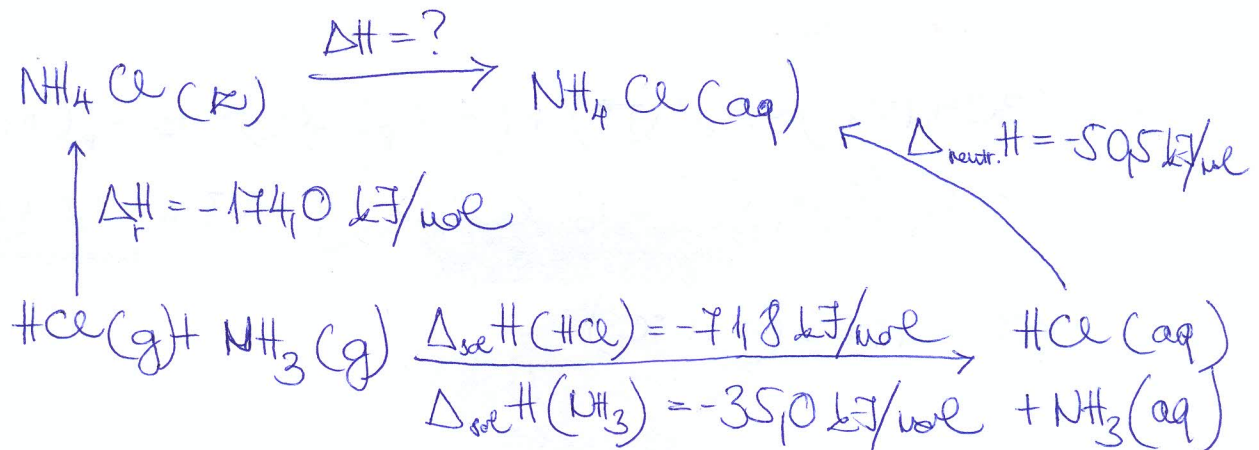
F43. Adottak az állandó nyomáson mért C_p mólhő értékek: $H_2O(l)$: $75,291 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $CO_2(g)$: $37,11 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $O_2(g)$: $29,355 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ és $C_6H_{12}O_6(s)$: $206,6 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Számítsa ki az égési entalpia $\Delta_c H^\circ(T^\circ)$ értékét a normális testhőmérsékletre ($36,0^\circ \text{C}$). *A szőlőcukor égési reakciójának $\Delta_c H^\circ(T^\circ)$ standard entalpiája $-2801 \text{ kJ mol}^{-1}$.*

$$\Delta_c H(309,15 \text{ K}) = \Delta_c H(T^\circ) + [6 \cdot c_p(CO_2) + 6 \cdot c_p(H_2O) - c_p(C_6H_{12}O_6) - 6 \cdot c_p(O_2)] \cdot \Delta T = \underline{\underline{-2798 \text{ kJ/mol}}}$$

$$\Delta T = 11 \text{ K} (= 11^\circ \text{C})$$

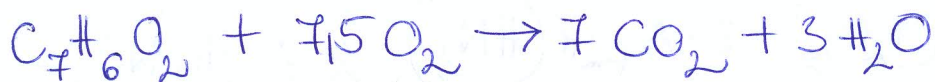
Vagy a $\Delta_c H^\circ$ értéket kell a számoláshoz átvaltani J/mol -ba, vagy a c_p értéket $\text{kJ/(mol}\cdot\text{K)}$ -be.

- F44. 25 °C-on az ammónia oldáshője vízben $-35,0 \text{ kJ mol}^{-1}$, a hidrogén-kloridé $-71,8 \text{ kJ mol}^{-1}$. A két oldat semlegesítési reakciójára $-50,5 \text{ kJ mol}^{-1}$. Számítsa ki az ammónium-klorid oldáshőjét, ha annak a reakciónak, amelyben gáznemű sósav és ammónia szilárd ammónium-kloriddá alakul, a reakciójára $-174,0 \text{ kJ mol}^{-1}$.



$$\begin{aligned}
 \Delta H &= -\Delta_r H + \Delta_{\text{sol}} H(\text{HCl}) + \Delta_{\text{sol}} H(\text{NH}_3) + \Delta_{\text{neutr.}} H = \\
 &= \underline{\underline{16,7 \text{ kJ/mol}}}
 \end{aligned}$$

F45. A benzoészav ($C_7H_6O_2$) $25^\circ C$ -ra és állandó térfogatra vonatkozó égéshője $-3230 \text{ kJ mol}^{-1}$. Számítsa ki a benzoészav standard képződési entalpiáját, ha a vízé $-285,83 \text{ kJ mol}^{-1}$, a széndioxidé pedig $-393,51 \text{ kJ mol}^{-1}$.



$$\Delta U = -3230 \text{ kJ/mol} = -3,23 \cdot 10^6 \text{ J/mol}$$

$$\Delta n = -0,5 \text{ mol}$$

$$\Delta H = \Delta U + \Delta n RT = -3231,239 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H = -\Delta_{\text{form}} H(C_7H_6O_2) + 7 \cdot \Delta_{\text{form}} H(CO_2) + 3 \cdot \Delta_{\text{form}} H(H_2O)$$

$$\Delta_{\text{form}} H(C_7H_6O_2) = \underline{\underline{-380,82 \text{ kJ/mol}}}$$

Reakcióhő = $\frac{\text{termékek képződéshője}}{\text{kezdőanyagok képződéshője}}$ — $\frac{\text{kezdőanyagok képződéshője}}{\text{termékek képződéshője}}$

- F46. Számolja ki a $2 \text{HN}_3(l) + 2 \text{NO}(g) \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2(l) + 4 \text{N}_2(g)$ reakció standard reakcióhőjét, ha a komponensek standard képződési entalpiája: $\text{HN}_3(l)$: 264 kJ mol^{-1} , $\text{NO}(g)$: $90,25 \text{ kJ mol}^{-1}$, $\text{H}_2\text{O}_2(l)$: $-187,8 \text{ kJ mol}^{-1}$.

$$\Delta H = \Delta_{\text{form}} H(\text{H}_2\text{O}_2) - 2 \cdot \Delta_{\text{form}} H(\text{HN}_3) - 2 \cdot \Delta_{\text{form}} H(\text{NO}) =$$

hidrogén-oxid

$$= \underline{\underline{-896,3 \text{ kJ/mol}}}$$

Reakcióhő = termékek képződéshője - kiindulási anyagok képződéshője

F47. Adottak az állandó nyomáson mért C_p mólhő értékek: $\text{HN}_3(l)$: $43,68 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\text{H}_2\text{O}_2(l)$: $89,1 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\text{NO}(g)$: $29,884 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\text{N}_2(g)$: $29,125 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Feltételezve, hogy a mólhő értékek az adott hőmérsékleti tartományban állandók, számítsa ki a $2 \text{ HN}_3(l) + 2 \text{ NO}(g) \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2(l) + 4 \text{ N}_2(g)$ reakció reakcióhőjét 50°C -ra. **A**

reakció standard reakcióhője 25°C -on $-896,5 \text{ kJ/mol}$.

$$\Delta_r H(50^\circ\text{C}) = \Delta_r H(25^\circ\text{C}) + \left[c_p(\text{H}_2\text{O}_2) + 4 \cdot c_p(\text{N}_2) - 2 \cdot c_p(\text{HN}_3) - 2 \cdot c_p(\text{NO}) \right] \Delta T = \underline{\underline{-894,84 \text{ kJ/mol}}}$$

$$\Delta T = 25 \text{ K}$$

A kalkulációhoz vagy a $\Delta_r H(25^\circ\text{C})$ értéket váltjuk át J/mol -ba, vagy a c_p értéket $\text{kJ/(mol}\cdot\text{K)}$ -be.

- F48. Számítsa ki a propén (CH_2CHCH_3) hidrogénezésének standard reakcióentalpiáját 25°C -on a következő standard égési entalpiák ismeretében: propén: $-2058 \text{ kJ mol}^{-1}$; propán: $-2220 \text{ kJ mol}^{-1}$; hidrogén: $-285,8 \text{ kJ mol}^{-1}$.



$$\begin{aligned}\Delta_r H &= \Delta_{\text{comb}} H(\text{C}_3\text{H}_6) + \Delta_{\text{comb}} H(\text{H}_2) - \Delta_{\text{comb}} H(\text{C}_3\text{H}_8) = \\ &= \underline{\underline{-123,8 \text{ kJ/mol}}}\end{aligned}$$

Reakcióhő = $\begin{matrix} \text{kezdőanyagok} \\ \text{égetései} \end{matrix}$ - $\begin{matrix} \text{termékek} \\ \text{égetései} \end{matrix}$

Önellenőrző (igaz/hamis) tesztkérdések

- T30. Kaloriméterben csak exoterm reakciók tanulmányozhatók. *h*
- T31. A rendszert és környezetét együttesen globálisan izolált rendszernek tekintjük. *i*
- T32. A belső energia termodinamikai értelemben útfüggvény. *állapotfüggvény h*
- T33. A belső energia infinitézimális megváltozását leíró egyenlet: $dU = \pi_T dV + C_V dT$. *i*
- T34. A $dU = \pi_T dV + C_V dT$ egyenletben szereplő $\pi_T = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$ az ún. belső nyomás. *h*
- T35. Ha $V =$ állandó és nincs egyéb munka, akkor $\Delta U = C_V \Delta T$. *h* $\Delta H = C_p \cdot \Delta T$
- T36. Az entalpia infinitézimális megváltozását leíró egyenlet: $dH = -\mu C_p dp + C_p dT$. *h*
- T37. Az entalpia megváltozása körfolyamatban $\oint dH = 0$. *i*
- T38. A $dH = -\mu C_p dp + C_p dT$ egyenletben szereplő $\mu = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_H$ az ún. Joule-Thomson együttható. *h*
- T39. Ha $\mu > 0$, a gáz fojtásos adiabatikus kiterjesztés hatására lehül. *i*
- T40. Egyatomos tökéletes gázra $\kappa = \frac{C_p}{C_v} = 1,4$. *h*

$$\text{Egyatomos} \quad \kappa = \frac{5/2 R}{3/2 R} = 1,6$$

$$\text{Kétatomos} \quad \kappa = \frac{7/2 R}{5/2 R} = 1,4$$