

Chemická termodynamika, 1 Systém, okolí, vnitřní energie, první věta termodynamiky, tepelná kapacita isochorická, bombový kalorimetr, enthalpie.

Chemická termodynamika, 2 Enthalpie jako isobarické teplo, vztah mezi tepelnou kapacitou za konstantního tlaku a objemu pro ideální plyn. Definice standardních stavů. Termochemi: endoterní a exoterní reakce, Hessův zákon, (standardní) slučovací a spalné enthalpie, teplotní závislost enthalpie pro reakce (Kirchhoffův zákon)

Je poučné vidět, že s čím se člověk setkává to se naučí: fyzikům nedělá problém matematika, ale bojí se chemických rovnic a práce s nimi. Dělali jsem příklady z fyzikálky: 2/1,2,3,4,5; 3/2,4

Chemická termodynamika, 3 Spontálnost děje. Entropie - její termodynamická a statistická definice. Fundamentální rovnice chemické termodynamiky pro U . Entropie míchání, fázových přechodů, při ohřívání látky a entropie chemických reakcí. Entropie izolovaného systému při spontánním ději neklesá!

Chemická termodynamika, 4 Gibbsova volná energie. Fundamentální rovnice chemické termodynamiky pro G . Chemický potenciál - čisté látky v plynné a kapalně fázi.

Chemická termodynamika, 5

Směšovací Gibbsova energie. Chemický potenciál látky ve směsi.

Chemická termodynamika, 6

Chemická rovnováha, La Chatelierův princip, příklady reálných chování. Výpočet rovnovážného složení pomocí rozsahu reakce.

1. Nakreslete Lewisovu strukturu a elektronový geometrický vzorec vody, amoniaku, SF₄, XeF₄.
2. Slovně definujte první, druhý a třetí zákon termodynamiky.
3. Definujte isochorickou tepelnou kapacitu.
4. Z prvního zákona termodynamiky a definice enthalpie odvoďte čemu je rovna změna enthalpie za konstantního tlaku.
5. Pro ideální plyn, jaký je vztah mezi tepelnou kapacitou za konstantního tlaku a za konstantního objemu?
6. Jedn mol sodíku bylo za laboratorní teploty 25 °C a tlaku $p = 101325$ Pa hozeno do vody a došlo k následné reakci: $\text{Na(s)} + 2\text{H}_2\text{O(l)} \rightarrow 2\text{NaOH(aq)} + \text{H}_2\text{(g)}$
 $\Delta H = -367.5$ kJ. Jak se změnila vnitřní energie systému?
7. Při tlaku 1 bar se přeměnil 1 mol kalcitu ($\rho = 2.71$ g.cm⁻³) na aragonit ($\rho = 2.93$ g.cm⁻³)(jedná se o dvě různé krystalové modifikace CaCO₃). Změna vnitřní energie systému doprovázející tento děj je $\Delta U = 210$ J/mol. Jak se změnila vnitřní energie systému?
8. V bombovém kalorimetru bylo při 25 °C spáleno 2.13 mg fenolu ($M = 94.12$ g/mol). Teplota v kalorimetru vzrostla o 1.01 °C. Vypočítejte konstantu kalorimetru včetně, že $\Delta_c H^\circ(\text{fenol,s}) = -3054$ kJ/mol.
9. Jaká je celková změna entropie pro reversibilní děj?
10. 0.5 molu ideálního plynu při 20 °C expandovalo isotermicky proti konstantnímu tlaku 2 atm z 1 litru na 5 litrů. Zpočítejte ΔS_{system} , ΔS_{sur} , $\Delta S_{\text{univers}}$.
11. Kdy je děj spontánní?
12. Jaká je definice Gibbsovy funkce. Proč je jí říká volná energie?
13. Odvoďte fundamentální rovnici termodynamiky pro Gibbsovu energii.
14. Z níže uvedených vztahů vyberte [5 bodů]:
 - (a) Vztah pro expanzní práci.
 - (b) Definici entalpie.
 - (c) Definici entropie.
 - (d) Definici Gibbsovy energie.
 - (e) První zákon termodynamiky.

$$\boxed{dU = dQ + dW}, \boxed{dW_{\text{vratná}} = -pdV}, \boxed{dS = d_{\text{vratná}}Q/T}, \boxed{G = H - TS}, \boxed{H = U + pV}$$

15. Na základě výše uvedených rovnic odvoďte, jestli je následující vztah pravdivý? [3 body]

$$dG = Vdp - SdT$$

16. Čemu je rovno $(\frac{\partial G}{\partial p})_T$, $(\frac{\partial G}{\partial T})_p$? [2 body]
17. Nakreslete závislost Gibbovy energie na rozsahu reakce s číselným vyznačením standardní reakční Gibbsovy energie při 25 °C a správně umístěnými minimem křivky, jestliže rovnovážná konstanta K má hodnotu 0.2 a jedná se o unimolekulární izomerizaci.
18. Reaktanty i produkty v reakci $2A + B \rightarrow 3C + 2D$ jsou plyny. Jestliže při teplotě 25 °C a celkovém tlaku 100 kPa smícháme 1 mol A, 2 mol B a 1 mol D, bude rovnovážná směs obsahovat 0.90 mol C. Vypočítejte
- molární zlomky všech látek v rovnováze.
 - rovnovážnou konstantu.
 - Standardní reakční Gibbsovu energii.
19. Teplotní rozklad vápence probíhá podle následující rovnice:
 $\text{CaCO}_3(\text{s}) \rightarrow \text{CaO}(\text{s}) + \text{CO}_2(\text{g})$.
 Jednotlivé standardní slučovací enthalpie jsou $\Delta_f H^\circ(\text{CaCO}_3) = -1207 \text{ kJ/mol}$, $\Delta_f H^\circ(\text{CaO}) = -635.3 \text{ kJ/mol}$, $\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2) = -313.5 \text{ kJ/mol}$. Jaká je standardní entropie reakce rozkladu vápence?
 Při 25 °C je standardní reakční entropie reakce $\Delta_r S^\circ = 160.6 \text{ J/mol}$. Vypočítejte standardní Gibbsovu reakční energii při 25 °C a rozhodněte o samovolnosti reakce. Při jakých teplotách bude reakce probíhat samovolně?