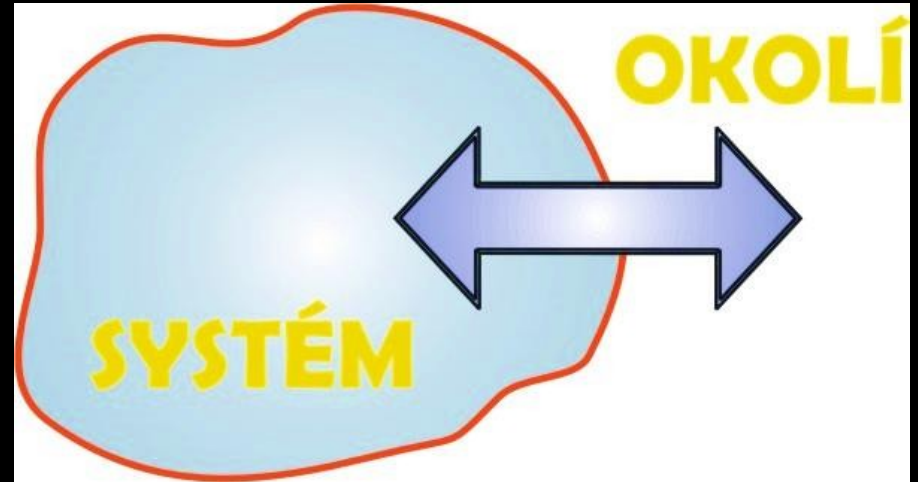


# Přednáška 2

## První zákon termodynamiky

Literatura: Atkins + de Paula, 8. vydání,  
Fyzikální chemie / Physical Chemistry  
Části 2.1-2.2.1.1 / Parts 2.1-2.2.1.1.

# 2.1 Základní pojmy



klasifikace systémů

	přestup	
SYSTEM	energie	látka
izolovaný	NE	NE
<b>uzavřený</b>	ANO	NE
otevřený	ANO	ANO



## 2.1.1.1 Definice pojmů teplo a práce



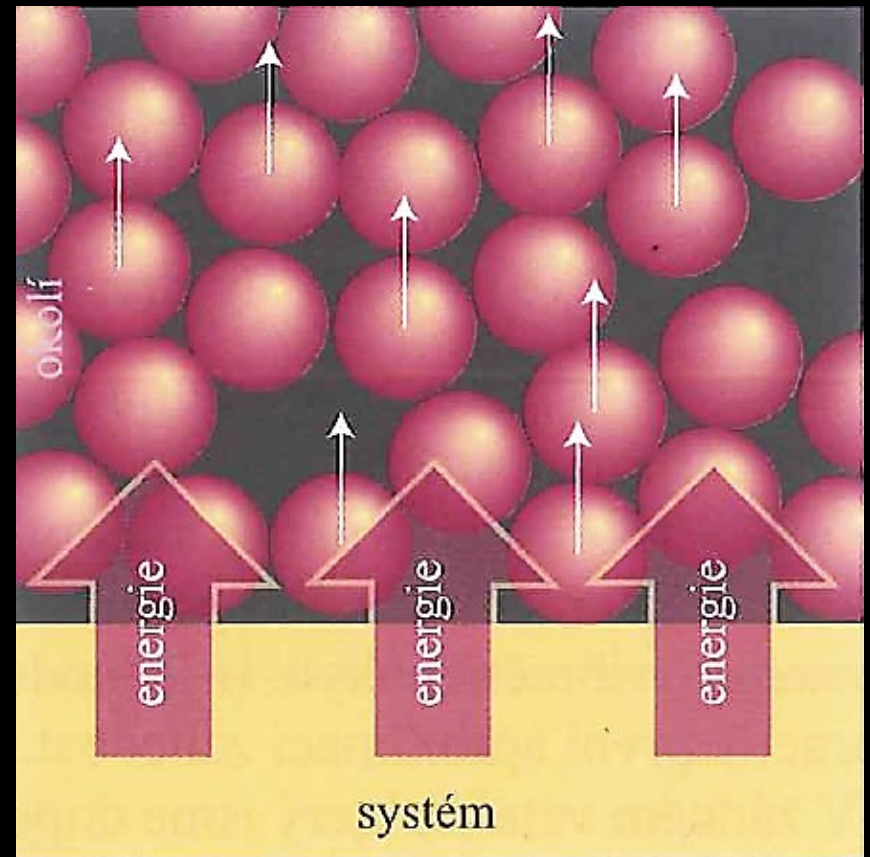
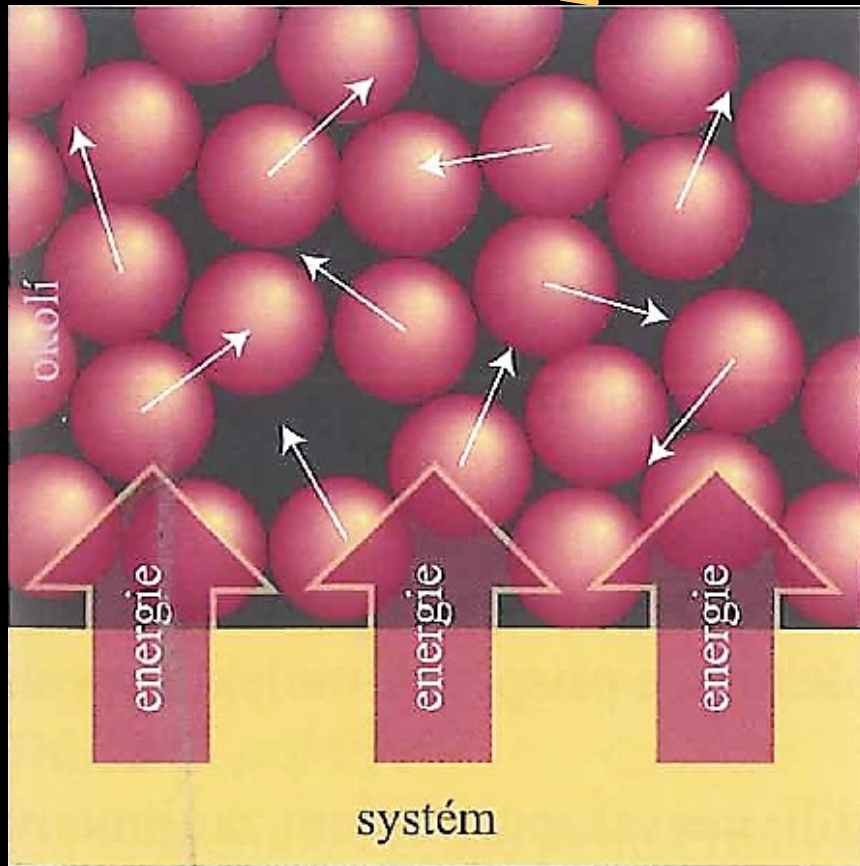
Sadi Carnot (1796-1832)



James Joule (1818-1889)

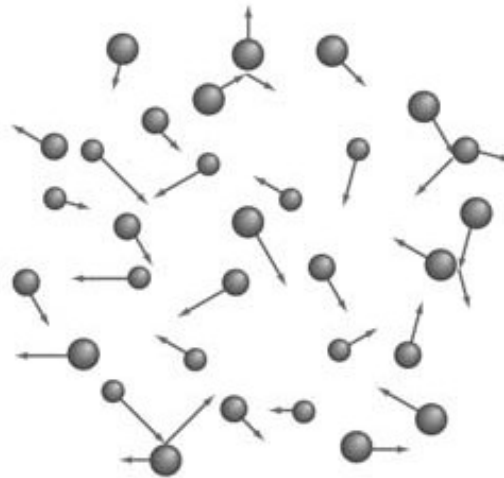
## 2.1.1.2 Molekulová interpretace

$q$  a  $w$



- V čem spočívá rozdíl mezi  $q$  a  $w$ ?
- Kde dochází k rozlišení mezi  $q$  a  $w$ ?

## 2.1.2 Vnitřní energie, U



$$U = \frac{3}{2}NkT$$

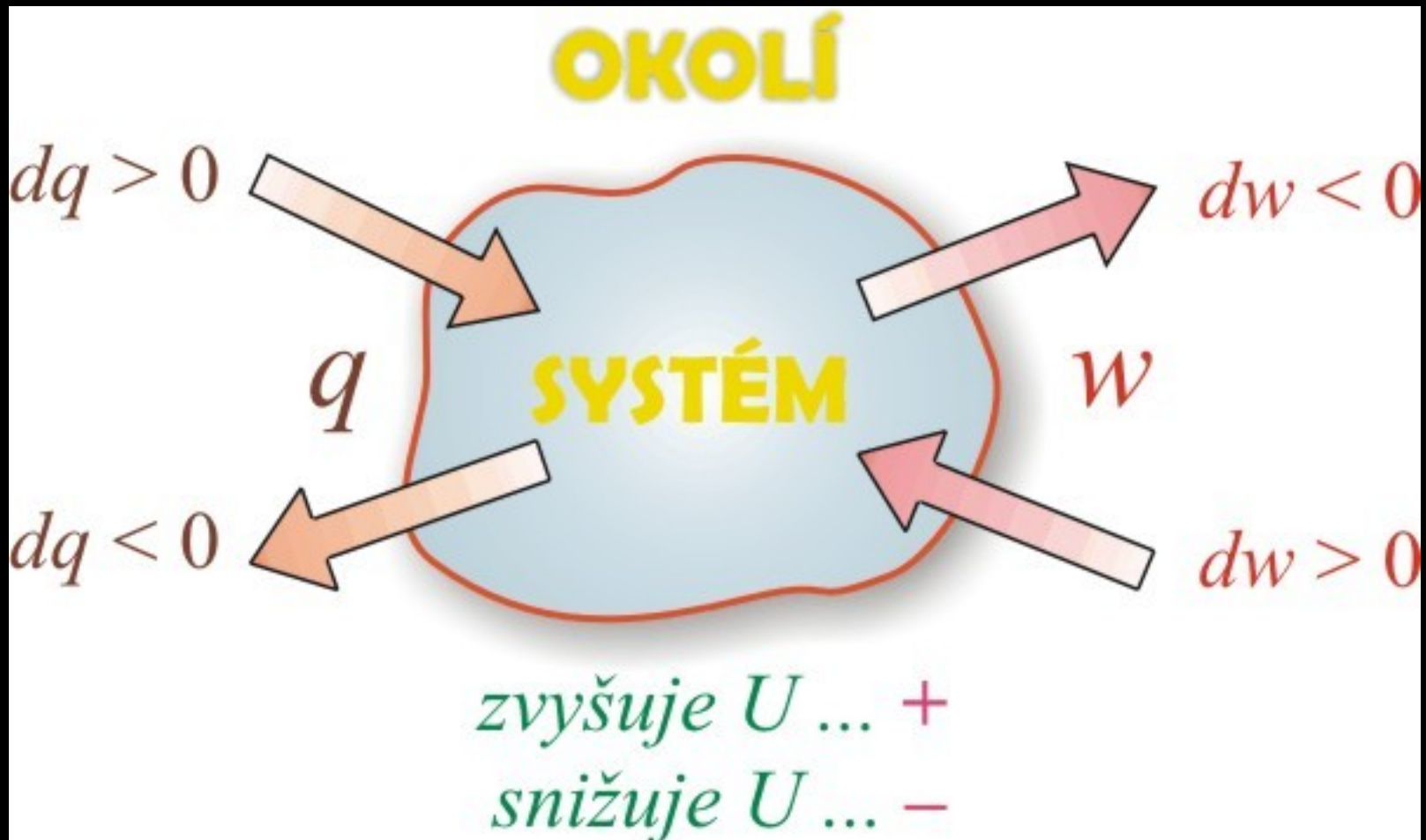
$$U = \frac{3}{2}nRT$$

Jednotky U:     1 J = 1 N m     (1 cal = 4.184 J)

Vnitřní energie U je tzv. extenzivní veličina.

## 2.1.2.2 První termodynamický zákon

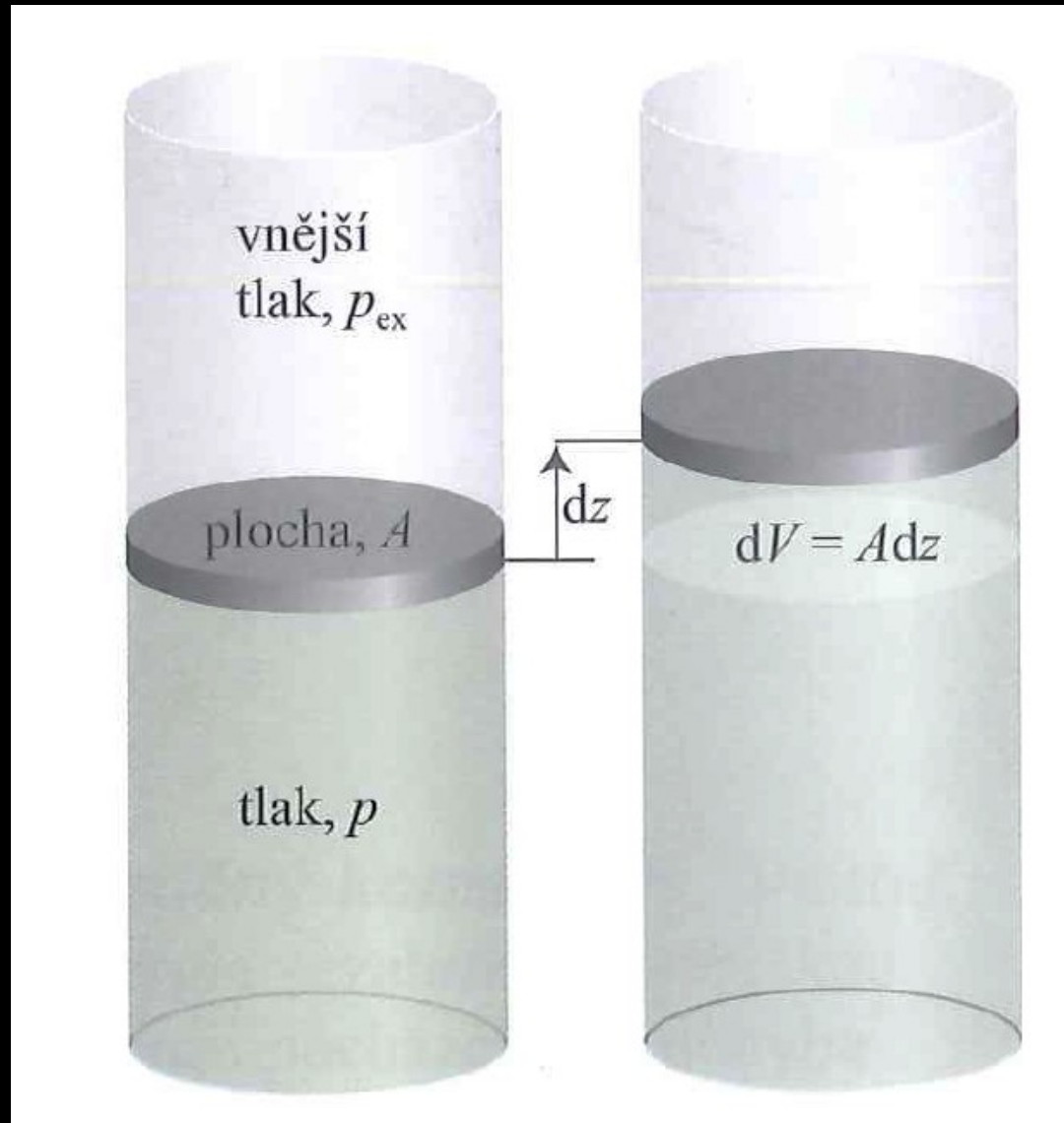
Znaménková konvence (chemická) pro „účetnictví“ tepla a práce:



## 2.1.3 Objemová práce

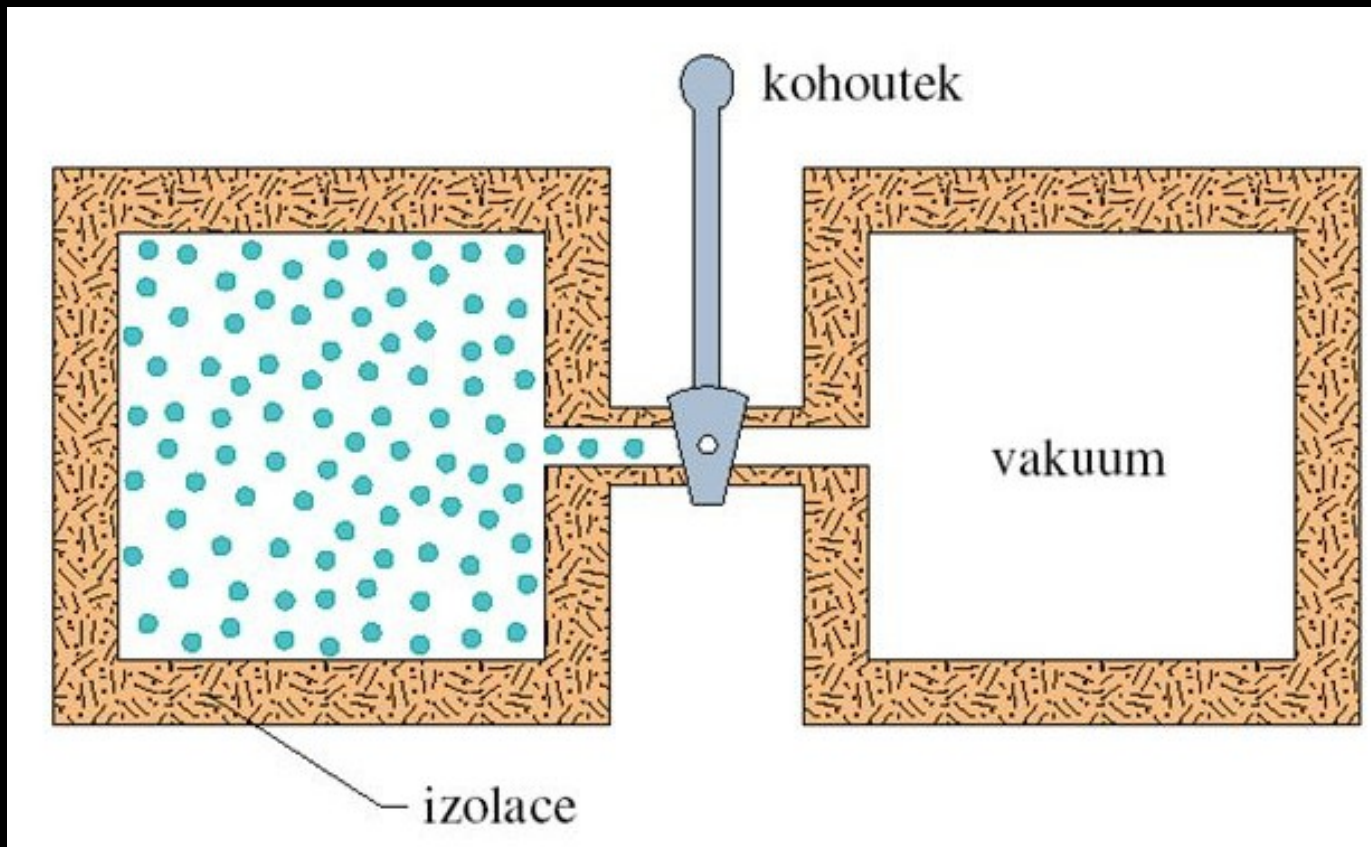
- Pro účely výpočtu v TD používáme nekonečně malé (tzv. **infinitesimální**) změny veličin a jejich funkcí.
- Objemová práce =  $w$  spojená se změnou objemu (např. rozklad  $\text{CaCO}_3$ ).

## 2.1.3.1 Obecný vztah pro práci

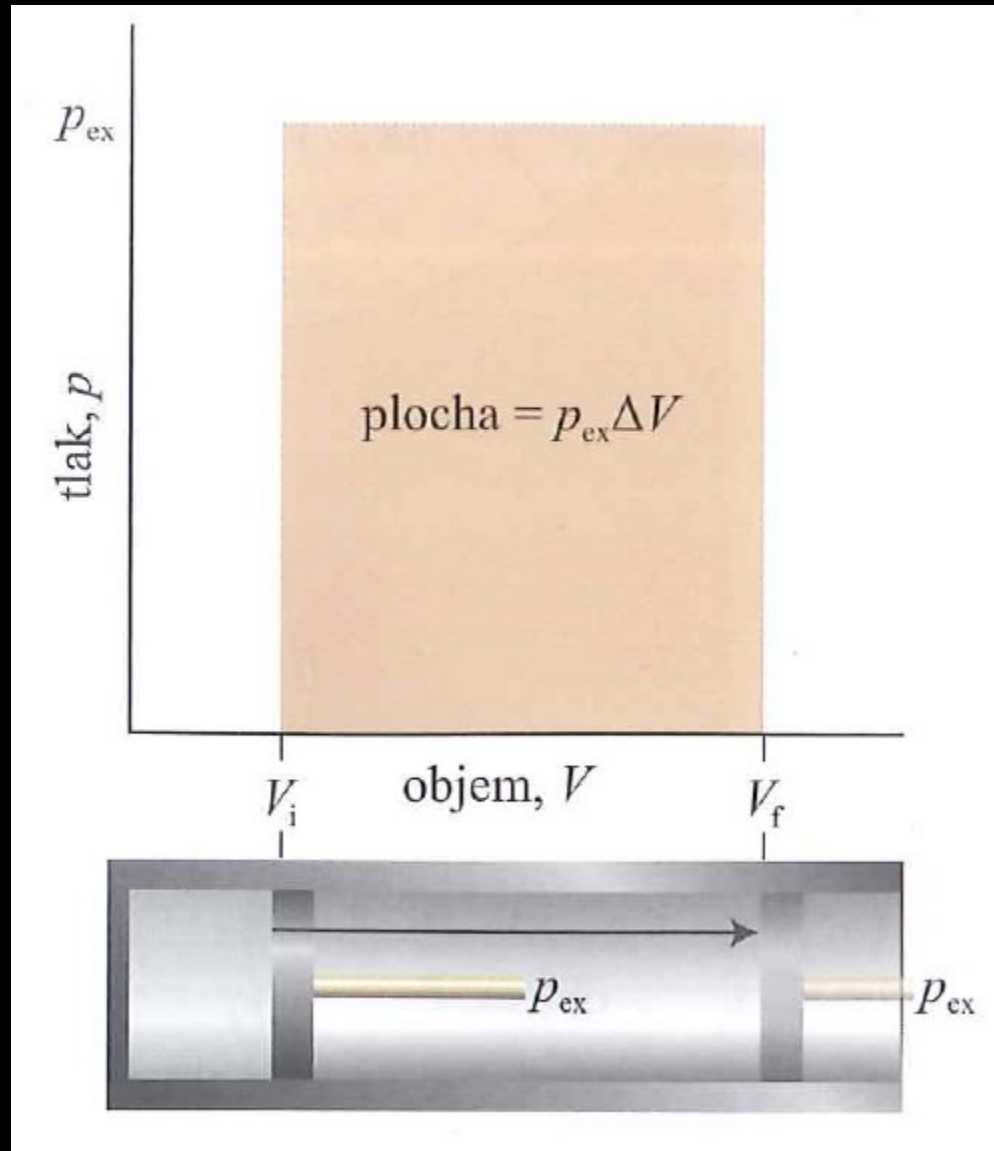




## 2.1.3.2 Volná expanze



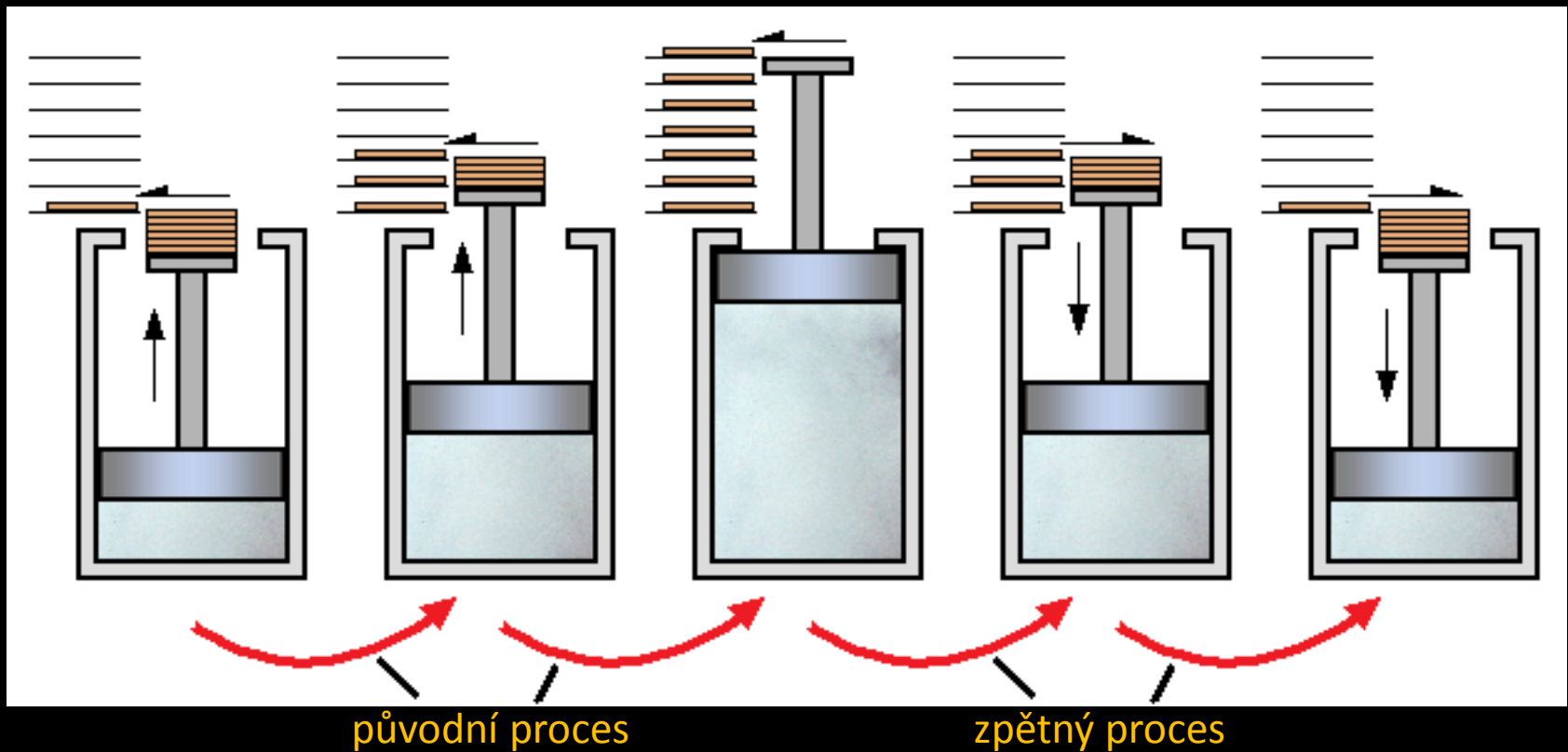
## 2.1.3.3 Expanze proti konstantnímu $p_{\text{ex}}$



## 2.1.3.4.a Vratná expanze

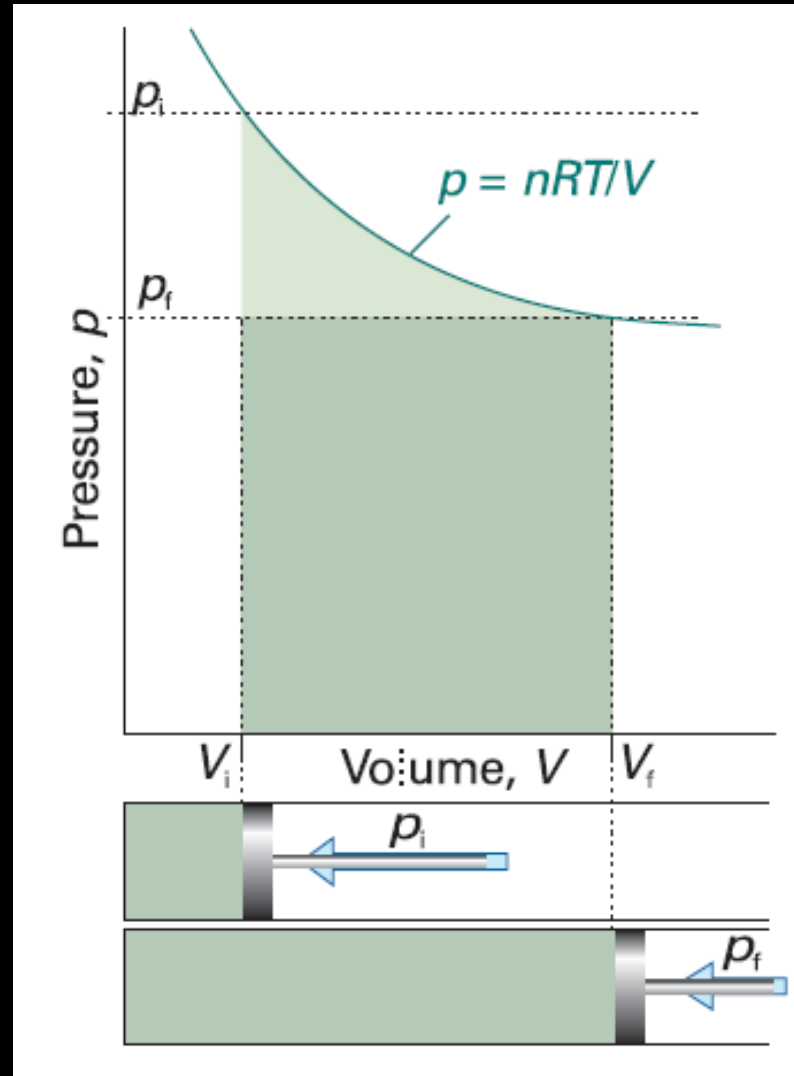
Vratný děj = děj, který může být obrácen

*infinitesimální* modifikací některé veličiny.



$\Delta p$  = konečně velká změna ,  $dp$  ... nekonečně malá změna.

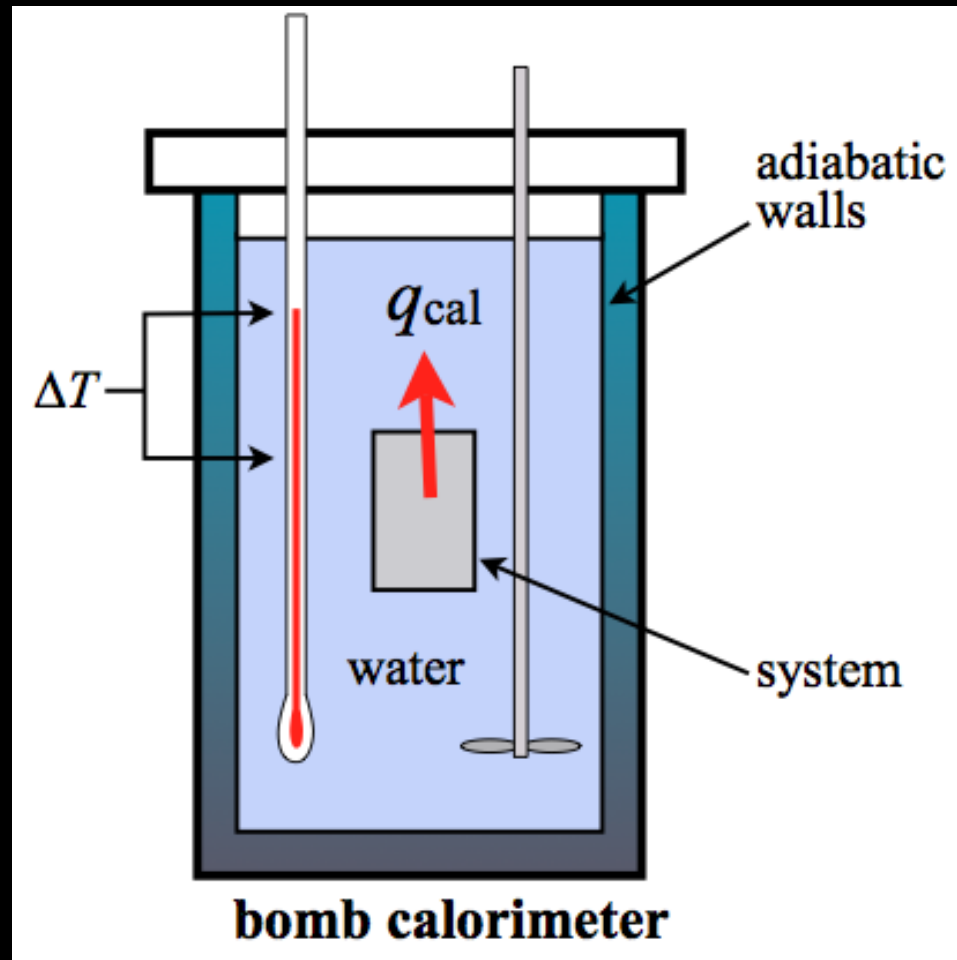
## 2.1.3.4.b Vratná objemová práce



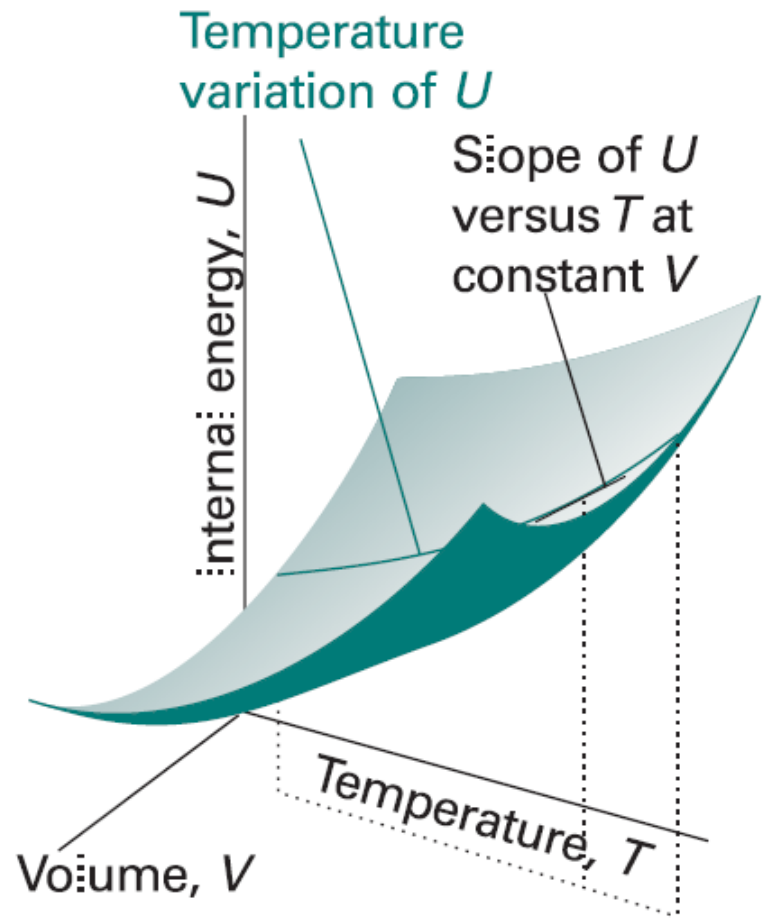
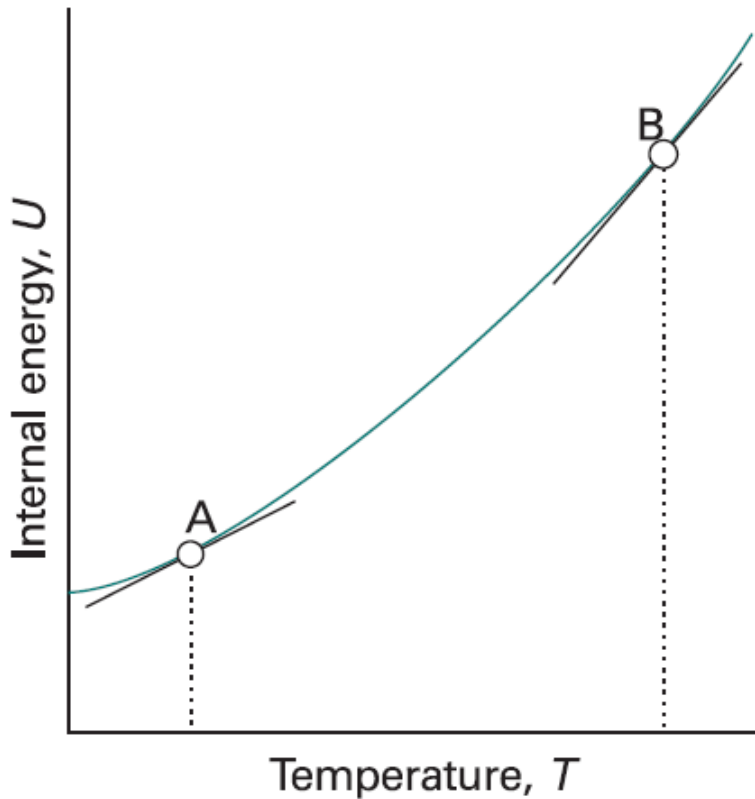
## 2.1.3.5. Izotermická vratná expanze

## 2.1.4. Tepelné efekty

## 2.1.4.1 Kalorimetrie

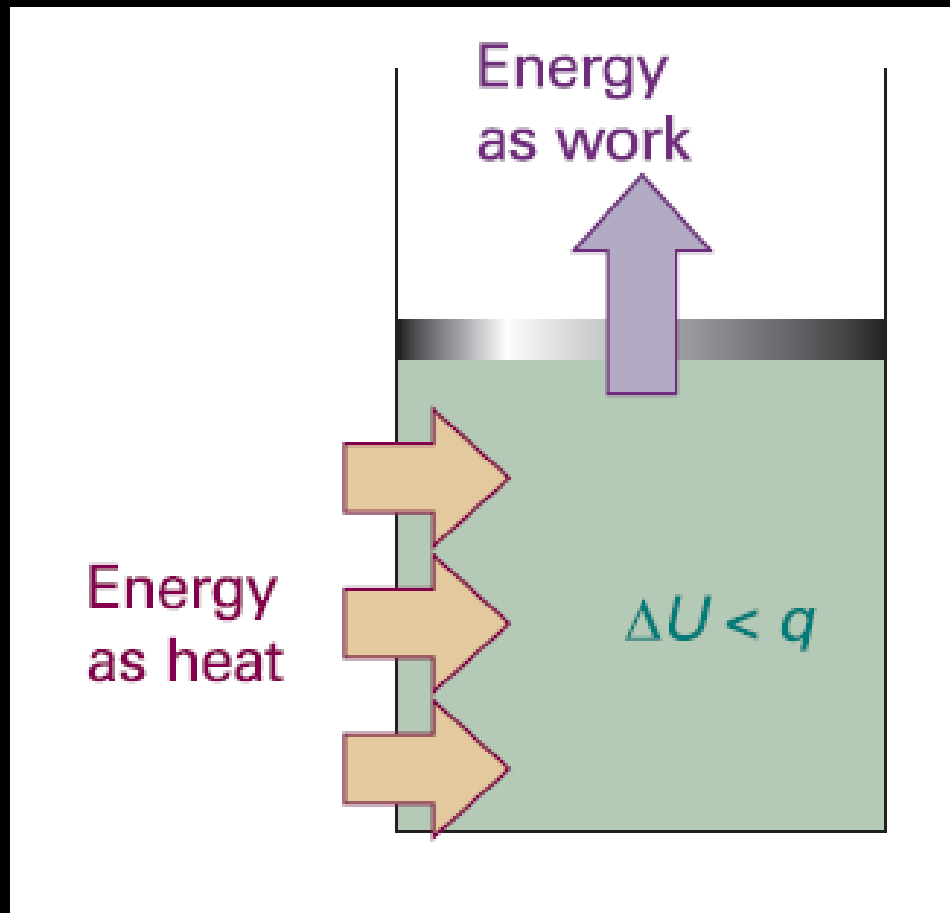


## 2.1.4.2 Tepelná kapacita





## 2.1.5 Entalpie



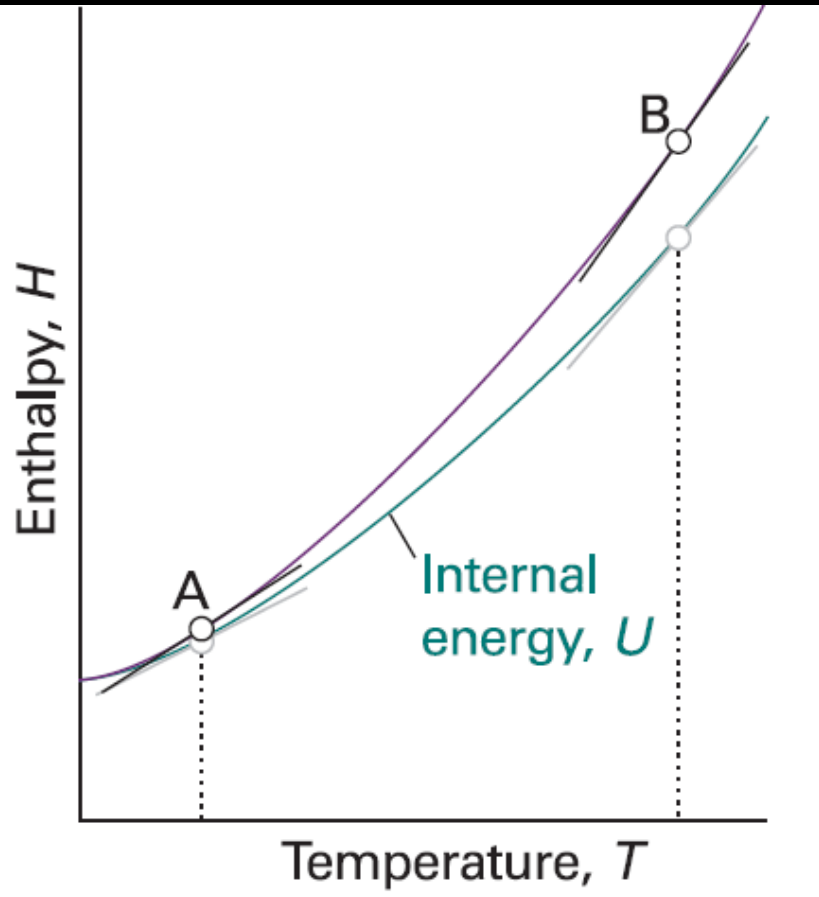
## 2.1.5.1 Definice entalpie, $H$

## 2.1.5.2 Vztah $\Delta H$ a $\Delta U$

### Příklad 1.

Rozdíl mezi  $\Delta H$  a  $\Delta U$

pro přechod  $\text{CaCO}_3$  (s): kalcit  $\rightarrow$  aragonit ?



## 2.1.5.3 Změna $H$ s $T$

rozdíl tepelných kapacit:

	$C_{m,V} / \text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$	$C_{m,p} / \text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$	$C_{m,p} - C_{m,V}$
He	12.48	20.79	8.31
$\text{N}_2$	20.74	29.12	8.38
$\text{CO}_2$	28.46	37.10	8.64

## 2.1.6 *Adiabatické děje*

## 2.2 Termochemie

## 2.2.1 Definice standardního stavu

čistá („chemicky“) látka v čisté („fyzikálně“) formě (ne směs)  
při tlaku 1 bar a specifikované teplotě

1 bar =  $10^5$  Pa („normální“ tlak: 101325 Pa)  
nejčastěji  $T = 298.15$  K

(s), (l), (g)

$p^\ominus$ ,  $\Delta H^\ominus$ ,  $\Delta G^\ominus$ , ...

prvky ve stavu referenční fáze (většinou nejstabilnější modifikace)

## 2.2.1.1 Změny H při fyzikálních přeměnách

Příklad:

Vypočítejte mřížkovou entalpii  $\Delta H_L$ , definovanou jako standardní enthalpii děje



pro KCl.

Využijte tzv. Born-Haberův cyklus na obrázku.

Změny  $H$  jsou v kJ/mol (při teplotě 298 K).

