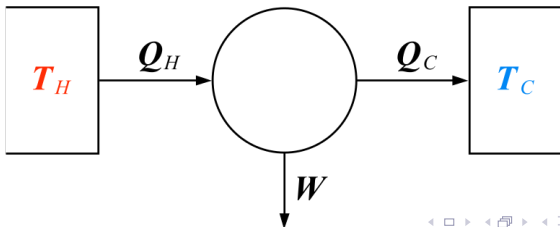


# Termodynamika

Vnitřní energie, entalpie, entropie, termochemie



Energetické přeměny při chemických a fyzikálních procesech, přenos energie mezi látkami, vzájemné přeměny různých druhů energie.

- Rozhoduje pouze počáteční a konečný stav.
- Nezávisí na mechanismu změny.
- Předpověď směru, samovolnosti a rozsahu reakcí.
- Nepočítá s časem, neurčí rychlost nebo mechanismus děje.

- Extenzivní veličiny - závisí na příspěvcích od jednotlivých částí soustavy, jsou aditivní - hmotnost, elektrický náboj, látkové množství, ...
- Intenzivní veličiny - nejsou aditivní - teplota, tlak, viskozita, koncentrace, hustota, ...
- Stav systému - je popsán intenzivními veličinami ( $T$ ,  $p$ ,  $c$ ).
- Stavová funkce - fyzikální charakteristika, jejíž hodnota závisí na stavu soustavy.

- Izolovaný systém - nevyměňuje s okolím ani energii, ani hmotu.
- Uzavřený systém - vyměňuje s okolím energii.
- Otevřený systém - vyměňuje s okolím energii i hmotu.
- Teplota - pravděpodobnostní veličina, popisuje makroskopické systémy.
- Teplo - část vnitřní energie.

- Nultý: Jsou-li dvě a více těles v termodynamické rovnováze s tělesem dalším, pak jsou všechna tato tělesa v rovnováze.
- První: Celkové množství energie (všech druhů) izolované soustavy zůstává zachováno.
- Druhý
  - Teplo nemůže při styku dvou těles různých teplot samovolně přecházet z tělesa chladnějšího na těleso teplejší.
  - Nelze sestavit periodicky pracující tepelný stroj, který by trvale konal práci pouze tím, že by ochlazoval jedno těleso, a k žádné další změně v okolí by nedocházelo.
- Třetí: Čistou pevnou látku nelze konečným pochodem ochladit na teplotu absolutní nuly ( $0\text{ K}$ ;  $-273,15\text{ °C}$ ), k této teplotě se lze pouze přiblížit.

# Termodynamika

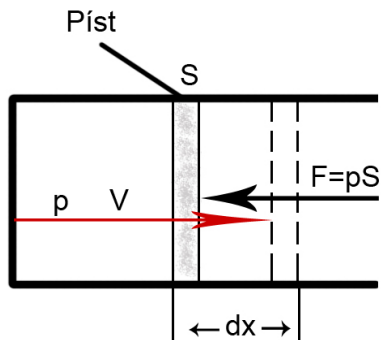
## Vnitřní energie

- Stavová veličina - závisí na stavu systému, ale ne na tom, jak se systém do tohoto stavu dostal.
- Součet kinetické a potenciální energie systému, jde o energii všech částic, ze kterých se systém skládá.
- $$U = \sum_{i=0}^n \frac{1}{2} m_i v_i^2 + E_p$$
- Její absolutní hodnotu nelze změřit ani vypočítat, pouze její změny.
- $\Delta U = U_2 - U_1$
- V termodynamice platí tzv. znamková konvence: *To, co snižuje vnitřní energii systému, má zápornou hodnotu a to, co ji zvyšuje, má hodnotu kladnou.*

# Termodynamika

## Objemová práce $W$

- Práce vykonaná nebo přijatá při změně objemu systému.
- $W = Fdx = pSdx = pdV$
- $dV = Sdx$ ;  $S$  - plocha pístu
- Pokud systém práci koná ( $dV < 0$ ), je  $W < 0$ ; pokud ji přijímá ( $dV > 0$ ) je  $W > 0$ .



# Termodynamika

## Entalpie a entropie

- **Entalpie** ( $H$ ) vyjadřuje množství energie uložené v systému.
- $\Delta H = \Delta U + p\Delta V$
- Za izobarických podmínek je entalpie rovna množství tepelné energie v systému.
- $\Delta H = Q$
- $dH(S, p) = TdS + Vdp$
- **Entropie** ( $S$ ) popisuje neuspořádanost systému, resp. počet stavů, které může systém nabýt.
- $S = -k \sum_i P_i \ln P_i$
- $\Delta S > 0$  - Spontánní proces
- $\Delta S < 0$  - Proces probíhá v opačném směru
- $\Delta S = 0$  - Rovnováha



- $\Delta G$  je stavová funkce
- $\Delta G^0$  - Gibbsova volná energie za standardních podmínek
  - 298,15 K (25 °C)
  - 100 000 Pa (1 bar) pro plyny
  - Koncentrace roztoků 1 mol.dm<sup>-3</sup>
- Hodnoty  $\Delta G^0$  jsou tabelovány
- $C + O_2 \longrightarrow CO_2$
- $\Delta G_{sluc}^0 = -394,4 kJ.mol^{-1}$
- $\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0$
- $\Delta G_{reak}^0 = \sum \nu_{prod} \Delta G_{sluc}^0 (prod) - \sum \nu_{reakt} \Delta G_{sluc}^0 (reakt)$
- $\nu$  - stechiometrický koeficient

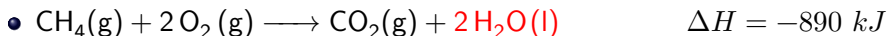
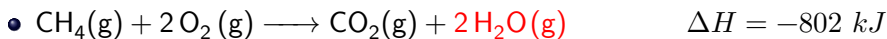
- Reakční teplo dané reakce a reakční teplo opačné reakce jsou až na znaménka stejná.
- Výsledná hodnota reakčního tepla nezáleží na průběhu chemické reakce, ale pouze na jeho počátečním a konečném stavu.

Endotermní reakce  $\Delta H > 0$

Exotermní reakce  $\Delta H < 0$

Atermická reakce  $\Delta H = 0$

- Pro správný výpočet reakčního tepla je nutné znát skupenství všech látek reakci.



- Standardní spalné teplo - teplo, při kterém se spálí 1 mol látky v nadbytku kyslíku. Spalná tepla prvků jsou nenulová.
- $\Delta H_{298}^0 = \sum(\Delta H_{sp}^0)_{reakt} - \sum(\Delta H_{sp}^0)_{prod}$
- Standardní slučovací teplo - teplo, při kterém vzniká 1 mol látky přímo z prvků, reakční látky musí být ve standardním stavu. Standardní slučovací tepla prvků jsou rovna nule.
- $\Delta H_{298}^0 = \sum(\Delta H_{sl}^0)_{reakt} - \sum(\Delta H_{sl}^0)_{prod}$

látka	skupenství	$\Delta H_f^0 [kJ \cdot mol^{-1}]$
$I_2$	(s)	0
$I_2$	(g)	+62
$O_2$	(g)	0
$O_3$	(g)	+142,7