Termochemia

Entalpia reakcji

entalpia reakcji z entalpii tworzenia ★

$$\Delta H^\circ = \Sigma n \Delta H^\circ_{\mathrm{tw,p}} - \Sigma n \Delta H^\circ_{\mathrm{tw,s}}$$

Przy stałym ciśnieniu, gdy układ wykonuje tylko pracę objętościową: ΔH < 0 oznacza reakcję egzoenergetyczną (układ oddaje ciepło otoczeniu), a ΔH > 0 endoenergetyczną (układ pobiera ciepło). Entalpia tworzenia pierwiastka w stanie standardowym (np. O_2, C grafit) jest równa zeru.

prawo Hessa $\Delta H^\circ = \Delta H^\circ_1 + \Delta H^\circ_2$

ΔH reakcji nie zależy od drogi, tylko od stanu początkowego i końcowego. Gdy równania etapów dodajesz, dodajesz ich ΔH; gdy równanie odwracasz, ΔH zmienia znak; gdy mnożysz równanie przez liczbę, mnożysz też ΔH.

entalpia reakcji z energii wiązań

$$\Delta H = \Sigma E_{\mathrm{zer}} - \Sigma E_{\mathrm{utw}}$$

Zerwanie wiązania pochłania energię, utworzenie wiązania ją oddaje. Tablice podają średnie energie wiązań, więc ΔH obliczone z nich jest przybliżone. Średnie energie wiązań dotyczą substancji w fazie gazowej. Gdy reagent jest cieczą albo ciałem stałym, uwzględnij entalpię przemiany fazowej albo licz z entalpii tworzenia w odpowiednich stanach skupienia.

Entalpia swobodna

entalpia swobodna (energia Gibbsa)

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Przy stałych temperaturze i ciśnieniu ΔG < 0 wskazuje samorzutny kierunek reakcji dla aktualnego składu; ΔG = 0 oznacza równowagę. Nie utożsamiaj ΔG z ΔG°.

entalpia swobodna a stała równowagi

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K$$

K to bezwymiarowa stała równowagi termodynamicznej wyznaczona w tej samej temperaturze T co ΔG°.

Ciepło reakcji

ciepło reakcji dla n moli substancji $Q = n \cdot |\Delta H_m|$

Q oznacza dodatnią ilość ciepła wydzielonego lub pochłoniętego, bez znaku. Przy wyznaczaniu ΔH_m wybierz znak ujemny dla reakcji egzotermicznej, a dodatni dla endotermicznej. n i molowa entalpia przemiany ΔH_m dotyczą tej samej wybranej substancji. Jeśli podano entalpię całej reakcji zapisanej równaniem, podziel ją przez współczynnik stechiometryczny tej substancji, aby otrzymać ΔH_m.

Zależność od temperatury

prawo Kirchhoffa termochemii

$$\Delta H(T_2) = \Delta H(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p(T)\, dT$$

Brak przejść fazowych w przedziale lub ich efekty uwzględnione osobno; ΔC_p produktów minus substratów.

Standardowe entalpie tworzenia i spalania, część 1

związek / stan	typ entalpii	ΔH° [kJ/mol]
$Al_2O_3(s)$	tworzenia	–1 675,7
CO(g)	tworzenia	–110,5
$CO_2(g)$	tworzenia	–393,5
$CaC_2(s)$	tworzenia	–59,8
CaO(s)	tworzenia	–634,9
$Ca(OH)_2(s)$	tworzenia	–985,2
$Cr_2O_3(s)$	tworzenia	–1 139,7
FeO(s)	tworzenia	–272,0
$Fe_2O_3(s)$	tworzenia	–824,2
FeS(s)	tworzenia	–100,0
HBr(g)	tworzenia	–36,3
HCl(g)	tworzenia	–92,3
HF(g)	tworzenia	–273,3
HI(g)	tworzenia	26,5
$H_2O(c)$	tworzenia	–285,8
H_2O (g)	tworzenia	–241,8
$H_2S(g)$	tworzenia	–20,6
MgO(s)	tworzenia	–601,6
$MnO_2(s)$	tworzenia	–520,0
$NH_3(g)$	tworzenia	–45,9
NO(g)	tworzenia	91,3

Standardowe entalpie tworzenia i spalania, część 2

związek / stan	typ entalpii	ΔH° [kJ/mol]
$NO_2(g)$	tworzenia	33,2
NaCl(s)	tworzenia	–411,2
$SiO_2(s)$	tworzenia	–910,7
benzen(c)	spalania	–3 267
butan(g)	spalania	–2 878
etan(g)	spalania	–1 561
etanol(c)	spalania	–1 368
eten(g)	spalania	–1 411
etyn(g)	spalania	–1 300
glicerol(c)	spalania	–1 654
glukoza(s)	spalania	–2 802
heksan(c)	spalania	–4 163
kwas benzoesowy(s)	spalania	–3 228
kwas etanowy(c)	spalania	–875
kwas stearynowy(s)	spalania	–11 280
metan(g)	spalania	–891
metanol(c)	spalania	–726
pentan(c)	spalania	–3 509
propan(g)	spalania	–2 219
sacharoza(s)	spalania	–5 643
toluen(c)	spalania	–3 920

Standardowe entalpie tworzenia i spalania. Standardowe entalpie tworzenia i spalania w kJ/mol. Oznaczenia stanów: (s) ciało stałe, (c) ciecz, (g) gaz. Wartość dotyczy utworzenia albo spalenia 1 mola substancji wskazanej w wierszu.

Symbole i jednostki

symbol	znaczenie	jednostka
ΔC_p	zmiana pojemności cieplnej reakcji	$\mathrm{J/(mol \cdot K)}$
ΔG	zmiana entalpii swobodnej reakcji dla aktualnego składu	$\mathrm{kJ/mol}$
ΔG°	standardowa entalpia swobodna reakcji	$\mathrm{J/mol}$
ΔH	entalpia reakcji obliczona z energii wiązań	$\mathrm{kJ/mol}$
ΔH	entalpia reakcji	$\mathrm{J/mol}$
ΔH°	standardowa entalpia reakcji (na mol reakcji, tak jak zapisano równanie)	$\mathrm{kJ/mol}$
ΔH_1°	entalpia pierwszego etapu	$\mathrm{kJ/mol}$
ΔH_2°	entalpia drugiego etapu (równania etapów sumują się do równania reakcji)	$\mathrm{kJ/mol}$
ΔH_m	molowa entalpia przemiany tej substancji (np. spalania)	$\mathrm{kJ/mol}$
K	stała równowagi reakcji (termodynamiczna, bez jednostki)	$-$
n	liczba moli substancji	mol

symbol	znaczenie	jednostka
Q	ciepło wydzielone albo pochłonięte	kJ
R	stała gazowa ≈ 8,314	$\mathrm{J/(K \cdot mol)}$
ΔS	zmiana entropii reakcji (w tablicach często w J/(mol·K): przelicz na kJ)	$\mathrm{kJ/(mol \cdot K)}$
T	temperatura w skali Kelvina	K
T_1	temperatura początkowa	K
T_2	temperatura końcowa	K
ΣE_{utw}	suma energii wiązań utworzonych w produktach	$\mathrm{kJ/mol}$
ΣE_{zer}	suma energii wiązań zerwanych w substratach	$\mathrm{kJ/mol}$
$\Sigma n \Delta H^\circ_{\mathrm{tw,p}}$	suma entalpii tworzenia produktów (p), każda razy współczynnik stechiometryczny n	$\mathrm{kJ/mol}$
$\Sigma n \Delta H^\circ_{\mathrm{tw,s}}$	suma entalpii tworzenia substratów (s), każda razy współczynnik stechiometryczny n	$\mathrm{kJ/mol}$