

## Termokémia

### (12. fejezet)

A kémiai reakciók minden esetben energiaváltozással járnak. Az energia többféle formában nyelődhet el, vagy szabadulhat fel: hő, fény, hang... **A termokémia a kémiai reakciók folyamán végbemenő energiaváltozásokkal foglalkozik.**

A **reakció, mint rendszer szempontjából** beszélhetünk **energiavesztéssel járó** folyamatokról (energia leadás), illetve **energiaszerzéssel járó** folyamatokról (energia felvétel). **Ha** a rendszer **energiát veszít**, akkor **exoterm folyamatról** beszélünk. Ezt a felszabaduló energiát mi tehát hő, fény esetleg hang formájában tapasztaljuk; a rendszer átadja energiájának egy részét a környezetének, energiát veszít, tehát az **energiaváltozás előjele ekkor negatív**. **Ha a rendszer energiát szerez**, akkor **endoterm folyamatról** beszélünk. Az energiát a környezetétől szerzi, attól vonja el. Az energiaváltozás **előjele** ez esetben **pozitív**. Az energiaközlés több módon végbemehet, de **olyan nincs, hogy hőváltkozás ne történjen**. **A kémiai reakciók energiaváltozását a reakcióhőnek nevezett mennyiséggel jellemezzük.**

Az energia nem lehet pozitív vagy negatív, ennek nincs értelme. **Az energiaváltozás ( $\Delta E$ ) előjele (+/-) az energia áramlásának irányát jelenti.** Nemzetközi megállapodás szerint **mindig a vizsgált rendszer szempontjából nézzük a helyzetet**; vagyis még egyszer: ha a rendszer (pl. a reakció) belső (teljes) energiája összességében csökken, akkor az energiaváltozás előjele: -, azaz, negatív. Ellenkező esetben: +, azaz pozitív.

A fizikában (fizikai kémiában) több energiajellegű mennyiség segítségével tudjuk hatékonyan jellemezni a természetben, illetve a laboratóriumokban lezajló változásokat. Az energiát kezeljük inkább általános fogalomként, mely több komponensből (pl. entrópia, entalpia, szabadentalpia...etc) áll!

**A reakcióhő egy adott kémiai reakcióegyenletben feltüntetett minőségű és mennyiségű anyagok átalakulását kísérő moláris hőváltkozás. Jele:  $\Delta_r H^1$ , mértékegysége kJ/mol.**

---

<sup>1</sup> Az ezzel a jellel jelölt mennyiséget valójában reakcióentalpia-változásnak nevezik. Az entalpia egy olyan energiajellegű mennyiség, mely egy anyag, vagy bármely rendszer teljes energiájához hozzájárul. Ez a mennyiség szoros kapcsolatban van a hőmennyiséggel, melyet a hétköznapi életben (hibásan) hajlamosak vagyunk egy az egyben az energiaként értelmezni. Ennek megfelelően fenomenologikusan az entalpiát

Megadásakor fel kell tüntetni az adott reakciót a **sztoichiometriai együtthatókkal**, valamint a **reagáló anyagok halmazállapotát** is.

Nézzünk egy példát!



Jól látható, hogy a két reakció teljesen ugyanaz, egy dolgot kivéve. Az első terméke vízgőz, a másodiké pedig folyékony víz. A két reakció között 88 kJ/mol energiakülönbség van. Ez a különbség a gáz- és folyékony halmazállapot közötti átalakulást kísérő energiaváltozás, vagyis a vízgőz lecsapódása során felszabaduló energia.



A sztoichiometriai együtthatókat megváltoztatva a következőt látjuk:

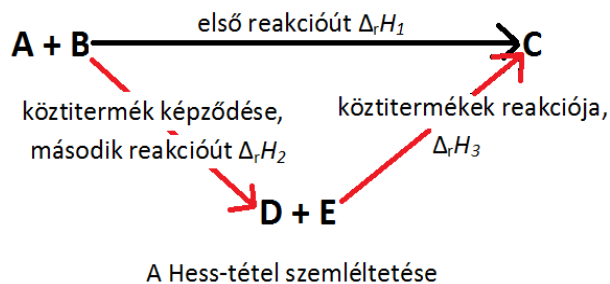


A reakcióban szereplő anyagok minősége és halmazállapota megegyezik, azonban az egyik reakció 1 mól víz képződésére van felírva, a másik pedig 2 mól víz képződésére. A „reakcióegyenletet tehát „elfeleztük”, így a megfelelő egyenlethez tartozó reakcióhő is a felére csökkent.

A fenti két példa mutatja, hogy miért fontos feltüntetni a termokémiai egyenletekben a reakcióhő mellett azt is, hogy mi a pontos sztoichiometria, és milyen halmazállapotú anyagokra érvényes az adott reakcióra megadott energiaérték. **Önmagában egy reakcióhőértéknek tehát semmi értelme, jelentése nincs; csak a hozzá felírt -termokémiai szempontból teljes- egyenlettel együtt válik hasznos információvá.**

---

„hőtartalom”-nak is szokták hívni. Valójában egy vizsgált rendszer állandó nyomáson mért energiaváltozásával egyezik meg.



A reakcióhő a Hess-tétel segítségével számolható.

A **Hess-tétel** a termokémia főtétele, amely kimondja, hogy **egy reakció reakcióhőjét (reakcióentalpia-változását) a kezdeti és a végállapot egyértelműen meghatározza, vagyis a reakcióhő független a részfolyamatok számától és minőségétől.**

A Hess-tétel szerint az ábrán lévő reakcióra igaz, hogy:  $\Delta_r H_1 = \Delta_r H_2 + \Delta_r H_3$

A Hess-tétel alapján a reakcióhőt kiszámolhatjuk a kötési energiákból vagy a képződéshőkből is, valamint a reakcióhő természetesen meg is mérhető (pl. kalorimetria<sup>2</sup>).

*A kötési energiákból való számolás során azt feltételezzük, hogy a kiindulási anyagok összes kötése felszakad, majd a termékek összes kötése létrejön. Ha a reagensek kötésfelszakítási energiáinak az összegéből kivonjuk a termékek kötésfelszakításához szükséges energiák összegét, akkor megkapjuk a reakcióhőt.*

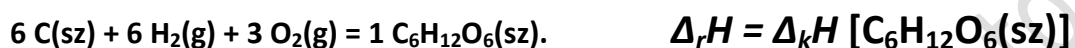
Praktikus volna termokémiai szempontból ismerni, jellemezni a különböző anyagokat. **Az energia azonban minden esetben relatív mennyiség: abszolút energiának nincs értelme, csak valamihez viszonyított energiának.** Például egy hasonlat, mely segít megérteni miért: hasonlóan a földrajzi magassághoz, ahol a tengerszint a skála nulla pontja, de akár más is lehetne (pl. Budapest magassága), ez csak megállapodás kérdése. Szükséges volt tehát egy **olyan mennyiség bevezetése**, mely definíció szerint **rögzíti az anyagokat egy képzeletbeli energiaskála egyes fokain.** Más-más anyagoknak más-más energiatartalmuk van. Ezt a mennyiséget **képződéshőnek** nevezzük.

**A képződéshő annak a reakciónak a reakcióhője, amelyben az adott vegyület egy mólját standard állapotú stabil elemeiből állítják elő.** jele:  $\Delta_f H$ , mértékegysége kJ/mol.

<sup>2</sup> Fizikai és/vagy kémiai folyamatokat kísérő hő mérése.

A képződéshő tehát egy reakcióhő, mely reakcióhőhöz tartozó termokémiai egyenlet a fenti definíció szerint meghatározott. **Adott vegyület képződéshője tehát megegyezik annak a reakciónak a reakcióhőjével, melyben a kérdéses vegyület 1 mólya standard állapotban stabilis elemeiből létrejön.**

Pl. a szőlőcukor képződéshőjét definiáló termokémiai egyenlet a következő:



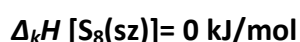
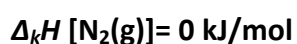
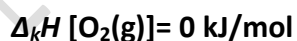
Mint tudjuk a reakcióhőt akár közvetlenül meg is mérhetjük (kalorimetria). Azonban sok-sok vegyület (szinte az összes) közvetlenül, elemeiből nem állítható elő, így bár az ilyen vegyületek képződését leíró termokémiai egyenleteket felírhatjuk, a hozzájuk tartozó reakcióhő (végső soron tehát az adott vegyület képződéshője) nem mérhető meg, hiszen a gyakorlatban a reakciót nem tudjuk kivitelezni.

Nézzünk a fenti szőlőcukor példáját!

A szőlőcukor összegképlete:  $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ . Ennek az összegképletnek –megszámolni is nehéz- rengeteg konstitúció és sok-sok különböző molekula megfelel, mind más-más vegyületek, más-más energiatartalommal. A sok vegyület közül a szőlőcukor ( $\beta$ -D-glükóz) csupán egy.

Igen nehéz elképzelni (és nincs is így), hogy szénport, hidrogén- és oxigéngázt összekeverve, majd a reakciót beindítva, éppen a  $\beta$ -D-glükóz igen bonyolult szerkezetű molekulája keletkezne. Tehát –bár a definíció így szól- sok-sok anyag képződéshőjét közvetlenül megmérni nem lehet.

Még egyszer mi következik a képződéshő definíciójából: az elemek standard állapotú ( $25^\circ\text{C}$ , légköri nyomás) stabil módosulatainak az energiatartalma nulla, vagyis **a standard-állapotú elemek képződéshője nulla**. Pl.:



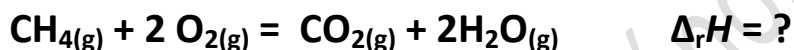
A képződéshők értékeit táblázatok tartalmazzák, igényesebb táblázatok a reakciót is feltüntetik.

A reakcióhőt leggyakrabban a képződéshők alapján határozzuk meg.

**Bármely reakció reakcióhőjét a képződéshők segítségével, a Hess-tétel alapján úgy kapjuk meg, ha a termékek megfelelő sztöchiometriai együtthatóval szorzott képződéshőinek az összegéből kivonjuk a reagensek megfelelő sztöchiometriai együtthatókkal szorzott képződéshőinek az összegét:**

$$\Delta_r H = \sum v_{\text{termékek}} \cdot \Delta_k H_{\text{termékek}} - \sum v_{\text{reagensek}} \cdot \Delta_k H_{\text{reagensek}}$$

Nézzünk egy konkrét példát!



$$\Delta_k H_{\text{metán}(\text{g})} = -75 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_k H_{\text{oxigén}(\text{g})} = 0 \text{ kJ/mol (elemeké mindig 0 kJ/mol!)}$$

$$\Delta_k H_{\text{szén-dioxid}(\text{g})} = -394 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_k H_{\text{víz}(\text{g})} = -242 \text{ kJ/mol}$$

$$v_{\text{metán}} = 1$$

$$v_{\text{oxigén}} = 2$$

$$v_{\text{szén-dioxid}} = 1$$

$$v_{\text{víz}} = 2$$

A reakcióhőre felírt összefüggés értelmében:

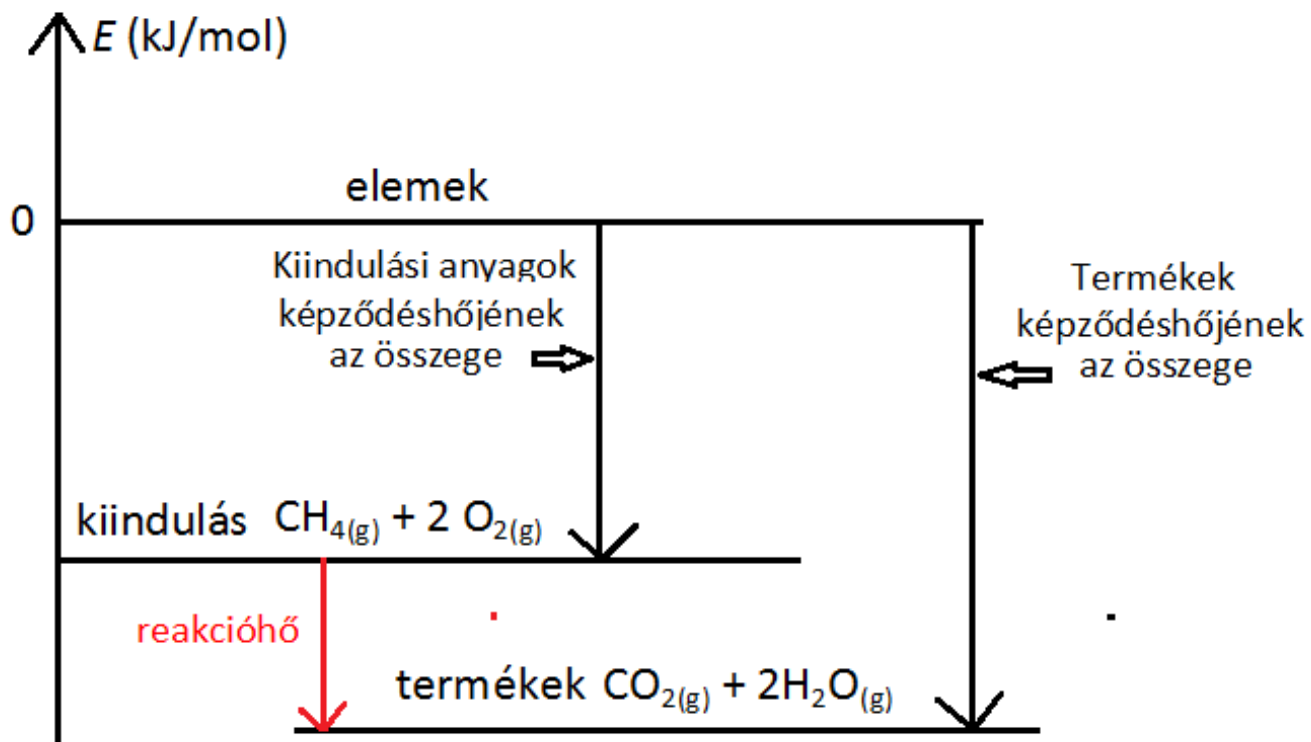
$$\Delta_r H = \sum v_{\text{termékek}} \cdot \Delta_k H_{\text{termékek}} - \sum v_{\text{reagensek}} \cdot \Delta_k H_{\text{reagensek}}$$

$$\Delta_r H = [v_{\text{széndioxid}} \cdot \Delta_k H_{\text{szén-dioxid}(\text{g})} + v_{\text{víz}} \cdot \Delta_k H_{\text{víz}(\text{g})}] - [v_{\text{metán}} \cdot \Delta_k H_{\text{metán}(\text{g})} + v_{\text{oxigén}} \cdot \Delta_k H_{\text{oxigén}(\text{g})}]$$

$$\Delta_r H = [1 \cdot (-394 \text{ kJ/mol}) + 2 \cdot (-242 \text{ kJ/mol})] - [1 \cdot (-75 \text{ kJ/mol}) + 2 \cdot 0 \text{ kJ/mol}]$$

$$\Delta_r H = -803 \text{ kJ/mol.}$$

A fenti reakcióban szereplő anyagok energiadiagramon ábrázolva:



Az ábrán szereplő felfelé és lefelé mutató nyilak az energiaváltozás előjelét jelzik. Ha a reakció exoterm, akkor azt lefelé, ha endoterm, akkor pedig felfelé nyilazzuk az ábrán. Itt a kiindulási anyagok képződéshőinek az összege, a termékek képződéshőinek az összege, valamint a reakcióhő is negatív előjelű, ezért mind a három eset lefelé mutató nyíllal lett jelölve az energiadiagramon.