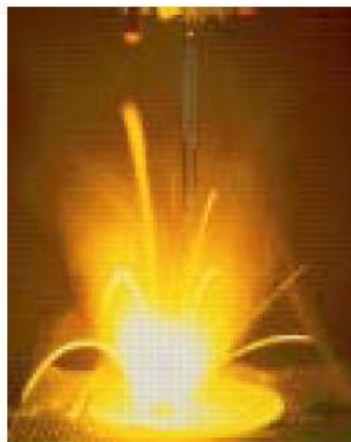


# TERMOHEMIJA ENERGIJA I HEMIJA



# ENERGETIKA HEMIJSKIH REAKCIJA

Prilikom odvijanja hemijskih reakcija dešavaju se energetske promjene prilikom kojih se može oslobađati ili apsorbovati energija

Vrste energije koje se razmjenjuju pri hemijskim reakcijama:

- toplotna energija
- električna energija
- rad
- svjetlosna energija

# NEKI OSNOVNI POJMOVI

## Termohemijska terminologija

- **SISTEM**–izdvojeni dio svemira koji proučavamo
- **OKOLINA**–ostali dio svemira
- Granica sistema
- Sistem može biti:

	Protok mase
Otvoreni	+
Zatvoreni	-



# Termohemijska terminologija

- **Energija**—mjerilo sposobnosti sistema da vrši rad ili odaje toplotu
- **Rad**—energija utrošena na kretanje predmeta nasuprot sile
- **Toplota**—vrsta energije koja se prenosi kao rezultat temperaturne razlike sistema i okoline
- **Temperatura**—stepen zagrijanosti nekog tijela

# Termohemijska terminologija

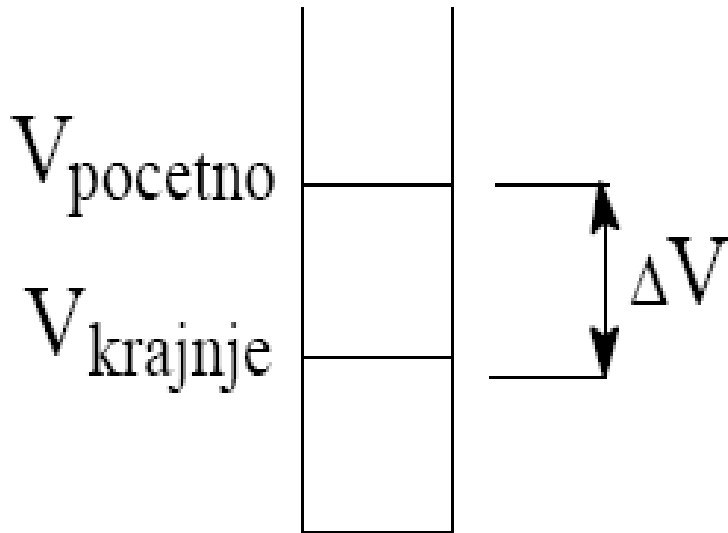
## Stanje sistema

- U termodinamici definicija pojedinog sistema opisuje njegovo **STANJE**
- Stanje sistema se najčešće opisuje:
  - Agregatnim stanjem (s), (l), (g), (aq)
  - Pritiskom, zapreminom i temperaturom
  - Hemijskim sastavom sistema
  - Alotropske modifikacije, vrsta kristala .....

# Termohemijska terminologija

## Funkcije stanja sistema

- P, V i T su funkcije stanja sistema
- Funkcije stanja sistema zavise samo od početnog i krajnjeg stanja



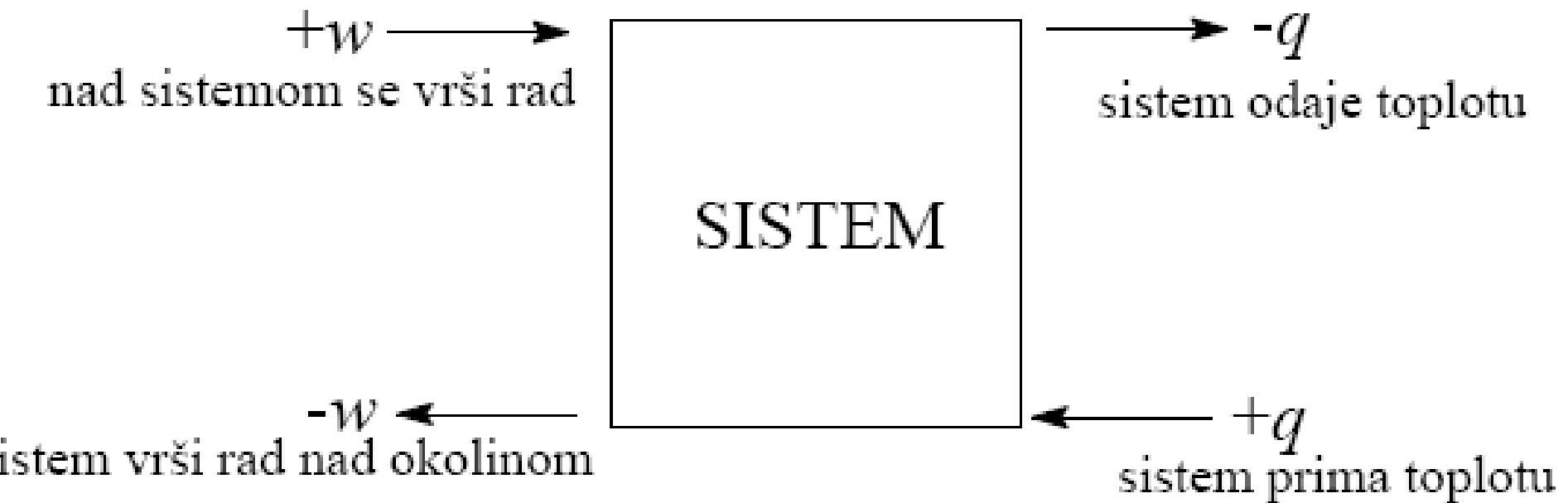
$$\Delta V = V_{\text{pocetno}} - V_{\text{krajnje}}$$

Slicno i za P, T, U...

# UNUTRAŠNJA ENERGIJA

- Unutrašnja energija ( $U$ ) je zbir svih pojedinačnih energija čestica (atoma, jona, molekula) koje čine sistem.
- Unutrašnja energija sistema zavisi od:
  - temperature
  - vrste čestica
  - njihove količine
- Nemoguće je mjeriti apsolutnu vrijednost unutrašnje energije
- Može se mjeriti samo promjena unutrašnje energije pri promjeni stanja,  $\Delta U$
-

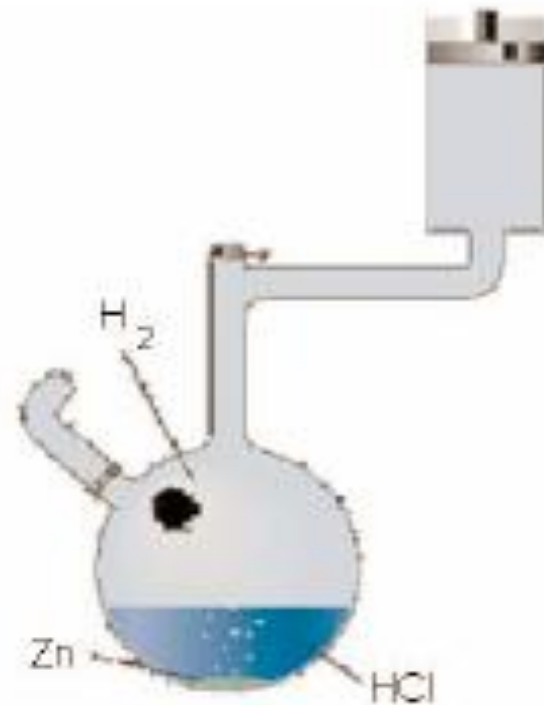
- OZNAČAVANJE RAZMJENE TOPLOTE I RADA IZMEĐU SISTEMA I OKOLINE





# RAD PRITISAK -ZAPREMINA

- Kod širenja gasova vrši se rad protiv pritiska
- $W = P \cdot \Delta V$



# Prvi zakon termodinamike

- Energija se ne može niti stvoriti niti uništiti
- Ukupna energija u svemiru je konstantna
- Energija se može prevesti iz jednog oblika u drugi

## Veza između $U$ , $q$ i $w$

- Primjena prvog zakona termodinamike
  - Kada sistem prolazi kroz fizičku i hemijsku promjenu, promjena unutrašnje energije je jednaka toplotnoj energiji koju sistem otpušta ili prima plus rad koji sistem vrši ili se vrši nad sistemom
- $\Delta U = q + w$
- odnosno:
- $q = \Delta U - w$

# ENTALPIJA

- Entalpija, H:

Toplotna energija koja se razmjenjuje između sistema i okoline pri konstantnom pritisku.

$$H = U + PV$$

- Entalpija je funkcija stanja sistema
- Nemoguće je mjeriti apsolutnu vrijednost entalpije nego samo njenu promjenu

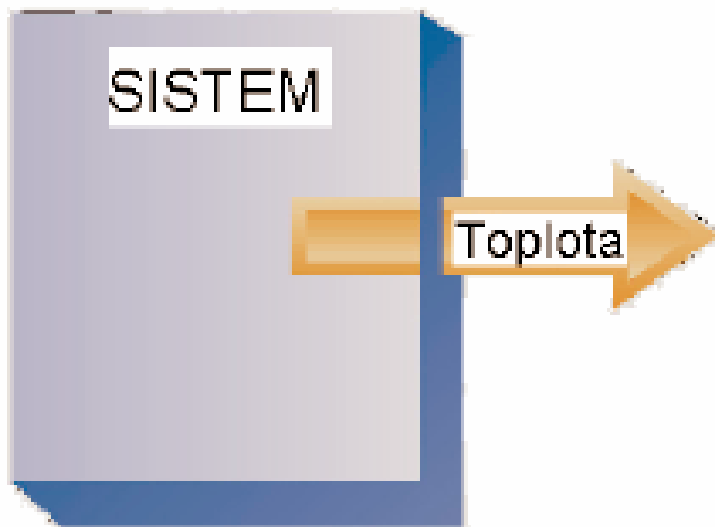
$$\Delta H = \Delta(U + PV)$$

- Ako je pritisak konstantan slijedi:

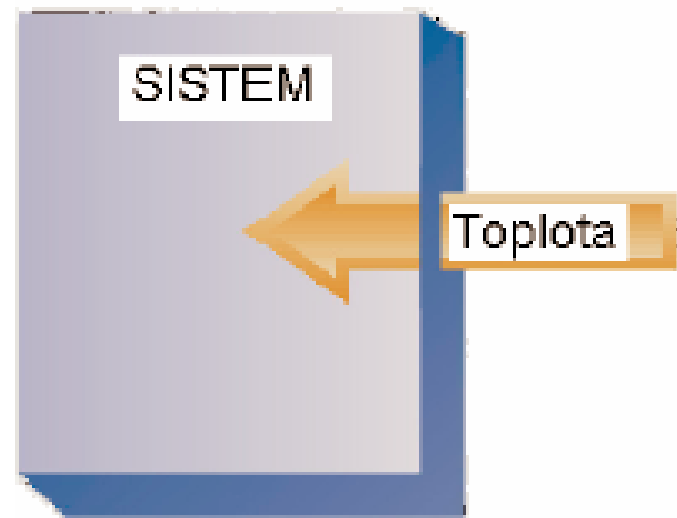
$$\Delta H = \Delta U + P\Delta V$$

# EGOZOTERMNE I ENDOTERMNE REAKCIJE

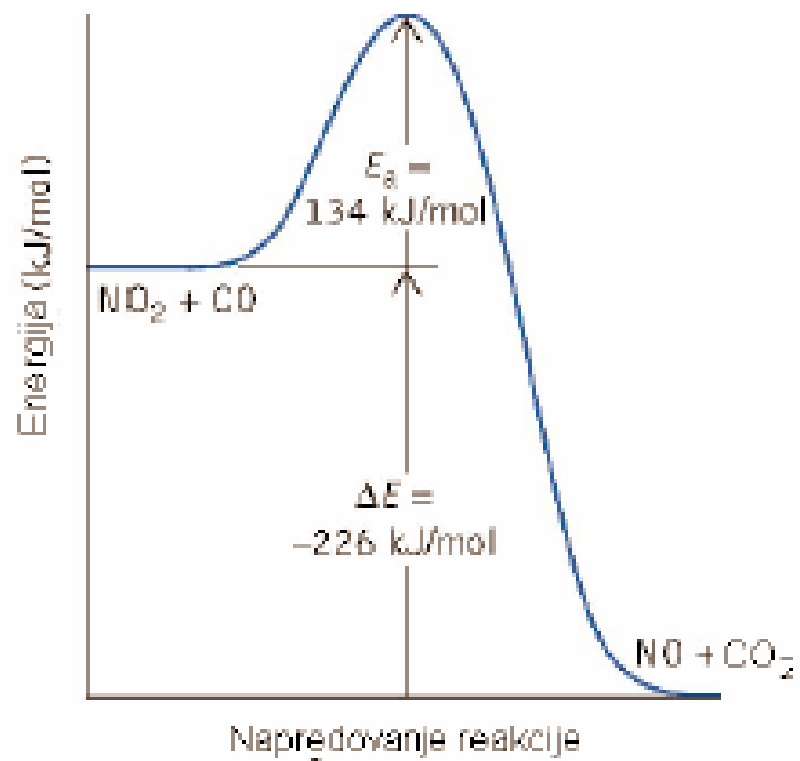
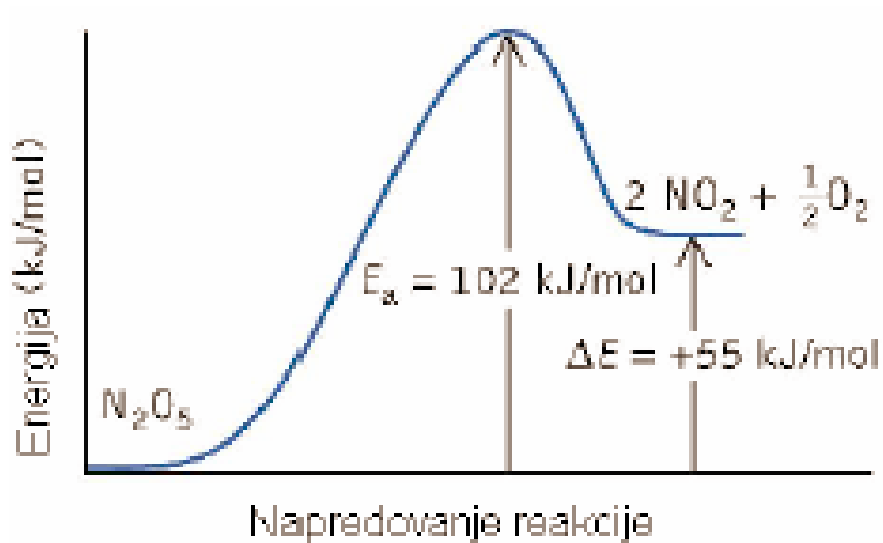
- Kod egzotermnih reakcija sistem odaje toplotu
- $\Delta H < 0$



- Kod endotermnih reakcija sistem prima toplotu od okoline
- $\Delta H > 0$



# ENDOTERMNE I EGZOTERMNE HEMIJSKE REAKCIJE



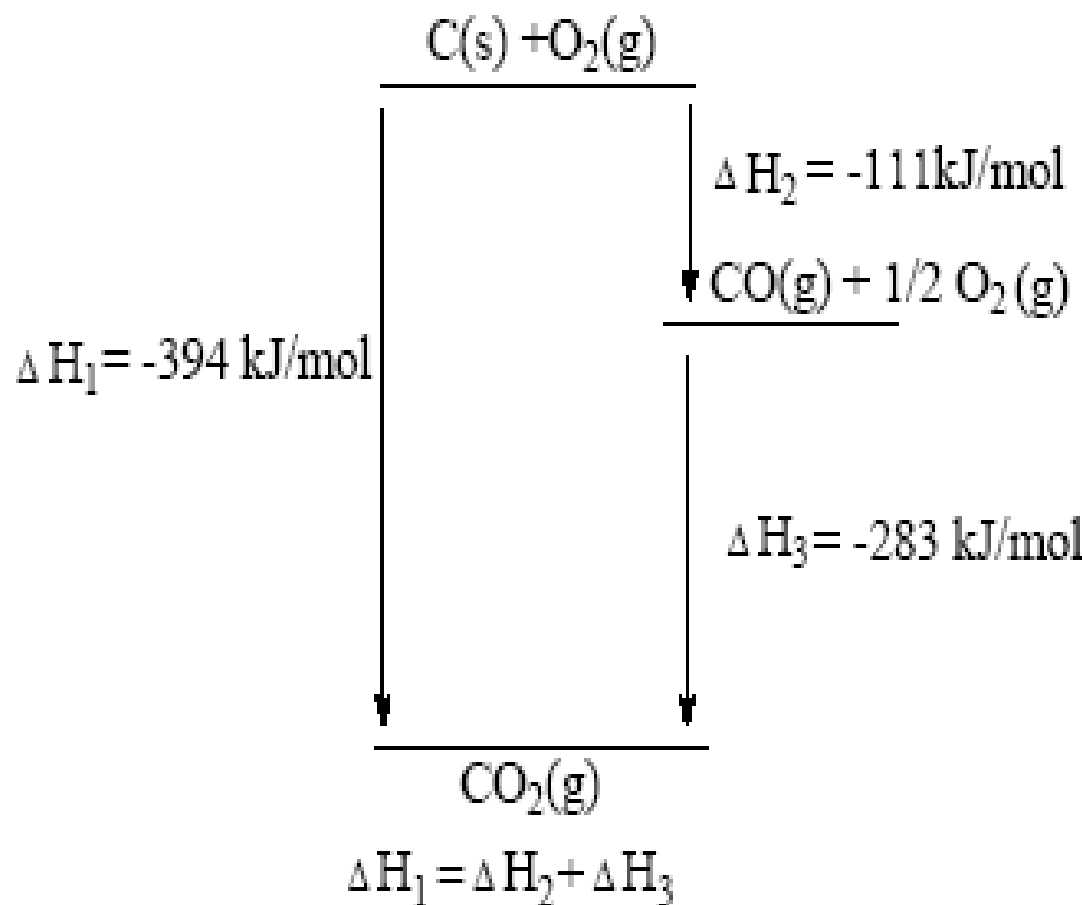
# TERMOHEMIJSKE JEDNAČINE

## PROMJENA ENTALPIJE HEMIJSKE REAKCIJE, $\Delta H_r$

- $C(s) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$        $\Delta H_r = -394 \text{ kJ/mol}$
  - $N_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2 NO(g)$        $\Delta H_r = +180 \text{ kJ/mol}$
  - $2 H_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2 H_2O(l)$        $\Delta H_r = -286 \text{ kJ/mol}$
  - $2 H_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2 H_2O(g)$        $\Delta H_r = -242 \text{ kJ/mol}$
- 
- Promjena entalpije hem. reakcije upravo je proporcionalna količini supstance koja reaguje
  - Promjena entalpije jedne reakcije je iste veličine ali suprotnog znaka od promjene entalpije za reversnu (suprotnu) reakciju.

# HESOV ZAKON

Ukupna promjena entalpije reakcije je stalna i ne zavisi od toga da li se reakcija odigrava u jednom stepenu ili više stepena ako se polazi od istih komponenti i dobijaju isti proizvodi reakcije sa istim agregatnim stanjem.





# ENTALPIJA STVARANJA JEDINJENJA

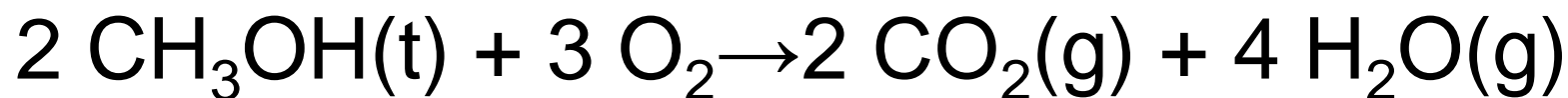
- Standardna entalpija stvaranja jedinjenja,  $\Delta H_f^0$ , je promjena entalpije pri stvaranju jednog mola jedinjenja iz elemenata pri standardnim uslovima.
- Standardni uslovi:  $P = 101325 \text{ Pa}$ ;  $T = 298 \text{ K}$  ( $25^\circ\text{C}$ )
- Uzima se najstabilniji oblik supstance pri standardnim uslovima
- Standardna entalpija stvaranja najstabilnije forme hemijskog elementa je nula.
- $\frac{1}{2}\text{H}_2(\text{g}) + \frac{1}{2}\text{Cl}_2(\text{g}) \rightarrow \text{HCl}(\text{g}) \quad \Delta H_f^0 = -92,3 \text{ kJ/mol}$
- $2 \text{ C}(\text{s,graf}) + \text{H}_2(\text{g}) + \frac{1}{2}\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$   
 $\Delta H_f^0 = -277,7 \text{ kJ/mol}$

# IZRAČUNAVANJE PROMJENE ENTALPIJE HEMIJSKE REAKCIJE

- Promjena entalpije hemijske reakcije jednaka je razlici zbira entalpija stvaranja proizvoda reakcije i zbira entalpija stvaranja reaktanata.

$$\Delta H^{\circ}_r = \sum n\Delta H^{\circ}_f(\text{produkti}) - \sum m\Delta H^{\circ}_f(\text{reaktanti})$$

IZRAČUNAVANJE PROMJENE ENTALPIJE  
HEMIJSKE REAKCIJE SAGORIJEVANJA  
METANOLA



$$\Delta H_f^0 \quad -238,7 \quad 0 \quad -393,6 \quad -242$$

$$\Delta H_r = [2 \cdot \Delta H_f^0(\text{CO}_2) + 4 \cdot \Delta H_f^0(\text{H}_2\text{O})] -$$
$$[2 \cdot \Delta H_f^0(\text{CH}_3\text{OH}) + 3 \cdot \Delta H_f^0(\text{O}_2)]$$

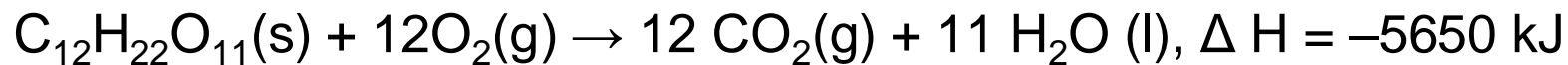
$$\Delta H_r = [2 \cdot (-393,6) + 4 \cdot (-242)] - [2 \cdot (-238,7) + 3 \cdot (0)]$$

$$\Delta H_r = -1277,8 \text{ kJ/mol}$$

# Entalpija sagorijevanja

- Standardna molarna entalpija sagorijevanja,  $\Delta H^0_{\text{sag,m}}$ , je promjena standardne entalpije pri sagorijevanju jednog mola organske supstancije do  $\text{CO}_2$  i  $\text{H}_2\text{O}$ , ako supstanca sadrži C, H ili O i još do  $\text{N}_2$  ili azotne ili sumporne okside ako sadrži N ili S.

- Dato je,



Koliko se toplote oslobodi kada 10.0 g of saharoze ( $M_r = 342.3$ ), pošto ste je konzumirali, svarili i potpuno sagorjeli (oksidovali)?

Rešenje: Dati uslovi se odnose na humano korišćenje saharoze (S),

$$10,0 \text{ g (S)} \times 5650 \text{ kJ/mol (S)} / 342,3 \text{ g/mol (S)} = -16,506 \text{ kJ/mol (S)}$$

– oslobođena energija

# SPONTANOST TOKA HEMIJSKE REAKCIJE

## ENTROPIJA, S

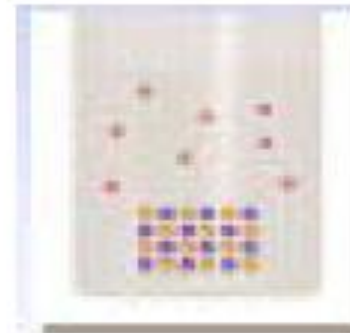
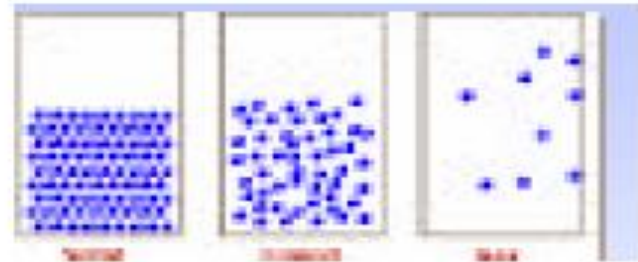
- Za spontane procese je karakteristično da je krajnje stanje neuređenije od početnog
- Spontani procesi teku uz povećanje neuređenosti sistema
- Termodinamička veličina koja se uvodi kao mjerilo neuređenosti sistema je ENTROPIJA, S
- Entropija je proporcionalna termodinamičkoj vjerovatnoći stanja sistema
- $S = R \ln W$

# SPONTANOST REAKCIJE

- Termodinamička vjerovatnoća sistema ukazuje da će se spontano odvijati reakcije kod kojih dolazi do rasipanja:
  - Energije
  - Mase
  - Energije i mase

# RASIPANJE MASE

- ŠIRENJE GASOVA  
PROTIČE UZ  
POVEĆANJE  
ENTROPIJE
- PROMJENE  
AGREGATNIH  
STANJA PROTIČU UZ  
POVEĆANJE  
ENTROPIJE
- RASTVARANJE  
PROTIČE UZ  
POVEĆANJE  
ENTROPIJE



# SPONTANOST REAKCIJE I ENTROPIJA

- Entropija je funkcija stanja sistema:

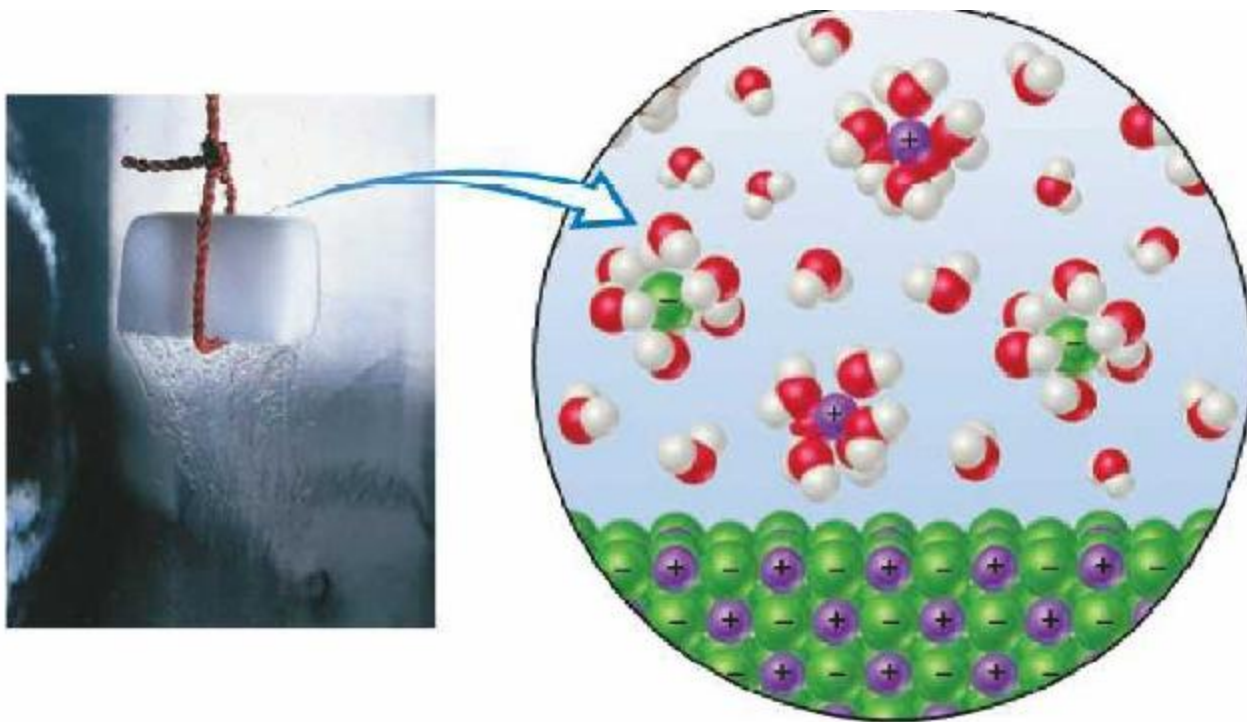
$$\Delta S = S_{\text{krajnje}} - S_{\text{početno}}$$

- **SPONTANI PROCESI TEKU UZ POVEĆANJE ENTROPIJE**
- $\Delta S > 0$  (+) SPONTANI PROCES
- $\Delta S < 0$  (-) PROCES NIJE SPONTAN  
SPONTAN JE REVERSNI PROCES
- $\Delta S = 0$  SISTEM JE U RAVNOTEŽI



Slučaj rastvaranje nekih soli (KCl) u vodi.

Neurenenost jona soli raste, neurenenost vode se smanjuje



# SPONTANOST TOKA HEMIJSKE REAKCIJE

## GIBSOVA SLOBODNA ENERGIJA

- Maksimalna količina energije koja se može prevesti u slobodan rad.

$$\Delta G^{\circ} = \Delta H^{\circ} - T \Delta S^{\circ}$$

ukupna promena energije sistema minus energija utrošena na povećanje neuređenosti sistema

- $\Delta G < 0$  (-), SPONTANI PROCES
- $\Delta G > 0$  (+), PROCES NIJE SPONTAN
- SPONTAN JE REVERSNI PROCES
- $\Delta G = 0$ , SISTEM JE U RAVNOTEŽI

# SPONTANOST TOKA HEMIJSKE REAKCIJE

## GIBSOVA SLOBODNA ENERGIJA

$$\Delta G^{\circ} = \Delta H^{\circ} - T \Delta S^{\circ}$$

$\Delta H^{\circ}$	$\Delta S^{\circ}$	$\Delta G^{\circ}$	spontanost
Egzo (-)	Povećanje (+)	-	spontana
Endo (+)	Smanjenje (-)	+	Spontana je reversna reakcija
Egzo (-)	Smanjenje (-)	?	Zavisí od T
Endo (+)	Povećanje (+)	?	Zavisí od T