

TARTU ÜLIKOOL
TEADUSKOOL

TÄIENDAVID TEEMASID KOOLIKEEMIALE I

**KEEMILISE REAKTSIOONI ENERGEETILINE
EFEKT**

Rein Pullerits

Õppevahend TK õpilastele
Tartu 2007

KEEMILISE REAKTSIOONI ENERGEETILINE EFEKT

Reaktsiooni energeetilise efekti väärtusele vastav energia kogus vabaneb või neeldub lõpuni kulgevas reaktsioonis.

Energeetiline efekt on tingitud lähteainete ja saadusainete energiavaru erinevusest. Et reaalsed protsessid toimuvad konstantsel rõhul (atmosfäärirõhul), siis energiavaru erinevust määratakse termodünaamilise suuruse – entalpiamuudu ΔH kaudu. Kui saadusained on energiavaesemad kui lähteained, siis toimus eksotermiline reaktsioon ja $\Delta H < 0$. ΔH määratakse alati süsteemi seisukohalt. $\Delta H =$ energiavaru lõpus miinus energiavaru alguses. Endotermilises reaktsioonis on $\Delta H > 0$.

Keemiliste reaktsioonide energeetiline efekt sõltub sellest, millistes tingimustes reaktsioon toimub. See ei sõltu sellest, kas protsess toimub ühes astmes või läbi vaheastmete. Vastavalt Hessi seadusele sõltub reaktsiooni energeetiline efekt ainult süsteemi alg- ja lõppolekust. Energeetilise efekti väärtused antakse tabelites ühesugustel tingimustel [reeglina standardtingimused: 25 °C ja rõhk 1 atmosfäär (üks baar)]. Ka meie kasutame niinimetatud standardväärtusi, lähtudes lähteainete ja saadusainete standardtingimustest.

Keemilise reaktsiooni võrrand väljendab reaktsiooni üldtulemust. Võrrand annab reageerivate ainete ja reaktsioonisaaduste valemid ja näitab nende hulga. Keemilise reaktsiooni võrrandid, kus on märgitud reageerivate ainete agregaatolek (g – gaas, v – vedelik ja t – tahke) ning reaktsiooni entalpia muut, nimetatakse termokeemiliseks võrrandiks. Sõna muut tavaliselt ei kasutata. On mõisted reaktsioonientalpia ΔH , tekkeentalpia ΔH_f (f – *formation* moodustumine) ja põlemisentalpia ΔH_c , (c – *combustion* põlemine).

Tekkeentalpia vastab reaktsioonientalpia, kus stabiilsetest lihtainetest tekib üks mool saadusainet.

Näiteks



Kõikide stabiilsete lihtainete tekkeentalpia on 0. Mittestabiilsetel lihtainetel on tekkeentalpia nullist erinev.

Näiteks: $\Delta H_f(\text{grafiit}) = 0$; $\Delta H_f(\text{teemant}) = +1,9 \text{ kJ/mol}$

Põlemisentalpia vastab reaktsioonientalpia, kus aine täielikult põlemisel moodustuvad CO_2 , H_2O , N_2

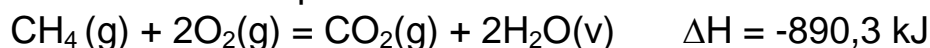
Näiteks: $\text{CH}_3\text{NH}_2 + \text{O}_2 = \text{CO}_2 + 2,5\text{H}_2\text{O} + 0,5\text{N}_2$ $\Delta H = \Delta H_c(\text{CH}_3\text{NH}_2)$

Muundumisel $C + O_2 = CO_2$ on reaktsioonientalpia samaaegselt nii CO_2 tekkeentalpiaks kui ka C põlemisentalpiaks:

$$\Delta H = \Delta H_f(CO_2) = \Delta H_c(C)$$

Erinevuse lähteainete ja saadusainete energiavarus peab kompenseerima reaktsioonis neelduv või eralduv energia.

Näiteks metaani põlemisreaktsioonis



on saadusainete ja lähteainete energiavaru erinevus 890,3 kJ (ühe mooli CH_4 kohta). Kui üks mool CH_4 põleb täielikult, vabaneb järelikult 890,3 kJ energiat. Kui aga õnnestuks ühe mooli CO_2 ja kahe mooli H_2O reageerimisel saada üks mool CH_4 ja kaks mooli dihapnikku, neelduks seejuures sama kogus (890,3 kJ) energiat.

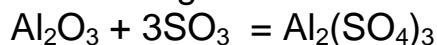
Vabanenud energia entalpia muuduna antakse negatiivse ($\Delta H = -890,3$ kJ), neeldunud energia positiivse ($\Delta H = 890,3$ kJ) väärtusega

Reaktsioonientalpiat saab arvutada:

I Tekkeentalpiate järgi.

$$\Delta H = \sum \Delta H_f(\text{saadusained}) - \sum \Delta H_f(\text{lähteained})$$

Näiteks: Arvutage muundumise



reaktsioonientalpia, kui Al_2O_3 , SO_3 ja $Al_2(SO_4)_3$ tekkeentalpiad on vastavalt -1670,2 kJ/mol, -395,3 kJ/mol ja -3435,8 kJ/mol.

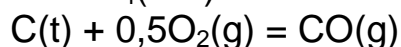
$$\Delta H = 1 \text{ mol} \cdot (-3435,8 \text{ kJ/mol}) - [3 \text{ mol} \cdot (-395,3 \text{ kJ/mol}) + 1 \text{ mol} \cdot (-1670,2 \text{ kJ/mol})] = -579,7 \text{ kJ}$$

II Põlemisentalpiate järgi.

$$\Delta H = \sum \Delta H_c(\text{lähteained}) - \sum \Delta H_c(\text{saadusained})$$

Soovitud entalpia leidmiseks kirjutame vastava reaktsiooni võrrandi.

Näiteks: $\Delta H_f(CO)$ leidmiseks oleks vastav võrrand



Selle muundumise reaktsioonientalpia on võimalik leida põlemisentalpiate järgi: $\Delta H_c(C) = -393,5$ kJ/mol ja $\Delta H_c(CO) = -283,0$ kJ/mol

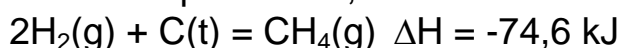
$$\Delta H = \Delta H_f(CO) = -393,5 \text{ kJ/mol} \cdot 1 \text{ mol} - (-283,0 \text{ kJ/mol}) \cdot 1 \text{ mol} =$$

$$= -110,5 \text{ kJ} = -110,5 \text{ kJ/mol}$$

Märkus: ΔH ühikuks on kJ; $\Delta H_f(\text{CO})$ ühikuks on kJ/mol.

Entalpia väärtust võib leida, kasutades reagentide erinevaid entalpiaid ja reaktsioonientalpiat.

Näiteks: Leidke vesiniku põlemisentalpia, kui metaani ja süsiniku põlemisentalpiad on vastavalt $-890,3 \text{ kJ/mol}$ ja $-393,5 \text{ kJ/mol}$ ning metaani tekkeentalpia on $-74,6 \text{ kJ/mol}$.



$$-74,6 \text{ kJ} = 2 \text{ mol} \cdot \Delta H_c(\text{H}_2) + 1 \text{ mol} \cdot (-393,5 \text{ kJ/mol}) - (-890,3 \text{ kJ/mol})$$

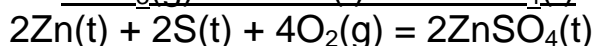
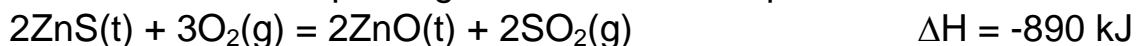
$$\Delta H_c(\text{H}_2) = \frac{+393,5 \text{ kJ} - 890,3 \text{ kJ} - 74,6 \text{ kJ}}{2 \text{ mol}} = -285,7 \text{ kJ/mol}$$

Ka erinevate muundumiste reaktsioonientalpiate kombineerimine võimaldab soovitud entalpiat leida. Ühinemisreaktsiooni asemel kasutame lagunemisreaktsiooni (muutub ka ΔH märk); termokeemilist võrrandit korrutame või jagame mingi teguriga; liidame või lahutame teineteisest jne.

Näiteks: Leidke $\text{ZnSO}_4(\text{t})$ tekkeentalpia järgmiste termokeemiliste võrrandite alusel.



Kirjutame võrrandid selliselt, et nende liitmisel jääksid vasakule ainult lihtained ja paremale nendest lihtainetest moodustuv ühend. Sellele võrrandile vastav entalpia ongi ühendi tekkeentalpia



$$\Delta H = (-890 - 401 - 196 - 464) \text{ kJ} = -1956 \text{ kJ}$$

$$\Delta H_f(\text{ZnSO}_4) = -\frac{1956 \text{ kJ}}{2 \text{ mol}} = -978 \text{ kJ/mol}$$

Kirjandus:

1. R.Ott, A.Piksarv, E.Talts. Keemia ülesannete kogu, Valgus, 1983.
2. Hergi Karik, Vello Past. Keemilised elemendid, ühendid & reaktsioonid. Süvakursus XI-XII kl, Koolibri, 1996.

Märkus: Loetletud raamatutes kasutatud mõisted: reaktsioonisoojus, tekkesoojus ja põlemissoojus ning siinkasutatud mõisted reaktsioonientalpia, tekkeentalpia ja põlemisentalpia on vastastikku sünonüümid.