



Сагоревање М

аудиторне вежбе



ТОПЛОТА (ЕНТАЛПИЈА) ФОРМИРАЊА (СТВАРАЊА)

- Основна једначина:

$$\Delta H_f^0 = \sum H_A - \sum H_D - \sum H_V \pm L$$

- где су:

- H_A – енталпија атомизације
- H_D – енталпија дисоцијације
- H_V – енталпија вибрација
- L – енталпија промене фазе (знак „+“ за доведену топлоту, знак „-“ за одведену/ослобођену)



Енталпије атомизације (Табела 1), вибрација и промене фазе

| Хемијски елемент | ΔH_A [kJ/mol] |
|--|-----------------------|
| H ₂ | 435,4 |
| O ₂ | 498,2 |
| N ₂ | 946,2 |
| C _s – C _g (чврсто/графит у гасовито) | 717,2 |

- **Енталпија вибрација** – карактеристична за бензен (бензол) = 150,4 kJ/mol.
- **Енталпија промене фазе** – карактеристична за воду (топлота испаравања/кондензације) = 44,04 kJ/mol



Енталпије дисоцијације (Табела 2)

| Хемијска веза | ΔH_D [kJ/mol] |
|--------------------|-----------------------|
| C-H | 414,5 |
| C-C | 347,5 |
| C=C | 615,5 |
| C \equiv C | 812,2 |
| C-O | 360,0 |
| H-O | 463,1 |
| За CO ₂ | |
| O-CO | 533,3 |
| C-O | 1075,8 |



1. Задатак

- a) Израчунати стандардну енталпију формирања гасовитог бензена (бензола).
- b) Одредити доњу топлотну моћ.
- c) Одредити горњу топлотну моћ.



1. Задатак, решење под а)

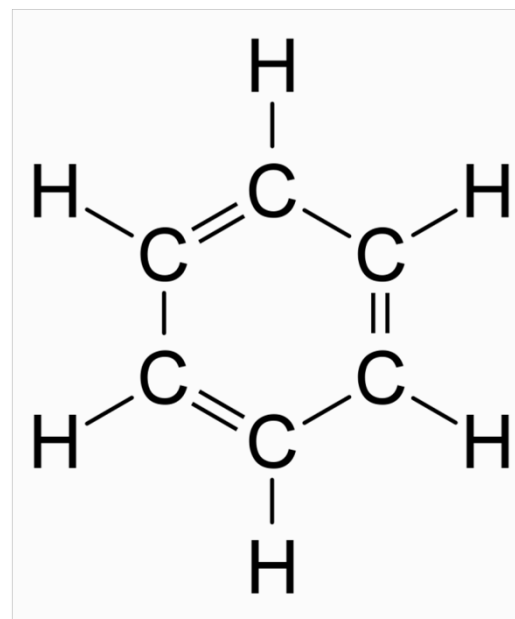
Општи израз за енталпију формирања

бензена:

$$\Delta H_f^0 = \sum H_A - \sum H_D - \sum H_V \pm L$$

Структура молекула

бензена:





1. Задатак, решење под а)

На основу структуре молекула бензена закључујемо да нам је потребно:

- 6 атома угљеника у гасовитом стању и
- 3 молекула водоника.

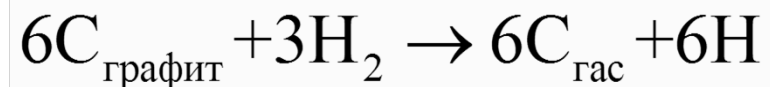
Формирање молекула бензена се врши у следећим корацима:

- атомизација угљеника (прелазак из чврстог у гасовито стање) и водоника,
- дисоцијација ради образовања бензеновог прстена са 3 једногубе (C-C), 3 двогубе (C=C) везе и 3 једногубе (C-H) везе,
- мора се узети у обзир и енталпија вибрација атома бензена!



1. Задатак, решење под а)

Хемијска једначина настајања гасовитог бензена:



На основу анализе процеса настајања атома бензена биће:

$$\begin{aligned}\Delta H_f^0 &= \sum H_A - \sum H_D - \sum H_V \pm L = \\ &= (6 \cdot 717,2 + 3 \cdot 435,4) - (3 \cdot 347,5 + 3 \cdot 615,5 + 6 \cdot 414,5) - 150,4 = \\ &= 83,4 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}\end{aligned}$$

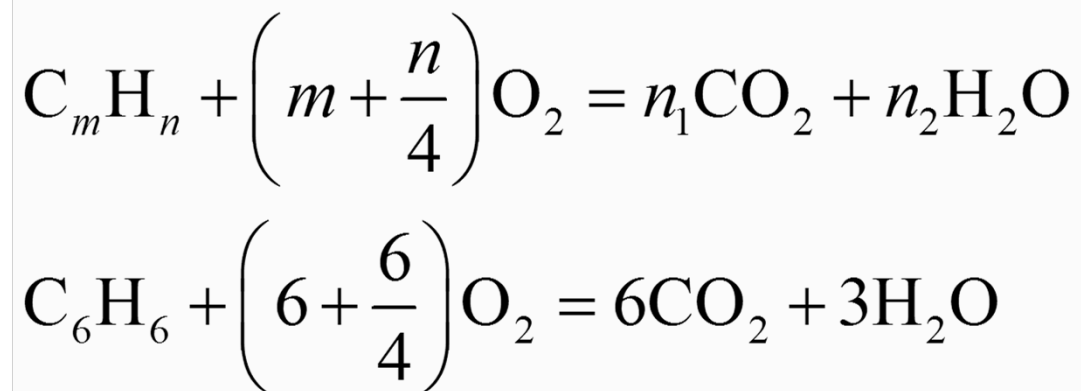


1. Задатак, решење под б)

Енталпија сагоревања бензена је разлика енталпија формирања продуката сагоревања и енталпија формирања реактанта:

$$\Delta H_{\text{fsag}}^0 = \Delta H_{\text{fP}}^0 - \Delta H_{\text{fR}}^0$$

Стехиометријска ј-на сагоревања бензена се добија на основу:





1. Задатак, решење под б)

Тако да се енталпија сагоревања бензена може написати у следећем облику:

$$\Delta H_{\text{fsag}}^0 = \underbrace{\left(\Delta H_{\text{fCO}_2}^0 + \Delta H_{\text{fH}_2\text{O}}^0 \right)}_{\text{продукти}} - \underbrace{\left(\Delta H_{\text{fC}_6\text{H}_6}^0 + \Delta H_{\text{fO}_2}^0 \right)}_{\text{реактанти}}$$

На основу ове ј-не закључујемо да морамо да одредимо енталпије формирања свих наведених елемената/једињења, при чему треба имати у виду да је **енталпија формирања елементарних молекула** (нпр. O_2 или $\text{C}_{\text{графит}}$) **увек једнака нули!**



1. Задатак, решење под б)

Енталпија формирања гасовитог угљен диоксида се одређује на основу стехиометријских j-на:



тако да је:

$$\Delta H_{f\text{CO}_2}^0 = (717,2 + 498,2) - (533,3 + 1075,8) = -393,7 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

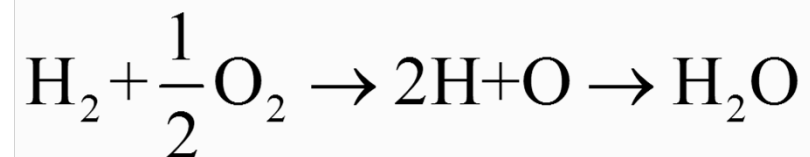
атомизација

дисоцијација



1. Задатак, решење под б)

Енталпија формирања водене паре се одређује на основу стехиометријских ј-на:



тако да је:

$$\Delta H_{\text{H}_2\text{O}}^0 = \left(435,4 + \frac{1}{2} 498,2 \right) - (2 \cdot 463,1) = -241,7 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

атомизација

дисоцијација



1. Задатак, решење под б)

Сада је енталпија сагоревања бензена :

$$\Delta H_{\text{fsag}}^0 = \underbrace{(-6 \cdot 393,7 - 3 \cdot 241,7)}_{\text{продукти}} - \underbrace{(83 + 7,5 \cdot 0)}_{\text{реактанти}} = -3170,3 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

По дефиницији, топлота сагоревања је заправо топлотна моћ, тако да познавајући молекулску масу бензена можемо да израчунамо масену топлотну моћ.



1. Задатак, решење под б)

Доњу топлотну моћ бензена можемо да израчунамо на основу већ израчунате енталпије сагоревања:

$$H_d = \frac{\Delta H_{\text{fsag}}^0}{M_{\text{C}_6\text{H}_6}} = \frac{3170,3 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}}{78 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}} = 40.645 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$$



1. Задатак, решење под с)

При израчунавању горње топлотни моћи бензена морамо да додамо енталпију промене фазе воде при одређивању енталпије формирања водене паре:

$$\Delta H_{\text{H}_2\text{O}}^0 = \left(434,5 + \frac{1}{2} 498,2 \right) - (2 \cdot 463,1) - 44,04 = -285,7 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

атомизација

дисоцијација

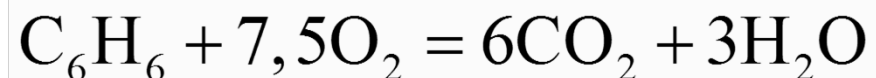
кондензација

(знак „-“ је зато што се
топлота ослобађа)



1. Задатак, решење под с)

Сада је енталпија сагоревања бензена (за горњу топ.моћ):



$$\Delta H_{\text{fsag}}^0 = (-6 \cdot 393,7 - 3 \cdot 285,7) - (83 + 7,5 \cdot 0) = -3302,3 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

продукти

реактанти

тако да је горња топлотна моћ:

$$H_d = \frac{\Delta H_{\text{fsag}}^0}{M_{\text{C}_6\text{H}_6}} = \frac{3302,3 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}}{78 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}} = 42.337 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$$



Кирхофова једначина/закон

- Уобичајено је да се енталпије (топлоте) хемијских реакција дају за атмосферски притисак и собну температуру.
- За вредности енталпија хемијских реакција на другим температурама користе се таблице стандардних енталпија формирања за реактанте и продукте, или Кирхофова једначина.
- **Кирхофова једначина описује зависност енталпије (топлоте) реакције од температуре.**
- Начелно, енталпија било које материје расте с температуром, што значи да расту енталпије и продуката и реактаната.



Кирхофова једначина/закон

- Настала је из потребе да се на основу познате енталпије на једној температури (T_1), одреди непозната енталпија на другој температури (T_2).

- По дефиницији је:

$$C_p \equiv \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p$$

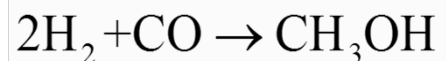
Тако да је:

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



2. Задатак

Наћи зависност топлотног ефекта хемијске реакције:



од температуре. Израчунати топлотни ефекат при температури $T=500\text{ K}$ и константном притиску ($p=\text{const}$). Реактанти и продукти хемијске реакције се налазе у гасовитом стању.

Познате су енталпије формирања при стандардним условима:

$$\Delta H_{\text{fCO}}^0 = -110500 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}, \quad \Delta H_{\text{fCH}_3\text{OH}}^0 = -201200 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

Емпиријске зависности

за c_p (J/molK)

дате су изразима:

$$c_{p\text{H}_2} = 27,28 + 3,26 \cdot 10^{-3} \cdot T + 0,502 \cdot 10^5 \cdot T^{-2}$$

$$c_{p\text{CO}} = 28,41 + 4,10 \cdot 10^{-3} \cdot T + 0,46 \cdot 10^5 \cdot T^{-2}$$

$$c_{p\text{CH}_3\text{OH}} = 15,28 + 105,2 \cdot 10^{-3} \cdot T - 3,104 \cdot 10^{-5} \cdot T^2$$



2. Задатак

На основу Кирхофове једначине биће:

$$\Delta H_{r2} = \Delta H_{r1} + \int_{T_1}^{T_2} \Delta c_p dT$$

при чему стање 1 одговара стандардним условима (298 K) тако да је:

$$\Delta H_{r2} = \Delta H_r^0 + \int_{298}^{500} \Delta c_p dT$$

При стандардним условима промена енталпије посматране хемијске реакције је:

$$\Delta H_r^0 = \Delta H_{\text{FP}}^0 - \Delta H_{\text{FR}}^0 = (-201200) - (-110500 + 2 \cdot 0) = -90.700 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$



2. Задатак

Специфични топлотни капацитет реактанта је:

$$\begin{aligned} \int_{298}^{500} \Delta c_{pR} dT &= \int_{298}^{500} (2 \cdot \Delta c_{pH_2} + \Delta c_{pCO}) dT = \\ &= 2 \cdot \int_{298}^{500} (27,28 + 3,26 \cdot 10^{-3} \cdot T + 0,502 \cdot 10^5 \cdot T^{-2}) dT + \\ &+ \int_{298}^{500} (28,41 + 4,10 \cdot 10^{-3} \cdot T + 0,46 \cdot 10^5 \cdot T^{-2}) dT = \\ &= 2 \cdot \left(27,28 \cdot T + \frac{1}{2} 3,26 \cdot 10^{-3} T^2 - 0,502 \cdot 10^5 \frac{1}{T} \right) \Big|_{298}^{500} + \\ &+ \left(28,41 \cdot T + \frac{1}{2} 4,10 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 + 0,46 \cdot 10^5 \cdot \frac{1}{T} \right) \Big|_{298}^{500} = \\ &= 2 \cdot \left[27,28 \cdot (500 - 298) + \frac{1}{2} 3,26 \cdot 10^{-3} (500^2 - 298^2) - 0,502 \cdot 10^5 \left(\frac{1}{500} - \frac{1}{298} \right) \right] + \\ &+ \left[28,41 \cdot (500 - 298) + \frac{1}{2} 4,10 \cdot 10^{-3} \cdot (500^2 - 298^2) + 0,46 \cdot 10^5 \cdot \left(\frac{1}{500} - \frac{1}{298} \right) \right] = \\ &= 17.690 \frac{\text{J}}{\text{molK}} \end{aligned}$$



2. Задатак

Специфични топлотни капацитет производа реакције је:

$$\begin{aligned} \int_{298}^{500} \Delta c_{pP} dT &= \int_{298}^{500} \Delta c_{pCH_3OH} dT = \\ &= \int_{298}^{500} (15,28 + 105,2 \cdot 10^{-3} \cdot T - 3,104 \cdot 10^{-5} \cdot T^2) dT = \\ &= \left(15,28 \cdot T + \frac{1}{2} 105,2 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - \frac{1}{3} 3,104 \cdot 10^{-5} \cdot T^3 \right) \Big|_{298}^{500} = \\ &= \left[15,28 \cdot (500 - 298) + \frac{1}{2} 105,2 \cdot 10^{-3} \cdot (500^2 - 298^2) - \frac{1}{3} 3,104 \cdot 10^{-5} \cdot (500^3 - 298^3) \right] = \\ &= 10.546 \frac{\text{J}}{\text{molK}} \end{aligned}$$

Тако да је тражени топлотни ефекат хемијске реакције на 298 К:

$$\Delta H_{r2} = \Delta H_r^0 + \int_{298}^{500} \Delta c_p dT = -90700000 - 17690 + 10546 = -90.707 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$