

# 5.2 REAKTIOLÄMMÖN LASKEMINEN JA KOKEELLINEN MÄÄRITTÄMINEN

*TNE/ 2020*

# Kemialliset reaktio – Aina sidoksissa

## Energia – Termokemiaa - Muutokset



- A. Alkuaineiden olomuodoksi tulkitaan niiden pysyvin olomuoto huoneenlämmössä ja normaalipaineessa.
- B. Määritelmän mukaan alkuaineen pysyvimmän olomuodon muodostumislämpö on nolla.
- C. Kun tiedetään tarkasteltavan reaktion lähtöaineiden ja reaktiotuotteiden muodostumislämmöt ( $\Delta H_f$ ):

$$\Delta H_{\text{reaktio}} = \sum \Delta H_f (\text{reaktiotuotteet}) - \sum \Delta H_f (\text{lähtöaineet})$$

missä

$\sum \Delta H_f$  (reaktiotuotteet) = reaktiotuotteiden muodostumislämpöjen summa

ja

$\sum \Delta H_f$  (lähtöaineet) = lähtöaineiden muodostumislämpöjen summa.

# Sidosenergia

Reaktion entalpiamuutos voidaan laskea myös taulukoitujen sidosenergia-arvojen avulla.

Sidosenergia kuvaa sitä energiamäärää (kJ), joka tarvitaan katkaisemaan yksi mooli tiettytyyppisiä kovalenttisia sidoksia.

Sidosenergiaa vastaava määrä energiaa puolestaan vapautuu, kun **ylsi mooli tarkasteltavia sidoksia muodostuu**.

Huom!

Taulukoidut sidosenergian arvot ovat keskimääräisiä arvoja.

Lisäksi taulukkoarvot viittaavat aina **kaasumaisiin** aineisiin.

(Sidosenergioiden avulla laskettu entalpiamuutos ei välttämättä ole siksi aivan tarkka, ja se voi poiketa muodostumislämpöjen avulla lasketusta arvosta.)

Reaktion entalpiamuutos  $\Delta H$  saadaan ratkaistua, kun lähtöaineiden sidosten katkeamiseen tarvittava kokonaisenergiämäärä  $(+\sum(\text{lähtöaineiden sidosenergiat}))$  lasketaan yhteen reaktiotuotteiden muodostuessa vapautuvan kokonaisenergiämäärän kanssa  $(-\sum(\text{reaktiotuotteiden sidosenergiat}))$

Näin ollen:

$$\Delta H_{\text{reaktio}} = [+ \sum (\text{lähtöaineiden sidosenergiat})] + [- \sum (\text{reaktiotuotteiden sidosenergiat})].$$

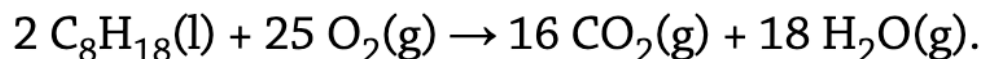
## ESIMERKKI 2

Entalpiamuutoksen laskeminen sidosennergia-arvojen avulla

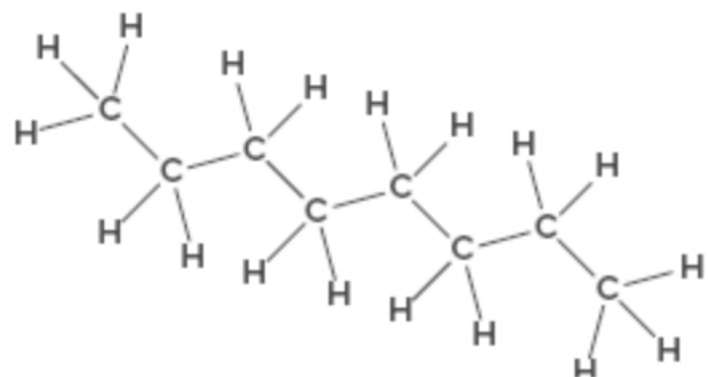
Laske entalpiamuutos, kun yksi mooli bensiinin pääkomponenttia oktaania palaa hiilidioksidiksi ja vedeksi.

### RATKAISU

Oktaanin palamisreaktion tasapainotettu reaktioyhtälö on



Selvitetään, kuinka monta moolia erityyppisiä sidoksia lähtöaineissa ja reaktiotuotteissa on. Paras tapa on piirtää kunkin aineen sidosviivakaavat.



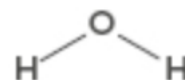
1 mol oktaania  
7 mol C-C sidoksia  
18 mol C-H sidoksia



1 mol happea  
1 mol O=O sidoksia



1 mol hiilidioksidia  
2 mol C=O sidoksia



1 mol vettä  
2 mol O-H sidoksia

Huomioidaan reaktioyhtälön kertoimet ja lasketaan taulukkokirjan ilmoittamien sidosenergia-arvojen avulla, kuinka paljon energiaa tarvitaan lähtöaineiden kaikkien sidosten katkaisemiseen (endoterminen vaihe).

### Lähtöaineiden sidokset

### Sitoutuva energiamäärä

|            |              |                                     |
|------------|--------------|-------------------------------------|
| 2 · 7 mol  | C-C sidoksia | +(14 mol · 348 kJ/mol) = +4 872 kJ  |
| 2 · 18 mol | C-H sidoksia | +(36 mol · 412 kJ/mol) = +14 832 kJ |
| 25 · 1 mol | O=O sidoksia | +(25 mol · 496 kJ/mol) = +12 400 kJ |
| Yhteensä   |              | +32 104 kJ                          |

Lasketaan samalla tavalla, kuinka paljon energiaa vapautuu reaktiotuotteiden sidosten muodostuessa.

| Reaktiotuotteiden sidokset |              | Vapautuva energiamäärä              |
|----------------------------|--------------|-------------------------------------|
| 16 · 2 mol                 | C=O sidoksia | -(32 mol · 743 kJ/mol) = -23 776 kJ |
| 18 · 2 mol                 | O-H sidoksia | -(36 mol · 463 kJ/mol) = -16 668 kJ |
|                            |              | <b>Yhteensä</b> -40 444 kJ          |



Lasketaan yhteen sitoutuva ja vapautuva energiamäärä, jolloin saadaan

$$\Delta H_c = (+32\,104\text{ kJ}) + (-40\,444\text{ kJ}) = -8\,340\text{ kJ}.$$

Tasapainotetun reaktioyhtälön perusteella tämä entalpiamuutos on 2 oktaanimoolia kohti.

Kysytty entalpiamuutos on  $\Delta H_c = \frac{-8\,340\text{ kJ}}{2\text{ mol}} = -4\,170\text{ kJ/mol}$

Vastaus:  $\Delta H_c = -4\,170\text{ kJ}$

# Lämpömäärä ominaislämpökapasiteetilla – REAKTIOLÄMPÖ kalorimetrissä

Entalpiamuutos ratkaistaan kalorimetrisestä mittauksesta saatujen tulosten avulla suureyhtälöstä:

$$\Delta H = c \cdot m \cdot \Delta T$$

missä

$$c = \text{veden ominaislämpökapasiteetti} \left( c = 4,19 \frac{\text{kJ}}{\text{kg} \cdot \text{K}} \right) \text{ (taulukkokirjasta)}$$

$m$  = kalorimetrissä olevan liuoksen massa (kg)

(veden tai liuoksen tilavuus muutetaan massaksi käyttämällä puhtaan veden tiheyden arvoa)

$\Delta T$  = reaktion aikana havaittu suurin lämpötilan erotus (K).