

**TECHNICKÁ UNIVERZITA V KOŠICIACH**  
**HUTNÍCKA FAKULTA**  
**KATEDRA CHÉMIE**

**Emília Sminčáková – Ľudmila Komorová**  
**CVIČENIA Z FYZIKÁLNEJ CHÉMIE PRE POSLUCHÁČOV**  
**BAKALÁRSKEHO ŠTÚDIA**

**KOŠICE 2 006**

## **Predslov**

Učebný text „CVIČENIA Z FYZIKÁLNEJ CHÉMIE PRE POSLUCHÁČOV BAKALÁRSKEHO ŠTÚDIA“ je určený predovšetkým poslucháčom 1.ročníka Hutníckej fakulty, ktorí študujú v dennej alebo externej forme bakalárskeho štúdia.

Obsah pozostáva z dvoch častí. Prvú časť učebného textu tvoria príklady a úlohy z termodynamiky. Každá kapitola obsahuje krátky teoretický úvod, potrebný pre pochopenie výpočtov, niekoľko riešených príkladov a úlohy na riešenie, ktorých výsledky sú uvedené na konci učebného textu. V teoretických úvodoch jednotlivých kapitol sú odvodené alebo len uvedené vzťahy a rovnice používané pri riešení príkladov. Niektoré príklady sú riešené opisne a podrobne, aby poslucháč vnikol do podstaty daného postupu. Vzorové riešené príklady je potrebné prepočítať na kalkulačke.

Druhá časť učebného textu obsahuje termodynamické tabuľky, kde sú uvedené základné termodynamické funkcie.

Emília Sminčáková

## OPAKOVANIE MATEMATICKÝCH VZORCOV

### 1. Integračné vzorce

$$a) \int dx = x + C$$

$$b) \int x^n \cdot dx = \frac{x^{n+1}}{n+1} + C \quad \text{pre } n \neq -1$$

$$c) \int \frac{1}{x} dx = \ln|x| + C$$

### 2. Derivačné vzorce

$$a) [C]' = 0, \text{ kde } C \text{ je konštanta}$$

$$b) [x^n]' = n \cdot x^{n-1}$$

$$c) [e^x]' = e^x$$

$$d) [\ln x]' = \frac{1}{x}$$

Vzorové príklady:

$$a) \int_{100}^{400} T^{-2} \cdot dT = \left[ \frac{T^{-1}}{-1} \right]_{100}^{400} = - \left( \frac{1}{400} - \frac{1}{100} \right) = - ( 2,5 \cdot 10^{-3} - 0,01 ) = - ( - 7,5 \cdot 10^{-3} ) =$$

$$= +7,5 \cdot 10^{-3}$$

$$b) \int_{300}^{400} 7 \cdot T \cdot dT = \frac{7}{2} \cdot ( 400^2 - 300^2 ) = 245\,000$$

$$c) \int_{298}^{700} \frac{50}{T} dT = 50 \cdot \ln \frac{700}{298} = 42,699$$

### 1. Vypočítajte

$$a) \int_{300}^{500} \left( 6 + \frac{2 \cdot 10^3}{T} \right) dT$$

$$b) \int_{200}^{500} T^{-3} \cdot dT$$

$$c) \int_{300}^{1000} ( 7 + 5 \cdot 10^{-3} \cdot T - 7 \cdot 10^5 \cdot T^{-2} ) dT$$

$$d) \int_{300}^{800} ( 4 - 4 \cdot 10^{-3} \cdot T + 8 \cdot 10^5 \cdot T^{-2} ) dT$$

$$e) \int_{298}^{500} 8 \cdot 10^6 \cdot T^{-3} \cdot dT$$

$$f) \int_{298}^{700} (2,1 + 3 \cdot 10^{-3} \cdot T + 4,7 \cdot 10^5 \cdot T^{-2}) \cdot dT$$

## 1. IDEÁLNE PLYNY

Stav plynu charakterizuje jeho objem  $V$ , tlak  $p$  a teplota  $T$ , prípadne jeho hmotnosť  $m$  alebo látkové množstvo  $n$ . Jeden z neznámych údajov o stave plynu môžeme vypočítať pre ideálny plyn podľa plynových zákonov.

### Základné plynové zákony

Ak sa teplota určitého množstva plynu nemení, je závislosť medzi objemom plynu a jeho tlakom vyjadrená vzťahom:

$$p_1 \cdot V_1 = p_2 \cdot V_2 \quad (1.1)$$

index „1“ odpovedá začiatočnému stavu, index „2“ konečnému stavu.

Ak sa tlak určitého množstva plynu nemení, vyjadruje závislosť zmeny objemu plynu na jeho teplote vzťah:

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2} \quad (1.2)$$

Ak sa nemení objem daného množstva plynu, potom závislosť medzi tlakom a teplotou plynu vyjadruje vzťah:

$$\frac{p_1}{T_1} = \frac{p_2}{T_2} \quad (1.3)$$

Spojením vzťahov (1.1), (1.2) a (1.3) dostávame spojený zákon:

$$\frac{p_1 \cdot V_1}{T_1} = \frac{p_2 \cdot V_2}{T_2} \quad (1.4)$$

alebo

$$\frac{p \cdot V}{T} = \frac{p_0 \cdot V_0}{T_0} \quad (1.5)$$

Ak sú veličiny  $p_0$ ,  $V_0$ ,  $T_0$  konštantné a definované pre normálne podmienky zahrňujeme ich do jednej konštanty  $R$ , ktorú nazývame univerzálna plynová konštanta

$$R = \frac{p_0 \cdot V_0}{T_0} = \frac{101325 \cdot 22,4136 \cdot 10^{-3}}{273,15} = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad (1.6)$$

Číselná hodnota konštanty  $R$  závisí od jednotiek, v ktorých vyjadrujeme tlak a objem plynu. Vo vzťahu (1.6) je

$$p_0 = 101\,325 \text{ Pa}$$

$$T_0 = 273,15 \text{ K}$$

$$V_0 = 22,4136 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{Pascal: } \text{Pa} = \text{N m}^{-2}$$

$$\text{Newton: } \text{N} = \text{kg m s}^{-2}$$

$$\text{Joule: } \text{J} = \text{kg m}^2 \text{ s}^{-2}$$

Po dosadení univerzálnej plynovej konštanty  $R$  do vzťahu (1.5) získavame pre látkové množstvo 1 mól stavovú rovnicu ideálneho plynu

$$p \cdot V = R \cdot T \quad (1.7)$$

$$\text{a pre } n \text{ mólov } p \cdot V = n \cdot R \cdot T \quad (1.8)$$

$$\text{resp. } p \cdot V = \frac{m}{M} \cdot R \cdot T \quad (1.9)$$

kde  $p$  – je tlak v Pa

$V$  – objem plynu v  $\text{m}^3$

$m$  – hmotnosť plynu v gramoch

$M$  – mólová hmotnosť v  $\text{g mol}^{-1}$

$R$  – univerzálna plynová konštanta  $\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

$T$  – termodynamická teplota v Kelvinoch  $\text{K}$

Zo stavovej rovnice je možné vypočítať hustotu plynu

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{p \cdot M}{R \cdot T} \quad (1.10)$$

Plynové zákony i stavová rovnica ideálneho plynu platia aj pre zmes plynov, pokiaľ zložky v zmesi spolu chemicky nereagujú. Celkový tlak  $P$  zmesi plynov sa potom rovná súčtu parciálnych tlakov jednotlivých plynných zložiek:

$$P = \sum p_i \quad (1.11)$$

Na vyjadrenie zloženia plynných zmesí je možné použiť objemový zlomok plynnej zložky, ktorý je pre zložku  $i$  daný vzťahom:

$$\varphi_i = \frac{V_i}{V} \quad (1.12)$$

kde  $V_i$  je objem zložky  $i$  a  $V$  je celkový objem sústavy. U ideálnych plynov je objemový zlomok zhodný s mólovým zlomkom:

$$\varphi_i = x_i \quad (1.13)$$

Parciálny tlak ( $p_i$ ) plynnej zložky  $i$  je rovný tlaku, ktorý by mal tento plyn, keby za rovnakých podmienok zaberol celkový objem plynnej zmesi. Parciálny tlak súvisí s celkovým tlakom zmesi vzťahom:

$$p_i = x_i \cdot P = \varphi_i \cdot P = \frac{V_i}{V} \cdot P \quad (1.14)$$

### Príklady

1. Objem plynu, ktorý je pod tlakom 0,097 MPa, je 1,5 dm<sup>3</sup>. Vypočítajte objem tohoto množstva plynu pri tlaku 0,150 MPa, ak je teplota konštantná.

RIEŠENIE:

Do vzťahu (1.1) dosadíme:

začiatkový stav	$p_1 = 0,097 \text{ MPa}$	$V_1 = 1,5 \text{ dm}^3$
-----------------	---------------------------	--------------------------

konečný stav	$p_2 = 0,150 \text{ MPa}$	$V_2 = ?$
--------------	---------------------------	-----------

a vypočítame:

$$V_2 = \frac{p_1 \cdot V_1}{p_2} = \frac{0,097 \text{ MPa} \cdot 1,5 \text{ dm}^3}{0,150 \text{ MPa}} = 0,97 \text{ dm}^3$$

Pri danom zvýšení tlaku klesne objem na 0,97 dm<sup>3</sup>.

2. V nádobe s objemom 0,05m<sup>3</sup> pri teplote 15°C je 0,48 kg oxidu uhoľnatého.

$$M(\text{CO}) = 28 \text{ g mol}^{-1}$$

- a) Vypočítajte látkové množstvo oxidu uhoľnatého.  
b) Vypočítajte tlak CO za predpokladu, že CO sa správa podľa stavovej rovnice ideálneho plynu.

RIEŠENIE:

- a) Látkové množstvo oxidu uhoľnatého je:

$$n_{\text{CO}} = \frac{m_{\text{CO}}}{M_{\text{CO}}} = \frac{480 \text{ g}}{28 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 17,14 \text{ mol}$$

- b) Podľa stavovej rovnice ideálneho plynu pre tlak CO dostaneme:

$$p = \frac{n.R.T}{V} = \frac{17,14.8,314.(15 + 273)}{0,05} = 820811,289\text{Pa}$$

3. V nádobe s objemom 3 l je dusík s hmotnosťou 56 g, pri tlaku 1,66 MPa. Dusík považujte za ideálny plyn a vypočítajte jeho teplotu.

RIEŠENIE:

V príklade sú dané:

$$p = 1,66 \text{ MPa} = 1,66 \cdot 10^6 \text{ Pa}$$

$$V = 3 \text{ l} = 3 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$$

$$M(\text{N}_2) = 28,014 \text{ g mol}^{-1}$$

$$m = 56 \text{ g}$$

Použijeme stavovú rovnicu v tvare:  $p.V = \frac{m.R.T}{M}$

odkiaľ hľadanú hodnotu teploty určíme podľa:

$$T = \frac{p.V.M}{m.R} = \frac{1,66 \cdot 10^6 \cdot 3 \cdot 10^{-3} \cdot 28,014}{56 \cdot 8,314} = 299,64 \text{ K}$$

4. Vypočítajte hustotu vzduchu pri teplote 127°C a tlaku  $9,3 \cdot 10^4 \text{ Pa}$ . Mólová hmotnosť vzduchu je  $29 \text{ g mol}^{-1}$ .

RIEŠENIE:

Využijeme stavovú rovnicu v tvare :  $p.V = \frac{m.R.T}{M}$  odkiaľ

$$p = \frac{m.R.T}{V.M} = \frac{\rho.R.T}{M} \quad \text{čiže pre hľadanú hustotu}$$

$$\text{vzduchu platí: } \rho = \frac{p.M}{R.T} = \frac{9,3 \cdot 10^4 \cdot 29}{8,314 \cdot (127 + 273)} = 810 \text{ g m}^{-3}$$

$$\text{Hustota vzduchu } \rho = 810 \text{ g m}^{-3} = 0,81 \text{ kg m}^{-3}.$$

## 1. ÚLOHY

1. Pri konštantnej teplote je objem ideálneho plynu  $0,95 \text{ dm}^3$  a jeho tlak je  $97\,990 \text{ Pa}$ . Vypočítajte, ako sa zmení objem daného plynu, ak sa tlak zvýši na  $110\,000 \text{ Pa}$ .

2. Pri teplote  $25^{\circ}\text{C}$  má určité množstvo ideálneho plynu objem  $10\text{ m}^3$ . Vypočítajte objem plynu, ak sa jeho teplota zvýši na  $35^{\circ}\text{C}$  a tlak zostane konštantný.
3. Pri konštantnom objeme má ideálny plyn tlak  $700\text{ Pa}$  a teplotu  $-7^{\circ}\text{C}$ . Vypočítajte tlak tohoto plynu, ak sa jeho teplota zvýši na  $97^{\circ}\text{C}$ .
4. Objem plynu pri teplote  $25^{\circ}\text{C}$  a tlaku  $9,7 \cdot 10^4\text{ Pa}$  je  $5\text{ dm}^3$ . Aký bude objem toho istého množstva plynu pri teplote  $55^{\circ}\text{C}$  a tlaku  $1,2 \cdot 10^5\text{ Pa}$ ?
5. Vypočítajte tlak oxidu uhličitého, ktorý je v nádobe o objeme  $0,2\text{ m}^3$  pri teplote  $15^{\circ}\text{C}$  s hmotnosťou  $1,2\text{ kg}$  za predpokladu ideálneho správania sa plynu. Mólová hmotnosť oxidu uhličitého je  $44\text{ g mol}^{-1}$ .
6. V nádrži s objemom  $40\text{ l}$  je pri teplote  $300\text{ K}$  kyslík pod tlakom  $1\text{ MPa}$ . Aká je jeho hmotnosť?  $M(\text{O}_2) = 32 \cdot 10^{-3}\text{ kg mol}^{-1}$ .
7. V nádobe s objemom  $8,3\text{ m}^3$  je vodík s hmotnosťou  $0,2\text{ kg}$  a teplotou  $27^{\circ}\text{C}$ . Vypočítajte jeho tlak. Mólovú hmotnosť vodíka vyhľadajte v prílohe.
8. Uzatvorená nádoba o objeme  $0,5\text{ m}^3$  je naplnená oxidom uhličitým. Vypočítajte hmotnosť a látkové množstvo oxidu uhličitého, ktorý je v nádobe pri teplote  $270^{\circ}\text{C}$  a tlaku  $101\,325\text{ Pa}$ .  $M(\text{CO}_2) = 44\text{ g mol}^{-1}$ .
9. Zmes plynov, ktorá je pod vonkajším tlakom  $9,77 \cdot 10^5\text{ Pa}$ , má nasledujúce zloženie:  $70\%$  obj. dusíka a  $30\%$  obj. vodíka. Vypočítajte parciálne tlaky daných plynných zložiek.
10. Zmes plynov uzavretá v nádobe s konštantným objemom obsahuje kyslík a oxid siričitý. Vypočítajte zloženie plynnej zmesi v % obj., ak parciálne tlaky zložiek sú  $p_{\text{O}_2} = 207\text{ kPa}$  a  $p_{\text{SO}_2} = 192\text{ kPa}$ .
11. Vypočítajte parciálny tlak kyslíka vo vzduchu, ak pri celkovom tlaku  $1,01 \cdot 10^5\text{ Pa}$  jeho obsah je  $21\%$  obj.



12. Svietiplyn obsahuje 7% obj. oxidu uhoľnatého. Vypočítajte parciálny tlak CO, ak celkový tlak svietiplynu je 0,12 MPa.
13. Parciálny tlak kyslíka vo vzduchu za normálnych podmienok je 21 278 Pa. Vypočítajte objem kyslíka, ktorý sa nachádza v 10 m<sup>3</sup> vzduchu.
14. Vypočítajte hustotu vodíka pri teplote 0°C a tlaku  $9,8 \cdot 10^4$  Pa.
15. Hustota acetónových pár je 1 860 g m<sup>-3</sup> pri teplote 87°C a tlaku 95 990 Pa. Vypočítajte mólovú hmotnosť acetónu.

## 2. POUŽITIE PRVEJ VETY TERMODYNAMICKEJ NA JEDNODUCHÉ PROCESY

Matematická formulácia prvej vety termodynamickej pre jednoduchú sústavu sa dá vyjadriť rovnicou :

$$dU = dq + dw \quad (2.1)$$

kde  $U$  je vnútorná energia,  $q$  je prijaté teplo a  $w$  je objemová práca.

Diferenciál vnútornej energie je úplný, zatiaľ čo  $dq$  a  $dw$  nie sú úplné diferenciály. Vnútorná energia je termodynamická funkcia, ale teplo a objemová práca (aj iné druhy práce) sú termodynamické veličiny. Podstatou prvej vety termodynamickej je úplnosť diferenciálu vnútornej energie, t.j. nezávislosť  $\Delta U$  od spôsobu, ktorým zmena stavu sústavy prebieha.

Proces je vratný (reverzibilný), keď v dôsledku jeho priebehu nenastávajú trvalé zmeny ani v sústave, ani v okolí. Vratný proces prebieha tak, že sústava je v každom okamihu v rovnováhe so silami, ktoré na ňu pôsobia. Procesy, ktoré nespĺňajú tieto podmienky, sú nevratné (ireverzibilné).

Pri mechanickej interakcii sústavy s okolím sa jej objem mení a medzi sústavou a okolím sa vymieňa energia tak, že sa koná objemová práca  $w$  :

$$w = - \int_{V_1}^{V_2} p \cdot dV \quad (2.2)$$

kde  $V_1$  je východiskový a  $V_2$  konečný objem sústavy. Ak  $V_2 > V_1$ , ide o objemovú expanziu, pri ktorej sústava prekonáva odpor okolia, energiu odovzdáva okoliu ( $w < 0$ ) a do rovnice (2.2) za tlak dosadzujeme okamžitý tlak, ktorým okolie pôsobí na sústavu. Pri kompresii ( $V_2 < V_1$ ) okolie prekonáva odpor sústavy, sústava prijíma energiu od okolia ( $w > 0$ ) a za tlak  $p$  v rovnici (2.2) dosadzujeme okamžitý tlak, ktorým sa sústava bráni zmene svojho stavu. Práca je prekonávanie odporu, jej diferenciál nie je úplný. Preto pri integrovaní rovnice (2.2) je potrebné vedieť, ako sa v priebehu procesu mení tlak s objemom.

**Entalpia**  $H$  jednoduchej sústavy je definovaná ako súčet vnútornej energie a objemovej (vonkajšej mechanickej) práce pri konštantnom tlaku:

$$H = U + p \cdot V \quad (2.3)$$

Je to termodynamická funkcia. Prvú vetu termodynamickú možno pomocou entalpie vyjadriť rovnicou:

$$dH = dq_p \quad (2.4)$$

Izochorická mólová tepelná kapacita  $C_v$  je intenzitná stavová veličina definovaná rovnicou :

$$C_v = (\partial U / \partial T)_v \quad (2.5)$$

Izobarická mólová tepelná kapacita je definovaná takto :

$$C_p = (\partial H / \partial T)_p \quad (2.6)$$

Vzťah medzi  $C_p$  a  $C_v$  pre stavovo ideálny plyn vyjadruje rovnica :

$$C_p - C_v = R \quad (2.7)$$

Tepelné kapacity reálnych plynov, kvapalín a tuhých látok sa spravidla zisťujú experimentálne a ich závislosť od teploty sa vyjadruje rovnicami tvaru:

$$C_p = a + b.T + c.T^2 + \dots \quad (2.8)$$

$$C_p = a + b.T + c.T^{-2} \quad (2.9)$$

V úzkom teplotnom intervale sa veľmi často používajú stredné mólové tepelné kapacity  $\bar{C}_p$  resp.  $\bar{C}_v$  :

$$\bar{C}_p = \frac{1}{T_2 - T_1} \int_{T_1}^{T_2} C_p \cdot dT \quad (2.10)$$

kde  $T_2$  je konečná teplota

$T_1$  je začiatková teplota

Pri izochorickom procese jednoduchá sústava nekoná objemovú prácu :

$$\delta q = dU \quad (dV = 0)$$

$$q_v = \Delta U \quad (2.11)$$

Teplo pri izochorickom procese má vlastnosti termodynamickkej funkcie a dá sa vypočítať, ak poznáme závislosť izochorickkej tepelnej kapacity od teploty :

$$q_v = \Delta U = n \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_v \cdot dT \quad (2.12)$$

kde  $n$  je látkové množstvo látky v sústave,  $T_1$  – začiatková teplota a  $T_2$  – konečná teplota.

Pri izobarickom procese prvú vetu termodynamickú možno vyjadriť rovnicou:

$$\Delta U = q + w \quad (2.13)$$

Objemová práca

$$w = - p \cdot (V_2 - V_1) \quad (2.14)$$

i teplo

$$q_p = \Delta H \quad (dp = 0) \quad (2.15)$$

pri tomto procese majú vlastnosti termodynamickej funkcie a zmenu entalpie sústavy môžeme vypočítať podľa rovnice :

$$\Delta H = n \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_p \cdot dT \quad (2.16)$$

Pri izotermickom procese jednoduchá sústava vymieňa energiu s okolím konaním objemovej práce a výmenou tepla :

$$q = \Delta U - w = C_v \cdot dT + \int_{v_1}^{v_2} p \cdot dV \quad (dT = 0) \quad (2.17)$$

Pre ideálny plyn, ktorého vnútorná energia závisí len od teploty, platí:

$$q = -w \quad (dT = 0, \text{ ideálny plyn}) \quad (2.18)$$

Zmenu entalpie pri izotermickom procese možno vypočítať podľa rovnice:

$$\Delta H = q + \int_{p_1}^{p_2} V \cdot dp \quad (dT = 0) \quad (2.19)$$

Jednoduchá sústava pri adiabatickom procese mení svoju vnútornú energiu len v dôsledku konania objemovej práce :

$$\begin{aligned} dU &= dw & (q = 0) \\ n \cdot C_v \cdot dT &= -p \cdot dV & (q = 0) \end{aligned} \quad (2.20)$$

Objemová práca pri adiabatickom procese má vlastnosti termodynamickej funkcie a rovná sa zmene vnútornej energie sústavy :

$$\Delta U = w \quad (q = 0) \quad (2.21)$$

t.j. jej hodnota závisí len od východiskového a konečného stavu sústavy. Pre zmenu vnútornej energie platí tiež :

$$\Delta U = n \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_v \cdot dT \quad (q = 0) \quad (2.22)$$

Ak sústavu tvorí ideálny plyn, pre vratný adiabatický proces platia rovnice :

$$p \cdot V^\kappa = \text{konšt} \quad (2.23)$$

$$T \cdot V^{(\kappa-1)} = \text{konšt} \quad (2.24)$$

$$T \cdot p^{(1-\kappa)/\kappa} = \text{konšt} \quad (2.25)$$

kde  $\kappa$  (kapa) je Poissonova konštanta :

$$\kappa = C_p / C_v \quad (2.26)$$

Objemová práca pri adiabatickom procese sa dá popísať rovnicami:

$$w = n.R.(T_2 - T_1) / (\kappa - 1) \quad (2.27)$$

$$w = (p_2.V_2 - p_1.V_1) / (\kappa - 1) \quad (q = 0, \text{ ideálny plyn}) \quad (2.28)$$

Dej, pri ktorom je konečný stav sústavy totožný s východiskovým stavom, sa nazýva kruhový dej (cyklický). Celková práca  $w'$  vykonaná pracovnou látkou počas jedného cyklu sa rovná celkovému teplu

$$Q = Q_1 - Q_2 \quad (2.29)$$

ktoré pracovná látka prijme počas cyklu od okolia, pričom  $Q_1$  je teplo, ktoré pracovná látka prijme od ohrievača počas cyklu a  $Q_2$  je teplo, ktoré počas cyklu odovzdá chladiču. Celková zmena vnútornej energie pracovnej látky je po ukončení jedného cyklu nulová ( $\Delta U = 0$ ).

**Účinnosťou** kruhového deja rozumieme podiel práce  $w'$  vykonanej pracovnou látkou a tepla  $Q_1$  prijatého od ohrievača:

$$\eta = \frac{w'}{Q_1} = \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1} \quad (2.30)$$

## Príklady

1. Sústavu obsahujúcu 10 mólov ideálneho plynu vratne a izotermicky pri teplote 300 K komprimujeme z východiskového tlaku 1 000 Pa na tlak 3 000 Pa. Vypočítajte energiu, ktorú okolie pri tomto procese odovzdá sústave.

RIEŠENIE:

Podľa rovnice (2.2) :

$$w = - \int_{V_1}^{V_2} p.dV \quad (1)$$

Pretože ide o vratný dej, závislosť tlaku od objemu vyjadruje rovnica :

$$p = \frac{n.R.T}{V} \quad (2)$$

Po dosadení rovnice (2) do rovnice (1) dostávame :

$$w = - n.R.T. \int_{V_1}^{V_2} \frac{1}{V} dV = - n.R.T. \ln \frac{V_2}{V_1} \quad (3)$$

Začiatočný objem  $V_1$  aj konečný objem  $V_2$  v rovnici (3) vyjadríme pomocou stavovej rovnice ideálneho plynu (teplota začiatočného a konečného stavu je tá istá) :

$$w = - n.R.T.\ln \frac{p_1}{p_2} \quad (4)$$

Podľa tejto rovnice (4) pre  $w$  dostávame :

$$w = - 10.8,314.300.\ln \frac{1000}{3000} = + 2,74.10^4 \text{ J}$$

Hodnota  $w$  je kladná, pretože sústava túto energiu od okolia prijala. Vnútoraná energia ideálneho plynu závisí len od teploty a podľa rovnice (2.18) platí :

$$q = - w = - 2,74.10^4 \text{ J}$$

2. Desať mólov ideálneho plynu ( $C_p = 5/2 R$ ) expanduje vratne zo začiatočného objemu  $1 \text{ m}^3$  pri teplote  $500 \text{ K}$  na objem  $2 \text{ m}^3$ :

a) izotermicky;

b) adiabaticky.

Vypočítajte hodnoty  $w$ ,  $q$ ,  $\Delta U$ ,  $\Delta H$ , konečný tlak a konečnú teplotu.

RIEŠENIE:

a) Začiatočný tlak vypočítame podľa stavovej rovnice :

$$p_1 = n.R.T / V_1 = 10.8,314.500 / 1 = 41\,570 \text{ Pa}$$

Pri izotermickej expanzii pre konečný tlak dostávame :

$$p_2 = n.R.T / V_2 = 10.8,314.500 / 2 = 20\,785 \text{ Pa}$$

a pre objemovú prácu :

$$w = - n.R.T.\ln (V_2 / V_1) = - 10.8,314.500 .\ln (2/1) = -28\,814,1 \text{ J}$$

Vnútoraná energia pri izotermickom procese sa nemení:

$$\Delta U = 0 \quad (dT = 0, \text{ ideálny plyn})$$

Podľa prvej vety termodynamickej :

$$q = - w = 28\,814,1 \text{ J}$$

Entalpia pri izotermickej expanzii ideálneho plynu sa takisto nemení :  $\Delta H = 0$

b) Konečný tlak pri vratnom adiabatickom procese vypočítame podľa rovnice (2.23):

$$p_1 V_1^\kappa = p_2 V_2^\kappa$$

$$\text{z ktorej } p_2 = p_1 \cdot (V_1 / V_2)^\kappa \quad (1)$$

Podľa definície pre Poissonovu konštantu  $\kappa$  ideálneho plynu dostávame :

$$\kappa = C_p / C_v = C_p / (C_p - R) = (5/2 R) / (5/2 R - R) = 5 / 3$$

a konečný tlak podľa (1) má hodnotu :

$$p_2 = 41\,570 \cdot (1/2)^{5/3} = 13\,093,7 \text{ Pa}$$

Konečnú teplotu vypočítame pomocou známej hodnoty konečného tlaku  $p_2$  a konečného objemu  $V_2$  podľa stavovej rovnice :

$$T_2 = \frac{p_2 \cdot V_2}{n \cdot R} = \frac{13\,093,7 \cdot 2}{10,8,314} = 314,9 \text{ K}$$

Podľa rovnice (2.27) na základe známych hodnôt  $T_1$  a  $T_2$  pre prácu dostávame :

$$w = n \cdot R \cdot (T_2 - T_1) / (\kappa - 1) = 10,8,314 \cdot (314,9 - 500) / (5/3 - 1) = -23\,083,8 \text{ J}$$

Pri adiabatickom procese sa zmena vnútornej energie podľa (2.21) rovná práci :

$$\Delta U = w = -23\,083,8 \text{ J}$$

Pre zmenu entalpie podľa jej definície platí :

$$\Delta H = \Delta U + (p_2 \cdot V_2 - p_1 \cdot V_1)$$

$$\Delta H = -23\,083,8 + (13\,093,7 \cdot 2 - 41\,570 \cdot 1)$$

$$\Delta H = -38\,466,4 \text{ J}$$

3. Päť mólov stavovo ideálneho oxidu uhličitého vratne a izobaricky ohrejeme z teploty 300 K na teplotu 400 K. Vypočítajte  $w$ ,  $q$ ,  $\Delta U$  a  $\Delta H$ . Závislosť izobarickej mólovej tepelnej kapacity stavovo ideálneho  $\text{CO}_2$  od teploty vyhľadajte v prílohe.

RIEŠENIE :

Pri izobarickom ohriatí podľa rovnice (2.14) platí :

$$w = -p \cdot (V_2 - V_1) \tag{1}$$

Konečný a začiatkový objem v tejto rovnici vyjadríme pomocou stavovej rovnice ideálneho plynu :

$$w = -p \cdot (n \cdot R \cdot T_2 / p_2 - n \cdot R \cdot T_1 / p_1) = -n \cdot R \cdot (T_2 - T_1) \tag{2}$$

pretože pri izobarickom procese  $p_1 = p_2 = p$ . Teda objemová práca v tomto prípade závisí len od začiatkovej teploty  $T_1$  a konečnej teploty  $T_2$ , má vlastnosti stavovej funkcie a pre jej hodnotu vychádza :

$$w = -5,8,314 \cdot (400 - 300) = -4\,157 \text{ J}$$

Hodnotu  $q$  a  $\Delta H$  vypočítame podľa rovnice (2.16):

$$\Delta H = q_p = n \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_p \cdot dT \tag{3}$$

V tabuľkách vyhľadáme  $C_p$  v závislosti od teploty pre  $\text{CO}_2$  :

$$C_p = 44,2 + 9,05 \cdot 10^{-3} \cdot T - 8,55 \cdot 10^{-5} \cdot T^{-2} \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\begin{aligned}\Delta H = q_p &= 5 \cdot \int_{300}^{400} (44,2 + 9,05 \cdot 10^{-3} \cdot T - 8,55 \cdot 10^{-5} \cdot T^2) dT = \\ &= 5 \cdot \left[ 44,2 \cdot (400 - 300) + \frac{9,05 \cdot 10^{-3}}{2} \cdot (400^2 - 300^2) - 8,55 \cdot 10^{-5} \cdot (400^3 - 300^3) \right] = \\ &= 20\,121,3 \text{ J}\end{aligned}$$

Pre zmenu vnútornej energie po dosadení číselných hodnôt  $q$  a  $w$  dostávame :

$$\Delta U = q + w = 20\,121,3 - 4\,157 = 15\,964,3 \text{ J.}$$

4. Vypočítajte množstvo tepla, ktoré je potrebné dodať, aby sme ohriali 0,5 kg cínu z teploty 27°C na teplotu 227°C pri konštantnom tlaku. Potrebné údaje k výpočtu vyhľadajte v prílohách.

RIEŠENIE:

Množstvo tepla potrebného na ohrev vypočítame podľa vzťahu (2.16) teda:

$$q_p = n \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_p \cdot dT \quad (1)$$

V príklade sú dané:

$$m = 0,5 \text{ kg} = 500 \text{ g}$$

$$T_1 = 27 + 273 = 300 \text{ K}$$

$$T_2 = 227 + 273 = 500 \text{ K}$$

Z prílohy 3 vypíšeme izobarickú mólovú tepelnú kapacitu cínu:

$$C_p = 21,62 + 18,18 \cdot 10^{-3} \cdot T \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

a z prílohy 1 mólovú hmotnosť cínu:  $M(\text{Sn}) = 118,69 \text{ g mol}^{-1}$ .

$$\text{Látkové množstvo } n = \frac{m}{M} = \frac{500 \text{ g}}{118,69 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 4,2 \text{ mol}$$

Množstvo tepla vypočítame podľa vzťahu (1):

$$\begin{aligned}q_p &= 4,2 \cdot \int_{300}^{500} (21,62 + 18,18 \cdot 10^{-3} \cdot T) dT = 4,2 \cdot \left[ 21,62 \cdot (500 - 300) + \frac{18,18 \cdot 10^{-3}}{2} \cdot (500^2 - 300^2) \right] \\ &= 4,2 \cdot (4\,324 + 1\,454,4) = 24\,269,28 \text{ J}\end{aligned}$$

Na ohrev cínu je potrebné dodať 24 269,28 J tepla.



## 2. ÚLOHY

1. Sústava látok prijala od okolia 2,7 kJ tepla a súčasne vykonala prácu 1,2 kJ. Určte, ako sa zmenila vnútorná energia sústavy.
2. Vypočítajte účinnosť tepelného stroja, ktorý pracuje podľa Carnotovho cyklu, ak teplota ohrievača je 400 K a teplota chladiča 300 K.
3. Tepelný stroj prijal počas jedného cyklu z ohrievača teplo 100 MJ a odovzdal chladiču teplo 60 MJ. Aká je účinnosť tepelného stroja?
4. Ideálny plyn pri vratnej izotermickej kompresii z objemu  $10 \text{ m}^3$  na objem  $1 \text{ m}^3$  pri teplote 300 K odovzdal okoliu  $1 \cdot 10^4 \text{ J}$  energie vo forme tepla. Vypočítajte, aké látkové množstvo plynu bolo komprimované.
5. Jeden mól ideálneho plynu pri reverzibilnej izotermickej expanzii zväčší svoj objem desaťkrát. Vykoná pri tom prácu  $w = -7140 \text{ J}$ . Východiskový tlak je 101,3 kPa. Vypočítajte, aká je teplota plynu a jeho východiskový objem.
6. V nádobe o objeme 10 litrov je jednoatómový plyn pri teplote 300 K a tlaku 101 325 Pa. Hodnota pomeru mólovej tepelnej kapacity pri konštantnom tlaku a konštantnom objeme pre tento plyn je 1,66 a hodnota  $C_V = 3/2R$ .
  - a) vypočítajte, aká bude teplota plynu po adiabatickom stlačení na objem 1 liter;
  - b) vypočítajte, aká práca je spojená s touto zmenou.
7. Vypočítajte prácu, teplo a zmenu vnútornej energie izotermickej expanzie 5 mólov neónu z objemu  $2 \text{ m}^3$  na objem  $20 \text{ m}^3$ , pri teplote 350 K.
8. Vodík má hmotnosť 5 kg a teplotu  $0^\circ\text{C}$ . O koľko sa zvýši jeho teplota pri izobarickom procese, ak vykoná prácu 37,4 kJ?
9. Vo valci sú 2 kg vzduchu pri teplote  $20^\circ\text{C}$ . Akú prácu vykoná vzduch pri jeho izobarickom ohriati na  $120^\circ\text{C}$ ? Hmotnosť jedného mólu vzduchu je 29 g.

10. Závislosť izobarickej mólovej tepelnej kapacity oxidu uhličitého od teploty udáva rovnica  $C_p = 44,2 + 9,05 \cdot 10^{-3} \cdot T - 8,55 \cdot 10^{-5} \cdot T^2$  J K<sup>-1</sup> mol<sup>-1</sup>

Desať mólov CO<sub>2</sub> vratne izochoricky ohrejeme z teploty 300 K na teplotu 400 K. Vypočítajte prácu, teplo, zmenu entalpie a zmenu vnútornej energie .

11. Závislosť izobarickej mólovej tepelnej kapacity dusíka od teploty udáva rovnica:

$C_p = 27,91 + 4,27 \cdot 10^{-3} \cdot T$  J K<sup>-1</sup> mol<sup>-1</sup> . Vypočítajte prácu, teplo, zmenu entalpie a zmenu vnútornej energie, ak 1 mol tohoto plynu vratne izobaricky ohrejeme z teploty 400 K na teplotu 500 K.

12. Vypočítajte množstvo tepla potrebné na ohrev 5 kg sulfidu antimonitého z teploty 300 K na teplotu 700 K. Závislosť izobarickej mólovej tepelnej kapacity od teploty pre Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> udáva rovnica :  $C_p = 101,98 + 60,63 \cdot 10^{-3} \cdot T$  J K<sup>-1</sup> mol<sup>-1</sup> ;  
M (Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) = 339,692 g mol<sup>-1</sup>

13. Vypočítajte spotrebu tepla, potrebného na ohrev 1 kg medi z teploty 25°C na teplotu 1 000°C. Potrebné termodynamické údaje vyhľadajte v tabuľkách.

14. Vypočítajte množstvo tepla, ktoré je potrebné na ohriatie 300 g sulfidu horečnatého z teploty 25°C na teplotu 900°C. Potrebné údaje vyhľadajte v tabuľkách.

15. Vypočítajte množstvo tepla, ktoré je potrebné dodať, aby sme ohriali 1 kg striebra z teploty 300 K na 1 000 K. Závislosť izobarickej mólovej tepelnej kapacity striebra od teploty odčítajte z prílohy. M(Ag) = 107,9 g mol<sup>-1</sup> .

16. Izobarická mólová tepelná kapacita tantalu pri teplote 500 K je 26,835 J K<sup>-1</sup> mol<sup>-1</sup> a pri teplote 800 K je 28,08 J K<sup>-1</sup> mol<sup>-1</sup>. V teplotnom intervale < 500 K; 800 K > nenastáva v tantale nijaká fázová premena.

a) za predpokladu lineárnej závislosti  $C_p = a + b \cdot T$  určte koeficienty rovnice a a b;

b) vypočítajte izobarickú mólovú tepelnú kapacitu tantalu pri teplote 700 K.

17. Závislosť izobarickej mólovej tepelnej kapacity ZnS od teploty udáva rovnica

$$C_p = 50,95 + 5,2 \cdot 10^{-3} \cdot T - 5,7 \cdot 10^{-5} \cdot T^2$$

- a) Vypočítajte pravú izobarickú mólovú tepelnú kapacitu ZnS pri teplote 727°C.
- b) Vypočítajte strednú izobarickú mólovú tepelnú kapacitu v intervale teplôt od 0°C do 727°C.

18. Nájdite hodnotu strednej izobarickej mólovej tepelnej kapacity Cl<sub>2</sub> v intervale teplôt od 350 K do 450 K, ak izochorická mólová tepelná kapacita je vyjadrená rovnicou :

$$C_v = 28,646 + 0,25 \cdot 10^{-3} \cdot T - 2,85 \cdot 10^{-5} \cdot T^2 \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} .$$

19. Nájdite hodnoty strednej izobarickej a izochorickej mólovej tepelnej kapacity dusíka v intervale teplôt od 300 K do 400 K, ak izobarická mólová tepelná kapacita dusíka je vyjadrená rovnicou :  $C_p = 27,91 + 4,27 \cdot 10^{-3} \cdot T \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ .

### 3. TERMOCHÉMIA

Termochémia sa zaoberá tepelnou bilanciou chemických, fázových premien alebo zmien koncentrácií. Každú chemickú reakciu, fázovú premenu alebo zmenu koncentrácie v sústave sprevádza uvoľňovanie alebo pohlcovanie tepla; podľa toho nazývame tieto procesy exotermické alebo endotermické.

Tepelný efekt chemickej reakcie sa nazýva reakčné teplo a definuje sa ako maximálne uvoľnené alebo prijaté teplo. Podľa podmienok za akých sa chemická reakcia uskutočňuje rozlišujeme reakčné teplo za stáleho tlaku:

$$q_p = \Delta H \quad (3.1)$$

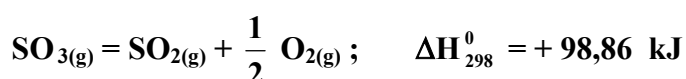
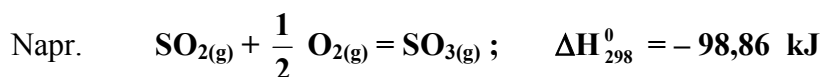
a reakčné teplo za stáleho objemu:

$$q_v = \Delta U \quad (3.2)$$

Ak sú zmeny vnútornej energie alebo entalpie záporné, hovoríme o exotermických procesoch, ak sú kladné, ide o endotermické procesy.

V termochémii sa hodnoty reakčných tepiel vzťahujú vždy na určité podmienky definované tlakom a teplotou a píše sa k príslušnej chemickej reakcii, v ktorej musí byť uvedené v akom skupenstve sa reaktanty a produkty nachádzajú .

**1. zákon termochémie** znie: Reakčné teplá priamej a protismernej reakcie sú pri rovnakej teplote okrem znamienka rovnaké.



**2. zákon termochémie** nazývaný aj Hessov zákon znie: Tepelný efekt reakcie nezávisí od spôsobu jej priebehu, ale iba od začiatočného a konečného stavu.

Hessov zákon umožňuje vypočítať reakčné teplo chemickej reakcie zo štandardných zlučovacích entalpií produktov a reaktantov alebo sa reakčné teplo dá zmerať v kalorimetri.

Ak sa meranie reakčného tepla uskutočňuje v kalorimetri pri konštantnom objeme, kde sa nevykonáva žiadna expanzná práca, nameraná hodnota sa rovná priamo zmene vnútornej energie chemickej reakcie. Podľa Hessovho zákona pre tento proces platí:

$$\Delta U = \Sigma \Delta U_{\text{produktov}} - \Sigma \Delta U_{\text{reaktantov}} \quad (3.3)$$

Ak sa meranie reakčného tepla uskutočňuje v kalorimetri pri konštantnom tlaku potom hodnota zmeny entalpie chemickej reakcie podľa Hessovho zákona je rovná:

$$\Delta H = \sum \Delta H_{\text{produktov}} - \sum \Delta H_{\text{reaktantov}} \quad (3.4)$$

Súvislosť medzi  $\Delta H$  a  $\Delta U$  uvádza definičná rovnica:

$$\Delta H = \Delta U + P \cdot \Delta V \quad (3.5)$$

Ak sa na reakcii zúčastňuje plyn, alebo pri chemickej reakcii vzniká plynný produkt, potom pri konštantnej teplote bude maximálna hodnota expanznej práce závisieť od zmeny látkového množstva plynu  $\Delta n$  pri chemickej reakcii:

$$\Delta H = \Delta U + RT \cdot \Delta n \quad (3.6)$$

kde  $P \cdot \Delta V = RT \cdot \Delta n$

$$\Delta n = \sum n_{\text{plyn. produktov}} - \sum n_{\text{plyn. reaktantov}} \quad (3.7)$$

Ak chemickou reakciou vzniká zlúčenina z prvkov, zmena entalpie sa označuje ako zlučovacia entalpia. Zlučovacia entalpia závisí od teploty, od tlaku, látkového množstva a stavu reaktantov a stavu produktov chemickej reakcie. Ak pri chemickej reakcii vzniká 1 mól zlúčeniny z prvkov pri takých podmienkach, že zlúčenina aj prvky sú vo svojich štandardných stavoch, reakčné teplo nazývame štandardná mólová zlučovacia entalpia a označujeme ju symbolom  $\Delta H^0$ .

Podľa medzinárodnej dohody sa štandardným mólovým zlučovacím entalpiám **prvkov** pri teplote 298 K pripisuje **nulová** hodnota. Zmeny entalpií chemických reakcií vypočítané zo štandardných zlučovacích entalpií uvedených v prílohách platia iba pri teplote 298 K.

V praxi však potrebujeme vypočítať zmeny entalpií chemických reakcií pri rozličných teplotách. Závislosť reakčného tepla od teploty vyjadruje **Kirchhoffov zákon**:

$$\left( \frac{d\Delta H^0}{dT} \right)_p = \Delta C_p \quad (3.8)$$

kde  $\Delta C_p = (\sum C_p)_{\text{produktov}} - (\sum C_p)_{\text{reaktantov}}$

Po integrácii tejto rovnice v intervale teplôt  $T_1$  až  $T_2$  platí:

$$\Delta H_{T_2}^0 = \Delta H_{T_1}^0 + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p \cdot dT \quad (3.9)$$

Izobarické mólové tepelné kapacity sú funkciou teploty, preto:

$$\Delta C_p = \Delta a + \Delta bT + \Delta cT^{-2} \quad (3.10)$$

Po dosadení tohoto vzťahu do rovnice ( 3.9 ) a po jej integrovaní v teplotnom intervale  $< T_1; T_2 >$  dostávame všeobecný tvar **Kirchhoffovej** rovnice:

$$\Delta H_{T_2}^0 = \Delta H_{T_1}^0 + \Delta a(T_2 - T_1) + \frac{\Delta b}{2}(T_2^2 - T_1^2) - \Delta c\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right) \quad (3.11)$$

Absolútnu hodnotu entalpie nepoznáme, preto v praxi pracujeme iba s relatívnymi hodnotami, ktoré vzťahujeme na štandardné podmienky pri tlaku 101 325 Pa a teplote 298 K. Pri týchto podmienkach možno rovnicu ( 3.11 ) vyjadriť v tvare:

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^T (\Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^{-2}) dT \quad (3.12)$$

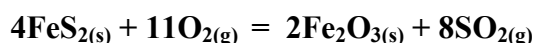
Rovnica ( 3.12 ) vyjadruje všeobecnú závislosť zmeny štandardnej entalpie chemickej reakcie od teploty t.j.  $\Delta H_T^0 = f(T)$ , ktorú môže vyjadrovať aj rovnica:

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_0^0 + \int_0^T (\Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^{-2}) dT \quad (3.13)$$

kde  $\Delta H_0^0$  vypočítame zo zmeny štandardnej entalpie reakcie pri teplote 298 K.

## Príklady

1. Vypočítajte zmenu štandardnej entalpie reakcie pri teplote 298 K



RIEŠENIE:

Podľa Hessovho zákona  $\Delta H_{298}^0 = \sum \Delta H_{298}^0(\text{produktov}) - \sum \Delta H_{298}^0(\text{reaktantov})$

Potom platí  $\Delta H_{298}^0 = ( 2 \cdot \Delta H_{298}^0(\text{Fe}_2\text{O}_3) + 8 \cdot \Delta H_{298}^0(\text{SO}_2) ) - ( 4 \cdot \Delta H_{298}^0(\text{FeS}_2) + 11 \cdot \Delta H_{298}^0(\text{O}_2) )$

Štandardné mólové zlučovacie entalpie  $\text{FeS}_2$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  a  $\text{SO}_2$  vypíšeme z prílohy 4:

– pre  $\text{FeS}_2$   $\Delta H_{298}^0 = -171\,630 \text{ J mol}^{-1}$

– pre  $\text{Fe}_2\text{O}_3$   $\Delta H_{298}^0 = -821\,710 \text{ J mol}^{-1}$

– pre  $\text{SO}_2$   $\Delta H_{298}^0 = -296\,950 \text{ J mol}^{-1}$

– pre  $\text{O}_2$   $\Delta H_{298}^0 = 0$

$$\Delta H_{298}^0 = [ 2 \cdot (-821\,710) + 8 \cdot (-296\,950) ] - [ 4 \cdot (-171\,630) + 11 \cdot 0 ] =$$



– NH <sub>3(g)</sub>	$C_p = 37,37 + 18,69 \cdot 10^{-3}T - 6,49 \cdot 10^5 T^{-2}$	J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup>	⟨298K;2400K⟩
– N <sub>2(g)</sub>	$C_p = 27,91 + 4,27 \cdot 10^{-3}T$	J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup>	⟨298K;2500K⟩
– H <sub>2(g)</sub>	$C_p = 27,32 + 3,27 \cdot 10^{-3}T + 0,5 \cdot 10^5 \cdot T^{-2}$	J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup>	⟨298K;3000K⟩

RIEŠENIE:

a) Použijeme Kirchhoffov zákon:

$$\Delta H_{500}^0 = \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^{500} \Delta C_p \cdot dT$$

$$\Delta C_p = \Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^{-2}$$

$$\Delta a = 2 \cdot a_{\text{NH}_3} - a_{\text{N}_2} - 3 \cdot a_{\text{H}_2} = 2 \cdot 37,37 - 27,91 - 3 \cdot 27,32 = -35,13$$

$$\Delta b = 2 \cdot b_{\text{NH}_3} - b_{\text{N}_2} - 3 \cdot b_{\text{H}_2} = (2 \cdot 18,69 - 4,27 - 3 \cdot 3,27) \cdot 10^{-3} = 23,3 \cdot 10^{-3}$$

$$\Delta c = 2 \cdot c_{\text{NH}_3} - c_{\text{N}_2} - 3 \cdot c_{\text{H}_2} = [2 \cdot (-6,49) - 3 \cdot 0,5] \cdot 10^5 = -14,48 \cdot 10^5$$

$$\Delta C_p = -35,13 + 23,3 \cdot 10^{-3}T - 14,48 \cdot 10^5 T^{-2}$$

$$\Delta H_{298}^0 = -91\,920 \text{ J mol}^{-1}$$

$$\begin{aligned} \Delta H_{500}^0 &= -91920 + \int_{298}^{500} (-35,13 + 23,3 \cdot 10^{-3}T - 14,48 \cdot 10^5 T^{-2}) dT = \\ &= -91920 - 35,13 \cdot (500 - 298) + \frac{23,3 \cdot 10^{-3}}{2} \cdot (500^2 - 298^2) + 14,48 \cdot 10^5 \cdot (500^{-1} - 298^{-1}) \end{aligned}$$

$$\Delta H_{500}^0 = -99\,101,3 \text{ J mol}^{-1} \text{ N}_2$$

b) Keďže  $\Delta H_{500}^0 < 0$  reakcia je exotermická

c) Závislosť zmeny štandardnej entalpie reakcie od teploty vypočítame podľa vzťahu:

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^T \Delta C_p \cdot dT$$

$$\Delta H_T^0 = -91920 + \int_{298}^T (-35,13 + 23,3 \cdot 10^{-3}T - 14,48 \cdot 10^5 T^{-2}) dT =$$

$$= -91920 - 35,13 \cdot (T - 298) + \frac{23,3 \cdot 10^{-3}}{2} \cdot (T^2 - 298^2) + 14,48 \cdot 10^5 \cdot (T^{-1} - 298^{-1}) =$$

$$= -91920 - 35,13 \cdot T + 10468,74 + 11,65 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 1034,57 + 14,48 \cdot 10^5 T^{-1} - 4859,06$$



$$\Delta H_T^0 = -87344,89 - 35,13 \cdot T + 11,65 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 + 14,48 \cdot 10^5 \cdot T^{-1} \quad \text{J mol}^{-1} \text{ N}_2$$

Uvedený vzťah platí v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 2400\text{K} \rangle$ , ktorý je určený podľa maximálnej hodnoty dolnej hranice a minimálnej hodnoty hornej hranice rozsahov platnosti uvažovaných teplotných závislostí tepelných kapacít.

4. Vypočítajte zmenu štandardnej entalpie reakcie  $\text{Pb}_{(l)} + \frac{1}{2} \text{O}_{2(g)} = \text{PbO}_{(l)}$  pri teplote 1200 K.

RIEŠENIE:

Z prílohy 3 vypíšeme údaje pre prírastok entalpie reaktantov a produktov chemickej reakcie:

- pre  $\text{Pb}_{(l)}$  v intervale teplôt  $\langle T_{\text{top}}; 1200\text{K} \rangle$  platí

$$H_T - H_{298} = 32,47 \cdot T - 1,55 \cdot 10^{-3} T^2 - 5353$$

- pre  $\text{O}_{2(g)}$  v intervale teplôt  $\langle 298\text{K}; 3000\text{K} \rangle$  platí

$$H_T - H_{298} = 30 \cdot T + 2,095 \cdot 10^{-3} T^2 + 1,68 \cdot 10^5 \cdot T^{-1} - 9\,689$$

- pre  $\text{PbO}_{(l)}$  v intervale teplôt  $\langle T_{\text{top}}; 1745\text{K} \rangle$  platí

$$H_T - H_{298} = 7,75 \cdot T - 0,37 \cdot 10^{-3} T^2 + 53\,038$$

Z Hessovho zákona vyplýva:

$$\Delta H_T^0 - \Delta H_{298}^0 = (H_T - H_{298}^0)_{\text{PbO}_{(l)}} - (H_T - H_{298}^0)_{\text{Pb}_{(l)}} - \frac{1}{2} (H_T - H_{298}^0)_{\text{O}_{2(g)}}$$

$$\Delta H_T^0 - \Delta H_{298}^0 = -39,72 \cdot T + 0,1325 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 0,84 \cdot 10^5 \cdot T^{-1} + 63235,5$$

Z prílohy 4 pre  $\text{PbO}$  nájdeme  $\Delta H_{298}^0 = -219\,800 \text{ J mol}^{-1}$ .

Podľa Hessovho zákona pre zmenu štandardnej entalpie chemickej reakcie platí:

$$\Delta H_{298}^0 = \sum \Delta H_{298}^0 (\text{produktov}) - \sum \Delta H_{298}^0 (\text{reaktantov})$$

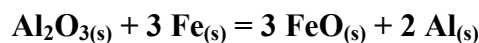
Potom  $\Delta H_{298}^0 = -219\,800 \text{ J mol}^{-1}$  pretože  $\Delta H_{298}^0 (\text{O}_2) = 0$  a  $\Delta H_{298}^0 (\text{Pb}) = 0$

Po dosadení  $\Delta H_{298}^0 = -219\,800 \text{ J mol}^{-1}$  a teploty 1 200 K vypočítame

$$\Delta H_{1200}^0 = -204\,107 \text{ J mol}^{-1} \text{ PbO}$$

### 3. ÚLOHY

1. Vypočítajte zmenu štandardnej entalpie reakcie:



pri teplote 298 K, ak sú známe štandardné mólové zlučovacie entalpie:

– pre  $\text{FeO}(\text{s})$      $\Delta H_{298}^0 = -264,84 \text{ kJ mol}^{-1}$

– pre  $\text{Al}_2\text{O}_3(\text{s})$      $\Delta H_{298}^0 = -1\,678,17 \text{ kJ mol}^{-1}$

2. Vypočítajte zmenu štandardnej entalpie reakcie:

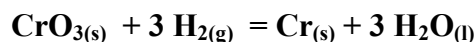


pri teplote 298 K.

Určte, či je reakcia exotermická alebo endotermická.

Potrebné termodynamické údaje nájdite v prílohe.

3. Vypočítajte, aké teplo sa uvoľní pri redukcii 10 gramov oxidu chrómového vodíkom pri teplote 298 K podľa reakcie:



Potrebné termodynamické údaje nájdite v prílohe.

4. Napíšte rovnice reakcií, ktorých zmena entalpie sa rovná mólovej zlučovacej entalpii týchto zlúčenín:

a)  $\text{CO}_2$

b)  $\text{CO}$

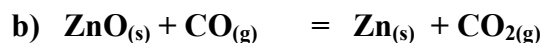
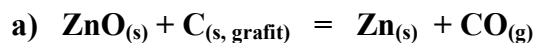
c)  $\text{NH}_3$

d)  $\text{CaCO}_3$

e)  $\text{KCl}$

5. Vypočítajte množstvo tepla, ktoré sa uvoľní pri oxidácii síry o hmotnosti 96 gramov na oxid siričitý. Potrebné údaje vyhľadajte v prílohách.

6. V súvislosti s výrobou zinku vypočítajte zmeny štandardných entalpií pri teplote 298 K týchto reakcií:



a určte, či v procese výroby zinku sa teplo uvoľňuje alebo spotrebuje.

Potrebné termodynamické údaje nájdite v prílohe.

7. Pre chemickú reakciu  $4\text{Ag}_{(s)} + \text{O}_{2(g)} = 2\text{Ag}_2\text{O}_{(s)}$  vypočítajte:

a) zmenu štandardnej entalpie pri teplote 400 K;

b) rovnicu závislosti zmeny štandardnej entalpie od teploty, ktorá platí v intervale teplôt  $\langle 298\text{K}; 500\text{K} \rangle$ , ak je dané:

$$\text{– pre Ag}_{(s)} \quad \Delta H_{298}^0 = 0 \quad C_p = 20,36 + 8,55 \cdot 10^{-3}T + 1,51 \cdot 10^{-5}T^2 \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{– pre O}_{2(g)} \quad \Delta H_{298}^0 = 0 \quad C_p = 30,00 + 4,19 \cdot 10^{-3}T - 1,68 \cdot 10^{-5}T^2 \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{– pre Ag}_2\text{O}_{(s)} \quad \Delta H_{298}^0 = -30\,560 \text{ J mol}^{-1} \quad C_p = 59,41 + 40,85 \cdot 10^{-3}T - 4,19 \cdot 10^{-5}T^2 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

8. Uhličitan vápenatý sa termicky rozkladá podľa rovnice:



Vypočítajte

a) zmenu štandardnej entalpie reakcie pri teplote 298 K a tlaku 101 325 Pa;

b) zmenu štandardnej entalpie reakcie pri teplote 1 000 K a tlaku 101 325 Pa;

c) odvodte závislosť štandardnej entalpie od teploty,

ak je dané:

$$\text{– pre CaCO}_{3(s)} \quad \Delta H_{298}^0 = -1\,207\,934 \text{ J mol}^{-1}$$

$$C_p = 104,67 + 21,96 \cdot 10^{-3}T - 25,98 \cdot 10^{-5}T^2 \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad \langle 298\text{K}; 1200\text{K} \rangle$$

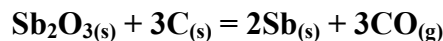
$$\text{– pre CaO}_{(s)} \quad \Delta H_{298}^0 = -634\,600 \text{ J mol}^{-1}$$

$$C_p = 49,69 + 4,53 \cdot 10^{-3}T - 6,96 \cdot 10^{-5}T^2 \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad \langle 298\text{K}; 1177\text{K} \rangle$$

$$\text{– pre CO}_{2(g)} \quad \Delta H_{298}^0 = -393\,751 \text{ J mol}^{-1}$$

$$C_p = 44,2 + 9,05 \cdot 10^{-3}T - 8,55 \cdot 10^{-5}T^2 \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad \langle 298\text{K}; 2500\text{K} \rangle$$

9. Vypočítajte množstvo tepla potrebné na redukciu 1 mólu  $\text{Sb}_2\text{O}_3$  prebiehajúcu podľa rovnice:



pri teplote 900 K, ak je dané:

$$\text{– pre Sb}_2\text{O}_{3(s)} \quad \Delta H_{298}^0 = -708,9 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$C_p = 80,03 + 71,65 \cdot 10^{-3}T \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad \langle 298\text{K}; 930\text{K} \rangle$$

– pre  $C_{(s)}$   $\Delta H_{298}^0 = 0$

$$C_p = 17,18 + 4,27 \cdot 10^{-3}T - 8,79 \cdot 10^{-5}T^2 \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad \langle 298\text{K}; 2300\text{K} \rangle$$

– pre  $Sb_{(s)}$   $\Delta H_{298}^0 = 0$

$$C_p = 23,09 + 7,29 \cdot 10^{-3}T \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad \langle 298\text{K}; 903\text{K} \rangle$$

– pre  $CO_{(g)}$   $\Delta H_{298}^0 = -110,59 \text{ kJ mol}^{-1}$

$$C_p = 28,45 + 4,11 \cdot 10^{-3}T - 0,46 \cdot 10^{-5}T^2 \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad \langle 298\text{K}; 2500\text{K} \rangle$$

10. Pre rovnicu uvedenú v predchádzajúcom príklade odvodte závislosť zmeny štandardnej entalpie od teploty platnej v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 903\text{K} \rangle$ .

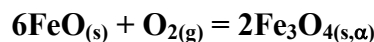
11. Vypočítajte zmenu štandardnej entalpie reakcie:



- pri teplote 298 K a tlaku 101 325 Pa;
- pri teplote 1000 K a tlaku 101 325 Pa;
- určte, či je reakcia pri teplote 1000 K exotermická alebo endotermická.

Potrebné termodynamické údaje nájdite v prílohe.

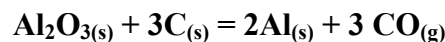
12. Pre reakciu:



- odvodte rovnicu závislosti zmeny štandardnej entalpie od teploty, ktorá platí v intervale teplôt  $\langle 298\text{K}; 900\text{K} \rangle$ ;
- vypočítajte zmenu štandardnej entalpie reakcie pri teplote 500 K;
- určte, či je reakcia exotermická alebo endotermická pri teplote 500 K a svoju odpoveď odôvodnite.

Potrebné termodynamické údaje nájdite v prílohe.

13. Vypočítajte množstvo tepla, ktoré je potrebné na výrobu 50 kg hliníka reakciou:



- pri teplote 298 K a tlaku 101 325 Pa
- pri teplote 900 K a tlaku 101 325 Pa

Potrebné termodynamické údaje vyhľadajte v prílohe.

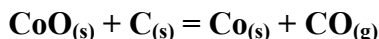
14. Pre Boudouardovu reakciu:



- a) odvodte rovnicu závislosti zmeny štandardnej entalpie od teploty, ktorá platí v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 2300\text{K} \rangle$ ;
- b) vypočítajte zmenu štandardnej entalpie reakcie pri teplote 1000 K;
- c) určte, či je reakcia exotermická alebo endotermická pri teplote 1000 K, ak je dané:

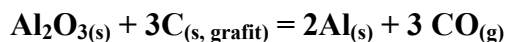
– pre $\text{CO}_{2(\text{g})}$	$\Delta H_{298}^0 = -393\,751 \text{ J mol}^{-1}$		
	$C_p = 44,20 + 9,05 \cdot 10^{-3}T - 8,55 \cdot 10^5 T^{-2}$	$\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$	$\langle 298\text{K}; 2500\text{K} \rangle$
– pre $\text{CO}_{(\text{g})}$	$\Delta H_{298}^0 = -110\,590 \text{ J mol}^{-1}$		
	$C_p = 28,45 + 4,11 \cdot 10^{-3}T - 0,46 \cdot 10^5 T^{-2}$	$\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$	$\langle 298\text{K}; 2500\text{K} \rangle$
– pre $\text{C}_{(\text{s, grafit})}$	$\Delta H_{298}^0 = 0$		
	$C_p = 17,18 + 4,27 \cdot 10^{-3}T - 8,79 \cdot 10^5 T^{-2}$	$\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$	$\langle 298\text{K}; 2300\text{K} \rangle$

15. Vypočítajte zmenu štandardnej entalpie redukcie oxidu kobaltnatého uhlíkom pri teplote 1000 K, ak redukcia prebieha podľa reakcie:



Potrebné termodynamické údaje nájdite v prílohe.

16. Pre reakciu:



odvodte rovnicu závislosti zmeny štandardnej entalpie od teploty, ktorá platí v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 933\text{K} \rangle$ .

Potrebné termodynamické údaje nájdite v prílohe.

## 4. DRUHÁ VETA TERMODYNAMICKÁ – ROVNOVÁHY CHEMICKÝCH REAKCIÍ

### 4.1 Entropia

Matematická formulácia druhého zákona termodynamiky vychádza z existencie novej termodynamickej funkcie, entropie, ktorá je definovaná vzťahom:

$$dS = \frac{\delta Q_{\text{rev}}}{T} \quad (4.1.1)$$

kde  $\delta Q_{\text{rev}}$  je teplo, ktoré sústava reverzibilne vymieňa s okolím pri teplote  $T$ .

Entropia, podobne ako všetky termodynamické funkcie, má tú vlastnosť, že jej zmena nezávisí od spôsobu priebehu deja, ale len od počiatočného a konečného stavu sústavy. Preto pre vratný proces, pri ktorom sústava prechádza zo začiatočného stavu 1 do konečného stavu 2 platí:

$$\Delta S = S_2 - S_1 = \int_{T_1}^{T_2} \frac{\delta Q_{\text{rev}}}{T} \quad (4.1.2)$$

Pre nevratný ( samovoľný ) dej platí:

$$S_2 - S_1 = \Delta S > \int_{T_1}^{T_2} \frac{\delta Q_{\text{ir}}}{T} \quad (4.1.3)$$

index ir zdôrazňuje, že uvažovaný dej je ireverzibilný ( nevratný ) .

Zmenu entropie pri fázových premenách za konštantnej teploty a tlaku je možné vypočítať zo vzťahov:

– **pre topenie**  $\Delta S_{\text{top}} = \frac{\Delta H_{\text{top}}}{T_{\text{top}}} \quad (4.1.4)$

kde  $\Delta H_{\text{top}}$  – je mólová entalpia topenia [J mol<sup>-1</sup>]

$T_{\text{top}}$  – je teplota topenia [K]

Pre väčšinu kovov podľa Richardsovoho pravidla je  $\Delta S_{\text{top}} = 8,4 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

– **pre vyparovanie**  $\Delta S_{\text{vyp}} = \frac{\Delta H_{\text{vyp}}}{T_{\text{varu}}} \quad (4.1.5)$

Podľa Troutonovho pravidla pre kovy je  $\Delta S_{\text{vyp}} = 87,8 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

– **pre kryštalografickú transformáciu** napr.  $\alpha \rightarrow \beta$  v tuhom stave

$$\Delta S_{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{\Delta H_{\alpha \rightarrow \beta}}{T_{\alpha \rightarrow \beta}} \quad (4.1.6)$$

Pre vratnú zmenu stavu ideálneho plynu podľa 1. vety termodynamiky je možné uviesť vzťah:

$$\delta Q = dU + p.dV = C_v.dT + \frac{nRT}{V}.dV \quad (4.1.7)$$

po vydelení obidvoch strán rovnice teplotou platí:

$$\frac{\delta Q}{T} = \frac{C_v.dT}{T} + \frac{nR}{V}.dV \quad (4.1.8)$$

$$dS = \frac{C_v.dT}{T} + \frac{nR}{V}.dV \quad (4.1.9)$$

resp. pre konečne veľkú zmenu platí:

$$\Delta S = S_2 - S_1 = \int_1^2 C_v \left( \frac{dT}{T} \right) + \int_1^2 n.R. \left( \frac{dV}{V} \right) \quad (4.1.10)$$

ak  $C_v$  nezávisí od teploty, je možné túto rovnicu integrovať, pričom dostávame:

$$\Delta S = C_v \cdot \ln \frac{T_2}{T_1} + nR \ln \frac{V_2}{V_1} \quad (4.1.11)$$

Ak sa teplota plynu mení za konštantného objemu, pre vzrast entropie s teplotou platí vzťah:

$$\Delta S = C_v \cdot \ln \frac{T_2}{T_1} \quad (4.1.12)$$

Pre izotermickú expanziu ideálneho plynu platí vzťah:

$$\Delta S = nR \ln \frac{V_2}{V_1} = nR \ln \frac{p_1}{p_2} \quad (4.1.13)$$

Pri chemickej reakcii vypočítame zmenu štandardnej entropie podobne ako zmenu štandardnej entalpie chemickej reakcie, s tým rozdielom, že je treba uvažovať aj štandardnú entropiu prvkov:

$$\Delta S^0 = \sum S^0_{\text{produktov}} - \sum S^0_{\text{reaktantov}} \quad (4.1.14)$$

Závislosť zmeny štandardnej entropie chemickej reakcie od teploty udáva vzťah:

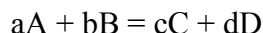
$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \int_{298}^T \Delta C_p \cdot \frac{dT}{T} \quad (4.1.15)$$

ak  $\Delta C_p = \Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^{-2}$ , po integrovaní dostávame

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \Delta a \cdot \ln \frac{T}{298} + \Delta b (T - 298) - \frac{\Delta c}{2} (T^{-2} - 298^{-2}) \quad (4.1.16)$$

Táto rovnica (4.1.16) platí iba v intervale teplôt, v ktorom nedochádza k fázovým premenám ani reaktantov ani produktov. V prípade, že v chemickej reakcii nastáva fázová premena,

musíme pri výpočte zmeny štandardnej entropie reakcie uvažovať aj zmenu entropie príslušnej fázovej premeny. Napr. ak pri všeobecnej chemickej reakcii



nastáva počas ohrevu topenie látky A pri teplote  $T_A$ , musíme priebeh tejto chemickej reakcie uvažovať v dvoch teplotných intervaloch:

- v intervale  $\langle 298\text{K}; T_A \rangle$ , kde platí rovnica



- v intervale  $\langle T_A; T \rangle$ , kde platí rovnica



a pri výpočte zmeny štandardnej mólovej entropie chemickej reakcie nad teplotou topenia látky A musíme mólovú entropiu topenia  $\Delta S_{\text{top}(A)}$  zahrnúť do výpočtu:

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \int_{298}^{T_A} \Delta C_{P(a)} \cdot \frac{dT}{T} - \Delta S_{\text{top}(A)} + \int_{T_A}^T \Delta C_{P(b)} \cdot \frac{dT}{T} \quad (4.1.17)$$

kde  $\Delta C_{P(a)}$  a  $\Delta C_{P(b)}$  sú rozdiely izobarických mólových tepelných kapacít reakcií (a) a (b).

## Príklady

1. Vypočítajte zmenu entropie pri topení 1 kg medi, ak mólová entalpia topenia Cu  $\Delta H_{\text{top}} = 13\,018 \text{ J mol}^{-1}$  a teplota topenia je  $1\,083^\circ\text{C}$ .  $M(\text{Cu}) = 63,546 \text{ g mol}^{-1}$ .

RIEŠENIE:

Zmenu entropie pri topení vypočítame zo vzťahu:

$$\Delta S_{\text{top}} = n \cdot \frac{\Delta H_{\text{top}}}{T_{\text{top}}}$$

kde látkové množstvo  $n = \frac{m}{M} = \frac{1000\text{g}}{63,546\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}} = 15,74 \text{ mol}$

a teplota topenia  $T_{\text{top}} = 1\,083 + 273 = 1\,356 \text{ K}$

potom

$$\Delta S_{\text{top}} = 15,74 \cdot \frac{13018}{1356} = 151,1 \text{ J K}^{-1}$$



2. Vypočítajte zmenu entropie 5 mólov kyslíka z objemu  $36 \text{ dm}^3$  pod tlakom  $202,65 \text{ kPa}$  na objem  $72 \text{ dm}^3$  pod tlakom  $101,325 \text{ kPa}$ . Kyslík považujte za stavovo ideálny plyn a jeho  $C_p = 29,39 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ .

RIEŠENIE:

Zmenu entropie sústavy ideálneho plynu z jedného stavu do druhého, vypočítame podľa vzťahu:

$$\Delta S = n \left( C_p \cdot \ln \frac{V_2}{V_1} + C_v \cdot \ln \frac{p_2}{p_1} \right)$$

Vieme, že

$$C_v = C_p - R = 29,39 - 8,314 = 21,076 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

potom

$$\begin{aligned} \Delta S &= 5 \cdot \left( 29,39 \cdot \ln \frac{72}{36} + 21,076 \cdot \ln \frac{101,325}{202,65} \right) = \\ &= 5 \cdot ( 20,3715 - 14,6087 ) \\ \Delta S &= 28,814 \text{ J K}^{-1} \end{aligned}$$

3. Jeden mól ideálneho plynu, ktorý zaberá za určitých podmienok objem  $10 \text{ dm}^3$ , expanduje pri konštantnej teplote. Vypočítajte, aký bude konečný objem, ak zmena entropie sprevádzajúca expanziu je rovná  $38,49 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ .

RIEŠENIE:

Zmenu entropie pri izotermickej expanzii vypočítame zo vzťahu:

$$\Delta S = R \cdot \ln \frac{V_2}{V_1}$$

$$\text{z ktorého } \ln V_2 = \frac{\Delta S}{R} + \ln V_1 = \frac{38,49}{8,314} + \ln 10 = 4,629 + 2,302$$

$$\ln V_2 = 6,931$$

$$V_2 = 1023,5 \text{ dm}^3$$

4. Vypočítajte zmenu entropie pri zmiešaní  $1 \text{ m}^3$  vodíka a  $0,5 \text{ m}^3$  metánu, ak plyny majú pred a po zmiešaní rovnakú teplotu  $298 \text{ K}$  a tlak  $91\,192 \text{ Pa}$  a riadia sa zákonmi ideálnych plynov.

RIEŠENIE:

Vypočítame látkové množstvá vodíka a metánu zo stavovej rovnice ideálneho plynu:

$$n_{\text{H}_2} = \frac{p \cdot V_{\text{H}_2}}{RT} = \frac{91192.1}{8,314.298} = 36,807 \text{ mol}$$

podobne 
$$n_{\text{CH}_4} = \frac{p \cdot V_{\text{CH}_4}}{RT} = \frac{91192.0,5}{8,314.298} = 18,403 \text{ mol}$$

Zmenu entropie vypočítame podľa vzťahu:

$$\begin{aligned} \Delta S &= n_{\text{H}_2} \cdot R \cdot \ln \frac{V}{V_{\text{H}_2}} + n_{\text{CH}_4} \cdot R \cdot \ln \frac{V}{V_{\text{CH}_4}} = \\ &= 36,807 \cdot 8,314 \cdot \ln \frac{1,5}{1} + 18,403 \cdot 8,314 \cdot \ln \frac{1,5}{0,5} \\ \Delta S &= 292,16 \text{ J K}^{-1} \end{aligned}$$

5. Vypočítajte entropiu  $\text{Fe}_{(s,\beta)}$  pri teplote 1 033 K a tlaku 101 325 Pa, ak sú dané:

- pre  $\text{Fe}_{(s,\alpha)}$   $S_{298}^0 = 27,15 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ;  $C_p = 14,11 + 29,72 \cdot 10^{-3} T - 1,8 \cdot 10^5 T^{-2} \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- teplota transformácie  $T_{\alpha-\beta} = 1 033 \text{ K}$ ;  $\Delta H_{\alpha-\beta} = 1 720 \text{ J mol}^{-1}$

RIEŠENIE:

$$\begin{aligned} S_{1033\text{Fe}(\beta)}^0 &= S_{298\text{Fe}(\alpha)}^0 + \int_{298}^{1033} \frac{C_p}{T} dT + \frac{\Delta H_{\alpha-\beta}}{T_{\alpha-\beta}} = \\ &= 27,15 + \int_{298}^{1033} \left( \frac{14,11 + 29,72 \cdot 10^{-3} T - 1,8 \cdot 10^5 T^{-2}}{T} \right) dT + \frac{1720}{1033} = \\ &= 27,15 + 14,11 \ln \frac{1033}{298} + 29,72 \cdot 10^{-3} (1033 - 298) + \frac{1,8 \cdot 10^5}{2} (1033^{-2} - 298^{-2}) + 1,665 \\ S_{1033\text{Fe}(\beta)}^0 &= 27,15 + 17,54 + 21,8442 - 0,9291 + 1,665 = 67,27 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \end{aligned}$$

6. Pre chemickú reakciu:  $6\text{FeO}_{(s)} + \text{O}_{2(g)} = 2\text{Fe}_3\text{O}_{4(s,\alpha)}$

vypočítajte

- a) zmenu štandardnej entropie pri teplote 298 K;
- b) zmenu štandardnej entropie pri teplote 600 K;
- c) odvoďte závislosť zmeny štandardnej entropie od teploty, ktorá platí v intervale teplôt  $\langle 298\text{K}; 900\text{K} \rangle$

RIEŠENIE:

Z príloh 4 a 3 vyhl'adáme tieto potrebné údaje:

– pre  $\text{FeO}_{(s)}$   $S_{298}^0 = 58,81 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ;  $C_p = 51,87 + 6,79 \cdot 10^{-3} T - 1,59 \cdot 10^5 T^{-2} \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

– pre  $O_{2(s)}$   $S_{298}^0 = 205,2 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ;  $C_p = 30,00 + 4,19 \cdot 10^{-3}T - 1,68 \cdot 10^{-5}T^2 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

– pre  $Fe_3O_{4(s,\alpha)}$   $S_{298}^0 = 151,53 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ;  $C_p = 91,68 + 201,96 \cdot 10^{-3}T \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

a) Vypočítame

$$\Delta S_{298}^0 = 2 \cdot (S_{298}^0)_{Fe_3O_4} - 6 \cdot (S_{298}^0)_{FeO} - (S_{298}^0)_{O_2}$$

$$\Delta S_{298}^0 = 2 \cdot 151,53 - 6 \cdot 58,81 - 205,2 = -255 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} O_2$$

b) Zmenu štandardnej entropie reakcie pri teplote 600 K vypočítame podľa vzťahu:

$$\Delta S_{600}^0 = \Delta S_{298}^0 + \int_{298}^{600} \frac{\Delta C_p}{T} dT$$

kde  $\Delta C_p = \Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^{-2}$

$$\Delta a = 2 \cdot a_{Fe_3O_4} - (6 \cdot a_{FeO} + a_{O_2}) = 2 \cdot 91,68 - (6 \cdot 51,87 + 30) = -157,86$$

$$\Delta b = 2 \cdot b_{Fe_3O_4} - (6 \cdot b_{FeO} + b_{O_2}) = [2 \cdot 201,96 - (6 \cdot 6,79 + 4,19)] \cdot 10^{-3} = 358,99 \cdot 10^{-3}$$

$$\Delta c = 2 \cdot c_{Fe_3O_4} - (6 \cdot c_{FeO} + c_{O_2}) = 2 \cdot 0 - [6 \cdot (-1,59) + (-1,68)] \cdot 10^5 = 11,22 \cdot 10^5$$

$$\Delta S_{600}^0 = -255 + \int_{298}^{600} \left( \frac{-157,86 + 358,99 \cdot 10^{-3}T + 11,22 \cdot 10^5 T^{-2}}{T} \right) dT$$

$$\Delta S_{600}^0 = -255 - 157,86 \cdot \ln \frac{600}{298} + 358,99 \cdot 10^{-3} (600 - 298) - \frac{11,22 \cdot 10^5}{2} \left( \frac{1}{600^2} - \frac{1}{298^2} \right)$$

$$\Delta S_{600}^0 = -252,3 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} O_2$$

c)  $\Delta S_T^0 = f(T)$  vypočítame:

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \int_{298}^T \frac{\Delta C_p}{T} dT$$

$$\Delta S_T^0 = -255 + \int_{298}^T \left( \frac{-157,86 + 358,99 \cdot 10^{-3}T + 11,22 \cdot 10^5 T^{-2}}{T} \right) dT$$

$$\Delta S_T^0 = -255 - 157,86(\ln T - \ln 298) + 358,99 \cdot 10^{-3}(T - 298) - \frac{11,22 \cdot 10^5}{2} \left( \frac{1}{T^2} - \frac{1}{298^2} \right)$$

$$\Delta S_T^0 = 543,68 - 157,86 \cdot \ln T + 358,99 \cdot 10^{-3}T - 5,61 \cdot 10^5 T^{-2}$$

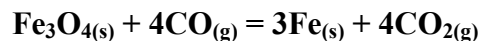
## 4.1 ÚLOHY

1. Vypočítajte zmenu entropie pri topení 10 kg striebra, ak teplota topenia je 1 233,8 K a mólová entalpia topenia Ag  $\Delta H_{\text{top}} = 10 800 \text{ J mol}^{-1}$ ;  $M(\text{Ag}) = 107,868 \text{ g mol}^{-1}$ .

2. Vypočítajte zmenu entropie pri teplote topenia pri roztavení 1 kg Pb.  
Potrebné údaje vyhľadajte v prílohe.
3. Vypočítajte zmenu entropie pri ohreve 5 mólov stavovo ideálneho vodíka pri konštantnom tlaku z teploty 25°C na 1 500°C. Závislosť izobarickej mólovej tepelnej kapacity od teploty udáva rovnica:  
$$C_p = 27,32 + 3,27 \cdot 10^{-3}T + 0,5 \cdot 10^{-5}T^{-2} \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}.$$
4. Vypočítajte zmenu entropie 10 mólov neónu, ktorý pri teplote 500°C izotermicky zmenšil svoj objem z 20 dm<sup>3</sup> na 5 dm<sup>3</sup>. Predpokladajte, že neón sa správa ako ideálny plyn.
5. Sedem mólov stavovo ideálneho argónu ohrejeme z teploty 100°C na teplotu 420°C izochoricky. Vypočítajte zmenu entropie tohto ideálneho plynu, ak izobarická mólová tepelná kapacita argónu je 20,785 J K<sup>-1</sup>mol<sup>-1</sup>.
6. Vypočítajte zmenu entropie 10 mólov ideálneho plynu pri izotermickej expanzii z objemu 0,2 m<sup>3</sup> na objem 1 m<sup>3</sup>.
7. Závislosť izobarickej mólovej tepelnej kapacity stavovo ideálneho dusíka od teploty vyjadruje rovnica:  $C_p = 27,91 + 4,27 \cdot 10^{-3}T \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ .
  - a) vypočítajte zmenu entropie pri zahrievaní 5 mólov stavovo ideálneho dusíka pri konštantnom tlaku z teploty 298 K na teplotu 700 K;
  - b) vypočítajte zmenu entropie pri zahrievaní 5 mólov stavovo ideálneho dusíka pri konštantnom objeme z teploty 298 K na teplotu 700 K.
8. Vypočítajte zmenu entropie 3 mólov stavovo ideálneho kyslíka pri jeho izochorickom ohreve z teploty 500°C na teplotu 1 500 °C.  
Potrebné údaje vyhľadajte v prílohe.
9. Vypočítajte zmenu entropie 2 mólov vodíka pri zmene stavu sústavy z objemu 22,5 l pod tlakom 202,65 kPa na objem 45 l pod tlakom 101,325 kPa. Vodík považujte za ideálny plyn, ktorého  $C_p = 29,099 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ .

10. V jednej z dvoch nádob rovnakého objemu (každá má  $30 \text{ dm}^3$ ) je 112 g dusíka, v druhej 128 g kyslíka. V oboch nádobách je rovnaká teplota aj tlak. Vypočítajte zmenu entropie, ktorá nastane pri zmiešaní obsahu obidvoch nádob, ak predpokladáte, že plyny sa správajú ideálne.
11. Vypočítajte zmenu entropie, ak 1 mól pár kadmia pri teplote  $1\,040 \text{ K}$  a tlaku  $101\,325 \text{ Pa}$  sa ohreje na teplotu  $1300 \text{ K}$  a stlačí tak, že jeho výsledný tlak je  $607\,950 \text{ Pa}$ . Predpokladajte, že sa pary Cd chovajú ako ideálny jednoatómový plyn. ( $C_p = 20,785 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ).
12. Vypočítajte, o koľko sa zmení entropia  $20 \text{ g}$  vody, ak ju ohrejeme z teploty  $298 \text{ K}$  na teplotu  $348 \text{ K}$ , ak pre  $\text{H}_2\text{O}$  je  $C_p = 75,55 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ,  $M(\text{H}_2\text{O}) = 18 \text{ g mol}^{-1}$ .

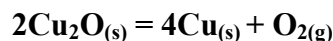
13. Vypočítajte zmenu štandardnej entropie chemickej reakcie:



pri teplote  $298 \text{ K}$ , ak je dané:

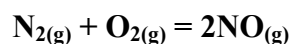
- pre  $\text{Fe}_3\text{O}_{4(s)}$        $S_{298}^0 = 151,53 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- pre  $\text{CO}_{(g)}$            $S_{298}^0 = 197,66 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- pre  $\text{Fe}_{(s)}$              $S_{298}^0 = 27,15 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- pre  $\text{CO}_{2(g)}$           $S_{298}^0 = 213,78 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

14. Vypočítajte zmenu štandardnej entropie chemickej reakcie:



pri teplote  $298 \text{ K}$  na  $1 \text{ mól Cu}$ .

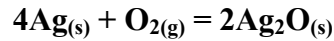
15. Pre homogénnu chemickú reakciu:



vypočítajte zmenu štandardnej entropie reakcie

- a) pri teplote  $298 \text{ K}$ ;
- b) pri teplote  $800 \text{ K}$ ;
- c) odvoďte závislosť zmeny štandardnej entropie od teploty pre danú chemickú reakciu a určte teplotný interval, v ktorom táto závislosť platí.

16. Oxidáciu striebra za vzniku oxidu strieborného vystihuje reakcia:



- a) vypočítajte zmenu štandardnej entropie uvedenej reakcie pri teplotách 298 K a 400 K;  
 b) odvoďte závislosť zmeny štandardnej entropie reakcie od teploty, ktorá platí v intervale teplôt  $\langle 298\text{K}; 500\text{K} \rangle$ , ak je dané:

– pre  $\text{Ag}_{(s)}$   $S_{298}^0 = 42,7 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

$$C_p = 20,36 + 8,55 \cdot 10^{-3}T + 1,51 \cdot 10^{-5}T^{-2} \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad \langle 298\text{K}; 1234\text{K} \rangle$$

– pre  $\text{O}_{2(s)}$   $S_{298}^0 = 205,2 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

$$C_p = 30,00 + 4,19 \cdot 10^{-3}T - 1,68 \cdot 10^{-5}T^{-2} \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad \langle 298\text{K}; 3000\text{K} \rangle$$

– pre  $\text{Ag}_2\text{O}_{(s)}$   $S_{298}^0 = 121,81 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

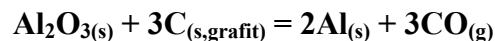
$$C_p = 59,41 + 40,85 \cdot 10^{-3}T - 4,19 \cdot 10^{-5}T^{-2} \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad \langle 298\text{K}; 500\text{K} \rangle$$

17. Na základe údajov v tabuľkových prílohách vypočítajte pre chemickú reakciu:



- a) zmenu štandardnej entropie pri teplote 298 K;  
 b) zmenu štandardnej entropie pri teplote 900 K;  
 c) odvoďte závislosť zmeny štandardnej entropie od teploty.

18. Pre chemickú reakciu:



vypočítajte zmenu štandardnej entropie reakcie

- a) pri teplote 298 K;  
 b) pri teplote 600 K.

19. Vypočítajte štandardnú entropiu zinku pri teplote 1000 K, ak teplota topenia zinku je 693 K, štandardná entropia pri teplote 298 K je  $41,65 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H_{\text{top}} = 6\,676 \text{ J mol}^{-1}$ ,  $C_{p,\text{Zn}(s)} = 22,42 + 10,06 \cdot 10^{-3}T \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ,  $C_{p,\text{Zn}(l)} = 31,43 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ .

## 4.2 Gibbsova energia

Gibbsova energia sa označuje symbolom  $g$  a definuje sa vzťahom:

$$g = h - T \cdot s \quad (4.2.1)$$

Pre zmenu Gibbsovej energie platí:

$$\Delta g = \Delta h - T \cdot \Delta s \quad (4.2.2)$$

Gibbsova energia je stavová funkcia a nezávisí akým spôsobom sa sústava dostane zo začiatočného stavu do konečného stavu. Je veličinou extenzívnou. Závislosť medzi zmenou Gibbsovej energie sústavy  $\Delta g$  a zmenou mólovej Gibbsovej energie  $\Delta G$  pripadajúcej na látkové množstvo 1 mólu vyjadruje vzťah:

$$\Delta g = n \cdot \Delta G$$

Hnacia sila chemickej reakcie sa posudzuje na základe zmeny Gibbsovej energie chemickej reakčnej sústavy pri konštantnej teplote a tlaku, pričom platí:

- ak  $\Delta g < 0$ , môže nastať samovoľný proces
- ak  $\Delta g = 0$ , sústava sa nachádza v rovnovážnom stave
- ak  $\Delta g > 0$ , samovoľný proces sa neuskutoční. Jediným možným samovoľným procesom je proces v opačnom smere.

Zmenu Gibbsovej energie všeobecnej chemickej reakcie pri konštantnej teplote a tlaku vypočítame z Gibbsových energií látok zúčastňujúcich sa na chemickej reakcii, teda:

$$\Delta g = \sum g_{\text{produktov}} - \sum g_{\text{reaktantov}} \quad (4.2.3)$$

Užitočnú veličinu predstavuje štandardná zlučovacia mólová Gibbsova energia, definovaná ako zmena Gibbsovej energie sústavy, v ktorej pri konštantnom tlaku a teplote vznikne látkové množstvo 1 mólu zlúčeniny z prvkov za predpokladu, že všetky reaktanty a produkty sú v štandardnom stave napr.



Hodnoty štandardných zlučovacích mólových Gibbsových energií zlúčenín je možné vypočítať z hodnôt štandardných zlučovacích mólových entalpií a štandardných entropií podľa vzťahu:

$$\Delta G_{298}^0 = \Delta H_{298}^0 - T \cdot \Delta S_{298}^0 \quad (4.2.4)$$

Závislosť Gibbsovej energie od teploty vyjadruje Gibbsova – Helmholtzova rovnica

$$\left( \frac{\partial \left( \frac{G_T}{T} \right)}{\partial T} \right)_p = - \frac{H_T}{T^2} \quad (4.2.5)$$

Pre závislosť zmeny Gibbsovej energie od teploty pri konštantnom tlaku, ak všetky reaktanty a produkty chemickej reakcie sú v štandardnom stave, platí:

$$\left( \frac{\partial \left( \frac{\Delta G_T^0}{T} \right)}{\partial T} \right)_p = - \frac{\Delta H_T^0}{T^2} \quad (4.2.6)$$

Ak do tejto rovnice (4.2.6) dosadíme za  $\Delta H_T^0$  všeobecnú závislosť reakčnej entalpie od teploty, pri konštantnom tlaku dostaneme:

$$\frac{\Delta G_T^0}{T} = - \int \frac{\Delta H_0^0 + \Delta a \cdot T + \frac{\Delta b}{2} \cdot T^2 - \Delta c \cdot T^{-1}}{T^2} dT \quad (4.2.7)$$

Po integrovaní a vynásobení hodnotou teploty T platí:

$$\Delta G_T^0 = \Delta H_0^0 - \Delta a \cdot T \cdot \ln T - \frac{\Delta b}{2} \cdot T^2 - \frac{\Delta c}{2} \cdot T^{-1} - I \cdot T \quad (4.2.8)$$

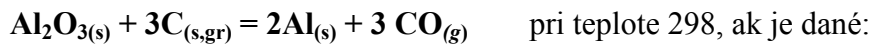
kde  $\Delta H_0^0$  a  $I$  sú integračné konštanty

$\Delta H_0^0$  vypočítame zo zmeny štandardnej entalpie reakcie pri 298 K;

$I$  vypočítame zo zmeny štandardnej Gibbsovej energie reakcie pri teplote 298 K.

## Príklady

1. Vypočítajte zmenu štandardnej Gibbsovej energie reakcie:



- pre  $Al_2O_3(s)$  .....  $S_{298}^0 = 51,07 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ;     $\Delta H_{298}^0 = -1\,678\,170 \text{ J mol}^{-1}$
- pre  $C_{(s,grafit)}$  .....  $S_{298}^0 = 5,74 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ;     $\Delta H_{298}^0 = 0$
- pre  $Al(s)$  .....  $S_{298}^0 = 28,34 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ;     $\Delta H_{298}^0 = 0$
- pre  $CO(g)$  .....  $S_{298}^0 = 197,66 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ;     $\Delta H_{298}^0 = -110\,590 \text{ J mol}^{-1}$

RIEŠENIE:



Zmenu štandardnej mólovej entropie reakcie vypočítame z údajov štandardných mólových entropií reaktantov a produktov:

$$\Delta S_{298}^0 = 2.S_{298(\text{Al})}^0 + 3.S_{298(\text{CO})}^0 - S_{298(\text{Al}_2\text{O}_3)}^0 - 3.S_{298(\text{C})}^0 = 2.28,34 + 3.197,66 - 51,07 - 3.5,74$$

$$\Delta S_{298}^0 = 581,37 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ Al}_2\text{O}_3$$

podobne

$$\Delta H_{298}^0 = 3.\Delta H_{298(\text{CO})}^0 - \Delta H_{298(\text{Al}_2\text{O}_3)}^0 = 3.(-110590) - (-1678170) = +1346400 \text{ J mol}^{-1} \text{ Al}_2\text{O}_3$$

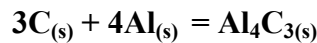
Štandardnú mólovú Gibbsovu energiu reakcie vypočítame podľa vzťahu:

$$\Delta G_{298}^0 = \Delta H_{298}^0 - T.\Delta S_{298}^0$$

$$\Delta G_{298}^0 = 1346400 - 298.581,37 = +1173151 \text{ J mol}^{-1} \text{ Al}_2\text{O}_3$$

$\Delta G_{298}^0 > 0$ , to znamená, že pri teplote 298 K uvedená chemická reakcia neprebíha.

2. Pre reakciu:



odvodte závislosť zmeny štandardnej Gibbsovej energie od teploty pri konštantnom tlaku pomocou Gibbsovej – Helmholtzovej rovnice, ak pri teplote 298 K hodnota

$$\Delta G_{298}^0 = -203\,321 \text{ J.mol}^{-1}.$$

Závislosť zmeny štandardnej entalpie reakcie od teploty je daná vzťahom

$$\Delta H_T^0 = -225\,661 + 20,56 \cdot T - 16,82 \cdot 10^{-3} T^2 + 15,61 \cdot 10^5 T^{-1},$$

ktorý platí v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 900\text{K} \rangle$ .

RIEŠENIE:

Použijeme Gibbsovu–Helmholtzovu rovnicu v tvare

$$\left( \frac{\partial \left( \frac{\Delta G_T^0}{T} \right)}{\partial T} \right)_P = - \frac{\Delta H_T^0}{T^2}$$

do ktorej dosadíme  $\Delta H_T^0 = -225661 + 20,56.T - 16,82.10^{-3}T^2 + 15,61.10^5T^{-1}$

a dostávame:

$$\frac{\Delta G_T^0}{T} = - \int \frac{-225661 + 20,56.T - 16,82.10^{-3}T^2 + 15,61.10^5.T^{-1}}{T^2} .dT$$

Po integrácii a vynásobení rovnice hodnotou T platí pre chemickú reakciu závislosť  $\Delta G_T^0$  od teploty:

$$\Delta G_T^0 = -225661 - 20,56T \cdot \ln T + 16,82 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 + 7,805 \cdot 10^5 \cdot T^{-1} - I \cdot T$$

Integračnú konštantu I vypočítame zo zmeny štandardnej Gibbsovej energie reakcie pri teplote 298 K

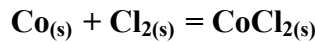
$$-203321 = -225661 - 20,56 \cdot 298 \cdot \ln 298 + 16,82 \cdot 10^{-3} \cdot 298^2 + 7,805 \cdot 10^5 \cdot 298^{-1} - I \cdot 298$$

$$\text{odkiaľ } I = -178,29$$

takže závislosť zmeny štandardnej Gibbsovej energie reakcie od teploty má tvar:

$$\Delta G_T^0 = -225661 - 20,56 \cdot T \ln T + 16,82 \cdot 10^{-3} T^2 + 7,805 \cdot 10^5 \cdot T^{-1} + 178,29 \cdot T$$

3. Závislosť zmeny štandardnej Gibbsovej energie od teploty pre chemickú reakciu:



$$\text{udáva rovnica } \Delta G_T^0 = -329438 - 28,88 \cdot T \cdot \log T + 226,55T \quad \text{J mol}^{-1}\text{Cl}_2$$

v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 933\text{K} \rangle$ .

- pomocou Gibbsovej – Helmholtzovej rovnice odvodte závislosť zmeny štandardnej entalpie a štandardnej entropie reakcie od teploty;
- vypočítajte zmenu štandardnej entalpie a entropie pri teplote 700 K.

RIEŠENIE:

a) Ak uvedenú závislosť  $\Delta G_T^0$  vydelíme T

$$\frac{\Delta G_T^0}{T} = -\frac{329438}{T} - 12,54 \cdot \ln T + 226,55$$

a derivujeme podľa teploty, dostaneme:

$$\left( \frac{\partial \left( \frac{\Delta G_T^0}{T} \right)}{\partial T} \right)_P = \frac{329438}{T^2} - \frac{12,54}{T}$$

podľa rovnice (4.2.6) platí

$$-\frac{\Delta H_T^0}{T^2} = \frac{329438}{T^2} - \frac{12,54}{T} \quad / \cdot T^2$$

a po úprave

$$\Delta H_T^0 = -329438 + 12,54 \cdot T \quad \text{J mol}^{-1}\text{Cl}_2$$

Pre závislosť zmeny štandardnej entropie reakcie od teploty platí:

$$\left(\frac{\partial \Delta G_T^0}{\partial T}\right)_p = -\Delta S_T^0$$

ak do tohoto vzťahu dosadíme funkciu  $\Delta G_T^0$

$$-\Delta S_T^0 = \frac{\partial}{\partial T} (-329438 - 12,54 \cdot T \cdot \ln T + 226,55T)$$

a pravú stranu rovnice derivujeme podľa teploty, dostaneme:

$$-\Delta S_T^0 = -12,54 - 12,54 \ln T + 226,55$$

Po úprave dostaneme závislosť zmeny štandardnej entropie od teploty:

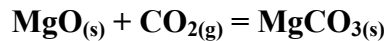
$$\Delta S_T^0 = -214,01 + 12,54 \ln T$$

b)  $\Delta H_{700}^0 = -329438 + 12,54 \cdot 700 = -320660 \text{ J mol}^{-1}$ , t.z. že reakcia je exotermická

$$\Delta S_{700}^0 = -131,86 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{Cl}_2$$

## 4.2 ÚLOHY

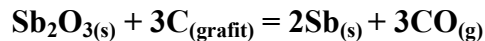
1. Vypočítajte zmenu štandardnej Gibbsovej energie reakcie:



pri teplote 298 K a určte, či uvedená reakcia pri tejto teplote je samovoľná, ak reaktanty a produkt sú v štandardnom stave.

Potrebné termodynamické údaje vyhľadajte v prílohe.

2. Zistite, či z termodynamického hľadiska možno uskutočniť redukciu  $\text{Sb}_2\text{O}_3$  pôsobením  $\text{C}_{(\text{grafit})}$



pri teplote 298 K, ak sú všetky reaktanty a produkty vo svojom štandardnom stave a je dané:

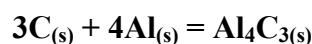
$$\text{– pre Sb}_{(s)} \quad \Delta H_{298}^0 = 0 \quad S_{298}^0 = 45,54 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{– pre CO}_{(g)} \quad \Delta H_{298}^0 = -110\,590 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}; \quad S_{298}^0 = 197,66 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{– pre Sb}_2\text{O}_{3(s)} \quad \Delta H_{298}^0 = -708\,900 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}; \quad S_{298}^0 = 141,07 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{– pre C}_{(\text{grafit})} \quad \Delta H_{298}^0 = 0; \quad S_{298}^0 = 5,74 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

3. Vypočítajte zmenu štandardnej Gibbsovej energie reakcie:



pri teplote 298 K , ak je dané:

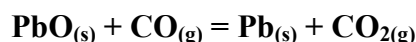
$$- \text{pre } C_{(s)} \quad S_{298}^0 = 5,74 \quad J \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$- \text{pre } Al_{(s)} \quad S_{298}^0 = 28,34 \quad J \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$- \text{pre } Al_4C_{3(s)} \quad S_{298}^0 = 88,74 \quad J \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\Delta H_{298}^0 = -215\,790 \quad J \text{ mol}^{-1}$$

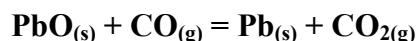
4. Pre uvedenú chemickú reakciu:



vypočítajte zmenu štandardnej Gibbsovej energie pri teplote 298 K za použitia údajov  $\Delta H_{298}^0$  ,  $S_{298}^0$  vyhl'adaných v tabuľkovej prílohe.

5. Pre reakciu:  $\text{MnS}_{(s)} + \text{H}_{2(g)} = \text{Mn}_{(s)} + \text{H}_2\text{S}_{(g)}$  vypočítajte  $\Delta G_{298}^0$  .

6. Závislosť zmeny štandardnej entalpie reakcie:



od teploty je daná vzťahom:

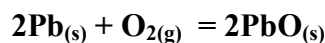
$$\Delta H_T^0 = -65\,960 + 1,42 \cdot T - 6,06 \cdot 10^{-3} T^2 + 8,09 \cdot 10^5 T^{-1},$$

ktorý platí v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 600\text{K} \rangle$ . Pri teplote 298 K zmena štandardnej

Gibbsovej energie reakcie je  $\Delta G_{298}^0 = -66\,802,9 \text{ J mol}^{-1}$  Pb

- pomocou Gibbsovej – Helmholtzovej rovnice odvodte závislosť zmeny štandardnej Gibbsovej energie reakcie od teploty;
- vypočítajte zmenu štandardnej Gibbsovej energie reakcie pri teplote 400 K.

7. Závislosť zmeny štandardnej Gibbsovej energie reakcie:

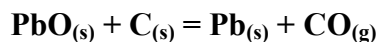


od teploty je daná rovnicou  $\Delta G_T^0 = -442\,883 - 28,91 T \log T + 288,56 T \text{ J mol}^{-1} \text{ O}_2$ ,

ktorá platí v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 600\text{K} \rangle$ ,

- odvodte závislosť zmeny štandardnej entalpie reakcie od teploty;
- odvodte závislosť zmeny štandardnej entropie reakcie od teploty;
- vypočítajte zmenu štandardnej entalpie a entropie reakcie pri teplote 500 K.

8. Zo závislosti zmeny štandardnej Gibbsovej energie reakcie



od teploty, ktorá je daná rovnicou

$$\Delta G_T^0 = 115\,105,77 + 10,31 T \ln T + 3,19 \cdot 10^{-3} T^2 - 4,395 \cdot 10^5 T^{-1} - 262,64 T$$

- odvodte závislosť zmeny štandardnej entalpie a entropie reakcie od teploty;
- vypočítajte zmenu štandardnej entalpie a entropie reakcie pri teplote 298 K.

9. Predpokladajte, že zmena štandardnej entalpie reakcie:  $4\text{Ag}_{(s)} + \text{O}_{2(g)} = 2\text{Ag}_2\text{O}_{(s)}$

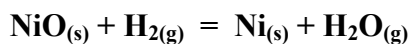
v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 1000\text{K} \rangle$  nezávisí od teploty:  $\Delta H_T^0 = -56\,260 \text{ J mol}^{-1} \text{ O}_2$ .

Zmena štandardnej Gibbsovej energie reakcie pri teplote 500 K má hodnotu  $4\,395 \text{ J mol}^{-1} \text{ O}_2$ . Odvodte závislosť  $\Delta G_T^0$  uvedenej reakcie od teploty.

10. Zo závislosti  $\Delta G_T^0$  od teploty chemických reakcií:

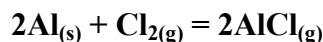


- odvodte závislosť  $\Delta G_T^0$  od teploty reakcie



- určte, či uvedená reakcia je pri teplote 298 K samovoľná, ak sú všetky reaktanty a produkty v štandardnom stave.

11. Závislosť zmeny štandardnej entalpie reakcie



od teploty je daná rovnicou:  $\Delta H_T^0 = -89\,430 - 21,36.T \text{ J mol}^{-1} \text{ Cl}_2$ , ktorá platí v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 933\text{K} \rangle$ . Pri teplote 298 K je zmena štandardnej Gibbsovej energie  $\Delta G_{298}^0 = -148\,607,82 \text{ J mol}^{-1} \text{ Cl}_2$ .

- Pomocou Gibbsovej – Helmholtzovej rovnice odvodte závislosť zmeny štandardnej Gibbsovej energie reakcie od teploty.
- Vypočítajte zmenu štandardnej Gibbsovej energie reakcie pri teplote 600 K.

12. Závislosť zmeny štandardnej entalpie reakcie:



od teploty je daná vzťahom:  $\Delta H_T^0 = 255\,005,7 - 20,33 \cdot T - 3,035 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 + 11,39 \cdot 10^5 \cdot T^{-1}$ ,

ktorý platí v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 1000\text{K} \rangle$ . Pri teplote 298 K zmena štandardnej

Gibbsovej energie reakcie má hodnotu  $\Delta G_{298}^0 = 193,996 \text{ kJ mol}^{-1} \text{SO}_3$ .

- Pomocou Gibbsovej – Helmholtzovej rovnice odvodte závislosť zmeny štandardnej Gibbsovej energie reakcie od teploty.
- Vypočítajte zmenu štandardnej Gibbsovej energie reakcie pri teplote 500 K.

### 4.3 Rovnovážna konštanta reakcií v plynnej fáze

Predpokladajme všeobecnú chemickú reakciu v plynnej fáze



Termodynamickú rovnovážnu konštantu tejto reakcie

$$K_a = \frac{a_C^c \cdot a_D^d}{a_A^a \cdot a_B^b} \quad (4.3.2)$$

môžeme vzhľadom na zvolený štandardný stav pre plyn ( $p^0 = 101\,325 \text{ Pa}$ , pri danej teplote)

kedy  $a_A = \frac{p_A}{p^0}$ ,  $a_B = \frac{p_B}{p^0}$ ,  $a_C = \frac{p_C}{p^0}$ ,  $a_D = \frac{p_D}{p^0}$  napísať v tvare:

$$K_a = \left( \frac{p_C^c \cdot p_D^d}{p_A^a \cdot p_B^b} \right)_{\text{rovn.}} (p^0)^{-\Delta v} \quad (4.3.3)$$

kde  $\Delta v = (c + d) - (a + b)$

Zloženie sústavy v rovnovážnom stave je vyjadrené parciálnymi tlakmi jednotlivých zložiek a zlomok predstavuje rovnovážnu konštantu, ktorú označujeme  $K_p$ :

$$K_p = \left( \frac{p_C^c \cdot p_D^d}{p_A^a \cdot p_B^b} \right)_{\text{rovn.}} \quad (4.3.4)$$

Závislosť medzi  $K_a$  a  $K_p$  udáva vzťah:

$$K_a = K_p \cdot (p^0)^{-\Delta v} \quad (4.3.5)$$

V prípade, že  $\Delta v = 0$  t.j. nedochádza k zmene počtu mólov plyných zložiek potom  $K_a = K_p$ .

$K_a$  súvisí s  $\Delta G^0$  podľa rovnice:

$$\Delta G^0 = -RT \ln K_a \quad (4.3.6)$$

Rovnovážna konštanta chemickej reakcie vyjadrená pomocou mólových zlomkov,  $K_x$ , má tvar:

$$K_x = \left( \frac{x_C^c \cdot x_D^d}{x_A^a \cdot x_B^b} \right)_{\text{rovn.}} \quad (4.3.7)$$

Závislosť medzi  $K_p$  a  $K_x$  vyjadruje vzťah  $K_p = K_x \cdot p^{\Delta v}$  (4.3.8)

Závislosť medzi  $K_a$  a  $K_x$  vyjadruje vzťah  $K_a = K_x \left( \frac{p_{\text{celk}}}{p^0} \right)^{\Delta v}$  (4.3.9)

$K_a = K_x$  vtedy, ak  $p_{\text{celk}} = p^0$  a aj vtedy, ak  $\Delta v = 0$

Ak sa rovnovážna konštanta vyjadrená pomocou látkového množstva označí symbolom  $K_n$  matematicky sa formuluje vzťahom:

$$K_n = \left( \frac{n_C^c \cdot n_D^d}{n_A^a \cdot n_B^b} \right)_{\text{rovn.}} \quad (4.3.10)$$

Rovnovážna konštanta vyjadrená pomocou mólových koncentrácií je označovaná symbolom  $K_c$  a matematicky sa vyjadruje vzťahom:

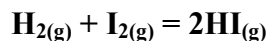
$$K_c = \left( \frac{c_C^c \cdot c_D^d}{c_A^a \cdot c_B^b} \right)_{\text{rovn.}} \quad (4.3.11)$$

Vzťah medzi  $K_p$  a  $K_c$ :  $K_p = K_c \cdot (RT)^{\Delta v}$ . (4.3.12)

V heterogénnych chemických reakciách sú aktivity čistých kondenzovaných zložiek (s a l) rovné jednej, a preto sa termodynamická rovnovážna konštanta vypočíta iba pomocou aktivít plynných reaktantov a/ alebo produktov.

## Príklady

1. Rovnovážna konštanta chemickej reakcie



pri teplote 718 K je  $K_n = 50,2$ . Vypočítajte, aké bude rovnovážne zloženie zmesi, ak do reakcie za vzniku jodovodíka vstupuje

a) 1 mól vodíka a 1 mól plynného jódu

b) 8 mólov vodíka a 1 mól jódu

RIEŠENIE:

a) Ak označíme časť mólu vodíka a jódu, ktorá zreaguje symbolom  $x$ , potom pre jednotlivé rovnovážne látkové množstvá možno písať

$$n_{\text{H}_2} = 1 - x \quad ; \quad n_{\text{I}_2} = 1 - x \quad ; \quad n_{\text{HI}} = 2 \cdot x$$

Rovnovážna konštanta pre uvedenú reakciu  $K_n = \frac{n_{\text{HI}}^2}{n_{\text{H}_2} \cdot n_{\text{I}_2}}$

teda 
$$50,2 = \frac{(2x)^2}{(1-x)(1-x)}$$

Riešením tejto kvadratickej rovnice dostaneme  $x = 0,78$

Rovnovážna zmes bude obsahovať:

$$n_{\text{H}_2} = 1 - 0,78 = 0,22 \text{ mólov}$$

$$n_{\text{I}_2} = 1 - 0,78 = 0,22 \text{ mólov}$$

$$n_{\text{HI}} = 2 \cdot 0,78 = 1,56 \text{ mólov}$$

b) Pre jednotlivé látkové množstvá možno písať

$$n_{\text{H}_2} = 8 - x \quad ; \quad n_{\text{I}_2} = 1 - x \quad ; \quad n_{\text{HI}} = 2 \cdot x$$

Rovnovážna konštanta  $K_n = \frac{n_{\text{HI}}^2}{n_{\text{H}_2} \cdot n_{\text{I}_2}}$  teda 
$$50,2 = \frac{4x^2}{(8-x)(1-x)}$$

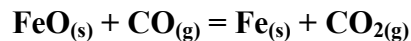
Riešením tejto kvadratickej rovnice dostaneme  $x = 0,989$

Rovnovážna zmes bude obsahovať

$$n_{\text{H}_2} = 7,011 \text{ mólov} \quad ; \quad n_{\text{I}_2} = 0,011 \text{ mólov} \quad ; \quad n_{\text{HI}} = 1,978 \text{ mólov}$$

Z uvedeného príkladu je zrejmé, že vhodným zložením východiskovej zmesi možno získať väčšie množstvo požadovaných produktov.

2. Určte rovnovážne zloženie plynnej zmesi pre reakciu:



ak teplota je 1 000 K a rovnovážna konštanta je  $K_p = 1,53$  pri tlaku 101 325 Pa.

RIEŠENIE:

$$\text{Rovnovážna konštanta } K_p = \frac{p_{\text{CO}_2}}{p_{\text{CO}}}$$

pričom  $p_{\text{CO}_2} + p_{\text{CO}} = 101325 \text{ Pa}$  z toho  $p_{\text{CO}} = 101325 - p_{\text{CO}_2}$



potom 
$$1,53 = \frac{p_{\text{CO}_2}}{101325 - p_{\text{CO}_2}}$$

a 
$$p_{\text{CO}_2} = 61\,275,592 \text{ Pa}, \quad p_{\text{CO}} = 40\,049,408 \text{ Pa}.$$

% obj.  $\text{CO}_2 = 100 \cdot x_{\text{CO}_2}$

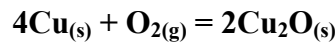
% obj.  $\text{CO} = 100 \cdot x_{\text{CO}}$

mólový zlomok 
$$x_{\text{CO}_2} = \frac{p_{\text{CO}_2}}{p} = \frac{61275,592}{101325} = 0,6047$$

mólový zlomok 
$$x_{\text{CO}} = \frac{p_{\text{CO}}}{p} = \frac{40049,408}{101325} = 0,3953$$

Zloženie plynnej zmesi je 60,47 % obj.  $\text{CO}_2$  a 39,53 % obj.  $\text{CO}$ .

3. Vypočítajte rovnovážnu konštantu  $K_a$  a rovnovážny parciálny tlak kyslíka, pri ktorom nastane rovnováha medzi tuhým  $\text{Cu}$  a tuhým  $\text{Cu}_2\text{O}$ , ktoré sú v štandardnom stave pri teplote 873 K a celkovom tlaku 101 325 Pa, ak prebieha chemická reakcia:



pre ktorú 
$$\Delta G_T^0 = -331\,780 + 135,21T \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1} \text{ O}_2.$$

RIEŠENIE:

Vypočítame zmenu štandardnej Gibbsovej energie reakcie pri teplote 873 K

$$\Delta G_{873}^0 = -331\,780 + 135,21 \cdot 873 = -213\,741,67 \text{ J mol}^{-1} \text{ O}_2$$

Pretože medzi rovnovážnou konštantou chemickej reakcie  $K_a$  a zmenou štandardnej Gibbsovej energie platí vzťah:

$$\Delta G^0 = -RT \ln K_a$$

potom 
$$\ln K_a = -\frac{\Delta G^0}{RT} = -\frac{(-213741,67)}{8,314 \cdot 873} = 29,448$$

$$K_a = 6,15 \cdot 10^{12}$$

Pre rovnovážnu konštantu  $K_a$  danej reakcie platí:

$$K_a = \frac{a_{\text{Cu}_2\text{O}}^2}{a_{\text{Cu}}^4 \cdot a_{\text{O}_2}}$$

Pretože  $\text{Cu}_2\text{O}_{(s)}$  a  $\text{Cu}_{(s)}$  sa nachádzajú v štandardnom stave, ich aktivity sú rovné 1. Potom pre rovnovážnu konštantu  $K_a$  platí:

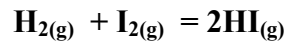
$$K_a = \frac{1}{a_{\text{O}_2}} = \frac{1}{\frac{p_{\text{O}_2}}{p^0}} = \frac{p^0}{p_{\text{O}_2}}$$

$$6,15 \cdot 10^{12} = \frac{101325}{p_{\text{O}_2}} \Rightarrow p_{\text{O}_2} = \frac{101325}{6,15 \cdot 10^{12}} = 1,647 \cdot 10^{-8} \text{ Pa}$$

Rovnovážna konštanta  $K_a = 6,15 \cdot 10^{12}$  a rovnovážny tlak kyslíka  $p_{\text{O}_2} = 1,647 \cdot 10^{-8} \text{ Pa}$ .

### 4.3 ÚLOHY

1. Vznik jodovodíka je možné popísať reakciou:

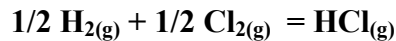


Vypočítajte rovnovážne konštanty  $K_n$  a  $K_c$  danej reakcie pri teplote  $448^\circ\text{C}$ , ak rovnovážna zmes obsahuje: 7,01 mólov  $\text{H}_2$ ; 0,01 mólov  $\text{I}_2$ ; 1,98 mólov HI

2. Parciálne tlaky  $\text{H}_2$ ,  $\text{Cl}_2$ , HCl v rovnovážnom stave pri určitej teplote sú:

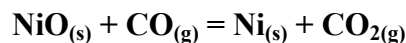
$$p_{\text{H}_2} = 5,03 \cdot 10^4 \text{ Pa}, \quad p_{\text{Cl}_2} = 4,0893 \cdot 10^4 \text{ Pa}, \quad p_{\text{HCl}} = 1,0132 \cdot 10^4 \text{ Pa};$$

a) Vypočítajte rovnovážne konštanty  $K_p$  a  $K_n$  reakcie:



b) Aké látkové množstvo plynného chlorovodíka je v rovnovážnom stave s 10 mólmí  $\text{H}_2$  a 8 mólmí  $\text{Cl}_2$ ?

3. Rovnovážna konštanta  $K_a$  chemickej reakcie:

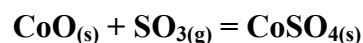


pri teplote 1 573 K má hodnotu 43.

Vypočítajte zloženie atmosféry v rovnovážnom stave v % obj., ak NiO a Ni sú v štandardnom stave.

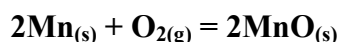
4. Pri teplote 823 K a celkovom tlaku 101 325 Pa vzniká z 1 mólu CO a 1 mólu  $\text{Cl}_2$  v rovnováhe 0,2 mólu  $\text{COCl}_2$ . Určte rovnovážne konštanty  $K_a$  a  $K_p$  pri tejto teplote reakcie  $\text{CO}_{(\text{g})} + \text{Cl}_{2(\text{g})} = \text{COCl}_{2(\text{g})}$

5. Rovnovážna konštanta  $K_a$  chemickej reakcie :



pri teplote 1 000 K má hodnotu 1 850. Vypočítajte rovnovážny parciálny tlak oxidu sírového pri tejto teplote. Predpokladajte, že CoO a CoSO<sub>4</sub> sú v štandardnom stave.

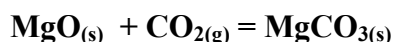
6. Vypočítajte parciálny tlak kyslíka, pri ktorom nastane rovnováha medzi tuhým Mn a tuhým MnO, ktoré sú v štandardnom stave pri teplote 1 273 K a celkovom tlaku 101 325 Pa, pri chemickej reakcii :



Zmena štandardnej Gibbsovej energie reakcie od teploty je daná závislosťou:

$$\Delta G_T^0 = -770\,370 + 147,46 \cdot T$$

7. Pri teplote 600 K je nad uhličitanom horečnatým rovnovážny tlak oxidu uhličitého  $p_{\text{CO}_2} = 22\,300$  Pa. Vypočítajte rovnovážnu konštantu  $K_p$  pre reakciu :



8. Pri teplote 423 K pre reakciu  $\text{Ag}_2\text{O}_{(s)} = 2 \text{Ag}_{(s)} + \frac{1}{2} \text{O}_{2(g)}$  je rovnovážna konštantu  $K_p = 0,485$ . Vypočítajte rovnovážny tlak kyslíka nad oxidom strieborným.

9. Závislosť zmeny štandardnej Gibbsovej energie od teploty pre chemickú reakciu:



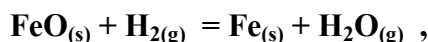
udáva rovnica :

$$\Delta G_T^0 = 329\,438 + 12,54 \cdot T \cdot \ln T - 226,55 \cdot T \quad \text{J mol}^{-1} \text{Cl}_2 \quad \text{v teplotnom intervale} \\ (298 \text{ K}; 933 \text{ K}). \text{ Vypočítajte :}$$

- zmenu štandardnej Gibbsovej energie pri teplote 700 K;
- rovnovážnu konštantu  $K_a$  pri teplote 700 K;
- rovnovážny parciálny tlak Cl<sub>2</sub> pri teplote 700 K.

Predpokladajte, že CoCl<sub>2(s)</sub> a Co<sub>(s)</sub> sú v štandardnom stave.

10. Vypočítajte rovnovážnu konštantu  $K_p$  pri teplote 1 073 K a tlaku 101 325 Pa pre reakciu:



ak  $\Delta G_{1073(\text{H}_2\text{O})}^0 = -187\,455 \text{ J mol}^{-1}$  a  $\Delta G_{1073(\text{FeO})}^0 = -194\,195 \text{ J mol}^{-1}$ . Predpokladajte, že

FeO<sub>(s)</sub> a Fe<sub>(s)</sub> sú v štandardnom stave.

#### 4.4 Závislosť Gibbsovej energie od zloženia sústavy

Zmenu Gibbsovej energie uzavretej sústavy, v ktorej pri konštantnom tlaku a teplote prebieha chemická reakcie:



kde  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$ , sú stechiometrické koeficienty reaktantov A, B a produktov C, D môžeme vypočítať zo vzťahu:

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln \left( \frac{a_C^c \cdot a_D^d}{a_A^a \cdot a_B^b} \right)_{\text{východiskové}}, \quad (dT = 0) \quad (4.4.2)$$

$$\text{kde} \quad \Delta G^0 = -RT \ln \left( \frac{a_C^c \cdot a_D^d}{a_A^a \cdot a_B^b} \right)_{\text{rovnovážne}} \quad (4.4.3)$$

pričom  $a_A^a$ ,  $a_B^b$ ,  $a_C^c$  a  $a_D^d$ , sú aktivity reaktantov a produktov umocnené na stechiometrický koeficient.

Rovnica (4.4.2) popisuje zmenu Gibbsovej energie ako funkciu zloženia sústavy a nazýva sa **reakčná izoterma**.

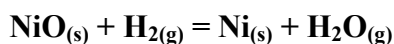
Rovnicu (4.4.3) môžeme napísať v tvare:

$$\Delta G^0 = -RT \ln K_a \quad (4.4.4)$$

Vzťah (4.4.4) je jedným z najdôležitejších vzťahov v termodynamike, podľa ktorého termodynamická funkcia  $\Delta G^0$  súvisí s rovnovážnou konštantou chemickej reakcie. Tento vzťah platí pre homogénne aj heterogénne rovnováhy.

#### Príklady

1. Pre heterogénnu reakciu:



kde NiO a Ni sú čistými tuhými fázami, je pri teplote 1 000 K a tlaku 101 325 Pa zmena štandardnej Gibbsovej energie  $\Delta G_{1000}^0 = -42\,740 \text{ J mol}^{-1} \text{ Ni}$ .

- Vypočítajte rovnovážnu konštantu  $K_a$  reakcie pri teplote 1 000 K;
- Určte parciálne tlaky vodíka a vodnej pary, ktorá je v rovnováhe s čistým Ni a NiO pri teplote 1 000 K a tlaku 101 325 Pa;
- Bude sa čistý NiO redukovať v atmosfére, ktorá obsahuje 90 obj. % vodnej pary a 10 obj. % vodíka pri teplote 1 000 K a celkovom tlaku 101 325 Pa?

RIEŠENIE:

a) Rovnovážnu konštantu  $K_a$  pri teplote 1 000 K vypočítame podľa vzťahu:

$$\Delta G^0 = -R T \ln K_a$$

z ktorého vyjadríme  $\ln K_a = -\frac{\Delta G^0}{RT}$

Po dosadení hodnôt  $\Delta G^0$ ,  $R$  a  $T$  dostávame:

$$\ln K_a = -\frac{(-42740)}{8,314 \cdot 1000} = 5,14$$

odkiaľ  $K_a = 170,71$

b) Rovnovážna konštanta  $K_a = \frac{a_{\text{H}_2\text{O}}}{a_{\text{H}_2}} = \frac{\frac{p_{\text{H}_2\text{O}}}{p^0}}{\frac{p_{\text{H}_2}}{p^0}} = \frac{p_{\text{H}_2\text{O}}}{p_{\text{H}_2}}$

pričom  $p_{\text{H}_2\text{O}} + p_{\text{H}_2} = 101\,325 \text{ Pa} \Rightarrow p_{\text{H}_2\text{O}} = 101\,325 - p_{\text{H}_2}$

potom  $170,71 = \frac{101325 - p_{\text{H}_2}}{p_{\text{H}_2}}$

a  $p_{\text{H}_2} = 590,09 \text{ Pa}$ ,  $p_{\text{H}_2\text{O}} = 100\,734,91 \text{ Pa}$ .

b) Zmenu Gibbsovej energie reakcie pri teplote 1 000 K vypočítame podľa rovnice:

$$\Delta G_{1000} = \Delta G_{1000}^0 + RT \ln \left( \frac{x_{\text{H}_2\text{O}}}{x_{\text{H}_2}} \right)_{\text{vych.}}$$

pričom  $x_{\text{H}_2} = \frac{\% \text{obj. H}_2}{100}$  a  $x_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{\% \text{obj. H}_2\text{O}}{100}$

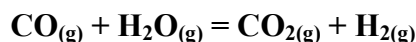
$$\Delta G_{1000} = -42\,740 + 8,314 \cdot 1\,000 \cdot \ln \frac{0,9}{0,1}$$

$$\Delta G_{1000} = -24\,472,2 \text{ J mol}^{-1} \text{ Ni}$$

Keďže  $\Delta G_{1000} < 0$ , bude sa NiO za daných podmienok redukovať.

## 4.4 ÚLOHY

1. Rovnovážna konštanta reakcie



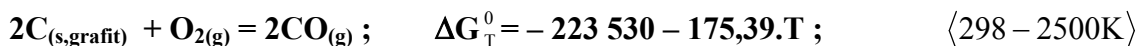
pri teplote 1 000 K je  $K_p = 1,4$ . Ktorým smerom bude prebiehať reakcia v reakčnej zmesi pozostávajúcej z 50 % CO, 5 % H<sub>2</sub>O, 25 % H<sub>2</sub> a 20 % CO<sub>2</sub>?

2. Rovnovážna konštanta  $K_a$  reakcie  $\text{C}_{(s)} + \text{CO}_{2(g)} = 2\text{CO}_{(g)}$

pri teplote 900 K má hodnotu 0,16.

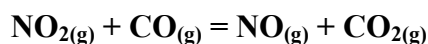
- určte, či uvedená reakcia je pri teplote 900 K samovoľná, ak sú reaktanty a produkt v štandardnom stave;
- určte, ktorým smerom bude prebiehať reakcia v reakčnej zmesi pozostávajúcej z 30 % obj. CO a 70 % obj. CO<sub>2</sub> pri teplote 900 K a celkovom tlaku 101 325 Pa.

3. Zo závislosti  $\Delta G_T^0$  od teploty chemických reakcií



- odvodte, závislosť  $\Delta G_T^0$  od teploty reakcie  $2\text{CO}_{(g)} = \text{C}_{(s,\text{gr})} + \text{CO}_{2(g)}$
- vypočítajte zmenu štandardnej Gibbsovej energie reakcie pri teplote 873 K;
- určte, či uvedená reakcia je pri teplote 873 K a tlaku 101 325 Pa samovoľná, ak východisková zmes obsahuje 20 % obj. CO a 80 % obj. CO<sub>2</sub>;
- vypočítajte  $\Delta G_{873}$ , ak východisková zmes obsahuje 25 % obj. CO a 75 % obj. CO<sub>2</sub> a určte ktorým smerom bude prebiehať reakcia pri teplote 873 K a tlaku 101 325 Pa.

4. Pre reakciu



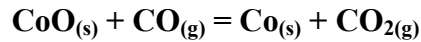
je zmena štandardnej Gibbsovej energie pri teplote 298 K rovná  $-221\,940 \text{ J mol}^{-1}$ . Vypočítajte rovnovážnu konštantu  $K_p$  reakcie pri teplote 298 K.

5. Určte, či nastane rozklad téglika z čistého oxidu zirkoničitého pri teplote 2 000 K, ak pri celkovom tlaku 101 325 Pa je parciálny tlak kyslíka v atmosfére  $2 \cdot 10^{-10}$  Pa. Závislosť zmeny štandardnej Gibbsovej energie od teploty je:

$$\Delta G_T^0 = 1\,080\,910 - 179,48T \quad \text{J mol}^{-1}$$



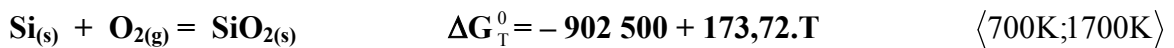
6. Pre heterogénnu reakciu



kde CoO a Co sú čistými tuhými fázami, je pri teplote 923 K a tlaku 101 325 Pa zmena štandardnej Gibbsovej energie rovná  $-32\,198 \text{ J mol}^{-1}$  Co.

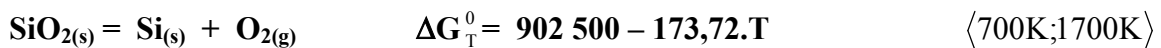
- Vypočítajte rovnovážnu konštantu  $K_p$  pri teplote 923 K;
- určte parciálny tlak oxidu uhličitého a oxidu uhoľnatého v plynnej fáze, ktorá je v rovnováhe s čistým CoO a Co pri teplote 923 K a tlaku 101 325 Pa;
- bude sa čistý oxid kobaltnatý redukovať v atmosfére, ktorá obsahuje 95 % obj.  $\text{CO}_2$  a 5 % obj. CO pri teplote 923 K a celkovom tlaku 101 325 Pa?

7. Zistite, či kremenné sklo  $\text{SiO}_2$  je stabilné pri styku s čistým grafitom pri teplote 1 600 K a tlaku 101 325 Pa, ak sú dané tieto údaje :

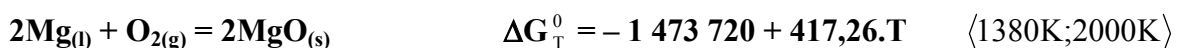
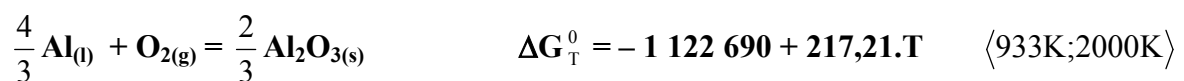


8. Určte, či nastane rozklad kremenného téglika pri teplote 1 273 K

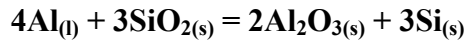
- pri tlaku vzduchu 10 Pa;
- pri tlaku vzduchu  $10^{-30}$  Pa, ak je dané



9. Určte teplotu, nad ktorou sa redukcia  $\text{Al}_2\text{O}_3$  horčíkom stane termodynamicky schodnou pri tlaku 101 325 Pa. Potrebné termodynamické údaje:



10. Rozhodnite, či je možné použiť kremenný téglik na tavenie hliníka pri teplote 1 000°C a tlaku 101 325 Pa. Uvažujte reakciu



a predpokladajte, že hliník a kremík sú čisté látky. Potrebne termodynamické údaje:

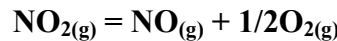
$$\frac{4}{3}\text{Al}_{(l)} + \text{O}_{2(g)} = \frac{2}{3}\text{Al}_2\text{O}_{3(s)} \quad \Delta G_T^0 = -1\,122\,690 + 217,21 \cdot T \quad \langle 933\text{K}; 2000\text{K} \rangle$$

$$\text{Si}_{(s)} + \text{O}_{2(g)} = \text{SiO}_{2(s)} \quad \Delta G_T^0 = -902\,500 + 173,72 \cdot T \quad \langle 700\text{K}; 1700\text{K} \rangle$$

11. Pri teplote 773 K sú v rovnovážnej plynnej zmesi tieto látkové množstvá plynov:

$$n_{\text{NO}_2} = 0,3168 \text{ mólu}, \quad n_{\text{NO}} = 0,6832 \text{ mólu}, \quad n_{\text{O}_2} = 0,3416 \text{ mólu}.$$

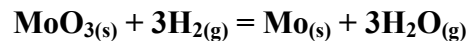
V sústave sa ustáľuje rovnováha podľa reakcie



pri celkovom tlaku 101 325 Pa. Určte smer priebehu reakcie, ak do reaktora privedieme pri teplote 773 K a tlaku 101 325 Pa tieto látkové množstvá:

$$n_{\text{NO}_2} = 7 \text{ mólov}, \quad n_{\text{NO}} = 10 \text{ mólov}, \quad n_{\text{O}_2} = 3 \text{ móly}.$$

12. Redukcia oxidu molybdénového prebieha podľa reakcie



a) vypočítajte zmenu štandardnej Gibbsovej energie na jeden mól vyredukovaného kovu pri teplote 1 000 K z nasledujúcich údajov:

$$\text{pre MoO}_{3(s)} \quad \Delta G_{1000}^0 = -495\,105 \text{ J mol}^{-1}$$

$$\text{pre H}_2\text{O}_{(g)} \quad \Delta G_{1000}^0 = -191\,720 \text{ J mol}^{-1}.$$

b) určte, či bude reakcia prebiehať samovoľne pri teplote 1 000 K, ak je pomer parciálnych tlakov na začiatku reakcie  $p_{\text{H}_2\text{O}} / p_{\text{H}_2} = 2$ .

## 4.5 Závislosť rovnovážnej konštanty od teploty

Závislosť rovnovážnej konštanty od teploty vyjadruje vzťah:

$$\left( \frac{\partial \ln K_a}{\partial T} \right)_p = \frac{\Delta H_T^0}{RT^2} \quad (4.5.1)$$

a pretože  $K_a$  závisí iba od teploty, možno tento vzťah napísať v tvare



$$\frac{d \ln K_a}{dT} = \frac{\Delta H_T^0}{RT^2} \quad (4.5.2)$$

Z rovnice (4.5.2) vyplýva, že pri exotermických reakciách ( $\Delta H_T^0 < 0$ ) hodnota rovnovážnej konštanty klesá s rastúcou teplotou a pri endotermických reakciách ( $\Delta H_T^0 > 0$ ) hodnota rovnovážnej konštanty sa s rastúcou teplotou zvyšuje.

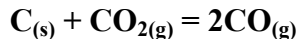
Rovnica (4.5.2) sa nazýva van 't Hoffova **reakčná izobara**.

V úzkom intervale teplôt možno  $\Delta H_T^0$  považovať za nezávislú od teploty, a tak zo známej hodnoty rovnovážnej konštanty  $K_{a,T_1}$  pri teplote  $T_1$  možno vypočítať hodnotu  $K_{a,T_2}$  pri inej teplote  $T_2$ , ak sa rovnica (4.5.2) integruje v hraniciach  $T_1$  a  $T_2$ , pričom platí:

$$\ln \frac{K_{a,T_2}}{K_{a,T_1}} = - \frac{\Delta H^0}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \quad (4.5.3)$$

## Príklady

1. Rovnovážna konštantka  $K_a$  reakcie



pri teplote 1 000 K má hodnotu 1,57.

- a) Odvodte rovnicu závislosti rovnovážnej konštanty od teploty pri tlaku 101 325 Pa, ak závislosť zmeny štandardnej entalpie od teploty určuje vzťah  $\Delta H_T^0 = 179642,5 - 4,48 \cdot T - 2,55 \cdot 10^{-3} T^2 - 16,42 \cdot 10^5 T^{-1}$ , ktorý platí v teplotnom intervale  $\langle 298K; 2300K \rangle$ ;
- b) Vypočítajte rovnovážnu konštantu reakcie pri teplote 1 500 K;
- c) Určte, či je reakcia endotermická alebo exotermická.

RIEŠENIE:

- a) Závislosť rovnovážnej konštanty od teploty vyjadruje vzťah:

$$\left( \frac{d \ln K_a}{dT} \right) = \frac{\Delta H_T^0}{RT^2}$$

Ak dosadíme do tejto rovnice za  $\Delta H_T^0$  závislosť, ktorá je uvedená v zadaní príkladu,

dostaneme

$$\ln K_a = \int \left( \frac{179642,5 - 4,48T - 2,55 \cdot 10^{-3} T^2 - 16,42 \cdot 10^5 T^{-1}}{RT^2} \right) dT.$$

Po integrácii platí

$$\ln K_a = -\frac{21607,2}{T} - 0,538 \cdot \ln T - 0,306 \cdot 10^{-3} T + \frac{0,987 \cdot 10^5}{T^2} + I$$

Integračná konštanta I sa vypočíta z hodnoty rovnovážnej konštanty pri teplote 1000 K:

$$\ln 1,57 = -\frac{21607,2}{1000} - 0,538 \cdot \ln 1000 - 0,306 \cdot 10^{-3} \cdot 1000 + \frac{0,987 \cdot 10^5}{1000^2} + I$$

teda  $I = 25,98$

a závislosť rovnovážnej konštanty od teploty má tvar

$$\ln K_a = -21607,2 \cdot T^{-1} - 0,538 \cdot \ln T - 0,306 \cdot 10^{-3} T + 0,987 \cdot 10^5 T^{-2} + 25,98$$

b) Po dosadení teploty 1 500K sa vypočíta hodnota rovnovážnej konštanty  $K_{a,1500}$

$$\ln K_{a,1500} = -21607,2 \cdot 1500^{-1} - 0,538 \cdot \ln 1500 - 0,306 \cdot 10^{-3} \cdot 1500 + 0,987 \cdot 10^5 \cdot (1500)^{-2} + 25,98$$

$$\ln K_{a,1500} = 7,2256$$

$$K_{a,1500} = 1374$$

c) Chemická reakcia je endotermická, lebo podľa Le Chatelierovho – Braunovho princípu hodnota rovnovážnej konštanty s rastúcou teplotou rastie

$$K_{a,1000} = 1,57$$

$$K_{a,1500} = 1374$$

$$K_{a,1500} > K_{a,1000}$$

## 4.5 ÚLOHY

1. Pre reakciu  $2\text{Ag}_2\text{O}_{(s)} = 4\text{Ag} + \text{O}_{2(g)}$

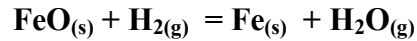
predpokladajte, že zmena štandardnej entalpie v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 1000\text{K} \rangle$

nezávisí od teploty;  $\Delta H_T^0 = 56\,260 \text{ J mol}^{-1} \text{ O}_2$ . Rovnovážna konštanta  $K_a$  reakcie pri

teplote 400 K má hodnotu 0,0976. Vypočítajte rovnovážnu konštantu  $K_a$  reakcie pri

teplote 600 K.

2. Pri teplote 800°C a tlaku 101 325 Pa je hodnota rovnovážnej konštanty reakcie



$K_p = 0,469$  a pri teplote 1 000°C  $K_p = 0,622$ .

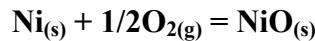
- a) Určte, či je reakcia exotermická alebo endotermická.  
 b) Zistite strednú hodnotu štandardnej reakčnej entalpie danej reakcie v uvedenom teplotnom intervale.
3. Pre reakciu  $2 \text{Pb}_{(s)} + \text{S}_{2(g)} = 2 \text{PbS}_{(s)}$  je zmena štandardnej entalpie reakcie pri teplote 298 K,  $\Delta H_{298}^0 = -196\,740 \text{ J mol}^{-1} \text{ S}_2$  a rozdiel izobarických mólových tepelných kapacít produktov a reaktantov

$$\Delta C_p = 5,62 + 12,65 \cdot 10^{-3} \cdot T + 3,77 \cdot 10^{-5} \cdot T^2 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ S}_2.$$

Rovnovážna konštanta  $K_a$  reakcie pri teplote 400 K má hodnotu  $1,9 \cdot 10^{32}$ .

- a) Odvodte závislosť rovnovážnej konštanty  $K_a$  od teploty pomocou van't Hoffovej reakčnej izobary.  
 b) Vypočítajte  $K_a$  pri teplote 500 K.  
 c) Rozhodnite, či je reakcia endotermická alebo exotermická.

4. Vypočítajte rovnovážnu konštantu  $K_a$  reakcie



pri teplote 1 200 K, ak pri teplote 1 000 K je hodnota  $K_{a,1000} = 6,056 \cdot 10^7$ .

Dané sú tieto údaje:

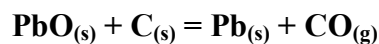
$$\text{– pre Ni}_{(s)} \quad C_p = 25,14 + 7,54 \cdot 10^{-3} T \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{– pre O}_{2(g)} \quad C_p = 30,0 + 4,19 \cdot 10^{-3} T - 1,68 \cdot 10^{-5} T^2 \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{– pre NiO}_{(s)} \quad C_p = 47,35 + 9,01 \cdot 10^{-3} T \quad \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\Delta H_{298}^0 = -240\,700 \text{ J mol}^{-1}$$

5. Pre reakciu



je zmena Gibbsovej štandardnej energie daná závislosťou

$$\Delta G_T^0 = 115\,105,77 + 10,31 \cdot T \cdot \ln T + 3,19 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 4,395 \cdot 10^5 T^{-1} - 262,64 \cdot T$$

- a) odvodte závislosť rovnovážnej konštanty  $K_a$  reakcie od teploty;  
 b) vypočítajte parciálny tlak oxidu uhoľnatého pri teplote 500 K, ak všetky tuhé fázy sú pri celkovom tlaku 101 325 Pa v štandardnom stave.

6. Pre reakciu  $3\text{C}_{(s)} + 4\text{Al}_{(s)} = \text{Al}_4\text{C}_{3(s)}$

závislosť zmeny štandardnej entalpie od teploty určuje vzťah:

$$\Delta H_T^0 = -225\,661 + 20,56T - 16,82 \cdot 10^{-3}T^2 + 15,61 \cdot 10^5 T^{-1},$$

ktorý platí v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 900\text{K} \rangle$ . Rovnovážna konštanta  $K_a$  reakcie pri teplote 298 K má hodnotu  $4,36 \cdot 10^{35}$ .

- pomocou van't Hoffovej reakčnej izobary odvodte závislosť rovnovážnej konštanty od teploty;
- vypočítajte rovnovážnu konštantu pri teplote 600 K;
- rozhodnite, či reakcia je exotermická alebo endotermická.

7. Pre reakciu  $\text{Sb}_2\text{O}_{3(s)} + 3\text{C}_{(s, \text{grafit})} = 2\text{Sb}_{(s)} + 3\text{CO}_{(g)}$

závislosť zmeny štandardnej entalpie od teploty určuje vzťah :

$$\Delta H_T^0 = 388\,083,15 - 0,04 \cdot T - 28,775 \cdot 10^{-3}T^2 - 24,99 \cdot 10^5 T^{-1},$$

ktorý platí v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 903\text{K} \rangle$ . Rovnovážna konštanta  $K_a$  reakcie pri teplote 298 K má hodnotu  $2,27 \cdot 10^{-39}$ .

- pomocou van't Hoffovej reakčnej izobary odvodte závislosť rovnovážnej konštanty od teploty;
- vypočítajte rovnovážnu konštantu reakcie pri teplote 900 K;
- rozhodnite, či reakcia je exotermická alebo endotermická.

8. Pre reakciu  $\text{N}_{2(g)} + 3\text{H}_{2(g)} = 2\text{NH}_{3(g)}$  je daná závislosť zmeny štandardnej entalpie od

teploty rovnicou :  $\Delta H_T^0 = -87\,353,827 - 35,1 \cdot T + 11,65 \cdot 10^{-3}T^2 + 14,48 \cdot 10^5 T^{-1}$ .

Zmena štandardnej Gibbsovej energie reakcie pri teplote 298 K má hodnotu

$$\Delta G_{298}^0 = -67\,492,5 \text{ J mol}^{-1} \text{ N}_2.$$

- Vypočítajte rovnovážnu konštantu  $K_a$  reakcie pri teplote 298 K.
- Pomocou van't Hoffovej reakčnej izobary odvodte závislosť rovnovážnej konštanty od teploty.
- Vypočítajte rovnovážnu konštantu reakcie pri teplote 1 000 K.

9. Závislosť zmeny štandardnej entalpie reakcie  $2\text{Al}_{(s)} + \text{Cl}_{2(g)} = 2\text{AlCl}_{(g)}$  od teploty je daná  $\Delta H_T^0 = -89\,430 - 21,36 \cdot T \text{ J mol}^{-1} \text{ Cl}_2$ , a platí v teplotnom intervale  $\langle 298\text{K}; 933\text{K} \rangle$ . Zmena štandardnej Gibbsovej energie pri teplote 298 K dosahuje hodnotu  $\Delta G_{298}^0 = -148\,607,82 \text{ J mol}^{-1} \text{ Cl}_2$ .

- Vypočítajte rovnovážnu konštantu reakcie  $K_a$  pri teplote 298 K.
- Pomocou van't Hoffovej reakčnej izobary odvodte závislosť rovnovážnej konštanty od teploty.
- Vypočítajte rovnovážnu konštantu reakcie  $K_a$  pri teplote 600 K a rozhodnite, či je reakcia endotermická alebo exotermická.

10. Termodynamická rovnovážna konštantu reakcie :  $\text{Mg}_{(s)} + \text{Cl}_{2(g)} = \text{MgCl}_{2(s)}$  pri teplote  $400^\circ\text{C}$  je  $2,43 \cdot 10^{41}$  a pri teplote  $600^\circ\text{C}$  je  $1,35 \cdot 10^{30}$ .

- Určte, či je reakcia endotermická alebo exotermická.
- Vypočítajte zmenu štandardnej Gibbsovej energie reakcie pri oboch teplotách.
- Bude vznikat'  $\text{MgCl}_2$  pri teplote  $400^\circ\text{C}$ , ak na tuhý horčík pôsobí atmosféra, v ktorej je začiatkový parciálny tlak chlóru 10 Pa pri celkovom tlaku 101 325 Pa?

11. Rovnovážne konštanty  $K_{a(1)}$  reakcie



a  $K_{a(2)}$  reakcie



majú tieto hodnoty

Teplota K	700	900	1 100	1 300
$K_{a(1)}$	$3,42 \cdot 10^{15}$	$2,79 \cdot 10^{11}$	$6,98 \cdot 10^8$	$1,1 \cdot 10^7$
$K_{a(2)}$	$1,1 \cdot 10^{13}$	$1,42 \cdot 10^9$	$4,78 \cdot 10^6$	$9,26 \cdot 10^4$

a) vypočítajte hodnoty rovnovážnej konštanty  $K_{a(3)}$  reakcie



pri všetkých teplotách ;

b) odvodte lineárnu rovnicu závislosti  $\ln K_{a(3)}$  od teploty;

c) určte zmenu štandardnej entalpie reakcie  $\Delta H_{(3)}^0$



## 5. FÁZOVÉ ROVNOVÁHY V JEDNOZLOŽKOVÝCH SÚSTAVÁCH

Pre rovnováhu medzi fázami 1 a 2 platí

$$G_{(1)} = G_{(2)} \quad (5.1)$$

$G_{(1)}$ ;  $G_{(2)}$  sú mólové Gibbsove energie fáz, závislé od tlaku a teploty, pričom nezáleží na tom, či ide o rovnováhu medzi dvomi stabilnými fázami s rôznou štruktúrou mriežky, tuhá fáza  $\alpha$  – tuhá fáza  $\beta$

alebo o rovnováhu medzi

tuhou fázou a kvapalinou	s – l
tuhou fázou a parou	s – g
kvapalinou a parou	l – g

Našou úlohou je nájsť hodnotu mólovej Gibbsovej energie pre inú teplotu a tlak, pričom pre infinitezimálnu zmenu stavu platí

$$dG_1 = dG_2 \quad (5.2)$$

$$G = f(T, P)$$

pre úplný diferenciál platí  $dG = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T \cdot dP + \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P \cdot dT$  (5.3)

$$\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T = V \quad \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P = -S$$

$$dG = V \cdot dP - S \cdot dT \quad (5.4)$$

pre fázou 1 platí  $dG_{(1)} = V_{(1)} \cdot dP - S_{(1)} \cdot dT$  (5.5)

pre fázovú rovnováhu v jednozložkovej sústave dostaneme:

$$\frac{dP}{dT} = \frac{S_{(2)} - S_{(1)}}{V_{(2)} - V_{(1)}} = \frac{\Delta S_{\text{premeny}}}{\Delta V_{\text{premeny}}} \quad (5.6)$$

$\Delta S_{\text{premeny}}$  zmena mólovej entropie pri uvažovanej fázovej premene

$\Delta V_{\text{premeny}}$  zmena mólového objemu pri fázovej premene.

Zmenu mólovej entropie fázovej premeny

$$\Delta S_{\text{premeny}} = \frac{\Delta H_{\text{premeny}}}{T_{\text{premeny}}} \quad (5.7)$$

a rovnica

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta S_{\text{premeny}}}{\Delta V_{\text{premeny}}} = \frac{\Delta H_{\text{premeny}}}{T_{\text{premeny}} \cdot \Delta V_{\text{premeny}}} \quad (5.8)$$

ktorú odvodil Clapeyron platí pre akúkoľvek fázovú premenu.

Pri väčšine látok, s výnimkou  $H_2O$ , Bi, Ga, Si, a pod. je mólový objem kvapalnej fázy väčší ako mólový objem tuhej fázy. Mólový objem pary je vždy väčší ako mólový objem kondenzovanej fázy

$$V_{(g)} \gg V_{(l)} > V_{(s)}$$

Mólová entropia všetkých látok sa pri fázových premenách mení nasledovne

$$S_{(g)} \gg S_{(l)} > S_{(s)}$$

### Výpočet rovnováh medzi dvomi tuhými fázami v jednozložkovej sústave:

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta H_{\text{premeny}}}{T_{\text{premeny}} \cdot \Delta V_{\text{premeny}}} \quad (5.9)$$

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta H_{\alpha-\beta}}{T_{\alpha-\beta} \cdot (V_{\beta} - V_{\alpha})} \quad (5.10)$$

### Výpočet rovnováh medzi tuhú a kvapalnú fázou v jednozložkovej sústave:

– za  $\Delta H_{\text{premeny}}$  dosadíme mólovú entalpiu topenia  $\Delta H_{\text{top}}$  a za  $T_{\text{premeny}}$  dosadíme teplotu topenia  $T_{\text{top}}$  pri normálnom tlaku 101 325 Pa, ktorá sa nazýva normálna teplota topenia.

–  $\Delta V_{\text{premeny}}$  sa rovná rozdielu mólových objemov kvapalnej a tuhej fázy

$$\Delta V_{\text{premeny}} = V_{(l)} - V_{(s)} \quad (5.11)$$

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta H_{\text{top}}}{T_{\text{top}} \cdot (V_l - V_s)} \quad (5.12)$$

$$\Delta S_{\text{top}} = \frac{\Delta H_{\text{top}}}{T_{\text{top}}} \quad (5.13)$$

Pri topení akejkoľvek tuhej látky sa entropia vždy zvýši  $\Delta S_{\text{top}} > 0$

teda  $\frac{dP}{dT}$  závisí iba od zmeny mólového objemu pri topení. Ak sa pri topení látok mólový

objem zväčšuje, potom  $\frac{dP}{dT} > 0$  z čoho vyplýva, že pri zvýšení celkového tlaku nad sústavou sa bude teplota topenia zvyšovať.

Ak sa pri topení látok mólový objem znižuje, napr. pri topení ľadu, bizmutu alebo gália potom

$$\frac{dP}{dT} < 0$$

Čo znamená, že pri zvyšovaní celkového tlaku nad sústavou sa bude teplota topenia znižovať.



### Výpočet rovnováh kondenzovaná fáza – para:

Pojmom kondenzovaná fáza rozumieme kvapalnú alebo tuhú fázu. Pri výpočte rovnováh v heterogénnej jednozložkovej sústave medzi kondenzovanou fázou a jej parou za  $\Delta H_{\text{premeny}}$  dosadíme mólovú entalpiu vyparovania  $\Delta H_{\text{vyp}}$  alebo mólovú entalpiu sublimácie  $\Delta H_{\text{sub}}$  a  $\Delta V_{\text{premeny}}$  sa rovná rozdielu mólových objemov plynnej a kondenzovanej fázy

$$\Delta V_{\text{vyp}} = V_{(g)} - V_{(l)} \quad (5.14)$$

alebo 
$$\Delta V_{\text{sub}} = V_{(g)} - V_{(s)} \quad (5.15)$$

Clausius poukázal na skutočnosť, že zmena mólového objemu pri vyparovaní a pri sublimácii je veľká. To znamená, že  $V_{(l)}$  ale aj  $V_{(s)}$  sú v porovnaní s  $V_{(g)}$  zanedbateľne malé, preto možno mólové objemy tuhej a kvapalnej fázy v (5.14) a (5.15) zanedbať

$$\Delta V_{\text{vyp}} = V_{(g)} \quad (5.16)$$

$$\Delta V_{\text{sub}} = V_{(g)} \quad (5.17)$$

Ak sa plynná fáza správa ako ideálny plyn možno podľa stavovej rovnice ideálnych plynov pre látkové množstvo 1 mólu plynu napísať:

$$V_{(g)} = \frac{RT}{P} \quad (5.18)$$

Po dosadení (5.16) a (5.18) do Clapeyronovej rovnice (5.8) Clausius odvodil vzťah:

$$\frac{dP}{P} = \frac{\Delta H_{\text{vyp}}}{RT^2} \cdot dT \quad (5.19)$$

Uvedená rovnica sa nazýva Clausiova – Clapeyronova rovnica.

Pre rovnováhu tuhej látky a pary platí vzťah:

$$\frac{dP}{P} = \frac{\Delta H_{\text{sub}}}{RT^2} \cdot dT \quad (5.20)$$

Rovnicu (5.19) možno integrovať v hraniciach tlakov  $P_1$  až  $P_2$ , ktoré zodpovedajú teplotám  $T_1$  a  $T_2$  za predpokladu, že v uvažovanom teplotnom intervale je mólová entalpia vyparovania konštantná. Po integrácii platí:

$$\ln \frac{P_2}{P_1} = -\frac{\Delta H_{\text{vyp}}}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \quad (5.21)$$

Z rovnice (5.21) môžeme vypočítať tlak nasýtenej pary pri akejkoľvek teplote zo známeho tlaku nasýtenej pary pri inej teplote za predpokladu, že  $\Delta H_{\text{vyp}}$  je v danom teplotnom intervale konštantná. Rovnicu (5.21) môžeme používať aj na výpočet zmeny teploty varu látky pri zmene celkového tlaku nad kvapalnou fázou.

## Príklady

1. Olovo sa topí pri teplote 600,4 K, ak je tlak 101 325 Pa. Mólový objem tuhého olova je  $18,73 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$  a roztaveného olova  $19,41 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$  pri normálnej teplote topenia. Mólová entalpia topenia je  $5 123 \text{ J mol}^{-1}$ . Vypočítajte, o koľko sa zmení teplota topenia, ak sa tlak zvýši o 101 325 Pa.

RIEŠENIE:

Zmena mólového objemu  $\Delta V$  sa rovná rozdielu mólových objemov kvapalnej a tuhej fázy  $\Delta V = V_{(l)} - V_{(s)}$  teda  $\Delta V = 0,68 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} = 0,68 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$

Pri výpočte použijeme Clapeyronovu rovnicu, ktorá platí všeobecne pre akúkoľvek fázovú premenu v jednozložkovej sústave:

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta H_{\text{premeny}}}{T_{\text{premeny}} \cdot \Delta V_{\text{premeny}}}$$

Po dosadení hodnôt do tejto rovnice platí:

$$\frac{dP}{dT} = \frac{5123}{600,4 \cdot 0,68 \cdot 10^{-6}}$$

$$\frac{dP}{dT} = 12548007 \text{ Pa} \cdot \text{K}^{-1}$$

prevrátená hodnota výrazu t.j.  $\frac{dT}{dP} = 7,96939 \cdot 10^{-8} \text{ K} \cdot \text{Pa}^{-1}$

vyjadruje zmenu teploty topenia pri zmene tlaku o 1Pa.

Ak sa tlak zvýši o 101 325 Pa, potom

$$\Delta T_{\text{top}} = 101325 \cdot 7,96939 \cdot 10^{-8}$$

$$\Delta T_{\text{top}} = 8,0749 \cdot 10^{-3} \text{ K}$$

Ak sa tlak zvýši o 101 325 Pa teplota topenia sa zvýši o  $8,0749 \cdot 10^{-3} \text{ K}$ .

Pre zmenu teploty, ak platí  $\Delta T_{\text{top}} = T_2 - T_1$  potom

$$T_2 = \Delta T_{\text{top}} + T_1 = 8,0749 \cdot 10^{-3} + 600,4$$

$$T_2 = 600,40807 \text{ K}$$

Teplota topenia olova pri zvýšenom tlaku bude 600,40807 K.

2. Pri teplote topenia kremíka je mólový objem roztaveného kremíka  $11,12 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$  a tuhého kremíka  $12,29 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ . Pri zvýšení tlaku o  $10^8 \text{ Pa}$  klesla teplota topenia o 4,24 K.

Za predpokladu, že objem a entropia nezávisia od tlaku a teploty, vypočítajte zmenu mólovej entropie pri topení kremíka.

RIEŠENIE:

$$\frac{\Delta P}{\Delta T} = \frac{\Delta H_{\text{top}}}{T \cdot \Delta V}$$

$$\frac{10^8}{(-4,24)} = \frac{\Delta S_{\text{Top}}}{V_1 - V_s}$$

$$\Delta S_{\text{top}} = \frac{(11,12 - 12,29) \cdot 10^{-6} \cdot 10^8}{(-4,24)}$$

$$\Delta S_{\text{top}} = 27,59 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}.$$

3. Stanovte zmenu bodu varu vody so zmenou tlaku o 506 625 Pa za predpokladu, že mólový objem vodnej pary je  $29\,700 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ , mólový objem vody je  $18 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$  a mólová entalpia vyparovania vody  $\Delta H_{\text{vyp}} = 40\,725 \text{ J mol}^{-1}$  pri normálnej teplote varu.

RIEŠENIE:

$$\frac{\Delta P}{\Delta T} = \frac{\Delta H_{\text{vyp}}}{T \cdot \Delta V}$$

$$\frac{\Delta T}{\Delta P} = \frac{T \cdot \Delta V}{\Delta H_{\text{vyp}}}$$

$$\Delta T = \frac{\Delta P \cdot T \cdot \Delta V}{\Delta H_{\text{vyp}}} = \frac{506625 \cdot 29700 - 18 \cdot 10^{-6}}{40725} = 137,7 \text{ K}$$

4. Tlak nasýtenej pary ľadu pri 263,16 K je 260 Pa a pri teplote 271,16 K je 517,3 Pa. Podľa Clausiovej – Clapeyronovej rovnice vypočítajte mólovú entalpiu sublimácie ľadu. Predpokladajte, že mólová entalpia sublimácie nezávisí od teploty.

RIEŠENIE:

Pre rovnováhu tuhej látky a pary platí vzťah:

$$\frac{dP}{P} = \frac{\Delta H_{\text{sub}}}{RT^2} \cdot dT$$

Túto rovnicu možno integrovať v hraniciach tlakov  $P_1$  až  $P_2$ , ktoré zodpovedajú teplotám  $T_1$  a  $T_2$ , za predpokladu, že v uvažovanom teplotnom intervale je mólová entalpia sublimácie konštantná.

Po integrácii platí:

$$\ln \frac{P_2}{P_1} = -\frac{\Delta H_{\text{subl}}}{R} \cdot \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

kde  $P_1 = 260 \text{ Pa}$  ;  $T_1 = 263,16 \text{ K}$

$P_2 = 517,3 \text{ Pa}$  ;  $T_2 = 271,16 \text{ K}$

Po dosadení týchto hodnôt dostávame:

$$\ln \frac{517,3}{260} = -\frac{\Delta H_{\text{subl}}}{8,314} \left( \frac{1}{271,16} - \frac{1}{263,16} \right)$$

odkiaľ  $\Delta H_{\text{subl}} = 51\,017 \text{ J mol}^{-1}$

5. Vypočítajte pri akom tlaku nastane var zinku pri teplote  $1\,300 \text{ K}$ . Mólová entalpia vyparovania zinku je  $114\,821 \text{ J mol}^{-1}$  a normálna teplota varu je  $1\,180 \text{ K}$ . Predpokladajte, že mólová entalpia vyparovania nezávisí od teploty a tlaku.

RIEŠENIE:

Pri teplote  $1\,300 \text{ K}$  vypočítame tlak nasýtenej pary zinku nad kvapalným zinkom za predpokladu, že  $\Delta H_{\text{vyp}}$  je konštantná z rovnice

$$\ln \frac{P_2}{P_1} = -\frac{\Delta H_{\text{vyp}}}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

v ktorej  $P_1$  je tlak nasýtenej pary  $101\,325 \text{ Pa}$  pri normálnej teplote varu zinku  $T_1 = 1180 \text{ K}$  a  $T_2$  je teplota  $1\,300 \text{ K}$

$$\ln P_2 - \ln 101325 = -\frac{114821}{8,314} \left( \frac{1}{1300} - \frac{1}{1180} \right)$$

odkiaľ  $\ln P_2 = 12,6063$

$$P_2 = 298\,432,78 \text{ Pa}$$

Aby teplota varu zinku bola  $1\,300 \text{ K}$ , musí byť tlak v sústave rovnaký ako tlak nasýtenej pary zinku, t.j.  $298\,432,78 \text{ Pa}$ .

## 5. ÚLOHY

1. Hustota tuhého cínu je  $7,18 \text{ g.cm}^{-3}$  a hustota roztaveného cínu je  $6,988 \text{ g cm}^{-3}$ . Mólová entalpia topenia  $\Delta H_{\text{top}} = 7\,199 \text{ J mol}^{-1}$ . Normálna teplota topenia cínu je  $504,8 \text{ K}$ . Ako sa zmení teplota topenia cínu, ak tlak vzrastie o  $200\,000 \text{ Pa}$ ?  $M(\text{Sn}) = 118,7 \text{ g mol}^{-1}$

2. Cín sa topí pri teplote 504,8 K, ak je tlak 101 325 Pa. Mólový objem tuhého cínu je  $16,53 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$  a roztaveného cínu  $16,983 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ , pri normálnej teplote topenia. Mólová entalpia topenia je  $7 199 \text{ J mol}^{-1}$ . Vypočítajte tlak, ktorý pôsobí na kov, ak sa jeho teplota topenia zvýšila z 504,8 K o 10 K.
3. Tlak nasýtenej pary nad roztaveným tantalom pri teplote 4 000 K je 149,1 Pa. Normálna teplota varu  $T_a$  je 5 425 K. Vypočítajte mólovú entalpiu vyparovania tantalu pri teplote varu.
4. Vypočítajte pri akom tlaku nastane var sodíka pri teplote 1 373 K. Mólová entalpia vyparovania sodíka je  $96 780 \text{ J mol}^{-1}$  a normálna teplota varu je 1 187 K. Predpokladajte, že mólová entalpia vyparovania nezávisí od teploty a tlaku.
5. Vypočítajte, pri akom tlaku nastane var zinku pri teplote 1 000 K. Mólová entalpia vyparovania zinku je  $114 821 \text{ J mol}^{-1}$  a normálna teplota varu je 1 180 K. Predpokladajte, že mólová entalpia vyparovania nie je závislá od teploty a tlaku.
6. Mólový objem ľadu pri teplote trojitého bodu 273,16 K a zodpovedajúcom tlaku nasýtenej pary je  $19,63 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$  a kvapalnej vody  $18 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ . Hodnota dotyčnice rovnovážnej krivky topenia ľadu v tom istom bode je  $dp/dT = -1,357 \cdot 10^7 \text{ Pa} \cdot \text{K}^{-1}$ . Vypočítajte mólovú entalpiu tuhnutia kvapalnej vody pri 273,16 K a zodpovedajúcom tlaku jej nasýtenej pary.
7. Stanovte pri akej teplote sa topí bizmut pri tlaku 10 132,5 kPa, ak hustota tuhého bizmutu je  $9,637 \cdot 10^6 \text{ g m}^{-3}$  a kvapalného  $10,005 \cdot 10^6 \text{ g m}^{-3}$ . Mólová entalpia topenia bizmutu  $\Delta H_{\text{top}} = 10 890 \text{ J mol}^{-1}$ . Normálna teplota topenia Bi je 544,3 K.  $M(\text{Bi}) = 208,98 \text{ g mol}^{-1}$ .
8. Stanovte zmenu teploty topenia kadmia pri tlaku  $101,325 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ , ak mólová entalpia topenia kadmia je  $6 404 \text{ J mol}^{-1}$ , teplota topenia pri tlaku 101 325 Pa je 594 K. Hustota tuhého kadmia je  $8,366 \text{ g cm}^{-3}$  a kvapalného  $7,989 \text{ g cm}^{-3}$ .  $M(\text{Cd}) = 112,4 \text{ g mol}^{-1}$ .

9. Antimón sa topí pri teplote 903,5 K, ak je tlak 101 325 Pa. Mólový objem tuhého antimónu je  $18,63 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$  a roztaveného antimónu je  $18,83 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$  pri normálnej teplote topenia. Mólová entalpia topenia je  $19 967 \text{ J mol}^{-1}$ . Vypočítajte teplotu topenia:

a) pri tlaku 506 625 Pa;

b) pri tlaku 202 650 Pa.

10. Vypočítajte, pri akom tlaku bude vriť voda pri teplote  $90^\circ\text{C}$ . Predpokladajte, že mólová entalpia vyparovania vody  $\Delta H_{\text{vyp}} = 40 725 \text{ J mol}^{-1}$  je konštantná. / Normálnu teplotu varu vody poznáte. /

11. Vypočítajte, pri akej teplote vrie voda pri tlaku 150 000 Pa, t.j. pri akej teplote sa tlak nasýtenej pary kvapalnej vody rovná 150 000 Pa. Predpokladajte, že mólová entalpia vyparovania vody  $\Delta H_{\text{vyp}} = 40 725 \text{ J mol}^{-1}$  je konštantná.

12. Závislosť tlaku nasýtenej pary nad roztaveným striebrom od teploty je daná vzťahom:

$$\log p = - \frac{14 400}{T} + 13,825 \quad \langle 1234\text{K}; T_{\text{var}} \rangle$$

Vypočítajte tlak nasýtenej pary nad striebrom pri teplote 1 500 K.

13. Závislosti tlakov nasýtenej pary nad tuhým a tekutým arzénom od teploty vyjadrujú

$$\text{rovnice : pre As}_{(s)} \text{ platí } \log p_{As} = - \frac{6947}{T} + 12,925$$

$$\text{pre As}_{(l)} \text{ platí } \log p_{As} = - \frac{2460}{T} + 8,815$$

Vypočítajte, pri akej teplote budú tlaky nad tuhým a tekutým arzénom rovnaké.

## 6. TERMODYNAMIKA ROZTOKOV

Ako roztoky označujeme homogénne (jednofázové) sústavy dvoch alebo viacerých zložiek, ktorých čiastočky sú v molekulovom disperznom stave homogénne rozložené po celom objeme sústavy. Roztoky môžu byť plynné, kvapalné alebo tuhé.

V termodynamike bol zavedený pojem ideálny roztok, v ktorom sa všetky silové pôsobenia medzi rozličnými časticami pokladajú za rovnaké. Jeho vznik nie je sprevádzaný zmenou entalpie ani zmenou objemu. Pre takto definované ideálne roztoky platia jednoduché rovnice.

U kvapalných roztokov je dôležitou veličinou **tlak pary zložky nad roztokom**, ktorý vystihuje snahu častíc danej zložky prechádzať z roztoku do plynnej fázy. Závislosť tlaku nasýtenej pary zložky nad roztokom od koncentrácie zložky v roztoku, vyjadruje **Raoultov zákon**, ktorý má pre zložky A a B tvar:

$$p_A = p_A^0 \cdot x_A \quad \text{alebo} \quad p_B = p_B^0 \cdot x_B \quad (6.1)$$

kde  $p_A$  je tlak pary zložky A nad roztokom,

$p_A^0$  – tlak pary čistej zložky A,

$x_A$  – mólový zlomok zložky A v roztoku.

Za predpokladu, že zložka B je neprchavá, môžeme  $p_A$  považovať za celkový tlak a po úprave vyjadriť zníženie tlaku pary rozpúšťadla nad roztokom v tvare

$$\frac{p_A^0 - p_A}{p_A^0} = \frac{\Delta p}{p_A^0} = x_B \quad (6.2)$$

kde  $x_B$  je mólový zlomok zložky B.

U reálnych roztokov je pre zachovanie platnosti Raoultovho zákona potrebné nahradiť koncentráciu aktivitou (pre vzájomné pôsobenie častíc zložiek v roztoku), s ktorou súvisí podľa vzťahu:

$$a_i = \gamma_i \cdot c_i \quad \text{alebo} \quad a_i = \gamma_i \cdot x_i \quad (6.3)$$

kde  $a_i$  je aktivita  $i$  –tej zložky ( Raoultova, Henryho atď.)

$\gamma_i$  – aktivitný koeficient  $i$  – tej zložky,

$c_i$  – koncentrácia  $i$  –tej zložky,

$x_i$  – mólový zlomok  $i$  –tej zložky,

Číselná hodnota aktivity závisí od voľby štandardného stavu, vzhľadom na ktorý sa aktivita vyjadruje.

## Príklady

1. Za predpokladu, že  $\text{CCl}_4$  s  $\text{SnCl}_4$  tvoria ideálny roztok, vypočítajte zloženie roztoku, ktorý vrie pri teplote  $100^\circ\text{C}$  a tlaku  $101\,325\text{ Pa}$ . Tlak pár pri  $100^\circ\text{C}$   $\text{CCl}_4$  je  $193\,314\text{ Pa}$  a  $\text{SnCl}_4$  je  $66\,660\text{ Pa}$ .

RIEŠENIE:

Podľa Raoultovho zákona pre  $\text{CCl}_4$  platí  $p_1 = p_1^0 \cdot x_1$

kde  $p_1$  je tlak pary  $\text{CCl}_4$  nad roztokom

$p_1^0$  je tlak pary nad čistým  $\text{CCl}_4$

$x_1$  je mólový zlomok  $\text{CCl}_4$  v roztoku

a podľa Daltonovho zákona pre celkový tlak platí

$$P = p_1 + p_2 = p_1^0 \cdot x_1 + p_2^0 \cdot x_2$$

keďže platí  $x_1 + x_2 = 1$ , potom možno písať

$$P = p_1^0 \cdot x_1 + p_2^0 (1 - x_1) = p_1^0 \cdot x_1 + p_2^0 - p_2^0 \cdot x_1$$

po úprave tohto vzťahu pre mólový zlomok  $\text{CCl}_4$  platí

$$x_1 = \frac{P - p_2^0}{p_1^0 - p_2^0} = \frac{101325 - 66660}{193314 - 66660} = 0,274$$

mólový zlomok  $\text{SnCl}_4$  je

$$x_2 = 1 - x_1 = 1 - 0,274 = 0,726.$$

2. Tlak pár Hg nad amalgámom s obsahom Sn v ortuti je  $100\,536,61\text{ Pa}$  a tlak pár čistej ortuti pri rovnakej teplote je  $102\,496,42\text{ Pa}$ . Vypočítajte hodnotu mólového zlomku cínu rozpusteného v ortuti, ak predpokladáme, že roztok je ideálny.

RIEŠENIE:

$$p_{\text{Hg}} = 100\,536,61\text{ Pa}; \quad p_{\text{Hg}}^0 = 102\,496,42\text{ Pa}$$

Podľa Raoultovho zákona  $p_{\text{Hg}} = p_{\text{Hg}}^0 \cdot x_{\text{Hg}} \Rightarrow x_{\text{Hg}} = \frac{p_{\text{Hg}}}{p_{\text{Hg}}^0}$

Po dosadení daných hodnôt dostávame  $x_{\text{Hg}} = \frac{100536,61}{102496,42} = 0,9809.$

Keďže platí:  $x_{\text{Hg}} + x_{\text{Sn}} = 1$

potom  $x_{\text{Sn}} = 1 - x_{\text{Hg}}$

$$x_{\text{Sn}} = 1 - 0,9809 = 0,0191.$$



## 6. ÚLOHY

1. Tlak nasýtenej pary čistého benzénu pri teplote  $100^{\circ}\text{C}$  je  $p_1^0 = 179,2 \text{ kPa}$  a čistého toluénu  $p_2^0 = 74,17 \text{ kPa}$ . Sústava, ktorá obsahuje benzén a toluén vrie pri teplote  $100^{\circ}\text{C}$  a pri tlaku  $101,325 \text{ kPa}$ . Zistite zloženie plynnej a kvapalnej fázy uvedenej sústavy za predpokladu ich ideálneho chovania.
2. Celkový tlak nasýtených pár kvapalného roztoku, ktorý obsahuje 1 mól látky A a dva móly látky B pri teplote  $50^{\circ}\text{C}$  je  $50\,000 \text{ Pa}$ . Keď kvapalná fáza obsahuje 4 móly látky A a 2 móly látky B, potom pri  $50^{\circ}\text{C}$  celkový tlak nasýtených pár je  $70\,000 \text{ Pa}$ . Vypočítajte tlak nasýtenej pary čistej látky A pri teplote  $50^{\circ}\text{C}$ . Kvapalná aj plynná fáza sa chovajú ideálne.
3. Celkový tlak nasýtenej pary nad  $100 \text{ kg}$  roztoku benzénu a toluénu pri teplote  $100^{\circ}\text{C}$  je  $126\,000 \text{ Pa}$ . Vypočítajte, koľko kilogramov benzénu a toluénu obsahuje roztok, ak tlak nasýtenej pary čistého benzénu pri danej teplote je  $p_1^0 = 179\,000 \text{ Pa}$  a toluénu  $p_2^0 = 74\,000 \text{ Pa}$ . Roztok považujte za ideálny.  
Mólová hmotnosť benzénu je  $78 \cdot 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}$ , toluénu  $92 \cdot 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}$ .
4. Ideálny roztok, ktorý sa skladá z  $0,5$  mólov látky A a z  $0,7$  mólov látky B sa ohreje na  $50^{\circ}\text{C}$ . Tlak pary čistej látky A pri tejto teplote je  $46\,662 \text{ Pa}$  a tlak pary čistej látky B pri tej istej teplote je  $101\,325 \text{ Pa}$ ;
  - a) určte zloženie roztoku v mólových zlomkoch;
  - b) určte zloženie plynnej fázy v mólových zlomkoch
5. Vypočítajte parciálne tlaky i celkový tlak nasýtenej pary nad roztokom benzénu a chlórbenzénu pri teplote  $303 \text{ K}$ , ak tento roztok možno považovať za ideálny. Mólový zlomok benzénu v roztoku je  $0,25$ , tlak nasýtených pár čistého benzénu pri teplote  $303 \text{ K}$  je  $15\,759 \text{ Pa}$ , chlórbenzénu  $3\,613 \text{ Pa}$ .
6. Zloženie nasýteného kvapalného roztoku látky A a B je také, že parciálne tlaky ich nasýtených pár pri teplote  $298 \text{ K}$  sú rovnaké /  $p_A = p_B$  /. Určte zloženie kvapalnej fázy, ak pri teplote  $298 \text{ K}$  je  $p_B^0 = 0,6 p_A^0$ . Správanie kvapalnej a plynnej fázy je ideálne.

7. Vypočítajte, koľko gramov cínu je potrebné rozpustiť v 250 g ortuti, aby bol tlak pary Hg nad zliatinou Hg – Sn rovný 93 324 Pa. Pri tej istej teplote je tlak pary nad čistou ortuťou 94 643,87 Pa. Mólová hmotnosť cínu je  $118,7 \text{ g mol}^{-1}$  a ortuti  $200,6 \text{ g mol}^{-1}$ .
8. Tlak pár Hg nad amalgámom s obsahom Sn v ortuti je 101 061,48 Pa a tlak pár čistej ortuti pri rovnakej teplote je 102 496,42 Pa. Vypočítajte hodnotu mólového zlomku cínu rozpusteného v ortuti, ak predpokladáme, že roztok je ideálny.
9. Vodný roztok vrie pri teplote  $101^\circ\text{C}$ . Čomu sa rovná vonkajší tlak, ak tlak pár vody pri teplote  $101^\circ\text{C}$  sa rovná 104 989,5 Pa a mólový zlomok rozpustenej látky sa rovná 0,043.
10. Tlak nasýtenej pary čistej vody pri teplote  $25^\circ\text{C}$  je 3,167 kPa. Aký bude tlak nasýtenej pary vody nad vodným roztokom glycerínu, ktorý obsahuje 10% hmot. glycerínu pri  $25^\circ\text{C}$ . Mólová hmotnosť vody je  $M_1 = 18,02 \text{ g mol}^{-1}$  a glycerínu  $M_2 = 92,09 \text{ g mol}^{-1}$ . Chovanie kvapalnej aj plynnej fázy považujte za ideálne.
11. Parciálny tlak nasýtených pár vody nad roztokom látky B vo vode pri teplote 298 K má hodnotu 2 070 Pa. Tlak nasýtených pár čistej vody pri tej istej teplote je 2 338,4 Pa. Vypočítajte hodnotu aktivity vody v uvedenom roztoku.

## VÝSLEDKY RIEŠENIA ÚLOH

### Opakovanie matematických vzorcov

- a) 2 221,65
- b)  $1,05 \cdot 10^{-5}$
- c) 5 541,66
- d) 2 566,66
- e) 29,043
- f) 2 351,7

### 1.kapitola

1.  $V = 0,846 \text{ dm}^3$
2.  $V = 10,34 \text{ m}^3$
3.  $p = 973,68 \text{ Pa}$
4.  $V = 4,45 \text{ dm}^3$
5.  $p = 326 513,45 \text{ Pa}$
6.  $m = 0,513 \text{ kg}$
7.  $p = 30 050,6 \text{ Pa}$
8.  $n = 11,22 \text{ mol}$ ;  $m = 493,68 \text{ g}$
9.  $p_{\text{N}_2} = 683 900 \text{ Pa}$ ,  $p_{\text{H}_2} = 293 100 \text{ Pa}$
10. obj.%  $\text{O}_2 = 51,88$ ; obj.%  $\text{SO}_2 = 48,12$
11.  $p_{\text{O}_2} = 21 210 \text{ Pa}$
12.  $p_{\text{CO}} = 8 400 \text{ Pa}$
13.  $V = 2,1 \text{ m}^3$
14.  $\rho = 86,35 \text{ g m}^{-3}$
15.  $M = 57,99 \text{ g mol}^{-1}$

### 2.kapitola

1.  $\Delta U = 1,5 \text{ kJ}$
2.  $\eta = 25 \%$
3.  $\eta = 40 \%$
4.  $n = 1,74 \text{ mol}$
5.  $T = 372,96 \text{ K}$ ;  $V_1 = 30,6 \text{ dm}^3$
6. a)  $T = 1 371 \text{ K}$ ; b)  $w = 5 422,7 \text{ J}$
7.  $w = -33 501,4 \text{ J}$ ;  $q = 33 501,4 \text{ J}$ ;  $\Delta U = 0$
8.  $\Delta T = 1,79 \text{ K}$
9.  $w = -57 337,93 \text{ J}$
10.  $w = 0$ ;  $q_v = \Delta U = 31 928,5 \text{ J}$ ;  $\Delta H = 40 242,5 \text{ J}$
11.  $w = -831,4 \text{ J}$ ;  $q_p = \Delta H = 2 983,15 \text{ J}$ ;  $\Delta U = 2 151,75 \text{ J}$
12.  $q = 778 910,6 \text{ J}$
13.  $q = 423 637,5 \text{ J}$
14.  $q = 229 216,06 \text{ J}$
15.  $q = 171 389 \text{ J}$
16. a)  $a = 24,76$ ;  $b = 4,15 \cdot 10^{-3}$ ; b)  $C_{p,700} = 27,665 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
17. a)  $C_{p,1000} = 55,58 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ; b)  $\overline{C}_p = 52,17 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
18.  $\overline{C}_p = 35,25 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ;
19.  $\overline{C}_p = 29,404 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ;  $\overline{C}_v = 21,09 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ;

### 3. kapitola

1.  $\Delta H_{298}^0 = 883,65 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ Al}_2\text{O}_3$
2.  $\Delta H_{298}^0 = 577\,500 \text{ J mol}^{-1} \text{ Al}_2\text{O}_3$  ; endotermická reakcia
3.  $-27\,629,1 \text{ J}$
4. a)  $\text{C} + \text{O}_2 = \text{CO}_2$   
 b)  $\text{C} + \frac{1}{2} \text{O}_2 = \text{CO}$   
 c)  $\frac{1}{2} \text{N}_2 + \frac{3}{2} \text{H}_2 = \text{NH}_3$   
 d)  $\text{Ca} + \text{C} + \frac{3}{2} \text{O}_2 = \text{CaCO}_3$   
 e)  $\text{K} + \frac{1}{2} \text{Cl}_2 = \text{KCl}$
5.  $-889\,071,86 \text{ J}$
6. a)  $240\,200 \text{ J mol}^{-1} \text{ Zn}$ ; endotermický proces;  
 b)  $67\,629 \text{ J mol}^{-1}$ ; endotermický proces
7. a)  $\Delta H_{400}^0 = -59\,915,6 \text{ J mol}^{-1} \text{ O}_2$ ;  
 b)  $\Delta H_T^0 = -69\,517,45 + 7,38 \cdot T + 21,655 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 + 12,74 \cdot 10^5 \cdot T^{-1}$
8. a)  $\Delta H_{298}^0 = 179\,582 \text{ J mol}^{-1} \text{ CO}_2$   
 b)  $\Delta H_{1000}^0 = 170\,662,2 \text{ J mol}^{-1} \text{ CO}_2$   
 c)  $\Delta H_T^0 = 186\,679,9 - 10,78 \cdot T - 4,19 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 10,47 \cdot 10^5 \cdot T^{-1}$
9.  $\Delta H_{900}^0 = 361\,962,7 \text{ J mol}^{-1} \text{ Sb}_2\text{O}_3$
10.  $\Delta H_T^0 = 388\,083,15 - 0,04 \cdot T - 28,775 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 24,99 \cdot 10^5 \cdot T^{-1}$
11. a)  $\Delta H_{298}^0 = 252\,500 \text{ J mol}^{-1} \text{ SO}_3$ ;  
 b)  $\Delta H_{1000}^0 = 232\,779,7 \text{ J mol}^{-1} \text{ SO}_3$ ;  
 c) reakcia je endotermická
12. a)  $\Delta H_T^0 = -610\,572,5 - 157,86 \cdot T + 179,495 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 11,22 \cdot 10^5 \cdot T^{-1}$   
 b)  $\Delta H_{500}^0 = -646\,872,7 \text{ J mol}^{-1} \text{ O}_2$   
 c) reakcia je exotermická;  $\Delta H_{500}^0 < 0$
13. a)  $1\,247\,498,33 \text{ kJ}$  ;    b)  $1\,245\,916,12 \text{ kJ}$
14. a)  $\Delta H_T^0 = 179\,642,5 - 4,48 \cdot T - 2,55 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 16,42 \cdot 10^5 \cdot T^{-1} \text{ J mol}^{-1} \text{ CO}_2$   
 b)  $\Delta H_{1000}^0 = 170\,970,5 \text{ J mol}^{-1} \text{ CO}_2$   
 c)  $\Delta H_{1000}^0 > 0$ , reakcia je endotermická
15.  $\Delta H_{1000}^0 = 121\,411,61 \text{ J mol}^{-1} \text{ Co}$
16.  $\Delta H_T^0 = 1\,372\,047,04 - 26,71 \cdot T + 3,255 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 53,57 \cdot 10^5 \cdot T^{-1}$

### 4.1 kapitola

1.  $\Delta S = 811,49 \text{ J K}^{-1}$
2.  $\Delta S_{\text{top}} = 41,18 \text{ J K}^{-1}$
3.  $\Delta S = 269,08 \text{ J K}^{-1}$
4.  $\Delta S = -115,25 \text{ J K}^{-1}$

5.  $\Delta S = 54,076 \text{ J K}^{-1}$
6.  $\Delta S = 133,8 \text{ J K}^{-1}$
7. a)  $\Delta S = 127,75 \text{ J K}^{-1}$     b)  $92,256 \text{ J K}^{-1}$
8.  $\Delta S = 66,236 \text{ J K}^{-1}$
9.  $\Delta S = 11,525 \text{ J K}^{-1}$
10.  $\Delta S = 46,1 \text{ J K}^{-1}$
11.  $\Delta S = -10,258 \text{ J K}^{-1}$
12.  $\Delta S = 13,02 \text{ J K}^{-1}$
13.  $\Delta S_{298}^0 = -5,6 \text{ J K}^{-1}$
14.  $\Delta S_{298}^0 = 37,88 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ Cu}$
15. a)  $\Delta S_{298}^0 = 24,75 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ O}_2$     b)  $\Delta S_{800}^0 = 25,608 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ O}_2$   
c)  $S_T^0 = 19,5039 + 1,01 \cdot \ln T - 0,76 \cdot 10^{-3} \cdot T - 0,25 \cdot 10^5 T^{-2}$ ;     $\langle 298\text{K}; 2500\text{K} \rangle$
16. a)  $\Delta S_{298}^0 = -132,38 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ O}_2$ ;     $\Delta S_{400}^0 = -128,98 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ O}_2$   
b)  $\Delta S_T^0 = -194,5031 + 7,38 \cdot \ln T + 43,31 \cdot 10^{-3} T + 6,37 \cdot 10^5 T^{-2}$
17. a)  $\Delta S_{298}^0 = 75,76 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ Cu}_2\text{O}$   
b)  $\Delta S_{900}^0 = 67,487 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ Cu}_2\text{O}$   
c)  $\Delta S_T^0 = 89,93 - 2,09 \cdot \ln T - 9,205 \cdot 10^{-3} T + 0,42 \cdot 10^5 T^{-2}$
18. a)  $\Delta S_{298}^0 = 581,37 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ Al}_2\text{O}_3$ ;    b)  $\Delta S_{600}^0 = 587,38 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ Al}_2\text{O}_3$
19.  $S_{1000}^0 = 85,7 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

## 4.2 kapitola

1.  $\Delta G_{298}^0 = -63\,939,68 \text{ J mol}^{-1} \text{ MgCO}_3$ ; samovoľná
2. nie je možná redukcia,  $\Delta G_{298}^0 = +220,45 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ Sb}_2\text{O}_3$
3.  $\Delta G_{298}^0 = -203\,321,68 \text{ J mol}^{-1} \text{ Al}_4\text{C}_3$
4.  $\Delta G_{298}^0 = -66\,802,9 \text{ J mol}^{-1} \text{ Pb}$
5.  $\Delta G_{298}^0 = 185\,008,5 \text{ J mol}^{-1} \text{ Mn}$
6. a)  $\Delta G_T^0 = -65\,960 - 1,42 \cdot T \cdot \ln T + 6,06 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 + 4,045 \cdot 10^5 \cdot T^{-1} - 1,099 \cdot T$   
b)  $\Delta G_{400}^0 = -67\,821,9 \text{ J mol}^{-1} \text{ Pb}$
7. a)  $\Delta H_T^0 = -442\,883 + 12,55 \cdot T$  /  $\text{J mol}^{-1} \text{ O}_2$  /  
b)  $\Delta S_T^0 = 12,55 \cdot \ln T - 276,01$  /  $\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ O}_2$  /  
c)  $\Delta H_{500}^0 = -436,608 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ O}_2$ ;  $\Delta S_{500}^0 = -198,02 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ Pb}$
8. a)  $\Delta H_T^0 = 115\,105,77 - 10,31 \cdot T - 3,19 \cdot 10^{-3} T^2 - 8,79 \cdot 10^5 \cdot T^{-1}$   
 $\Delta S_T^0 = 252,33 - 10,31 \cdot \ln T - 6,38 \cdot 10^{-3} \cdot T - 4,395 \cdot 10^5 T^{-2}$   
b)  $\Delta H_{298}^0 = 108,8 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ Pb}$ ;  $\Delta S_{298}^0 = 186,74 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ Pb}$
9.  $\Delta G_T^0 = -56\,260 + 121,31 \cdot T$  /  $\text{J mol}^{-1} \text{ O}_2$  /
10. a)  $\Delta G_T^0 = -12\,435 - 30,305 \cdot T$  /  $\text{J mol}^{-1} \text{ Ni}$  /  
b)  $\Delta G_{298}^0 = -21\,465,89 \text{ J mol}^{-1} \text{ Ni}$ ; reakcia je samovoľná
11. a)  $\Delta G_T^0 = -89\,430 + 21,36 \cdot T \cdot \ln T - 320,2732 \cdot T$  /  $\text{J mol}^{-1} \text{ Cl}_2$  /



4.  $K_{a,1200} = 5,43 \cdot 10^5$
5. a)  $\ln K_a = -13\,844,8 \cdot T^{-1} - 1,24 \cdot \ln T - 0,3837 \cdot 10^{-3} \cdot T + 0,528 \cdot 10^5 \cdot T^{-2} + 31,59$   
b)  $p_{CO} = 2\,298,05 \text{ Pa}$
6. a)  $\ln K_a = 27\,142,29 \cdot T^{-1} + 2,4729 \cdot \ln T - 2,023 \cdot 10^{-3} \cdot T - 93\,877,79 \cdot T^{-2} - 21,446$   
b)  $K_{a,600} = 3,6479 \cdot 10^{16}$ ; c) exotermická
7. a)  $\ln K_a = -46\,678,27 \cdot T^{-1} - 4,81 \cdot 10^{-3} \cdot \ln T - 3,46 \cdot 10^{-3} \cdot T + 1,502 \cdot 10^5 \cdot T^{-2} + 67,02$   
b)  $K_{a,900} = 1\,331,43$ ; c) endotermická
8. a)  $K_{a,298} = 6,773 \cdot 10^{11}$   
b)  $\ln K_a = 10\,506,835 \cdot T^{-1} - 4,22 \cdot \ln T + 1,401 \cdot 10^{-3} \cdot T - 87\,082 \cdot T^{-2} + 16,588$   
c)  $K_{a,1000} = 0,476$
9. a)  $K_{a,298} = 1,12 \cdot 10^{26}$ ; b)  $\ln K_a = 10\,756,55 \cdot T^{-1} - 2,569 \cdot \ln T + 38,52$   
c)  $K_{a,600} = 2,3867 \cdot 10^{17}$ , exotermická
10. a) exotermická; b)  $\Delta G_{673}^0 = -533\,199,9 \text{ J mol}^{-1} \text{Cl}_2$ ;  $\Delta G_{873}^0 = -503\,551,5 \text{ J mol}^{-1} \text{Cl}_2$ ;  
c) bude vznikat  $\text{MgCl}_2$ ;  $\Delta G_{673} = -481\,591,43 \text{ J mol}^{-1} \text{Cl}_2$ .
11. a)  $K_{a,700} = 310,9$ ;  $K_{a,900} = 196,47$ ;  $K_{a,1100} = 146,02$ ;  $K_{a,1300} = 118,79$   
b)  $\ln K_a = 1\,462,4 / T + 3,649$ ; c)  $\Delta H_{(3)}^0 = -12\,158 \text{ J mol}^{-1} \text{Ni}$ .

## 5. kapitola

1.  $T_2 = 504,80636 \text{ K}$
2.  $P = 3,14915 \cdot 10^8 \text{ Pa}$
3.  $\Delta H_{\text{vyp}} = 825\,658,3 \text{ J mol}^{-1}$
4.  $p = 382\,546,6 \text{ Pa}$
5.  $p_2 = 12\,325,09 \text{ Pa}$
6.  $\Delta H_{\text{tuh}} = -6\,024 \text{ J mol}^{-1}$
7.  $T = 543,9002 \text{ K}$
8.  $\Delta T = 0,5898 \text{ K}$
9. a)  $T = 903,50366 \text{ K}$  b)  $T = 903,5009 \text{ K}$
10.  $p = 70\,566,8 \text{ Pa}$
11.  $T = 384,48 \text{ K}$
12.  $p = 16\,788,04 \text{ Pa}$
13.  $T = 1\,091,7 \text{ K}$

## 6. kapitola

1.  $x_1 = 0,2585$ ,  $x_2 = 0,7415$ ;  $y_1 = 0,4572$ ,  $y_2 = 0,5428$
2.  $p_A^0 = 90\,000 \text{ Pa}$
3.  $m_1 = 45,4 \text{ kg}$ ;  $m_2 = 54,6 \text{ kg}$
4. a)  $x_A = 0,417$ ,  $x_B = 0,583$ ; b)  $y_A = 0,248$ ,  $y_B = 0,752$
5.  $p_B = 3\,939,75 \text{ Pa}$ ,  $p_{\text{Ch}} = 2\,709,75 \text{ Pa}$ ,  $p = 6\,649,5 \text{ Pa}$
6.  $x_A = 0,375$ ,  $x_B = 0,625$
7.  $m_{\text{Sn}} = 2,098 \text{ g}$
8.  $x_{\text{Sn}} = 0,014$
9.  $p = 100\,474,95 \text{ Pa}$
10.  $3\,099,5 \text{ Pa}$
11.  $a = 0,885$





## Protónové čísla a mólové hmotnosti prvkov

Príloha 1

Slovenský názov	Latinský názov	Chemická značka prvku	Protónové číslo	Mólová hmotnosť
Aktíniium	Actinium	Ac	89	227,05
Ameríciium	Americium	Am	95	243*
Antimón	Stibium	Sb	51	121,75
Argón	Argon	Ar	18	39,948
Arzén	Arsenicum	As	33	74,922
Astát	Astatium	At	85	210*
Bárium	Baryum	Ba	56	137,34
Berkélium	Berkelium	Bk	97	247*
Berylium	Beryllium	Be	4	9,012
Bizmut	Bismuthum	Bi	83	208,980
Bór	Borum	B	5	10,811
Bróm	Bromum	Br	35	79,904
Cér	Cerium	Ce	58	140,12
Céziium	Caesium	Cs	55	132,905
Cín	Stannum	Sn	50	118,69
Curium	Curium	Cm	96	247*
Draslík	Kalium	K	19	39,102
Dusík	Nitrogenium	N	7	14,007
Dysprózium	Dysprosium	Dy	66	162,50
Einsteinium	Einsteinium	E	99	254*
Erbium	Erbium	Er	68	167,26
Európiium	Europium	Eu	63	151,96
Fermium	Fermium	Fm	100	257*
Fluór	Fluorum	F	9	18,998
Fosfor	Phosphorus	P	15	30,974
Francium	Francium	Fr	87	223*
Gadolínium	Gadolinium	Gd	64	157,25
Gálium	Gallium	Ga	31	69,72
Germánium	Germanium	Ge	32	72,59
Hafnium	Hafnium	Hf	72	178,49
Hélium	Helium	He	2	4,003
Hliník	Aluminium	Al	13	26,982
Holmium	Holmium	Ho	67	164,930
Horčík	Magnesium	Mg	12	24,312
Chlór	Chlorum	Cl	17	35,453
Chróm	Chromium	Cr	24	51,996
Indium	Indium	In	49	114,82
Iridium	Iridium	Ir	77	192,2
Jód	Iodum	I	53	126,904
Kadmium	Cadmium	Cd	48	112,40
Kalifornium	Californium	Cf	98	251*
Kobalt	Cobaltum	Co	27	58,933

## 1. pokračovanie prílohy 1

Slovenský názov	Latinský názov	Chemická značka prvku	Protónové číslo	Mólová hmotnosť
Kremík	Silicium	Si	14	28,086
Kryptón	Krypton	Kr	36	83,80
Kyslík	Oxygenium	O	8	15,999
Lantán	Lanthanum	La	57	138,91
Lítium	Lithium	Li	3	6,939
Lutécium	Lutetium	Lu	71	174,97
Mangán	Manganum	Mn	25	54,938
Meď	Cuprum	Cu	29	63,546
Mendelevium	Mendelevium	Md	101	256*
Molybdén	Molybdaenium	Mo	42	95,94
Neodým	Neodymium	Md	60	144,24
Neón	Neon	Ne	10	20,183
Neptúnium	Neptunium	Np	93	237*
Nikel	Niccolum	Ni	28	58,71
Niób	Niobium	Nb	41	92,906
Nobelium	Nobelium	No	102	254*
Olovo	Plumbum	Pb	82	207,19
Ortuť	Hydrargyrum	Hg	80	200,59
Osmium	Osmium	Os	76	190,2
Paládium	Palladium	Pd	46	106,4
Platina	Platinum	Pt	78	195,09
Plutónium	Plutonium	Pu	94	244*
Polónium	Polonium	Po	84	209
Prazeodým	Praseodymium	Pr	59	140,907
Prométium	Promethium	Pm	61	145*
Protaktínium	Protactinium	Pa	91	231
Rádium	Radium	Ra	88	226
Radón	Radon	Rn	86	222
Rénium	Rhenium	Re	75	186,2
Ródium	Rhodium	Rh	45	102,905
Rubídium	Rubidium	Rb	37	85,47
Rutérium	Ruthenium	Ru	44	101,07
Samárium	Samarium	Sm	62	150,35
Selén	Selenium	Se	34	78,96
Síra	Sulphur	S	16	32,064
Skandium	Scandium	Sc	21	44,956
Sodík	Natrium	Na	11	22,990
Striebro	Argentum	Ag	47	107,868
Stroncium	Strontium	Sr	38	87,62
Tálium	Thallium	Tl	81	204,37
Tantal	Tantalum	Ta	73	180,948
Technécium	Technetium	Tc	43	98*
Telúr	Tellurium	Te	52	127,60

## 2. pokračovanie prílohy 1

Slovenský názov	Latinský názov	Chemická značka prvku	Protónové číslo	Mólová hmotnosť
Terbium	Terbium	Tb	65	158,924
Titán	Titanium	Ti	22	47,90
Tórium	Thorium	Th	90	232,038
Túlium	Thulium	Tm	69	168,934
Uhlík	Carboneum	C	6	12,011
Urán	Uranium	U	92	238,03
Vanád	Vanadium	V	23	50,942
Vápnik	Calcium	Ca	20	40,08
Vodík	Hydrogenium	H	1	1,0080
Volfrám	Wolframium	W	74	183,85
Xenón	Xenon	Xe	54	131,30
Yterbium	Ytterbium	Yb	70	173,04
Ytrium	Yttrium	Y	39	88,905
Zinok	Zincum	Zn	30	65,37
Zirkónium	Zirconium	Zr	40	91,22
Zlato	Aurum	Au	79	196,967
Železo	Ferrum	Fe	26	55,847

\* Hmotnostné číslo izotopu s najdlhším polčasom

**Teplota transformácie, mólová entalpia transformácie, teplota topenia, mólová entalpia topenia, teplota varu a mólová entalpia vyparovania rozličných prvkov a zlúčenín**

Prvok, zlúčenina	Teplota transformácie (K)	$\Delta H$ transformácie (J mol <sup>-1</sup> )	Teplota topenia (K)	$\Delta H$ topenia (J mol <sup>-1</sup> )	Teplota varu (K)	$\Delta H$ vyparovania (J mol <sup>-1</sup> )
Ag			1 233,8	10 800	2 485,0	254 417
Ag <sub>2</sub> S	$\alpha \rightarrow \beta$ 449,0	5 866	1 115,0	11 313	—	—
AgCl	—	—	728,0	13 219	1 837,0	178 158
Ag <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	—	—	933,0	(18 020)	—	—
Al	—	—	933,0	10 684	2 330,0	255 674
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	—	—	2 324,0	107 683	3 273,0	—
AlCl <sub>3</sub>	—	—	465,5	70 994	453,2	111 975
AlF <sub>3</sub> · 3 NaF	—	—	1 273,0	68 566	—	—
Ar	—	—	83,7	1 215	87,2	6 662
As	—	—	1 087,0*	27 737	883,0	129 890
As <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	—	—	586,0	33 488	730,2	59 859
As <sub>2</sub> S <sub>3</sub>	—	—	585,0	28 701	—	—
AsCl <sub>3</sub>	—	—	257,0	10 139	395,0	31 718
Au	—	—	1 336,0	12 696	3 239,0	342 742
B	—	—	2 453,0	22 626	—	—
B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	—	—	723,0	22 210	—	—
Ba	—	—	1 002,0	7 667	1 911,0	149 457
BaO	—	—	2 198,0	5 780	—	—
BaCl <sub>2</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 195,0	17 179	1 235,0	16 760	—	—
BaF <sub>2</sub>	—	—	1 563,0	28 490	—	—
BaCO <sub>3</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 079,0	18 860	rozkladá sa	—	—	—
BaSO <sub>4</sub>	$\beta \rightarrow \gamma$ 1 241,0	2 930	1 623,0	40 640	—	—
Be	—	—	1 553,0	12 230	—	—
BeO	—	—	2 853,0	80 870	—	—
Bi	—	—	544,3	10 890	1 693	—
Bi <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 978,0	56 980	1 097,0	59 920	—	—
Bi <sub>2</sub> S <sub>3</sub>	—	—	1 040,0	78 350	—	—
Br <sub>2</sub>	—	—	265,7	10 560	—	—

\* pri zvýšenom tlaku

## 1. pokračovanie prílohy 2

Prvok, zlúčenina	Teplota transformácie (K)	$\Delta H$ transformácie (J mol <sup>-1</sup> )	Teplota topenia (K)	$\Delta H$ topenia (J mol <sup>-1</sup> )	Teplota varu (K)	$\Delta H$ vyparovania (J mol <sup>-1</sup> )
C grafit	—	—	3 873,0	46 090	—	—
CO	—	—	68,0	837	81,5	6 045
CO <sub>2</sub>	—	—	215,5	7 953	194,6	25 241
COS	—	—	134,0	4 730	222,8	18 532
CS <sub>2</sub>	—	—	161,0	4 400	—	—
CCl <sub>4</sub>	—	—	250,0	2 510	350,0	30 503
CH <sub>4</sub>	—	—	90,5	940	111,6	8 548
Ca	$\alpha \rightarrow \beta$ 737,0	251	1 124,0	9 334	1 760	153 123
CaO	—	—	2 888,0	(79 534)	—	—
CaCl <sub>2</sub>	—	—	1 045,0	28 464	—	—
CaF <sub>2</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 424,0	4 772	1 691,0	29 720	—	—
CaC <sub>2</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 720,0	5 567	2 573,0	—	—	—
CaCO <sub>3</sub>	—	—	1 555,0	53 162	—	—
CaSO <sub>4</sub>	—	—	1 570,0	28 046	—	—
CaFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	—	—	1 513,0	108 420	—	—
Ca <sub>2</sub> Fe <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	—	—	1 753,0	151 114	—	—
CaO.MgO. 2SiO <sub>2</sub> diopsit	—	—	1 665,0	128 510	—	—
Cd	—	—	594,0	6 404	1 038	99 919
CdO	—	—	—	—	1 832	225 290
CdCl <sub>2</sub>	—	—	841,0	30 139	—	—
CdF <sub>2</sub>	—	—	1 383,0	22 604	—	—
CdSO <sub>4</sub>	—	—	1 273,0	20 050	—	—
Ce	—	—	1 048,0	8 874	—	—
CeF <sub>3</sub>	—	—	1 710,0	56 510	—	—
Cl <sub>2</sub>	—	—	172,0	6 408	238,9	20 419
Co	—	—	1 768,0	15 488	—	—
CoCl <sub>2</sub>	—	—	1 013,0	59 022	1 323,0	113 733
Cr	—	—	2 130,0	20 930	2 748,0	—
CrO <sub>3</sub>	—	—	471,0	14 232	—	—
CrCl <sub>2</sub>	—	—	1 088,0	32 232	—	—
Cs	—	—	301,4	2 090	963,0	68 315
CsCl	—	—	915,0	15 069	1 573,0	149 398
CsF	—	—	976,0	21 767	1 524,0	143 705

## 2. pokračovanie prílohy 2

Prvok, zlúčenina	Teplota transformácie (K)	$\Delta H$ transformácie ( $\text{J mol}^{-1}$ )	Teplota topenia (K)	$\Delta H$ topenia ( $\text{J mol}^{-1}$ )	Teplota varu (K)	$\Delta H$ vyparovania ( $\text{J mol}^{-1}$ )
Cu	—	—	1 356,0	13 018	2 868,0	304 782
Cu <sub>2</sub> O	—	—	1 509,0	56 845	—	—
CuO	—	—	1 720,0	11 846	—	—
Cu <sub>2</sub> S	$\alpha \rightarrow \beta$ 376,6 $\beta \rightarrow \gamma$ 623,0	3 851 837	1 403,0	23 023	—	—
CuCl	$\alpha \rightarrow \beta$ 680,0	6 069	696,0	7 325	1 763,0	49 897
CuFeO <sub>2</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 091,0	377	1 470,0	64 380	—	—
CuFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 675,0 $\beta \rightarrow \gamma$ 795,0	753 753	1 358,0	—	—	—
F <sub>2</sub>	—	—	50,0	—	84,8	6 865
Fe	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 033,0 $\beta \rightarrow \gamma$ 1 179,0 $\gamma \rightarrow \delta$ 1 674,0	1 720 880 460	1 809,0	15 490	3 008,0	354 135
FeO	—	—	1 653,0	(32 232)	—	—
Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	—	—	1 870,0	138 138	—	—
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 953,0 $\beta \rightarrow \gamma$ 1 053,3	669	1 867,0	—	—	—
FeS	$\alpha \rightarrow \beta$ 411,0 $\beta \rightarrow \gamma$ 598,0	2 388	1 468,0	32 357	—	—
FeCl <sub>2</sub>	—	—	950,0	43 115	1 299,0	126 459
FeCl <sub>3</sub>	—	—	577,0	43 115	592,0	50 399
Fe <sub>3</sub> C	$\alpha \rightarrow \beta$ 463,0	753	1 500,0	51 487	—	—
Fe <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	—	—	1 493,0	92 092	—	—
Ga	—	—	302,0	5 597	2 344,0	—
Ge	—	—	1 213,0	36 836	—	—
GeO <sub>2</sub>	—	—	1 389,0	43 950	—	—
H <sub>2</sub>	—	—	13,8	117	20,3	904
H <sub>2</sub> O	—	—	273,0	6 011	373,0	40 725
H <sub>2</sub> S	—	—	187,5	2 453	212,7	18 682
HCl	—	—	158,8	1 992	188,0	16 157
HF	—	—	190,0	4 579	306,3	31 227
Hf	—	—	2 503,0	(24 070)	4 723	570 970
HfO <sub>2</sub>	—	—	3 083,0	104 650	—	—
Hg	—	—	234,1	2 331	634,0	58 520
HgS	—	—	1 098,0	—	—	—

## 3. pokračovanie prílohy 2

Prvok, zlúčenina	Teplota transformácie (K)	$\Delta H$ transformácie ( $\text{J mol}^{-1}$ )	Teplota topenia (K)	$\Delta H$ topenia ( $\text{J mol}^{-1}$ )	Teplota varu (K)	$\Delta H$ vyparovania ( $\text{J mol}^{-1}$ )
HgCl <sub>2</sub>	—	—	551,0	19 464	—	—
I	—	—	387,0	15 781	456	43 492
In	—	—	430,0	3 265	2 335,0	231 904
Ir	—	—	2 727,0	(26 371)	—	—
K	—	—	336,5	2 402	1 049,0	79 199
KCl	—	—	1 043,0	26 832	1 680,0	162 584
K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	—	—	1 174,0	27 627	—	—
Li	—	—	453,5	2 930	1 645,0	135 417
Li <sub>2</sub> O	—	—	1 843,0	58 604	—	—
LiCl	—	—	883,0	19 883	1 655,0	150 528
LiF	—	—	1 120,0	26 790	1 954,0	213 360
Li <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	—	—	993,0	44 790	—	—
LiOH	—	—	746,0	20 930	—	—
Mg	—	—	923,0	9 041	1 380,0	136 128
MgO	—	—	3 098,0	77 440	—	—
MgCl <sub>2</sub>	—	—	985,0	33 906	1 691	132 654
MgF <sub>2</sub>	—	—	1 536,0	58 185	—	—
Mg <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 823,0	460	rozkladá sa	—	—	—
MgSO <sub>4</sub>	—	—	1 400,0	(14 651)	—	—
MgSiO <sub>3</sub>	903,0 1 258,0	669 1 632	1 850,0	75 348	—	—
Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	—	—	2 163,0	71 162	—	—
Mn	$\alpha \rightarrow \beta$ 993,0 $\beta \rightarrow \gamma$ 1 363,0 $\gamma \rightarrow \delta$ 1 409,0	2 218 2 218 1 799	1 517,0	14 651	2 425	55 423
MnO	—	—	2 148,0	54 418	—	—
Mn <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 445,0	20 930	1 833,0	—	—	—
MnS	—	—	1 803,0	26 162	—	—
Mn <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	—	—	1 618,0	89 664	—	—
Mo	—	—	2 893,0	35 581	(5 073,0)	(535 808)
MoO <sub>3</sub>	—	—	1 068,0	48 432	1 424,0	—
N <sub>2</sub>	—	—	63,0	719	77,2	5 592
NH <sub>3</sub>	—	—	195,3	5 659	239,6	23 362

## 4. pokračovanie prílohy 2

Prvok, zlúčenina	Teplota transformácie (K)	$\Delta H$ transformácie (J mol <sup>-1</sup> )	Teplota topenia (K)	$\Delta H$ topenia (J mol <sup>-1</sup> )	Teplota varu (K)	$\Delta H$ vyparovania (J mol <sup>-1</sup> )
N <sub>2</sub> O			182,2	6 542	184,5	16 534
NO			109,4	2 302	121,3	13 843
Na	—	—	370,7	2 637	1 187,0	96 780
Na <sub>2</sub> O	—	—	593,0	6 362		
Na <sub>2</sub> S	—	—	1 193,0	5 023	—	—
NaCl	—	—	1 073,0	30 222	1 738	170 830
NaF	—	—	1 265,0	29 302	1 977,0	222 946
Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	—	—	1 127,0	29 302	—	—
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 522,0 $\beta \rightarrow \gamma$ 980,0	10 799 330	1 157,0	24 404	—	—
Na <sub>4</sub> SiO <sub>4</sub>	—	—	884,0	24 404	—	—
Na <sub>2</sub> SiO <sub>3</sub>	—	—	1 361,0	52 325	—	—
Na <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	—	—	1 090,0	3 658	—	—
Na <sub>3</sub> AlF <sub>6</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 838,0	8 246	1 285,0	107 329	—	—
Ni	$\alpha \rightarrow \beta$ 631,0	586	1 728,0	17 581	3 003,0	365 437
NiCl <sub>2</sub>	—	—	(1 303)	77 441	1 260,0	202 434
O <sub>2</sub>	—	—	54,1	443	90,0	6 818
OsO <sub>4</sub>	—	—	329,0	16 995	403,0	39 557
P biely	—	—	317,0	2 637	553,0	51 906
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	—	—	693,0	(48 139)		
PCl <sub>3</sub>	—	—	182,0	4 520		
Pb	—	—	600,4	5 123	2 017,0	176 063
PbO	—	—	1 163,0	11 804	1 745,0	214 783
PbS	—	—	1 387,0	17 371	1 554,0	(209 300)
PbCl <sub>2</sub>	—	—	771,0	23 650	1 227,0	123 905
PbF <sub>2</sub>	—	—	1 097,0	7 785	1 566,0	160 323
PbSO <sub>4</sub>	—	—	1 360,0	40 185	—	—
Pt	—	—	2 046,5	19 674	(4 673,0)	(447 902)
Rb	—	—	312,1	2 197	952,0	75 808
RbCl	—	—	990,0	18 418	1 654,0	154 547
RbF	—	—	1 106,0	17 288	1 681,0	165 388
Re	—	—	3 453,0	33 488	—	—
Re <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	—	—	569,0	(64 045)	—	—
ReF <sub>6</sub>	—	—	292,0	(4 186)	306,7	28 465



## 5. pokračovanie prílohy 2

Prvok, zlúčenina	Teplota transformácie (K)	$\Delta H$ transformácie (J mol <sup>-1</sup> )	Teplota topenia (K)	$\Delta H$ topenia (J mol <sup>-1</sup> )	Teplota varu (K)	$\Delta H$ vyparovania (J mol <sup>-1</sup> )
S	368*	401	392,0	1 674	717,6	84 557
SO <sub>2</sub>	—	—	197,5	7 405	268,0	24 948
SO <sub>3</sub>	—	—	290,0	8 623	—	—
Sb	—	—	903,5	19 967	1 713,0	195 360
Sb <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	—	—	928,0	(113 022)	1 698,0	74 594
Sb <sub>2</sub> S <sub>3</sub>	—	—	819,0	46 883	—	—
SbCl <sub>3</sub>	—	—	346,4	12 683	492,0	43 366
Se	—	—	493,0	5 106	1 026,0	106 701
SeF <sub>6</sub>	—	—	—	—	318,8	26 581
Si	—	—	1 700,0	39 643	2 563,0	—
SiO <sub>2</sub> kremeň	$\alpha \rightarrow \beta$ 847,0	732	1 995,0	10 883	2 503,0	—
SiO <sub>2</sub> christobalit	—	—	1 973,0	8 790	—	—
SiCl <sub>4</sub>	—	—	205,4	7 723	329,8	28 715
Sn	—	—	504,8	7 199	2 543,0	284 648
SnS	$\alpha \rightarrow \beta$ 875,0	669	1 154,0	31 604	—	—
SnCl <sub>2</sub>	—	—	251,2	12 767	896,0	86 817
SnCl <sub>4</sub>	—	—	239,8	9 167	386,0	34 869
Sr	—	—	1 043,0	10 046	—	—
SrO	—	—	2 733,0	69 906	—	—
SrCl <sub>2</sub>	—	—	1 148,0	15 278	—	—
SrF <sub>2</sub>	—	—	1 750,0	29 678	—	—
Ta	—	—	3 288,0	24 697	—	—
Ta <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	—	—	2 173,0	151 198	—	—
Te	—	—	726,0	34 994	1 363	104 650
TeO <sub>2</sub>	—	—	1 006,0	29 092	—	—
TeCl <sub>4</sub>	—	—	497,0	18 837	—	—
Th	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 633,0	3 599	2 023,0	13 939	—	—
ThCl <sub>4</sub>	—	—	1 043,0	43 953	—	—
ThF <sub>4</sub>	—	—	1 383,0	43 953	—	—
ThC <sub>1,94</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 703,0	2 093	—	—	—	—
	$\beta \rightarrow \gamma$ 1 763,0	10 465	—	—	—	—

## 6. pokračovanie prílohy 2

Prvok, zlúčenina	Teplota transformácie (K)	$\Delta H$ transformácie (J mol <sup>-1</sup> )	Teplota topenia (K)	$\Delta H$ topenia (J mol <sup>-1</sup> )	Teplota varu (K)	$\Delta H$ vyparovania (J mol <sup>-1</sup> )
Ti	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 155,0	3 348	1 940,0	14 651	3 558,0	425 716
TiO	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 264,0	3 432	2 293,0	58 604		
Ti <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 473,0	899	2 112,0	110 510		
TiO <sub>2</sub>	—	—	2 143,0	66 976		
TiCl <sub>4</sub>			248,0	9 376	407,0	36 209
Tl	$\alpha \rightarrow \beta$ 507,0	376	577,0	4 311		
TlCl	—	—	702,0	15 906		
TlF	$\alpha \rightarrow \beta$ 356,0	334	595,0	13 897		
U	$\alpha \rightarrow \beta$ 941,0	2 930	1 403,0	12 558	4 203,0	417 344
UCl <sub>4</sub>	—	—	863,0	44 790		
UF <sub>4</sub>	—	—	1 309,0	42 697		
UF <sub>6</sub>	—	—	(337,0)	19 213		
V		—	—	2 175,0	16 744	
VO <sub>2</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 345,0	4 311	(1 633)	56 929		
V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	—	—	943,0	65 301		
W	—	—	3 663,0	35 162	6 173,0	736 736
WO <sub>3</sub>	—	—	1 745,0	73 464		
Y	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 758	5 023	1 803,0	11 511	3 573	367 531
Zn	—	—	692,5	6 676	1 180	114 821
ZnO	—	—	2 248,0	18 711	—	—
ZnS	—	—	1 918,0	(37 674)	—	—
ZnCl <sub>2</sub>	—	—	556,0	23 023	1 005,0	120 180
Zr	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 125,0	3 767	2 130,0	19 255	4 673	
ZrO <sub>2</sub>	$\alpha \rightarrow \beta$ 1 448,0	5 944	2 953,0	87 068		
	$\beta \rightarrow \gamma$ 2 568,0	—				
ZrCl <sub>4</sub>	—	—	(710,0)	37 674		

## Izobarické mólové tepelné kapacity a prírastky entalpie prvkov a zlúčenín

$$\left[ C_p = a + bT + cT^{-2} \left( \text{JK}^{-1} \text{mol}^{-1} \right), H_T - H_{298} = aT + \frac{b}{2} T^2 - cT^{-1} + d \left( \text{Jmol}^{-1} \right) \right]$$

Látka	a	$10^3 b$	$10^5 c$	d	Rozsah (K)
Ag <sub>(s)</sub>	20,36	8,55	1,51	-5 940	298 — 1 234
Ag <sub>(l)</sub>	30,59	—	—	-1 377	1 234 — 1 600
Ag <sub>2</sub> O <sub>(s)</sub>	59,41	40,85	-4,19	-20 924	298 — 500
Ag <sub>2</sub> S <sub>(α)</sub>	42,44	110,62	—	-17 559	298 — 449
Ag <sub>2</sub> S <sub>(β)</sub>	90,67	—	—	-22 197	449 — 850
AgCl <sub>(s)</sub>	62,35	4,19	-11,31	-22 562	298 — 728
AgCl <sub>(l)</sub>	67,04	—	—	-10 093	728 — 900
Ag <sub>2</sub> CO <sub>3(s)</sub>	79,48	108,31	—	-28 494	298 — 450
Ag <sub>2</sub> SO <sub>4(s)</sub>	96,79	116,90	—	-34 034	298 — 933
Al <sub>(s)</sub>	20,70	12,4	—	-6 719	298 — 933
Al <sub>(l)</sub>	29,33	—	—	1 311	933 — 2 400
Al <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	101,92	17,81	-28,58	-40 754	298 — 1 800
Al <sub>2</sub> S <sub>3(s)</sub>	102,32	36,12	—	-32 095	298 — 1 370
AlCl <sub>(g)</sub>	37,71	—	-2,85	-12 194	298 — 2 000
AlCl <sub>3(s)</sub>	55,52	117,32	—	-21 754	298 — 465
AlCl <sub>3(l)</sub>	130,73	—	—	-26 940	465 — 500
AlCl <sub>3(g)</sub>	82,96	—	-11,06	-28 433	298 — 1 800
AlF <sub>(g)</sub>	37,29	—	-6,08	-13 153	298 — 2 000
AlF <sub>3(α)</sub>	72,36	45,92	-9,64	-26 837	298 — 727
AlF <sub>3.3,5H<sub>2</sub>O<sub>(s)</sub></sub>	211,60	—	—	-63 057	288 — 326
AlF <sub>3.3NaF<sub>(s)</sub></sub>	161,86	199,44	-18,80	-63 399	298 — 1 273
AlN <sub>(s)</sub>	34,44	16,97	-8,38	-13 829	298 — 1 500
Al <sub>4</sub> C <sub>3(s)</sub>	154,90	28,77	-41,98	-61 525	298 — 1 800
Al <sub>2</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>3(s)</sub>	366,83	62,68	-111,79	-149 612	298 — 1 100
Al <sub>2</sub> O <sub>3.SiO<sub>2(s)</sub></sub>					
— sillimanit	170,91	19,96	-41,56	-65 764	298 — 1 573
— distén	175,02	22,14	-50,69	-70 149	298 — 1 673
— andaluzit	184,02	8,06	-45,46	-70 451	298 — 1 573
3Al <sub>2</sub> O <sub>3.2SiO<sub>2(s)</sub></sub> — mullit	249,69	280,73	—	-86 873	298 — 576
4Al <sub>2</sub> O <sub>3.3SiO<sub>2(s)</sub></sub>	473,86	273,19	—	-153 340	298 — 575
Ar <sub>(g)</sub>	20,82	—	—	-6 204	298 — 3 000
As <sub>(s)</sub>	23,21	5,53	—	-7 162	298 — 883
As <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub> — claudelit	59,92	175,98	—	-25 670	298 — 586
As <sub>2</sub> O <sub>5(s)</sub>	42,53	247,21	—	-23 651	298 — 550
As <sub>2</sub> S <sub>3(s)</sub>	105,80	36,49	—	-33 149	298 — 585
AsCl <sub>3(l)</sub>	133,66	—	—	-39 831	298 — 371
AsCl <sub>(g)</sub>	82,21	1,01	-5,95	-26 540	298 — 1 000

## 1. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	10 <sup>3</sup> b	10 <sup>-5</sup> c	d	Rozsah (K)
Au <sub>(s)</sub>	23,72	5,2	—	-7 299	298 — 1 336
Au <sub>(l)</sub>	29,33	—	—	2 542	1 336 — 1 600
B <sub>(s)</sub>	19,84	5,78	-9,22	-9 262	298 — 2 453
B <sub>(l)</sub>	31,43	—	—	2 699	2 453 — 3 500
B <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	57,11	73,12	-14,08	-24 990	298 — 723
B <sub>2</sub> O <sub>3(l)</sub>	127,80	—	—	-32 830	723 — 1 800
BCl <sub>3(l)</sub>	70,64	11,98	-10,22	-25 012	298 — 1 000
BN <sub>(s)</sub> kubický	33,94	14,75	-23,09	-18 517	298 — 1 200
B <sub>4</sub> C <sub>(s)</sub>	96,33	22,63	-44,92	-44 784	298 — 1 373
Ba <sub>(s)</sub>	-5,70	80,45	—	-1 873	298 — 1 002
Ba <sub>(l)</sub>	48,19	—	—	-7 818	1 002 — 1 125
BaO <sub>(s)</sub>	53,38	4,36	-8,31	-18 889	298 — 1 270
BaCl <sub>2(α)</sub>	93,02	3,18	-16,76	-33 485	298 — 1 195
BaCl <sub>2(β)</sub>	111,50	—	—	-34 716	1 195 — 1 235
BaCl <sub>2(g)</sub>	104,58	—	—	-9 409	1 235 — 1 339
BaF <sub>2(s)</sub>	86,94	3,77	-15,08	-31 135	298 — 1 563
BaF <sub>2(l)</sub>	94,28	—	—	-8 547	1 563 — 1 900
BaCO <sub>3(α)</sub>	87,03	49,02	-11,98	-32 131	298 — 1 079
BaCO <sub>3(β)</sub>	155,03	—	—	-56 997	1 079 — 1241
BaCO <sub>3(γ)</sub>	163,41	—	—	-64 466	1 241 — ?
BaSO <sub>4(s)</sub>	141,62	—	-35,32	-54 055	298 — 1 300
BaSiO <sub>3(s)</sub>	122,18	7,12	-31,26	-47 216	298 — 1 300
BaAl <sub>2</sub> O <sub>4(α)</sub>	143,51	74,00	-45,96	-61 475	298 — 600
Be <sub>(s)</sub>	196,85	6,52	-5,07	-60 652	298 — 1 173
BeO <sub>(s)</sub>	36,41	15,29	-13,11	-15 928	298 — 1 175
BeS <sub>(s)</sub>	41,77	8,13	-9,64	-16 043	298 — 1 800
Be <sub>3</sub> N <sub>2(s)</sub>	54,89	103,70	-17,68	-26 886	298 — 430
Bi <sub>(s)</sub>	18,80	22,63	—	-6 607	298 — 544
Bi <sub>(l)</sub>	20,03	6,16	21,16	9 940	544 — 820
Bi <sub>2</sub> O <sub>3(α)</sub>	103,66	33,52	—	-32 379	298 — 978
Bi <sub>2</sub> O <sub>3(β)</sub>	146,65	—	—	-1 412	978 — 1 097
Bi <sub>2</sub> S <sub>3(s)</sub>	109,99	41,06	—	-34 600	298 — 1 040
Br <sub>(g)</sub>	19,90	1,49	0,42	-5 855	298 — 2 000
C <sub>(s)</sub> grafit	17,18	4,27	-8,79	-8 263	298 — 2 300
C <sub>(s)</sub> diamant	9,06	12,82	-5,46	-5 101	298 — 1 373
CO <sub>(g)</sub>	28,45	4,11	-0,46	-8 814	298 — 2 500
CO <sub>2(g)</sub>	44,20	9,05	-8,55	-16 442	298 — 2 500
COS <sub>(g)</sub>	47,47	9,13	-7,67	-17 125	298 — 1 800
CS <sub>2(g)</sub>	52,17	6,70	-7,54	-18 374	298 — 1 800
CCl <sub>4(g)</sub>	104,33	2,01	-19,86	-37 844	298 — 2 000
CH <sub>4(g)</sub>	23,67	47,93	-1,93	-9 829	298 — 1 500

## 2. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	$10^3b$	$10^{-5}c$	d	Rozsah (K)
Ca <sub>(α)</sub>	22,25	13,95	—	-7 249	298 — 737
Ca <sub>(β)</sub>	26,36	5,87	—	-7 833	737 — 873
CaO <sub>(s)</sub>	49,69	4,53	-6,96	-17 344	298 — 1 177
CaS <sub>(s)</sub>	45,25	7,75	—	-13 828	298 — 2 000
CaCl <sub>2(s)</sub>	71,98	12,74	-2,51	-22 858	298 — 1 045
CaCl <sub>2(l)</sub>	103,49	—	—	-20 125	1 045 — 1 700
CaF <sub>2(α)</sub>	59,92	30,50	1,97	-18 549	298 — 1 424
CaC <sub>2 (α)</sub>	68,72	11,90	-8,67	-23 916	298 — 720
CaC <sub>2 (β)</sub>	64,53	8,38	—	-18 062	720 — 1 275
CaCO <sub>3(s)</sub>	104,67	21,96	-25,98	-40 884	298 — 1 200
CaSO <sub>4(s)</sub>	70,31	98,88	—	-25 342	298 — 1 400
CaSiO <sub>3(s)</sub> pseudowollastonit	108,31	16,51	-23,67	-40 952	298 — 1 700
CaSiO <sub>3(s)</sub> wollastonit	111,62	15,08	-27,32	-43 100	298 — 1 450
Ca <sub>2</sub> SiO <sub>4(s)</sub>	151,89	37,00	-30,34	-57 087	298 — 1 200
CaAl <sub>2</sub> O <sub>4(s)</sub>	150,34	24,97	-33,35	-57 250	298 — 1 800
CaAl <sub>4</sub> O <sub>7(s)</sub>	276,92	22,96	-74,58	-108 568	298 — 1 800
Ca <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>6(s)</sub>	260,95	19,19	-50,32	-95 501	298 — 1 800
CaFe <sub>2</sub> O <sub>4(s)</sub>	165,17	19,94	-15,34	-55 253	298 — 1 513
CaFe <sub>2</sub> O <sub>4(l)</sub>	230,03	—	—	-21 129	1 513 — 1 800
Ca <sub>2</sub> Fe <sub>2</sub> O <sub>5(s)</sub>	248,97	—	-48,94	-90 615	298 — 1 753
Ca <sub>2</sub> Fe <sub>2</sub> O <sub>5(l)</sub>	310,90	—	—	-45 272	1 753 — 1 850
CaO.MgO.2SiO <sub>2(s)</sub> diopsit	221,53	32,85	-65,95	-89 605	298 — 1 600
Cd <sub>(s)</sub>	22,25	12,32	—	-7 177	298 — 594
Cd <sub>(l)</sub>	29,75	—	—	-3 055	594 — 1 100
CdO <sub>(s)</sub>	48,31	6,39	-4,90	-16 324	298 — 1 500
CdS <sub>(s)</sub>	44,62	13,83	—	-13 910	298 — 1 200
CdCl <sub>2(s)</sub>	47,35	91,76	—	-18 184	298 — 842
CdF <sub>2(s)</sub>	60,13	23,05	—	-18 942	298 — 1 383
CdCO <sub>3(s)</sub>	43,16	131,99	—	-18 722	298 — 700
CdSO <sub>4(s)</sub>	77,43	77,52	—	-26 516	298 — 1 273
Ce <sub>(s)</sub>	24,64	5,15	—	-7 571	298 — 908
CeO <sub>2(s)</sub>	64,90	17,72	-7,60	-22 677	298 — 1 250
Ce <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	107,98	41,48	-9,22	-37 113	298 — 1 200
CeF <sub>3(s)</sub>	80,45	16,76	—	-24 718	298 — 1 710
CeN <sub>(s)</sub>	46,51	6,91	-7,25	-16 599	298 — 2 000
Cl <sub>2(g)</sub>	36,96	0,25	-2,85	-11 981	298 — 3 000
Co <sub>(s)</sub>	21,45	13,95	—	-7 011	298 — 1 768
Co <sub>(l)</sub>	35,20	—	—	5 969	1 768 — 1 873
CoO <sub>(s)</sub>	48,35	8,55	1,68	-14 224	298 — 1 800

## 3. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	$10^3b$	$10^5c$	d	Rozsah (K)
$\text{Co}_3\text{O}_4(\text{s})$	129,22	71,57	-23,97	-49 729	298 — 1 000
$\text{CoS}(\text{s})$	44,41	10,52	—	-13 701	298 — 1 373
$\text{CoCl}_2(\text{s})$	60,38	61,17	—	-20 709	298 — 1 000
$\text{CoF}_2(\text{s})$	64,11	15,67	—	-19 800	298 — 1 000
$\text{CoF}_3(\text{s})$	86,10	24,43	-2,56	-27 601	298 — 1 200
$\text{CoSO}_4(\text{s})$	126,08	41,52	—	-39 415	298 — 1 000
$\text{Cr}(\text{s})$	24,47	9,89	-3,69	-8 969	298 — 2 130
$\text{Cr}(\text{l})$	39,39	—	—	-2 789	2 130—1 923
$\text{Cr}_2\text{O}_3(\text{s})$	108,94	16,76	—	-33 208	298 — 2 263
$\text{CrO}_3(\text{s})$	82,67	21,70	-17,51	-31 475	298 — 471
$\text{CrO}_3(\text{l})$	125,70	—	—	-31 385	471 — 551
$\text{CrCl}_2(\text{s})$	63,90	24,97	—	-20 150	298 —1 088
$\text{CrCl}_2(\text{l})$	100,56	—	—	-13 025	1 088 —?
$\text{Cr}_2\text{N}(\text{s})$	63,86	28,49	—	-20 295	298 — 800
$\text{CrN}(\text{s})$	41,23	16,34	—	-13 012	298 — 800
$\text{Cr}_3\text{C}_2(\text{s})$	125,83	23,38	-31,26	-49 025	298 — 1 500
$\text{Cr}_7\text{C}_3(\text{s})$	238,66	60,92	-42,40	-88 053	298 — 1 700
$\text{Cr}_4\text{C}(\text{s})$	122,98	31,01	-21,03	-45 081	298 — 1 700
$\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3(\text{s})$	358,58	79,61	-89,88	-140 552	298 — 1 200
$\text{Cs}(\text{s})$	8,2	76,26	—	-5 829	298 — 301
$\text{Cs}(\text{l})$	33,52	—	—	-7 906	301 — 963
$\text{Cs}(\text{g})$	20,82	—	—	72 639	963 — 2 000
$\text{CsCl}(\text{s})$	53,55	5,15	-1,93	-16 834	298 — 743
$\text{CsF}$	47,35	11,35	—	-14 614	298 — 976
$\text{Cs}_2\text{CO}_3(\text{s})$	115,60	69,43	-10,98	-41 216	298 —?
$\text{Cu}(\text{s})$	22,67	6,29	—	-7 034	298 — 1 356
$\text{Cu}(\text{l})$	31,43	—	—	-112	1 356 —1 600
$\text{Cu}_2\text{O}(\text{s})$	62,43	23,88	—	-19 664	298 — 1 200
$\text{CuO}(\text{s})$	38,84	20,11	—	-12 467	298 — 1 250
$\text{Cu}_2\text{S}(\alpha)$	81,71	—	—	-24 349	298 — 376
$\text{Cu}_2\text{S}(\beta)$	97,42	—	—	-26 404	376 — 623
$\text{Cu}_2\text{S}(\gamma)$	85,06	—	—	-17 867	623 — 1 000
$\text{Cu}_2\text{S}(\text{l})$	100,48	—	—	-5 129	1 403 —?
$\text{CuS}(\text{s})$	44,41	11,06	—	-13 723	298 —1 273
$\text{CuCl}(\alpha)$	36,16	41,90	—	-12 536	298 —680
$\text{CuCl}(\beta)$	64,78	—	—	-16 341	680 —696
$\text{CuCl}(\text{l})$	58,24	—	—	-4 464	696 —1 000
$\text{CuCl}_2(\text{s})$	64,61	50,28	—	-21 486	298 —?
$\text{CuSO}_4(\text{s})$	78,65	72,07	—	-26 637	298 —900
$\text{CuO} \cdot \text{CuSO}_4(\text{s})$	160,77	48,44	-31,09	-60 493	298 —1 200
$\text{CuFeO}_2(\alpha)$	98,13	7,54	-18,02	-35 624	298 —1 091
$\text{CuFeO}_2(\beta)$	91,64	15,08	—	-31 002	1 091 —1 470

## 4. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	$10^3b$	$10^5c$	d	Rozsah (K)
$\text{CuFeO}_{2(l)}$	126,87	—	—	-65 026	1 470 — 1 600
$\text{CuFe}_2\text{O}_{4(\alpha)}$	139,82	117,95	-23,46	-54 776	298 — 675
$\text{CuFe}_2\text{O}_{4(\beta)}$	227,52	—	—	-82 874	675 — 795
$\text{CuFe}_2\text{O}_{4(\gamma)}$	166,26	41,06	—	-46 394	795 — 1 358
$\text{CuFe}_2\text{O}_{4(l)}$	226,26	—	—	—	1 358 — 1 500
$\text{F}_{2(g)}$	34,74	1,84	-3,35	-11 558	298 — 2 000
$\text{Fe}_{(\alpha)}$	14,11	29,72	-1,8	-5 585	298 — 1 033
$\text{Fe}_{(\beta)}$	43,54	—	—	-18 391	1 033 — 1 179
$\text{Fe}_{(\gamma)}$	20,30	12,56	—	1 159	1 179 — 1 674
$\text{Fe}_{(\delta)}$	43,12	—	—	-18 982	1 674 — 1 089
$\text{Fe}_{(l)}$	41,87	—	—	-1 230	1 809 — 2 973
$\text{FeO}_{(s)}$	51,87	6,79	-1,59	-16 292	298 — 1 200
$\text{Fe}_3\text{O}_{4(\alpha)}$	91,68	201,96	—	-36 288	298 — 900
$\text{Fe}_3\text{O}_{4(\beta)}$	201,12	—	—	—	900 — 1 800
$\text{Fe}_2\text{O}_{3(\alpha)}$	98,42	77,93	-14,87	-37 779	298 — 950
$\text{Fe}_2\text{O}_{3(\beta)}$	150,84	—	—	-50 178	950 — 1 050
$\text{Fe}_2\text{O}_{3(\gamma)}$	132,82	7,37	—	-35 319	1 050 — 1 750
$\text{FeS}_{(\alpha)}$	21,75	110,62	—	-11 393	298 — 411
$\text{FeS}_{(\beta)}$	72,91	—	—	-20 688	411 — 598
$\text{FeS}_{(\gamma)}$	51,12	9,97	—	-8 938	598 — 1 468
$\text{FeS}_{(l)}$	71,23	—	—	4 640	1 468 — 1 500
$\text{FeS}_2_{(s)}$	74,92	5,53	-12,78	-26 860	298 — 1 000
$\text{FeCl}_2_{(s)}$	79,36	8,72	-4,90	-25 680	298 — 950
$\text{FeCl}_2_{(l)}$	102,24	—	—	149	950 — 1 110
$\text{FeCl}_3_{(s)}$	123,86	—	-25,60	-45 500	298 — 557
$\text{Fe}_4\text{N}_{(s)}$	112,46	34,19	—	-35 031	298 — 1 000
$\text{Fe}_2\text{N}_{(s)}$	62,47	25,52	—	-19 749	298 — 1 000
$\text{Fe}_3\text{C}_{(\alpha)}$	82,29	83,80	—	-28 243	298 — 463
$\text{Fe}_3\text{C}_{(\beta)}$	107,35	12,57	—	-31 458	463 — 1 500
$\text{FeCO}_3_{(s)}$	95,11	—	—	-28 342	298 — 368
$\text{FeSO}_4_{(s)}$	92,18	—	—	-27 469	298 — 373
$\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3_{(s)}$	277,38	—	—	-82 659	298 — 373
$\text{Fe}_2\text{SiO}_4_{(s)}$	152,98	39,22	-28,07	-56 748	298 — 1 493
$\text{Fe}_2\text{SiO}_4_{(l)}$	240,93	—	—	-50 374	1 493 — 1 724
$\text{FeCr}_2\text{O}_4_{(s)}$	163,24	22,37	-31,93	-60 353	298 — 1 800
$\text{Ga}_{(s)}$	26,13	—	—	-7 786	298 — 303
$\text{Ga}_{(l)}$	26,40	—	1,26	-1 854	303 — 1 200
$\text{Ga}_2\text{O}_3_{(s)}$	113,05	15,46	-21,03	-41 432	298 — 1 800
$\text{GaN}_{(s)}$	38,13	9,01	—	-11 762	298 — 1 773
$\text{GaP}_{(s)}$	41,90	6,83	—	-12 789	298 — 1 790
$\text{GaAs}_{(s)}$	45,25	6,08	—	-13 754	298 — 1 238
$\text{GaSb}_{(s)}$	45,67	12,57	—	-14 167	298 — 985

## 5. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	$10^3b$	$10^5c$	d	Rozsah (K)
Ge <sub>(s)</sub>	21,62	5,87	—	-6 703	298 — 1 213
Ge <sub>(l)</sub>	27,65	—	—	27 136	1 213 — 1 600
GeO <sub>2(s)</sub> tetragon.	66,70	11,61	-17,77	-26 355	298 — 1 500
GeO <sub>2(s)</sub> hexagon.	69,01	9,85	-17,72	-26 948	298 — 1 500
GeF <sub>4(s)</sub>	97,75	8,38	-16,38	-34 998	298 — 1 000
H <sub>2(g)</sub>	27,32	3,27	0,50	-8 118	298 — 3 000
H <sub>2O(l)</sub>	75,55	—	—	-22 513	298 — 373
H <sub>2O(g)</sub>	30,04	10,73	0,34	-182	373 — 2 500
H <sub>2S(g)</sub>	32,72	12,40	-1,93	-10 948	298 — 2 000
HCl <sub>(g)</sub>	26,56	4,61	1,09	-7 753	298 — 2 000
HF <sub>(g)</sub>	26,94	3,44	1,09	-7 815	298 — 2 000
Hf <sub>(s)</sub>	23,49	7,63	—	-7 338	298 — 1 000
HfO <sub>2(s)</sub>	72,86	8,72	-14,58	-26 992	298 — 1 800
HfCl <sub>4(s)</sub>	131,86	—	-9,97	-42 639	298 — 485
HfC <sub>(s)</sub>	50,28	4,94	-10,06	-18 578	298 — 2 500
Hg <sub>(l)</sub>	27,70	—	—	-8 254	298 — 634
Hg <sub>(g)</sub>	20,82	—	—	-54 627	634 — 2 000
HgO <sub>(s)</sub>	37,71	25,16	—	-12 354	298 — ?
HgS <sub>(s)</sub> červený	43,83	15,59	—	-13 753	298 — 618
HgS <sub>(s)</sub> čierny	44,08	15,21	—	-13 811	298 — 1 000
HgCl <sub>(s)</sub>	46,30	15,50	—	-14 485	298 — 773
HgCl <sub>2(s)</sub>	64,02	43,58	—	-21 013	298 — 553
I <sub>(g)</sub>	20,42	0,40	0,28	-6 008	298 — 2 000
I <sub>2(g)</sub>	37,46	0,57	-0,63	-11 399	298 — 2 000
In <sub>(s)</sub>	24,34	10,48	—	-7 718	298 — 703
In <sub>(l)</sub>	30,34	-1,38	—	-5 740	703 — 800
In <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	124,02	7,96	-23,09	-45 059	298 — 1 600
Ir <sub>(s)</sub>	23,30	5,95	—	-7 207	298 — 1 800
IrO <sub>2(s)</sub>	72,61	8,09	-15,42	-27 171	298 — 1 400
Ir <sub>2</sub> S <sub>3(s)</sub>	108,94	40,56	-10,56	-37 808	298 — 1 200
IrCl <sub>3(s)</sub>	85,06	18,86	-4,19	-27 591	298 — 1 080
K <sub>(s)</sub>	25,31	13,07	—	-8 122	298 — 336
K <sub>(l)</sub>	32,26	—	—	-7 317	336 — 373
KCl <sub>(s)</sub>	41,44	21,79	3,23	-12 232	298 — 1 043
KCl <sub>(l)</sub>	67,04	—	—	-559	1 043 — 1 200
K <sub>2</sub> CO <sub>3(s)</sub>	80,41	109,19	—	-28 810	298 — 1 174
K <sub>2</sub> CO <sub>3(l)</sub>	154,82	44,58	—	-44 015	1 174 — 1 250



## 6. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	10 <sup>3</sup> b	10 <sup>-5</sup> c	d	Rozsah (K)
Li <sub>(s)</sub>	13,95	34,40	—	-5 684	298 — 453
Li <sub>2</sub> O <sub>(s)</sub>	62,60	25,48	-14,16	-24 537	298 — 1 045
LiCl <sub>(s)</sub>	46,09	14,25	—	-14 367	298 — 883
LiF <sub>(s)</sub>	38,30	21,75	—	-12 379	298 — 1 120
LiF <sub>(l)</sub>	64,95	—	—	-1 795	1 120 — 1 170
Li <sub>3</sub> N <sub>(s)</sub>	49,15	96,37	—	-18 925	298 — 880
Li <sub>2</sub> CO <sub>3(s)</sub>	16,01	179,00	—	-12 718	298 — 993
Li <sub>2</sub> CO <sub>3(l)</sub>	129,26	56,77	—	-20 122	993 — 1 150
LiOH <sub>(s)</sub>	50,24	34,53	-9,51	-19 696	298 — 746
LiOH <sub>(l)</sub>	86,90	—	—	-15 231	746 — 880
Mg <sub>(s)</sub>	22,33	10,27	-0,43	-7 254	298 — 923
Mg <sub>(l)</sub>	32,68	—	—	-3 345	923 — 1 150
MgO <sub>(s)</sub>	49,06	3,14	-11,73	-18 695	298 — 3 098
MgS <sub>(s)</sub>	43,16	8,25	—	-13 228	298 — 2 000
MgCl <sub>2(s)</sub>	79,19	5,95	-8,63	-26 758	298 — 985
MgCl <sub>2(l)</sub>	92,60	—	—	-2 299	985 — 1 500
MgF <sub>2(s)</sub>	70,94	10,56	-9,22	-24 702	298 — 1 536
MgF <sub>2(l)</sub>	94,69	—	—	10 060	1 536 — 1 800
Mg <sub>3</sub> N <sub>2(α)</sub>	95,57	30,59	—	-29 838	298 — 823
Mg <sub>3</sub> N <sub>2(β)</sub>	124,02	—	—	-42 432	823 — 1 061
MgCO <sub>3(s)</sub>	78,02	57,82	-17,43	-31 666	298 — 750
MgSO <sub>4(s)</sub>	111,87	—	—	-33 337	298 — 372
MgSiO <sub>3(s)</sub> klinoenstatit	92,18	33,10	-17,81	-34 915	298 — 903
MgSiO <sub>3(s)</sub> rombický enstatit	120,50	—	—	-44 352	903 — 1 258
MgSiO <sub>3(s)</sub> protoenstatit	122,60	—	—	-45 361	1 258 — 1 850
MgSiO <sub>3(l)</sub>	146,65	—	—	75 348	1 850 — 2 300
MgSiO <sub>4(s)</sub>	150,04	27,40	-35,70	-57 908	298 — 2 163
MgSiO <sub>4(l)</sub>	205,31	—	—	-40 548	2 163 — 2 500
MgAl <sub>2</sub> O <sub>4(s)</sub>	154,19	26,82	-40,98	-60 891	298 — 1 800
MgCr <sub>2</sub> O <sub>4(s)</sub>	167,68	14,92	-40,14	-64 100	298 — 1 800
Mn <sub>(α)</sub>	23,88	14,16	-1,57	-8 271	298 — 993
Mn <sub>(β)</sub>	34,90	2,77	—	-11 223	993 — 1 363
Mn <sub>(γ)</sub>	25,27	14,92	-1,86	-7 301	1 363 — 1 409
Mn <sub>(δ)</sub>	46,51	—	—	-20 487	1 409 — 1 517
Mn <sub>(l)</sub>	46,09	—	—	-5 199	1 517 — 2 425
MnO <sub>(s)</sub>	46,55	8,13	-3,69	-15 471	298 — 1 800
MnO <sub>2(s)</sub>	69,55	10,22	-16,26	-26 636	298 — 780
Mn <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	103,62	35,11	-13,53	-36 679	298 — 1 350
Mn <sub>3</sub> O <sub>4(α)</sub>	145,14	45,35	-9,22	-48 358	298 — 1 445
Mn <sub>3</sub> O <sub>4(β)</sub>	210,34	—	—	-73 669	1 445 — 1 800
MnS <sub>(s)</sub>	47,77	7,54	—	-14 570	298 — 1 803
MnS <sub>(l)</sub>	67,04	—	—	-10 896	1 803 — 2 000
Mn <sub>4</sub> N <sub>(s)</sub>	92,85	127,80	—	-33 343	298 — 800

## 7. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	10 <sup>3</sup> b	10 <sup>-5</sup> c	d	Rozsah (K)
Mn <sub>5</sub> N <sub>2(s)</sub>	128,00	160,90	—	-45 288	298 — 800
Mn <sub>3</sub> C <sub>(s)</sub>	105,84	23,46	-17,05	-38 303	298 — 1 310
Mn <sub>7</sub> C <sub>3(s)</sub>	247,00	54,89	39,81	-89 402	298 — 1 500
MnCO <sub>3(s)</sub>	92,14	38,97	-19,65	-35 782	298 — 700
MnSO <sub>4(s)</sub>	122,60	37,37	-29,50	-48 093	298 — 1 100
MnSiO <sub>3(s)</sub>	110,70	16,26	-25,81	-42 371	298 — 1 500
Mn <sub>2</sub> SiO <sub>4(s)</sub>	159,30	19,53	-31,17	-58 798	298 — 1 618
Mn <sub>2</sub> SiO <sub>4(l)</sub>	243,44	—	—	-77 782	1 618 – 1 800
Mo <sub>(s)</sub>	22,96	5,45	—	-7 084	298 — 1 800
MoO <sub>3(s)</sub>	84,09	24,72	-15,42	-31 330	298 — 1 808
Mo <sub>2</sub> N <sub>(s)</sub>	46,89	57,82	—	-16 540	298 — 800
Mo <sub>2</sub> C <sub>(s)</sub>	69,14	9,64	-11,48	-24 884	298 — 2 200
N <sub>2(g)</sub>	27,91	4,27	—	-8 506	298 — 2 500
NH <sub>3(g)</sub>	37,37	18,69	-6,49	-14 143	298 — 2 400
N <sub>2</sub> O <sub>(g)</sub>	45,75	8,63	-8,55	-16 885	298 — 2 000
NO <sub>(g)</sub>	29,46	3,85	-0,59	-9 148	298 — 2 500
Na <sub>(s)</sub>	20,95	22,46	—	-7 240	298 — 371
Na <sub>(l)</sub>	31,43	—	—	-6 945	371 — 500
Na <sub>2</sub> O <sub>(s)</sub>	65,78	22,63	—	-20 607	298 — 593
Na <sub>2</sub> O <sub>(l)</sub>	104,75	—	—	-33 375	593 — 2 200
Na <sub>2</sub> S <sub>(s)</sub>	75,84	12,57	—	-23 158	298 — 1 193
Na <sub>2</sub> S <sub>(l)</sub>	90,17	0,92	—	-26 940	1 193 — 2 000
NaCl <sub>(s)</sub>	46,01	16,34	—	-14 436	298 — 1 073
NaCl <sub>(l)</sub>	67,04	—	—	2 626	1 073 — 1 300
NaF <sub>(s)</sub>	43,58	16,26	-1,38	-14 171	298 — 1 265
Na <sub>2</sub> CO <sub>3(s)</sub>	58,58	227,94	-13,11	-31 977	298 — 1 127
Na <sub>2</sub> CO <sub>3(l)</sub>	142,42	44,83	—	20 287	1 127 — 1 210
Na <sub>2</sub> SO <sub>4(α)</sub>	98,47	132,99	—	-35 249	298 — 450
Na <sub>4</sub> SiO <sub>4(s)</sub>	162,82	74,33	—	-51 820	298 — 884
Na <sub>4</sub> SiO <sub>4(l)</sub>	259,78	—	—	-84 085	884 — 1 800
Na <sub>2</sub> SiO <sub>3(s)</sub>	130,48	40,22	27,11	-49 766	298 — 1 361
Na <sub>2</sub> SiO <sub>3(l)</sub>	179,33	—	—	-24 683	1 361 — 1 800
Na <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>5(s)</sub>	185,95	70,64	-44,71	-73 553	298 — 1 090
Na <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>5(l)</sub>	261,25	—	—	-105 906	1 090 — 1 800
Na <sub>3</sub> AlF <sub>6(α)</sub>	192,53	123,44	-11,65	-66 764	298 — 838
Na <sub>3</sub> AlF <sub>6(β)</sub>	218,51	66,45	—	-58 888	838 — 1 285
Na <sub>3</sub> AlF <sub>6(l)</sub>	391,35	—	—	-118 797	1 285 — 1 400
Ni <sub>(α)</sub>	17,01	29,50	—	-6 378	298 — 631
Ni <sub>(β)</sub>	25,14	7,54	—	-6 551	631 — 1 728
Ni <sub>(l)</sub>	38,55	—	—	-885	1 728 — 2 000
NiO <sub>(s)</sub>	47,35	9,01	—	-14 510	298 — 1 273
NiS <sub>(s)</sub>	38,97	26,82	—	-12 803	298 — 670

## 8. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	10 <sup>3</sup> b	10 <sup>-5</sup> c	d	Rozsah (K)
NiCl <sub>2(s)</sub>	73,33	13,24	-4,99	-24 114	298 — 1 303
NiCl <sub>2(l)</sub>	100,56	—	—	29 468	1 303 — 1 336
NiF <sub>2(s)</sub>	62,85	18,02	—	-19 529	298 — 1 723
NiSO <sub>4(s)</sub>	139,95	—	—	-41 705	298 — 373
NiAl <sub>2</sub> O <sub>4(s)</sub>	158,43	23,38	-30,80	-58 585	298 — 1 900
O <sub>2(g)</sub>	30,00	4,19	-1,68	-9 689	298 — 3 000
Os <sub>(s)</sub>	23,59	3,85	—	-7 200	298 — 2 000
OsO <sub>2(s)</sub>	70,06	10,39	-14,42	-26 104	298 — 1 200
OsO <sub>4(s)</sub>	86,10	20,45	-16,01	-31 938	298 — 329
P <sub>(s)</sub> biely	19,15	15,84	—	-6 410	298 — 317
P <sub>(s)</sub> červený	16,97	14,92	—	-5 719	298 — 870
P <sub>(l)</sub>	26,36	—	—	-5 262	317 — 870
P <sub>2</sub> O <sub>5(s)</sub>	75,00	162,57	-15,63	-34 813	298 — 700
PS <sub>(l)</sub>	37,08	0,50	-1,80	-11 676	298 — 2 00
PCl <sub>3(l)</sub>	80,24	3,10	-8,00	-26 733	298 — 1 000
PCl <sub>5(l)</sub>	131,65	0,84	-17,89	-45 272	298 — 2 000
PF <sub>3(l)</sub>	71,98	8,04	-16,26	-27 263	298 — 2000
Pb <sub>(s)</sub>	23,59	9,76	—	-7 463	298 — 600
Pb <sub>(l)</sub>	32,47	-3,10	—	-5 353	600 — 1 200
PbO <sub>(l)</sub> červený	45,88	15,71	-4,19	-15 775	298 — 1 000
PbO <sub>(s)</sub> žltý	37,92	26,82	—	-12 491	298 — 1 163
PbO <sub>(l)</sub>	7,75	-0,74	—	53 038	1 163 — 1 745
PbO <sub>2(s)</sub>	55,56	31,17	—	-17 940	298 — 1 000
Pb <sub>3</sub> O <sub>4(s)</sub>	137,43	32,68	—	-42 405	298 — 1 000
PbS <sub>(s)</sub>	44,67	16,42	—	-14 040	298 — 1 387
PbS <sub>(l)</sub>	37,37	—	-2,05	29 101	1 387 — 2 000
PbCl <sub>2(s)</sub>	67,46	16,76	—	-20 847	298 — 771
PbCl <sub>2(l)</sub>	118,16	—	—	-31 305	771 — 950
PbF <sub>2(s)</sub>	69,14	17,18	—	-21 366	298 — 1 097
PbCO <sub>3(s)</sub>	51,91	119,83	—	-20 789	298 — 800
PbSO <sub>4(s)</sub>	74,04	101,40	—	-26 566	298 — 1 139
Pt <sub>(s)</sub>	24,80	4,86	—	-7 606	298 — 1 873
Rb <sub>(s)</sub>	13,70	54,89	—	-6 519	298 — 312
RbCl <sub>(s)</sub>	48,19	10,43	—	-14 823	298 — 990
RbF <sub>(s)</sub>	33,39	38,55	5,07	-9 960	298 — 1 106
RbF <sub>(l)</sub>	-47,34	3,48	1 469,43	250 476	1 106 — 1 200
Re <sub>(s)</sub>	23,72	5,45	—	-7 310	298 — 2 000
Re <sub>2</sub> O <sub>7(s)</sub>	122,14	184,36	-9,43	-47 748	298 — 570

## 9. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	10 <sup>3</sup> b	10 <sup>-5</sup> c	d	Rozsah (K)
ReCl <sub>3(s)</sub>	105,63	27,65	-19,11	-39 118	298 — 750
ReF <sub>6(l)</sub>	15,45	1,30	-32,05	-57 136	298 — 2 000
Rh <sub>(s)</sub>	23,00	8,63	—	-7 237	298 — 1 900
Rh <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	86,90	57,82	—	-28 463	298 — 973
S <sub>(s)</sub> rombická	14,08	26,82	—	-5 386	298 — 368
S <sub>(s)</sub> monoklinická	18,35	18,44	—	-5 989	368 — 392
S <sub>(l)</sub>	22,63	23,05	—	-6 346	392 — 718
S <sub>2(g)</sub>	36,54	0,67	-3,77	-12 183	298 — 3 000
S <sub>6(g)</sub>	131,94	0,67	-17,22	-45 126	298 — 2000
SO <sub>(g)</sub>	32,26	3,52	-2,72	-10 682	298 — 2 000
SO <sub>2(g)</sub>	43,49	10,64	-5,95	-15 429	298 — 1 800
SO <sub>3(g)</sub>	57,40	26,90	-13,07	-22 685	298 — 1 200
Sb <sub>(s)</sub>	23,09	7,29	—	-7 204	298 — 903
Sb <sub>(l)</sub>	31,43	—	—	8 204	903 — 1 300
Sb <sub>2(g)</sub>	37,44	—	-0,92	-11 465	298 — 2 000
Sb <sub>4(g)</sub>	83,17	—	-1,84	-25 402	298 — 2 000
Sb <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	80,03	71,65	—	-27 030	298 — 930
SbO <sub>2(s)</sub>	47,35	33,94	—	-15 617	298 — 1 198
Sb <sub>2</sub> O <sub>5(s)</sub>	45,88	241,22	—	-24 382	298 — 500
Sb <sub>2</sub> S <sub>3(s)</sub>	101,98	60,63	—	-33 082	298 — 823
SbCl <sub>3(s)</sub>	43,16	239,25	—	-23 484	298 — 346
Se <sub>(s)</sub>	17,91	25,14	—	-6 453	298 — 493
Se <sub>(l)</sub>	35,20	—	—	-6 816	493 — 800
Se <sub>(g)</sub>	21,49	1,51	-0,92	6 779	298 — 2 000
Se <sub>2(g)</sub>	44,67	-2,66	-2,51	-14 035	298 — 2 000
SeO <sub>(g)</sub>	34,36	2,10	-3,35	-11 456	298 — 2 000
SeO <sub>2(s)</sub>	69,68	3,90	-11,06	-24 649	298 — 613
SeO <sub>2(g)</sub>	52,92	3,10	-9,93	-19 240	298 — 2 000
SeF <sub>4(g)</sub>	101,19	3,69	-27,57	-39 570	298 — 2 000
Si <sub>(s)</sub>	23,97	2,47	-4,15	-8 645	298 — 1 700
Si <sub>(l)</sub>	25,64	—	—	31 969	1 700 — 1 800
SiO <sub>2(α)</sub> kremeň	43,95	1,01	-6,03	-15 165	298 — 847
SiO <sub>2(β)</sub> kremeň	59,00	10,06	—	-29 715	847 — 1 079
SiO <sub>(α)</sub> christob.	17,93	88,24	—	-9 261	298 — 523
SiO <sub>2(β)</sub> christob.	72,86	1,30	-41,48	-25 240	523 — 1 995
SiO <sub>2(α)</sub> tridymit	13,70	103,91	—	-8 696	298 — 390
SiO <sub>2(l)</sub> sklo	56,06	15,42	-14,46	-22 242	298 — 2000
SiCl <sub>2(g)</sub>	57,65	0,38	-5,66	-19 095	298 — 2 200
SiCl <sub>4(g)</sub>	101,61	6,87	-11,52	-34 450	298 — 1 000
Si <sub>3</sub> N <sub>4(s)</sub>	70,64	98,88	—	-25 441	298 — 900
SiC <sub>(s)</sub>	37,25	12,19	-11,90	-15 635	298 — 1 629

## 10. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	10 <sup>3</sup> b	10 <sup>-5</sup> c	d	Rozsah (K)
Sn <sub>(s)</sub>	21,62	18,18	—	-7 250	298 — 505
Sn <sub>(l)</sub>	34,74	-9,22	—	-3 182	505 — 810
SnO <sub>(s)</sub>	40,01	14,67	—	-12 577	298 — 1 273
SnO <sub>(g)</sub>	35,28	1,34	-3,52	-11 754	298 — 2 000
SnO <sub>2(s)</sub>	74,00	10,06	-21,62	-29 753	298 — 1 500
SnS <sub>(α)</sub>	35,74	31,34	3,77	-10 776	298 — 875
SnS <sub>(β)</sub>	40,98	15,67	—	-9 125	875 — 1 154
SnS <sub>(g)</sub>	37,00	0,34	-2,30	-11 812	298 — 2 000
SnS <sub>2(s)</sub>	64,99	17,60	—	-20 148	298 — 1 000
SnCl <sub>2(s)</sub>	67,88	38,80	—	-21 951	298 — 520
SnCl <sub>4(l)</sub>	165,51	—	—	-49 321	298 — 400
SnCl <sub>4(g)</sub>	107,14	0,84	-7,84	-34 595	298 — 1 000
SrO <sub>(s)</sub>	51,70	4,69	-7,58	-18 158	298 — 1 270
SrCl <sub>2(s)</sub>	64,19	39,39	—	-20 877	298 — 1 002
SrF <sub>2(s)</sub>	64,95	18,02	—	-20 155	298 — 1 750
SrCO <sub>3(s)</sub>	89,75	35,87	-14,25	-33 120	298 — 1 197
Ta <sub>(s)</sub>	24,76	4,15	—	-7 562	298 — 1 173
Ta <sub>2</sub> O <sub>5(s)</sub>	155,03	27,49	-24,80	-55 741	298 — 1 800
TaCl <sub>(s)</sub>	133,66	—	-8,38	-42 642	298 — 700
Ta <sub>2</sub> N <sub>(s)</sub>	70,60	17,68	-7,08	-24 199	298 — 300
TaN <sub>(s)</sub>	55,35	2,72	-12,65	-20 860	298 — 3 360
Ta <sub>2</sub> C <sub>(s)</sub>	66,54	13,95	-8,59	-23 330	298 — 3 775
TaC <sub>(s)</sub>	43,37	11,35	-8,80	-16 381	298 — 4 270
Te <sub>(s)</sub>	19,19	22,00	—	-6 695	298 — 726
Te <sub>(l)</sub>	37,71	—	—	27 346	726 — 873
TeO <sub>2(s)</sub>	65,28	14,58	-5,03	-21 788	298 — 1 006
TeO <sub>2(l)</sub>	112,79	2,18	—	-33 717	1 006 — 1 146
TeO <sub>3(s)</sub>	54,85	2,43	-11,86	-20 433	298 — 2 000
TeCl <sub>4(s)</sub>	139,11	—	—	-41 454	298 — 497
TeCl <sub>4(l)</sub>	222,91	—	—	-64 266	497 — 550
Th <sub>(α)</sub>	25,52	7,84	-0,51	-8 124	298 — 1 633
Th <sub>(β)</sub>	15,71	11,98	—	6 005	1 633 — 2 023
Th <sub>(l)</sub>	46,09	—	—	-16 999	2 023 — 3 000
ThO <sub>2(s)</sub>	69,76	8,92	-9,39	-24 335	298 — 2 500
ThCl <sub>4(s)</sub>	127,17	13,58	-9,13	-41 563	298 — 1 043
ThF <sub>4(s)</sub>	112,08	24,51	-7,58	-37 031	298 — 1 383
ThN <sub>(s)</sub>	47,51	9,55	-4,78	-16 186	298 — 2 000
Th <sub>3</sub> N <sub>4(s)</sub>	164,79	26,15	-22,33	-57 761	298 — 2 000
ThC <sub>1,94(s)</sub>	63,56	12,11	-9,26	-22 585	298 — 1 700

## 11. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	10 <sup>3</sup> b	10 <sup>-5</sup> c	d	Rozsah (K)
Ti <sub>(α)</sub>	22,12	10,06	—	-7 062	298 — 1 155
Ti <sub>(β)</sub>	19,86	7,96	—	657	1 155 — 1 940
TiO <sub>(α)</sub>	44,29	15,08	-7,79	-16 482	298 — 1 264
TiO <sub>(β)</sub>	49,65	12,57	—	-17 203	1 264 — 1 800
Ti <sub>2</sub> O <sub>3(α)</sub>	30,63	224,25	—	-19 084	298 — 473
Ti <sub>2</sub> O <sub>3(β)</sub>	145,31	5,45	-42,74	-56 989	473 — 1 800
Ti <sub>3</sub> O <sub>5(α)</sub>	148,62	123,61	—	-49 777	298 — 450
TiO <sub>2(s)</sub> rutil	75,29	1,17	-18,23	-28 605	298 — 1 800
TiO <sub>2(s)</sub> anatas	74,71	2,10	-17,72	-28 303	298 — 1 300
TiS <sub>2(α)</sub>	33,86	114,55	—	-15 176	298 — 420
TiCl <sub>4(g)</sub>	106,64	1,01	-9,89	-35 142	298 — 2 000
TiN <sub>(s)</sub>	49,90	3,94	-12,40	-19 206	298 — 1 800
TiC <sub>(s)</sub>	49,57	3,35	-15,00	-19 954	298 — 1 800
Tl <sub>(α)</sub>	15,67	25,31	2,81	-4 850	298 — 507
Tl <sub>(β)</sub>	20,95	20,95	—	-7 145	507 — 577
Tl <sub>(1)</sub>	30,17	—	—	-4 666	577 — 1 760
Tl <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	132,07	3,56	-22,29	-46 994	298 — 500
TlCl <sub>(s)</sub>	50,28	8,38	—	-15 355	298 — 702
TlCl <sub>(1)</sub>	59,50	—	—	-3 857	702 — 850
TlF <sub>(α)</sub>	51,58	10,98	—	-15 858	298 — 356
TlF <sub>(β)</sub>	22,17	74,50	—	-9 079	356 — 595
TlF <sub>(1)</sub>	67,38	—	—	-8 894	595 — 850
U <sub>(α)</sub>	10,49	37,50	4,90	-3 280	298 — 941
U <sub>(β)</sub>	41,86	—	—	-13 364	941 — 1 048
U <sub>(γ)</sub>	38,13	—	—	-5 041	1 048 — 1 405
UO <sub>2(s)</sub>	80,45	6,79	-16,59	-29 842	298 — 1 500
U <sub>3</sub> O <sub>8(s)</sub>	282,83	37,00	-50,03	-102 714	298 — 900
UO <sub>3(s)</sub>	92,56	10,64	-12,44	-32 229	298 — 900
US <sub>(s)</sub>	52,92	6,54	-3,79	-17 332	298 — 2 000
U <sub>2</sub> S <sub>3(s)</sub>	124,86	16,13	-3,77	-39 189	298 — 2 000
US <sub>2(s)</sub>	71,90	9,64	—	-21 854	298 — 1 833
UCl <sub>3(s)</sub>	87,15	32,47	4,40	-25 935	298 — 900
UCl <sub>4(s)</sub>	113,97	35,91	-3,31	-36 668	298 — 800
UF <sub>4(s)</sub>	107,98	29,33	-0,25	-33 474	298 — 1 309
UF <sub>6(s)</sub>	52,79	385,48	—	-32 847	298 — 337
UC <sub>(s)</sub>	56,15	4,27	-6,12	-18 975	298 — 2 073
U <sub>2</sub> C <sub>3(s)</sub>	125,28	12,82	-15,54	-43 117	298 — 2 050
UC <sub>2(s)</sub>	69,14	8,55	-9,43	-24 147	298 — 2 050
V <sub>(s)</sub>	20,53	10,81	0,84	-6 316	298 — 2 175
V <sub>(1)</sub>	47,56	—	—	-22 831	2 175 — 2 600
VO <sub>(s)</sub>	47,43	13,49	-5,28	-16 504	298 — 1 700
VO <sub>2(α)</sub>	62,68	—	—	-18 678	298 — 345

## 12. pokračovanie prílohy 3

Látka	a	10 <sup>3</sup> b	10 <sup>-5</sup> c	d	Rozsah (K)
VO <sub>2(β)</sub>	74,79	7,12	-16,55	-23 766	345 — 1 633
VO <sub>2(l)</sub>	106,85	—	—	-8 684	1 633 — 1 900
V <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	122,98	19,94	-22,71	-45 154	298 — 1 800
V <sub>2</sub> O <sub>5(s)</sub>	195,00	-16,34	-55,39	-75 971	298 — 943
V <sub>2</sub> O <sub>5(l)</sub>	191,06	—	—	-8 346	943 — 1 500
VCl <sub>2(s)</sub>	72,28	11,40	-2,97	-23 042	298 — 1 300
VCl <sub>3(s)</sub>	96,33	16,42	-7,04	-31 797	298 — 900
VN <sub>(s)</sub>	45,84	8,80	-9,26	-17 158	298 — 1 600
VC <sub>0,88(s)</sub>	36,41	13,32	-7,12	-13 830	298 — 2 000
W <sub>(s)</sub>	23,67	36,29	—	-8 665	298 — 2 073
WO <sub>3(s)</sub>	73,24	28,45	—	-23 088	298 — 1 550
WS <sub>2(s)</sub>	69,34	14,25	-4,19	-22 702	298 — 1 300
WC <sub>(s)</sub>	33,44	9,09	—	-10 368	298 — 3 000
Y <sub>(s)</sub>	23,97	7,56	0,34	-7 364	298 — 1 752
Zn <sub>(s)</sub>	22,42	10,06	—	-7 127	298 — 693
Zn <sub>(l)</sub>	31,43	—	—	-4 280	693 — 1 180
Zn <sub>(g)</sub>	20,82	—	—	123 060	1 180 — 1 600
ZnO <sub>(s)</sub>	49,06	5,11	-9,13	-17 910	298 — 1 600
ZnS <sub>(s)</sub>	50,95	5,20	-5,70	-17 326	298 — 1 200
ZnS <sub>(l)</sub>	38,05	—	-1,97	-11 999	298 — 1 500
ZnCl <sub>2(s)</sub>	60,76	23,05	—	-19 129	298 — 556
ZnCl <sub>2(l)</sub>	100,98	—	—	-14 905	556 — 1 000
Zn <sub>3</sub> N <sub>2(s)</sub>	79,61	94,28	—	-27 910	298 — 700
ZnCO <sub>3(s)</sub>	38,97	138,27	—	-17 752	298 — ?
ZnSO <sub>4(s)</sub>	91,76	76,26	—	-30 730	298 — ?
Zn <sub>2</sub> SiO <sub>4(s)</sub>	145,10	37,00	-30,34	-55 063	298 — 1 785
ZnFe <sub>2</sub> O <sub>4(s)</sub>	155,66	44,62	-16,01	-53 740	298 — 1 000
Zr <sub>(α)</sub>	22,00	11,65	—	-7 073	298 — 1 135
Zr <sub>(β)</sub>	23,25	4,65	—	-216	1 135 — 2 130
ZrO <sub>2(α)</sub>	69,72	7,54	-14,08	-25 836	298 — 1 448
ZrO <sub>2(β)</sub>	74,58	—	—	-18 052	1 448 — 1 850
ZrCl <sub>4(s)</sub>	133,74	—	-12,19	-43 945	298 — 710
ZrN <sub>(s)</sub>	46,51	7,04	-7,21	-16 952	298 — 1 700
ZrSiO <sub>4(s)</sub>	131,90	16,42	-33,86	-51 397	298 — 1 800

## Príloha 4

Štandardné mólové zlučovacie entalpie  
a štandardné mólové entropie prvkov  
a zlúčenín

Látka	$\Delta H_{298}^0$ (J mol <sup>-1</sup> )	$S_{298}^0$ (J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> )
Ag(s)	0	42,70
Ag <sub>2</sub> O(s)	-30 560	121,81
Ag <sub>2</sub> S(s)	-31 810	143,58
AgCl(s)	-127 130	96,28
Ag <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)	-505 670	167,44
Ag <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (s)	-717 480	199,92
Al	0	28,34
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-1 678 170	51,07
Al <sub>2</sub> S <sub>3</sub> (s)	-723 760	123,49
AlCl(g)	-51 490	227,93
AlCl <sub>3</sub> (s)	-705 970	109,34
AlF(g)	-265 390	215,16
AlF <sub>3</sub> (s)	-1 511 150	66,52
AlN(s)	-318 550	20,18
Al <sub>4</sub> C <sub>3</sub> (s)	-215 790	88,74
Al <sub>2</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> (s)	-3 443 400	239,31
3 Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> . .2SiO <sub>2</sub> (s)	-17 160	275,02
Ar(g)	0	
As(s)	0	35,71
As <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-653 640	122,78
As <sub>2</sub> O <sub>5</sub> (s)	-914 640	105,49
As <sub>2</sub> S <sub>3</sub> (s)	-167 440	163,67
AsCl <sub>3</sub> (g)	-271 250	326,38
Au(s)	0	47,39
B(s)	0	5,86
B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-1 272 540	54,00
BCl <sub>3</sub> (g)	-403 110	290,09
BN(s)	-252 420	14,82
B <sub>4</sub> C(s)	-71 580	27,13
Ba(s)	0	62,46
BaO(s)	-553 810	70,45
BaCl <sub>2</sub> (s)	-859 800	123,70
BaF <sub>2</sub> (s)	-1 207 660	96,40
BaCO <sub>3</sub> (s)	-1 216 870	112,18

## 1. pokračovanie prílohy 4

Látka	$\Delta H_{298}^0$ (J mol <sup>-1</sup> )	$S_{298}^0$ (J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> )
BaSO <sub>4</sub> (s)	-1 473 890	132,28
BaSiO <sub>3</sub> (s)	-159 070	112,18
BaAlO <sub>4</sub> (s)	-100 460	148,60
Be(s)	0	9,50
BeO(s)	-608 640	14,15
BeS(s)	-233 580	35,16
Be <sub>3</sub> N <sub>2</sub> (s)	-589 810	34,33
Be <sub>2</sub> C(s)	-117 210	16,33
Bi(s)	0	56,72
Bi <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-570 970	151,53
Bi <sub>2</sub> S <sub>3</sub> (s)	-210 770	200,51
Br <sub>2</sub> (l)	0	152,29
C <sub>grafit</sub>	0	5,74
CO(g)	-110590	197,66
CO <sub>2</sub> (g)	-393 751	213,78
COS(g)	-138 470	231,57
CS <sub>2</sub> (g)	117 210	237,89
CCl <sub>4</sub> (l)	-102 980	309,89
CH <sub>4</sub> (g)	74 890	186,28
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (g)	-84 740	
Ca(s)	0	41,65
CaO(s)	-634 600	39,77
CaS(s)	-476 370	56,51
CaCl <sub>2</sub> (s)	-796 18	104,56
CaF <sub>2</sub> (s)	-1 220 220	68,86
CaC <sub>2</sub> (s)	-59 020	70,32
CaCO <sub>3</sub> (s)	-1 207 934	88,74
CaSO <sub>4</sub> (s)	-1 434 790	106,74
CaSiO <sub>3</sub> (s)	-89 160	82,05
Ca <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub> (s)	-136 880	120,56
CaAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (s)	-15 070	114,07
CaAl <sub>4</sub> O <sub>7</sub> (s)	-12 560	177,91
Ca <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>6</sub> (s)	-8 370	205,53
CaFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (s)	-40 190	188,79
Ca <sub>2</sub> Fe <sub>2</sub> O <sub>5</sub> (s)	-20 930	149,25
CaO.MgO. .SiO <sub>2</sub> (s)	-115 530	110,51



## 2. pokračovanie prílohy 4

Látka	$\Delta H_{298}^0$ (J mol <sup>-1</sup> )	$S_{298}^0$ (J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> )
Cd <sub>(s)</sub>	0	51,82
CdO <sub>(s)</sub>	-259 530	54,84
CdS <sub>(s)</sub>	-149 440	69,07
CdCl <sub>2(s)</sub>	-390 970	115,32
CdF <sub>2(s)</sub>	-700 740	83,72
CdCO <sub>3(s)</sub>	-752 220	92,51
CdSO <sub>4(s)</sub>	-929 290	123,07
Ce <sub>(s)</sub>	0	72,00
CeO <sub>2(s)</sub>	-1 090 450	62,37
Ce <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	-1 822 580	150,70
CeF <sub>3(s)</sub>	-1 779 050	115,32
CeN <sub>(s)</sub>	-326 510	—
Cl <sub>2(g)</sub>	0	223,07
Co <sub>(s)</sub>	0	30,06
CoO <sub>(s)</sub>	-239 020	52,95
Co <sub>3</sub> O <sub>4(s)</sub>	-905 430	102,56
CoS <sub>0,89(s)</sub>	-94 600	52,33
CoS <sub>1,33(s)</sub>	-119 720	61,53
CoCl <sub>2(s)</sub>	-310 180	109,72
CoF <sub>2(s)</sub>	-692 360	82,00
CoF <sub>3(s)</sub>	-811 250	95,44
CoSO <sub>4(s)</sub>	-887 430	113,44
Cr <sub>(s)</sub>	0	23,65
Cr <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	-1 130 220	81,21
CrO <sub>3(s)</sub>	-578 760	72,00
CrCl <sub>2(s)</sub>	-395 580	115,32
CrN <sub>(s)</sub>	-123 070	328,60
Cr <sub>3</sub> C <sub>2(s)</sub>	-109 670	85,59
Cr <sub>7</sub> C <sub>3(s)</sub>	-228 140	200,93
Cr <sub>4</sub> C <sub>(s)</sub>	-98 370	105,91
Cr <sub>2</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>3(s)</sub>	-2 912 200	258,90
Cs <sub>(s)</sub>	0	85,27
CsCl <sub>(s)</sub>	-442 880	101,22
CsF <sub>(g)</sub>	-356 650	243,21
Cs <sub>2</sub> CO <sub>3(s)</sub>	-1 147 800	204,57
Cu <sub>(s)</sub>	0	33,15
Cu <sub>2</sub> O <sub>(s)</sub>	-167 440	93,14

## 3. pokračovanie prílohy 4

Látka	$\Delta H_{298}^0$ (J mol <sup>-1</sup> )	$S_{298}^0$ (J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> )
CuO <sub>(s)</sub>	-155 300	42,70
Cu <sub>2</sub> S <sub>(s)</sub>	-79 530	120,98
CuS <sub>(s)</sub>	-52 330	66,56
CuCl <sub>(s)</sub>	-137 330	86,23
CuCl <sub>2(s)</sub>	-217 670	108,12
CuSO <sub>4(s)</sub>	-771 270	109,25
CuFeO <sub>2(s)</sub>	-512 790	88,91
CuFe <sub>2</sub> O <sub>4(s)</sub>	-966 970	146,84
F <sub>2(s)</sub>	0	202,77
Fe <sub>(s)</sub>	0	27,15
FeO <sub>(s)</sub>	-264 840	58,81
Fe <sub>3</sub> O <sub>4(s)</sub>	-1 117 240	151,53
Fe <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	-821 710	87,49
FeOOH <sub>(s)</sub>	-559 250	59,44
FeS <sub>(s)</sub>	-100 460	60,32
FeS <sub>2(s)</sub>	-171 630	52,95
FeCl <sub>2(s)</sub>	-342 410	118,05
FeCl <sub>3(s)</sub>	-399 760	142,32
Fe <sub>4</sub> N <sub>(s)</sub>	-11 090	155,72
Fe <sub>3</sub> C <sub>(s)</sub>	-25 120	104,65
FeCO <sub>3(s)</sub>	-740 920	92,93
FeSO <sub>4(s)</sub>	-929 290	121,02
Fe(SO <sub>4</sub> ) <sub>3(s)</sub>	-2 584 230	307,67
Fe <sub>2</sub> SiO <sub>4(s)</sub>	-34 330	145,25
FeCr <sub>2</sub> O <sub>4(s)</sub>	-52 120	146,93
Ga <sub>(s)</sub>	0	41,02
Ga <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	-1 083 340	84,68
GaN <sub>(s)</sub>	-109 670	29,72
GaP <sub>(s)</sub>	-122 230	52,33
GaAs <sub>(s)</sub>	-81 630	64,26
GaSb <sub>(s)</sub>	-41 860	77,36
Ge <sub>(s)</sub>	0	31,10
GeO <sub>2(s)</sub>	-580 180	39,77
GeF <sub>4(g)</sub>	-1 192 470	302,86
H <sub>2(g)</sub>	0	130,65
H <sub>2</sub> O <sub>(l)</sub>	-286 030	69,98
H <sub>2</sub> S <sub>(g)</sub>	-20 510	205,74
HCl <sub>(g)</sub>	-92 360	186,88

## 4. pokračovanie prílohy 4

Látka	$\Delta H_{298}^0$ (J mol <sup>-1</sup> )	$S_{298}^0$ (J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> )
Hf(g)	-272 680	173,76
Hf(s)	0	43,58
HfO <sub>2</sub> (s)	-1 113 480	59,44
HfCl <sub>4</sub> (s)	-990 830	190,88
HfC(s)	-218 930	39,56
Hg(l)	0	75,93
HgO(s)	-90 840	70,32
HgS(s)	-53 370	82,46
HgCl(s)	-131 860	96,28
HgCl <sub>2</sub> (s)	-228 350	140,11
I <sub>2</sub> (s)	0	116,20
In(s)	0	57,85
In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-926 360	108,00
Ir(s)	0	35,54
IrO <sub>2</sub> (s)	-241 530	56,51
Ir <sub>2</sub> S <sub>3</sub> (s)	-244 460	97,12
IrCl <sub>3</sub> (s)	-254 510	114,91
K(s)	0	64,72
KCl(s)	- 436 890	82,59
K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)	-1 150 730	155,59
Li(s)	0	29,09
Li <sub>2</sub> O(s)	-596 920	37,93
LiCl(s)	- 405 620	59,32
LiF(s)	-617 230	35,58
Li <sub>3</sub> N(s)	-196 740	—
Li <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)	-1 217 290	90,21
LiOH(s)	- 488 090	42,70
Mg(g)	0	32,69
MgO(s)	-601 530	29,96
MgS(s)	-351 620	50,36
MgCl <sub>2</sub> (s)	-641 710	89,66
MgF <sub>2</sub> (s)	-1 123 940	58,26
Mg <sub>3</sub> N <sub>2</sub> (s)	- 461 720	93,77
MgCO <sub>3</sub> (s)	-1 112 220	65,89
MgSO <sub>4</sub> (s)	-1 285 520	91,67

## 5. pokračovanie prílohy 4

Látka	$\Delta H_{298}^0$ (J mol <sup>-1</sup> )	$S_{298}^0$ (J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> )
MgSiO <sub>3</sub> (s)	-36 420	67,81
Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub> (s)	-62 790	95,23
MgAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (s)	-35 580	80,58
MgCr <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (s)	-41 860	105,91
Mn(s)	0	32,02
MnO(s)	-385 110	59,86
MnO <sub>2</sub> (s)	-520 320	53,16
Mn <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-957 340	110,51
Mn <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (s)	-1 387 240	154,04
MnS(s)	-213 490	80,37
Mn <sub>4</sub> N(s)	-127 670	—
Mn <sub>5</sub> N <sub>2</sub> (s)	-100 880	—
Mn <sub>7</sub> C <sub>3</sub>	-110 930	239,02
MnCO <sub>3</sub> (s)	-894 550	85,81
MnSO <sub>4</sub> (s)	-1 065 760	112,18
MnSiO <sub>3</sub>	-24 700	102,56
Mn <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub> (s)	- 49 390	100,46
Mo(s)	0	28,67
MoO <sub>3</sub> (s)	-745 530	77,82
Mo <sub>2</sub> N(s)	-69 490	87,91
Mo <sub>2</sub> C(s)	- 46 050	65,72
N <sub>2</sub> (g)	0	191,59
NH <sub>3</sub> (g)	- 45 960	192,77
N <sub>2</sub> O(g)	-82 090	219,97
NO(g)	-90 330	210,77
Na(s)	0	51,28
Na <sub>2</sub> O(s)	- 415 250	75,10
Na <sub>2</sub> S(s)	-374 650	79,53
NaCl(s)	- 412 820	72,17
NaF(s)	-575 660	51,24
Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)	-1 131 480	138,85
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (s)	-1 396 030	149,57
Na <sub>4</sub> SiO <sub>4</sub> (s)	-360 000	195,90
Na <sub>2</sub> SiO <sub>3</sub> (s)	-232 320	113,86
Na <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>5</sub> (s)	-230 650	164,93
Na <sub>3</sub> AlF <sub>6</sub> (s)	-82 880	238,60
Ni(s)	0	29,89
NiO(s)	-240 700	38,09

## 6. pokračovanie prílohy 4

Látka	$\Delta H_{298}^0$ (J mol <sup>-1</sup> )	$S_{298}^0$ (J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> )
NiS <sub>(s)</sub>	-94 190	52,95
NiCl <sub>2(s)</sub>	-305 580	97,74
NiF <sub>2(s)</sub>	-657 200	73,67
NiSO <sub>4(s)</sub>	-873 620	103,90
NiAl <sub>2</sub> O <sub>4(s)</sub>	-6 070	98,37
O <sub>2(g)</sub>	0	205,20
Os <sub>(s)</sub>	0	32,65
OsO <sub>2(s)</sub>	-294 690	51,91
OsO <sub>4(s)</sub>	-393 900	136,88
P <sub>biely (s)</sub>	0	41,11
P <sub>2</sub> O <sub>5(s)</sub>	-1 492 730	114,49
PS <sub>(g)</sub>	221 860	235,50
PCl <sub>3(l)</sub>	-321 070	218,59
PCl <sub>5(s)</sub>	-367 110	364,60
PF <sub>3(g)</sub>	-920 920	272,93
Pb <sub>(s)</sub>	0	64,93
PbO <sub>(s)</sub>	-219 800	69,50
PbO <sub>2(s)</sub>	-274 600	71,83
Pb <sub>3</sub> O <sub>4(s)</sub>	-719 030	212,06
PbS <sub>(s)</sub>	-98 370	91,38
PbCl <sub>2(s)</sub>	-359 580	136,05
PbF <sub>2(s)</sub>	-667 290	113,02
PbCO <sub>3(s)</sub>	-699 900	131,02
PbSO <sub>4(s)</sub>	-920 500	148,60
Pt <sub>(s)</sub>	0	41,65
Rb <sub>(s)</sub>	0	76,81
RbCl <sub>(s)</sub>	- 430 740	91,67
RbF <sub>(s)</sub>	-553 390	73,67
Re <sub>(s)</sub>	0	36,54
Re <sub>2</sub> O <sub>7(s)</sub>	-1 249 100	207,42
ReCl <sub>3(s)</sub>	-263 720	123,91
ReF <sub>6(l)</sub>	-1 163 710	—
Rh <sub>(s)</sub>	0	31,52
Rh <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	-383 020	92,09

## 7. pokračovanie prílohy 4

Látka	$\Delta H_{298}^0$ (J mol <sup>-1</sup> )	$S_{298}^0$ (J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> )
S <sub>(s)</sub>	0	31,90
SO <sub>(g)</sub>	5 020	221,94
SO <sub>2(g)</sub>	-296 950	248,23
SO <sub>3(g)</sub>	-395 910	256,81
Sb <sub>(s)</sub>	0	45,54
Sb <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	-708 900	141,07
SbO <sub>2(s)</sub>	-453 970	63,63
Sb <sub>2</sub> O <sub>5(s)</sub>	-1 007 990	125,16
Sb <sub>2</sub> S <sub>3(s)</sub>	-205 110	182,09
SbCl <sub>3(s)</sub>	-382 390	182,51
Se <sub>(s)</sub>	0	42,28
SeO <sub>(g)</sub>	62 370	234,00
SeO <sub>2(s)</sub>	-225 210	66,72
SeF <sub>6(g)</sub>	-1 117 450	313,62
Si <sub>(s)</sub>	0	18,84
SiO <sub>2(s)</sub>	-910 870	41,48
SiCl <sub>2(g)</sub>	-167 440	281,97
SiCl <sub>4(g)</sub>	-663 060	330,99
Si <sub>3</sub> N <sub>4(s)</sub>	-745 110	113,02
SiC <sub>(s)</sub>	-66 980	16,53
Sn <sub>(s)</sub>	0	51,24
SnO <sub>(s)</sub>	-286 320	56,51
SnO <sub>2(s)</sub>	-581 020	52,33
SnS <sub>(s)</sub>	-108 420	77,02
SnS <sub>2(s)</sub>	-153 630	87,49
SnCl <sub>2(s)</sub>	-331 110	131,86
SnCl <sub>4(l)</sub>	-529 110	259,11
Sr <sub>(s)</sub>	0	52,33
SrO <sub>(s)</sub>	-592 320	55,55
SrCl <sub>2(s)</sub>	-829 250	114,91
SrF <sub>2(s)</sub>	-1 217 710	82,17
SrCO <sub>3(s)</sub>	-1 220 430	97,12
Ta <sub>(s)</sub>	0	41,53
Ta <sub>2</sub> O <sub>5(s)</sub>	-2 046 950	143,16
TaCl <sub>3(s)</sub>	-553 390	154,88
Ta <sub>2</sub> N <sub>(s)</sub>	-272 930	74,51
Ta <sub>2</sub> C <sub>(s)</sub>	-203 020	83,72

## 8. pokračovanie prílohy 4

Látka	$\Delta H_{298}^0$ (J mol <sup>-1</sup> )	$S_{298}^0$ (J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> )
TaC <sub>(s)</sub>	-143 160	42,40
Te <sub>(s)</sub>	0	49,52
TeO <sub>2(s)</sub>	-323 580	74,09
TeCl <sub>4(s)</sub>	-324 000	200,93
Th <sub>(s)</sub>	0	53,41
ThO <sub>2(s)</sub>	-1 227 340	65,30
ThCl <sub>4(s)</sub>	-1 187 150	190,46
ThF <sub>4(g)</sub>	-2 112 260	142,11
ThN <sub>(s)</sub>	-378 830	57,35
Th <sub>3</sub> N <sub>4(s)</sub>	-1 306 030	182,93
ThC <sub>1,94(s)</sub>	-117 210	70,32
Ti <sub>(s)</sub>	0	30,64
TiO <sub>(s)</sub>	-542 920	34,74
Ti <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	-1 521 610	77,27
Ti <sub>3</sub> O <sub>5(s)</sub>	-2 460 530	129,47
TiO <sub>2(s)</sub>	-945 200	50,36
TiS <sub>(s)</sub>	-272 090	56,51
TiCl <sub>4(l)</sub>	-804 550	252,54
TiN <sub>(s)</sub>	-336 550	30,31
TiC <sub>(s)</sub>	-183 770	24,28
Tl <sub>(s)</sub>	0	64,21
Tl <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	-390 550	137,30
TlCl <sub>(s)</sub>	-204 280	111,35
TlF <sub>(s)</sub>	-325 670	95,73
U <sub>(s)</sub>	0	50,32
UO <sub>2(s)</sub>	-1 084 170	77,86
U <sub>3</sub> O <sub>8(s)</sub>	-3 575 260	282,56
UO <sub>3(s)</sub>	-1 230 680	98,79
US <sub>(s)</sub>	-320 230	78,03
U <sub>2</sub> S <sub>3(s)</sub>	-820 460	188,37
US <sub>2(s)</sub>	-460 460	110,51
UCl <sub>3(s)</sub>	-893 710	159,07
UCl <sub>4(s)</sub>	-1 051 940	198,42
UF <sub>4(s)</sub>	-1 899 190	151,95
UF <sub>6(s)</sub>	-2 186 770	227,72
UC <sub>(s)</sub>	-90 840	58,94
U <sub>2</sub> C <sub>3(s)</sub>	-205 110	138,43
UC <sub>2(s)</sub>	-96 280	68,23

## 9. pokračovanie prílohy 4

Látka	$\Delta H_{298}^0$ (J mol <sup>-1</sup> )	$S_{298}^0$ (J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> )
V <sub>(s)</sub>	0	28,97
VO <sub>(s)</sub>	-432 000	39,01
VO <sub>2(s)</sub>	-713 710	51,78
V <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	-1 219 380	98,12
V <sub>2</sub> O <sub>5(s)</sub>	-1 551 330	130,60
VCl <sub>3(s)</sub>	-560 920	131,02
VN <sub>(s)</sub>	-217 250	37,30
VC <sub>0,88(s)</sub>	-101 930	27,67
W <sub>(s)</sub>	0	32,65
WO <sub>3(s)</sub>	-843 270	75,93
WS <sub>2(s)</sub>	-202 770	83,72
WC <sub>(s)</sub>	-38 090	41,86
Y <sub>(s)</sub>	0	44,50
Zn	0	41,65
ZnO <sub>(s)</sub>	-350 790	43,66
ZnS <sub>(s)</sub>	-205 320	57,68
ZnCl <sub>2(s)</sub>	-415 250	111,52
Zn <sub>3</sub> N <sub>2(s)</sub>	-22 190	140,23
ZnCO <sub>3(s)</sub>	-818 360	82,46
ZnSO <sub>4(s)</sub>	-981 830	110,59
Zn <sub>2</sub> SiO <sub>4(s)</sub>	-32 650	131,44
ZnFe <sub>2</sub> O <sub>4(s)</sub>	-5 020	153,38
Zr <sub>(s)</sub>	0	39,01
ZrO <sub>2(s)</sub>	-1 101 340	50,73
ZrCl <sub>4(s)</sub>	-981 200	182,09
ZrN <sub>(s)</sub>	-368 370	38,89
ZrSiO <sub>4(s)</sub>	-2 036 077	84,56

## Odporúčaná literatúra

1. Lisý J.M., Valko L. : PRÍKLADY A ÚLOHY Z FYZIKÁLNEJ CHÉMIE , ALFA, Bratislava , 1979
2. Kellö V., Tkáč A. : FYZIKÁLNA CHÉMIA, ALFA, Bratislava,1969
3. Moore W.J. : FYZIKÁLNÍ CHEMIE, SNTL, Praha, 1981
4. Rybárová Ž., Komorová Ľ. : FYZIKÁLNA CHÉMIA ( Chemická termodynamika a kinetika ) , ALFA, 1990
5. Sminčáková E., PRÍKLADY A ÚLOHY Z FYZIKÁLNEJ CHÉMIE PRE ŠTUDENTOV HF , ETC, Košice, 2001
6. Komorová Ľ., Imriš I. : TERMODYNAMIKA V HUTNÍCTVE , ALFA, 1990
7. Hála E., Reiser A. : FYZIKÁLNÍ CHEMIE 1, ACADEMIA , Praha, 1971
8. Fischer O. a kolektiv : FYZIKÁLNÍ CHEMIE , SPN, Praha, 1984

**OBSAH**

Predslov	3
OPAKOVANIE MATEMATICKÝCH VZORCOV	5
1. IDEÁLNE PLYNY	6
2. POUŽITIE PRVEJ VETY TERMODYNAMICKEJ NA JEDNODUCHÉ PROCESY	12
3. TERMOCHÉMIA	22
4. DRUHÁ VETA TERMODYNAMICKÁ - ROVNOVÁHY CHEMICKÝCH REAKCIÍ	32
4.1 Entropia	32
4.2 Gibbsova energia	41
4.3 Rovnovážna konštanta reakcií v plynnej fáze	48
4.4 Závislosť Gibbsovej energie od zloženia sústavy	54
4.5 Závislosť rovnovážnej konštanty od teploty	58
5. FÁZOVÉ ROVNOVÁHY V JEDNOZLOŽKOVÝCH SÚSTAVÁCH	64
6. TERMODYNAMIKA ROZTOKOV	72
VÝSLEDKY RIEŠENIA ÚLOH	76
Prílohy	81
Odporúčaná literatúra	110
OBSAH	111