ГОУ ВПО «Донбасская Национальная академия строительства и архитектуры»,
кафедра «Прикладная химия»
Курс лекций по дисциплине «Химия»
для студентов 1 курса
Направление подготовки – 08.03.01 Строительство

Лекция №2
«Химическая термодинамика. Термохимия»

Составил:
Ташкинов Ю.А.

Макеевка, 2021

Химическая Термодинамика

раздел химии, изучающий взаимные превращения энергии, теплоты и работы в термодинамических системах разных типов, переходы энергии из одной формы в другие и от одной совокупности тел к другим, а также возможность, направление и глубину осуществления химических и фазовых процессов в данных условиях.

Изучением тепловых эффектов реакций занимается ***термохимия***. В термохимии тепловой эффект реакции обозначается *Q* и выражается в кДж.

Состояние системы определяется ***термодинамическими параметрами состояния*** – температурой, давлением, концентрацией, объемом и т. д. Система характеризуется, кроме того, такими свойствами как внутренняя энергия *U*, энтальпия *H*, энтропия *S*, энергия Гиббса *G*.

В химии чаще всего рассматривают **изобарические процессы** (P = const), и тепловой эффект в этом случае называют изменением энтальпии системы или ***энтальпией процесса***:

$$Q_p = \Delta H$$

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

- ***Энтальпия*** имеет размерность энергии (кДж). Ее величина пропорциональна количеству вещества; энтальпия единицы количества вещества (моль) измеряется в кДж·моль–1.
- В термодинамической системе выделяющуюся теплоту химического процесса условились считать отрицательной (экзотермический процесс, $\Delta H < 0$), а поглощение системой теплоты соответствует эндотермическому процессу, $\Delta H > 0$.

Вещество	ΔH°_{298}, кДж/моль	S°_{298}, Дж/(моль·К)
$Al_{(к)}$	0	28,31
$Al_2O_{3(к)}$	-1676,0	50,9
$C_{(графит)}$	0	5,74
$CaO_{(к)}$	-635,1	39,7
$CaCO_{3\,(к)}$	-1207,0	88,7
$Ca_3(PO_4)_{2(к)}$	-4125,0	240,9
$CO_{2(г)}$	-393,5	213,6
$CO_{(г)}$	-110,5	197,5
$CH_{4(г)}$	-74,85	186,16
$C_2H_{2(г)}$	226,8	200,8
$C_2H_{4\,(г)}$	52,28	219,4
$Cl_{2(г)}$	0	222,9
$CuCl_{2(к)}$	-205,9	113,0
$CuO_{(к)}$	-162,0	42,6
$F_{2(г)}$	0	202,9
$Fe_{(к)}$	0	27,15
$FeO_{(к)}$	-264,8	60,8

Закон Гесса:

«Тепловой эффект (энтальпия) процесса зависит только от начального и конечного состояния и не зависит от пути перехода его из одного состояния в другое».

Тепловой эффект химической реакции равен сумме теплот образования всех продуктов реакции минус сумма теплот образования всех реагентов:

Qр= Q обр.(продуктов) - Q обр.(реагенты)

Следствия закона Гесса

1) Тепловой эффект реакции равняется разности сумм теплот образования конечных продуктов реакции и исходных веществ с учетом стехиометрических коэффициентов этих веществ в уравнении реакции:

$$\Delta H_{реакц} = \Sigma(n_i \Delta H)^{обр}_{продукт} - \Sigma(n_i \Delta H)^{обр}_{исх}$$

2) Тепловой эффект реакции сгорания равняется разности сумм теплот сгорания конечных продуктов реакции и исходных веществ с учетом стехиометрических коэффициентов этих веществ в уравнении реакции сгорания:

$$\Delta H_{реак} = \sum(n_i \Delta H)^{сгор}_{прод} - \sum(n_i \Delta H)^{сгор}_{исх}$$

$$\Delta G_{реакц} = \Sigma n_i \Delta G^{обр}_{298,прод} - \Sigma n_i \Delta G^{обр}_{298,исх}$$

- **<u>Энтропия (мольная) - S′</u>** - это количественная мера беспорядка (неупорядоченности) системы. Она измеряется в Дж/моль□К; чем это величина большее тем беспорядок в системе больше. Расчет изменения энтропии в системе производится по формуле (4.8):

$$\Delta S = \sum nS_{прод} - \sum nS_{исх}$$

- При T=const P = const эта энергия называется ***энергией Гиббса***, ***или изобарно-изотермическим потенциалом,*** который является функцией состояния

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

- В случаях, если V и T постоянные - эта энергия носит название ***энергии Гельмгольца***, ***или изохорно-изотермического потенциала,*** который тоже является функцией состояния при определенных условиях

$$\Delta F = \Delta U - T\Delta S$$

Не беспорядок, а **энтропия**

- Химические процессы самопроизвольно идут только в таких направлениях, где энергия Гиббса уменьшается ($\Delta G<0$)

$T \geq \Delta H/\Delta S$ Для любой из этих формул $\Delta H>0$		$T \leq \Delta H/\Delta S$ Имеем также два случая или $\Delta H<0$	
$\Delta H>0$	$\Delta H<0$	$\Delta H>0$	$\Delta H<0$
Видим, что если $\Delta H>0$ и $\Delta S>0$, то реакция протекает при больших температурах, при низких - нет, температура начала реакции равняется $T\geq\Delta H/\Delta S$	Если $\Delta S>0$ и $\Delta H<0$. Поскольку T не может быть отрицательной, то из (4.14.) вытекает, что в этом случае реакция может протекать при любой температуре	Если $\Delta S<0$ и $\Delta H>0$, а поскольку температура не может быть отрицательной, то в этом случае реакция не может протекать ни при каких условиях (при любых условиях) никогда.	Если $\Delta S<0$ и $\Delta H<0$. Из этого явствует, что реакция может протекать только при маленьких T, при больших – нет. Интервал T при которых идет реакция $0<T\geq\Delta H/\Delta S$

Пример

303. Не производя вычислений, установить знак ΔS° следующих процессов:

а) $2NH_3$ (г.) $= N_2$ (г.) $+ 3H_2$ (г.);
б) CO_2 (к.) $= CO_2$ (г.);
в) $2NO$ (г.) $+ O_2$ (г.) $= 2NO_2$ (г.);
г) $2H_2S$ (г.) $+ 3O_2$ (г.) $= 2H_2O$ (ж.) $+ 2SO_2$ (г.);
д) $2CH_3OH$ (г.) $+ 3O_2$ (г.) $= 4H_2O$ (г.) $+ 2CO_2$ (г.).

ВЫСОТА H ЭНТАЛЬПИЯ
ГРАВ.ПОСТОЯННАЯ G ЭНЕРГИЯ ГИББСА
ПЛОЩАДЬ S ЭНТРОПИЯ
КОЭФ.ЖЕСТКОСТИ K КОНСТАНТА РАВНОВЕСИЯ
МОДУЛЬ ЮНГА E ЭЛ. ПОТЕНЦИАЛ
ИНДУКЦИЯ B ОСНОВАНИЕ
УД.ТЕПЛОЕМКОСТЬ C МОЛ.ТЕПЛОЕМКОСТЬ
МОМЕНТ ИНЕРЦИИ I ЙОД
СИЛА!!! F ЭНЕРГИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА
СИЛА РЕАКЦИИ ОПОРЫ N АЗОТ!
МЕХ.РАБОТА W ТЕРМ.ВЕРОЯТНОСТЬ
КОЭФ.ТРЕНИЯ μ МОЛЯРНАЯ МАССА
K ЛЮБИМАЯ КОНСТАНТА R
Нормальный человек
Физхимик

5
Прикладная химия

Спасибо за внимание