

# Энергетика химических реакций

17.07.2021

- При химических реакциях происходит разрыв одних и образовании других связей. Поэтому химические реакции сопровождаются выделением или поглощением энергии в виде теплоты, света, совершением работы расширения газообразных продуктов

# Системы

- Системой называют тело или группу тел, отделенных от окружающей среды реальной или воображаемой поверхностью раздела.
- В зависимости от способности системы к обмену энергией и веществом с окружающей средой различают три типа систем.

Система	Обмен энергией	Обмен веществом
Изолированная	Нет	Нет
Закрытая	Есть	Нет
Открытая	Есть	Есть

# Внутренняя энергия

- Полная энергия системы равна сумме ее кинетической энергии как целого, энергии ее взаимодействия с внешними телами и внутренней энергии  $U$ .
- **Внутренняя энергия  $U$**  характеризует общий энергетический запас всех компонентов (частиц) системы и включает кинетическую энергию движения молекул, атомов, ионов, электронов и других частиц и потенциальную энергию их взаимодействия.
- *Изменение внутренней энергии ( $\Delta U$ )* системы при переходе системы из одного состояния в другое можно измерить с достаточной точностью как количество энергии, принимаемой системой из окружающей среды или отдаваемой ею.

# Процессы

- Переход системы из одного состояния в другое называют **процессом**. Процессы бывают:
- изотермические ( $T = \text{const}$ )
- изобарные ( $p = \text{const}$ )
- изохорные ( $V = \text{const}$ )

# 1й закон термодинамики

- Сумма изменения внутренней энергии системы и совершенной системой (или над нею) работы равна сообщенной (или выделенной) теплоте.

$$Q = \Delta U + W$$

# Энтальпия

- Для химических реакций под работой против внешних сил обычно подразумевают работу против внешнего давления. Для изобарных процессов она равна произведению давления  $p$  на изменение объема системы  $\Delta V$  при переходе из состояния 1 в 2 ( $W = p(V_2 - V_1) = p\Delta V$ )

- $H$  – энтальпия

$$Q_p = \Delta U + p\Delta V = (U_2 - U_1) + p(V_2 - V_1)$$

$$H = U + pV$$

$$Q_p = (U_2 + pV_2) - (U_1 + pV_1)$$

$$Q_p = H_2 - H_1 = \Delta H$$

- А в изохорном процессе?  $Q_v = dU$

# Вывод

- Тепловой эффект химической реакции возникает в результате изменения внутренней энергии  $U$  системы или энтальпии  $H$

$$Q_p = H_2 - H_1 = \Delta H$$

$$Q_V = U_2 - U_1 = \Delta U$$



# Термохимические расчеты

- Большинство химических реакций происходит при постоянном давлении, поэтому энергетический (тепловой) эффект реакции оценивают изменением энтальпии
- Химические реакции, при протекании которых происходит уменьшение энтальпии системы ( $\Delta H < 0$ ) и во внешнюю среду выделяется теплота ( $Q_p > 0$ ), называют экзотермическими. Реакции, в результате которых энтальпия увеличивается ( $\Delta H > 0$ ) и система поглощает теплоту извне ( $Q_p < 0$ ), называют эндотермическими

# Стандартные условия

- Давление 1 бар и произвольная температура

Стандартные энтальпии образования  $\Delta_f H^{\circ}_{298}$ , свободные энергии  $\Delta_f G^{\circ}_{298}$  образования и энтропии  $S^{\circ}_{298}$  веществ

Вещество	$\Delta_f H^{\circ}_{298}$ , кДж/моль	$\Delta_f G^{\circ}_{298}$ , кДж/моль	$S^{\circ}_{298}$ , Дж/моль К
Ag(к.)	0	0	42,6
Ag <sup>+</sup> (р.)	105,5	77,1	72,6
AgBr(к.)	-100,7	-97,2	107,1
AgCl(к.)	-127,1	-109,8	96,1
AgI(к.)	-61,9	-66,4	115,4
AgNO <sub>3</sub> (к.)	-124,5	-33,6	140,9
Ag <sub>2</sub> O(к.)	-31,13	-11,25	120,96
Ag <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (к.)	-987,8	-895,4	258,2
Ag <sub>2</sub> S(к.)	-32,79	-40,84	144,01
AgSCN(к.)	85,8	98,6	133,1
Ag <sub>2</sub> (SO <sub>4</sub> )(к.)	-717,2	-619,6	200,0
[Ag(CN) <sub>2</sub> ] <sup>-</sup> (р.)	269,03	301,7	201,3

# Термохимические уравнения

- Указывают агрегатное состояние и аллотропную модификацию реагентов и продуктов



# Стандартное состояние вещества

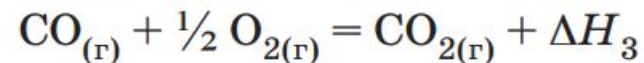
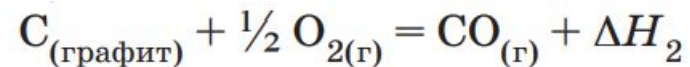
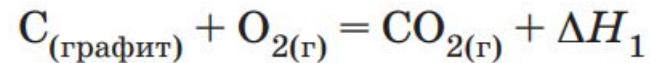
- Стандартное состояние вещества — наиболее устойчивое состояние при стандартных условиях.
- графит, ромбическая сера, белый фосфор, кислород  $O_2$ , газообразный хлор, жидкий бром
- Стандартное состояние может быть отнесено к любой температуре.

# Стандартная энтальпия образования

- Стандартной энтальпией (теплотой) образования ( $\Delta H^\circ_{\text{обр}} = -Q$ ) вещества называют энтальпию (теплоту) образования *1 моль этого вещества из простых веществ при стандартных условиях.*
- Согласно этому определению, **энтальпия (теплота) образования простого вещества при стандартных условиях равна нулю.**

# Закон Гесса

Тепловой эффект реакции при постоянном давлении (объеме) зависит только от природы и состояния исходных веществ и продуктов, но не зависит от пути процесса, т. е. от числа и характера промежуточных стадий.



$$\Delta H_1 = \Delta H_2 + \Delta H_3$$

$$\Delta H_1 = \Delta H_2 + \Delta H_3 \quad (\Delta H_2 = x)$$

$$x = \Delta H_1 - \Delta H_3.$$

# Следствие из закона Гесса

Тепловой эффект химической реакции равен разности суммы теплот образования продуктов реакции и суммы теплот образования исходных веществ (при суммировании теплот образования учитывают молярные количества (число молей) веществ, участвующих в реакции):

$$Q = \sum_i n_i Q_i - \sum_j n_j Q_j$$

$$\Delta H = \sum_i n_i \Delta H_i - \sum_j n_j \Delta H_j$$