Почему протекают химические реакции

Начала термодинамики

Автор: Фельдман Людмила Валентиновна, учитель химии МБОУ СОШ им. А.М.Горького г.Карачева Брянской обл.

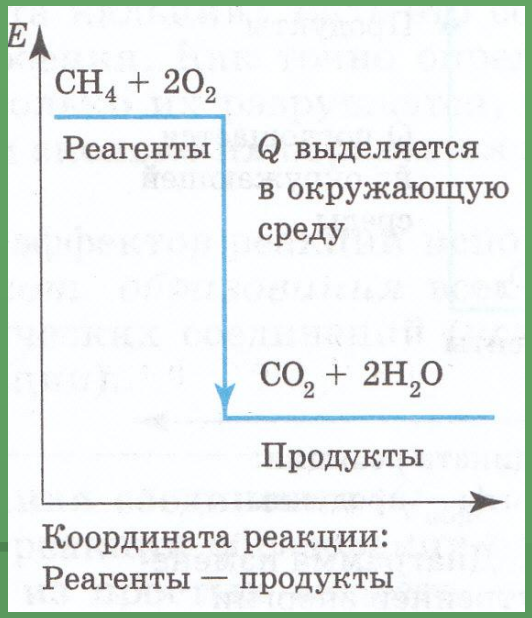
Первый закон термодинамики – закон сохранения энергии

Энергия не возникает из ничего и не исчезает бесследно, а только переходит из одной формы в другую

Энергия объекта
Кинетическая
Потенциальная
Внутренняя
Кинетическая энергия движения атомов, молекул, ионов
Энергия их взаимного притяжения и отталкивания
Энергия, связанная с движением ē, их притяжением к ядру
Взаимное отталкивание ē и ядер
Внутриядерная энергия

E реагентов > E продуктов

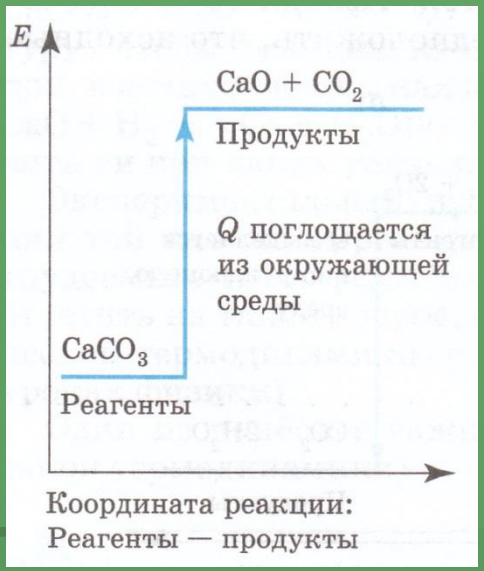
Энергия выделяется в окружающую среду



Реакции, при которых выделяется энергия и нагревается окружающая среда, называются экзотермическими.

E реагентов < E продуктов

Энергия поглощается из окружающей среды, температура системы понижается



Реакции, при протекании которых энергия поглощается из окружающей среды, называется эндотермической.

Энергия, которая выделяется или поглощается в химической реакции, называется *тепловым эффектом реакции*.

Тепловой эффект реакции выражается в кДж и его относят к тем количествам веществ, которые определены уравнением.

Уравнение, в котором указан тепловой эффект реакции, называется *термохимическим*.

$2H_2 + O_2 = 2H_2O + 484$ кДж

Для расчета тепловых эффектов реакций используют значения величин теплот образования исходных веществ и продуктов реакции

Теплота образования соединения ($Q_{обр}$) – это тепловой эффект реакции образования одного моля соединения из простых веществ, устойчивых в стандартных условиях (25°С, 1 атм)

При таких условиях теплота образования простых веществ равна 0.

$C + O_2 = CO_2 + 394$ кДж

теплоты образования

$0{,}5N_2 + 0{,}5O_2 = NO - 90$ кДж

Закон Гесса (1840)

Тепловой эффект химической реакции не зависит от промежуточных стадий (при условии, что исходные вещества и продукты реакции одинаковы).

$$C + O_2 \rightarrow CO_2 + 394 \text{ кДж/моль } (Q_1)$$

а) $C + 0{,}5O_2 \rightarrow CO + ?(Q_2)$

б) $CO + 0{,}5O_2 \rightarrow CO_2 + 284 \text{ кДж/моль}(Q_3)$

$$Q_1 = Q_2 + Q_3$$

$$Q_2 = Q_1 - Q_3 = 394 - 284 = 110 \text{ кДж}$$

Следствие из закона Гесса

Тепловой эффект химической реакции равен сумме теплот образования всех продуктов реакции минус сумма теплот образования всех реагентов (с учетом коэффициентов в уравнении реакции):

$$Qp = \Sigma Q_{обр(продукты)} - \Sigma Q_{обр(реагенты)}$$

$$Fe_2O_3 + 2Al = 2Fe + Al_2O_3 + Q_p$$

По справочнику:

$Q_{обр}(Al_2O_3) = 1670$ кДж/моль

$Q_{обр}(Fe_2O_3) = 820$ кДж/моль

$Q_р = Q_{обр}(Al_2O_3) – Q_{обр}(Fe_2O_3) = 1670 – 820 = 850$ кДж

$$Fe_2O_3 + 3CO = 2Fe + 3CO_2 + Q_p$$

$Qp = 3Q_{обр}(CO_2) – [3Q_{обр}(CO) + Q_{обр}(Fe_2O_3)] = 3 \cdot 394 – [3 \cdot 110 + 820] = 32$ кДж

Энтальпия (теплосодержание) – это величина, которая характеризует запас энергии в веществе.

$$\Delta H = \Sigma H_{\text{продукты}} - \Sigma H_{\text{реагенты}}$$

$$\Delta H = -Q_{\text{реакции}}$$

Для экзотермической реакции:

$Q > 0, \quad \Delta H < 0$

Для эндотермической реакции

$Q < 0, \quad \Delta H > 0$

($\Delta H_{\text{обр}}$ – справочное значение)

Движущая сила реакций

Для экзотермических реакций – стремление системы к состоянию с наименьшей внутренней энергией.

Для эндотермических реакций – стремление любой системы в наиболее вероятному состоянию, которое характеризуется максимальным беспорядком, более высокой энтропией.

Энтропия – мера хаоса.

Вещество	Формула	Энтропия (S), Дж/моль·К
Алмаз (т)	C	2,4
Водород (г)	H_2	130,6
Железо (т)	Fe	27,2
Хлорид натрия (т)	NaCl	72,4
Вода (т)	H_2O	48,0
Вода (ж)	H_2O	70,0
Вода (пар)	H_2O	188,7
Метан (г)	CH_4	186,2
Этан (г)	C_2H_6	229,5
Пропан (г)	C_3H_8	269,9

Выводы

1. Направление химической реакции определяется двумя факторами: стремлением к уменьшению внутренней энергии и стремлением к увеличению энтропии.
2. Эндотермическую реакцию можно активировать, если она сопровождается увеличением энтропии.
3. Энтропия увеличивается при повышении температуры и особенно при фазовых переходах.
4. Чем выше температура, при которой проводят реакцию, тем большее значение будет иметь энтропийный фактор по сравнению по сравнению с энергетическим.

Возможность протекания реакций в зависимости от ΔH и ΔS

№	*Изменение*		*Возможность протекания реакции*
	энергии	*энтропии*	
1	Уменьшение	Увеличение	Идет
2	Увеличение	Уменьшение	Не должна идти
3	Увеличение	Увеличение	Зависит от абсолютных значений и температуры реакции («кто перетянет»)
4	Уменьшение	Уменьшение	

Энергия Гиббса (G)

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

T – абсолютная температура

ΔH – изменение энтальпии системы

ΔS – изменение энтропии системы

Самопроизвольно протекают лишь те процессы, в которых энергия Гиббса уменьшается

$\Delta G < 0$

Процессы, при которых $\Delta G > 0$ – невозможны.

Если $\Delta G = 0$, то есть $\Delta H = T\Delta S$, значит в системе установилось равновесие.