

ЭНЕРГЕТИКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Лекция 8,9

Князева Е.М.

Основные понятия и определения

- Хим. термодинамика –
- Термодинамическая система (ТДС) –
 - Открытая ТДС –*
 - Закрытая ТДС –*
 - Изолированная ТДС –*

Основные понятия и определения

- **Химический компонент** –
- *Различают: одно-, двух-, многокомпонентные системы.*
- **Фаза** –
- **Гомогенная система** – система, состоящая из одной фазы.
- **Гетерогенная система** – система, состоящая из нескольких фаз.

Основные понятия и определения

Параметры состояния –

Изотермические процессы: $T = \text{const}$

■ *Изобарные:* $P = \text{const}$

■ *Изохорные:* $V = \text{const}$

ТД функции – это характеристики состояния ТДС, которые зависят от простых параметров:

■ U – внутренняя энергия

■ H – энтальпия

■ S – энтропия

■ G – энергия Гиббса

Внутренняя энергия

Внутренняя E - это

Абсолютное значение внутренней E измерить невозможно.

ΔU – изменение внутренней E

Первый закон термодинамики

Теплота (Q), полученная ТДС, расходуется на изменение её внутренней E (ΔU) и совершение работы (A).

$$Q = \Delta U + A$$

A – суммарная работа, совершаемая системой.

Энтальпия

$$\Delta H = \Delta U + p \cdot \Delta V$$

Изменение энтальпии равно изменению внутренней энергии ТДС и совершению работы расширения.

$$Q_p = |\Delta H|$$

Тепловой эффект при постоянном давлении равен изменению энтальпии.

Стандартная энтальпия

Стандартная энтальпия (ΔH°) – изменение энтальпии реакции в стандартных условиях.

Стандартные условия

- Давление $1,013 \cdot 10^5$ Па
- Температура 298 К (как правило)

Стандартная энтальпия образования вещества

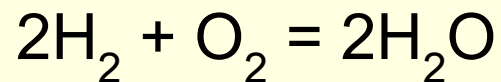
$\Delta_f H^\circ$ –

$$[\Delta_f H^\circ] = \text{кДж/моль}$$

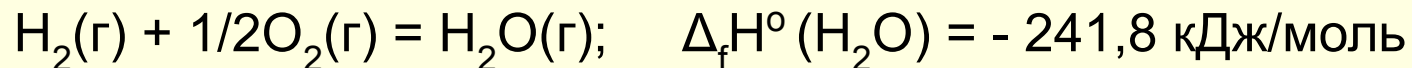
$\Delta_f H^\circ$ простых в-в в термодинамически устойчивом состоянии равны 0.

Термохимические уравнения

Хим. уравнение реакции:



Термохимическое урав-ие р-ции:



Закон Гесса

Энтальпия химической реакции

1840 г. Г.И. Гесс

Тепловой эффект хим. р-ции (энтальпия р-ции) не зависит от пути её протекания, а определяется только начальным и конечным состоянием исходных в-в и продуктов р-ции.

Второй закон термодинамики

В изолированной системе любой самопроизвольный процесс протекает в направлении, при котором система переходит из менее вероятного состояния в более вероятное.

Третий закон термодинамики

Энтропия правильного кристалла стремится к 0 по мере приближения температуры к абсолютному 0.

$$S_{T \rightarrow 0}^o \rightarrow 0$$

Энтропия

В **изолированной** системе S является критерием самопроизвольности протекания процесса.

Процессы протекают самопр-но в направлении ув-ия энтропии.

$\Delta S > 0$ процесс протекает самопр-но

$\Delta S < 0$ процесс не протекает самопр-но

$\Delta S = 0$ система находится в состоянии равновесия

Энтропия явл-ся функцией состояния.

Изменение S при протекании хим. р-ции рассчит-ся также как $\Delta_r H^\circ$, по закону Гесса:

$$\Delta_r S^\circ = \sum S^\circ_{\text{продуктов}} - \sum S^\circ_{\text{исх. в-в}}$$

Направление протекания химических процессов.

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

ΔG – энергия Гиббса - функция состояния ТДС, характеризующая возможность самопротекания хим. проц.

Энергия Гиббса

$\Delta G < 0$ - самопроизвольный процесс
возможен

$\Delta G > 0$ реакция не протекает в прямом
направлении.

$\Delta G = 0$ система находится в состоянии
равновесия.