Закономерности протекания химических реакций
Основы химической термодинамики

Одним из признаков химической реакции является выделение (экзотермический процесс) или поглощение (эндотермический процесс) теплоты (Q).

$$\mathbf{CH_{4(г)} + 2O_{2\,(г)} \rightarrow CO_{2(г)} + 2H_2O_{(ж)} + 891\ кДж}$$

Изучает тепловые эффекты термохимия (раздел термодинамики)

Система – совокупность объектов, взаимосвязь между которыми выше, чем с объектами внешней среды.

Типы систем:

1. Открытые – способны обмениваться с окружающими телами веществом и энергией
2. Закрытые – обмениваются с внешней средой только энергией (движение вещества невозможно)
3. Изолированные – не обмениваются с внешней средой ни веществом, ни энергией

Состояние системы характеризуется рядом т/д параметров – **T, P, C, V** и т.д.

V = const : изохорический процесс

P = const : изобарический процесс

T = const : изотермический процесс

Q = o : адиабатный

U - внутренняя энергия, H – энтальпия, S – энтропия, G – энергия Гиббса

Внутренняя энергия системы – общий запас, обусловленный всеми видами движений и взаимодействий составляющих ее молекул, атомов, ионов, элементарных частиц.

Кинетическая энергия – это энергия колебательного, вращательного, поступательного движения частиц.

Потенциальная энергия – обусловлена силами притяжения и отталкивания.

Абсолютная величина энергии не может быть определена. Поэтому вычисляют разность между U в начальном и конечном состояниях.

$\mathbf{U_{реаг.} > U_{прод.}}$ **(экзо)** $\mathbf{U_{реаг.} < U_{прод.}}$ **(эндо)**

Закон сохранения энергии
(Первое начало т/д)

$$Q = \Delta U + A$$

Энергия в изолированной системе не возникает и не исчезает, а лишь переходит из одной формы в другую.

Следствие:

Тепловой эффект прямой реакции равен по абсолютному значению и противоположен по знаку тепловому эффекту обратной реакции.

$$H = U + PV$$

Энтальпия образования – это тепловой эффект реакции образования 1 моля вещества из простых веществ (абсолютное значение определить невозможно)

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

При постоянном давлении и при условии, что в ходе процесса совершается только работа расширения ($A = P\Delta V$)

$$\Delta H = Q$$

Закон Гесса (1840):

Тепловой эффект химической реакции не зависит от пути ее протекания и определяется только начальным и конечным состоянием системы.

Следствие:

Тепловой эффект реакции

$$\mathbf{Q_р = Q_{пр} - Q_{реаг.}}$$

ЭНТРОПИЯ. НАПРАВЛЕНИЕ РЕАКЦИЙ

Энтропия (S) – т/д функция состояния, которая служит мерой неупорядоченности системы.

В изолированных системах энтропия самопроизвольно протекающего процесса увеличивается ($\Delta S>0$)

$$\Delta S = \Delta Q / T$$

Энтропия возрастает и остается неизменной в обратимых т/д процессах.

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

$\Delta G < 0$ реакция т/д разрешена

$\Delta G > 0$ процесс т/д запрещен