

Семинар № 2.

Основы химической термодинамики

Элементы химической термодинамики.

Термохимические уравнения. Закон Гесса.

Энергия (E) - способность системы производить работу (Дж, кДж)

Виды энергии: теплота, свет, химическая, и др.

Типы энергии: кинетическая и потенциальная

Кинетическая энергия – энергия движущегося тела до достижения им покоя.

Потенциальная энергия – энергия, которая определяется взаимным расположением взаимодействующих тел или частей тела одного и того же тела.

Теплота (Q) - вид кинетической энергии - связана с движением атомов и молекул, (Дж, кДж)

Энергия химических связей - вид потенциальной энергии, возникающей из-за расположения атомов или молекул относительно друг друга

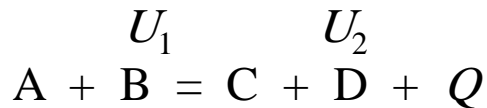
Первый закон термодинамики

Энергия может переходить из одного вида в другой, но не может исчезать или возникать

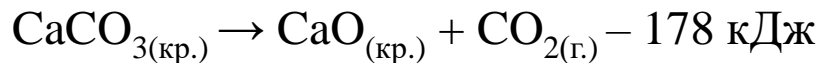
Внутренняя энергия (U) - сумма кинетической и потенциальной энергий частиц, составляющих тело (Дж, кДж)

Поглощаемая в реакции теплота равна разности внутренней энергии продуктов реакции и реагентов

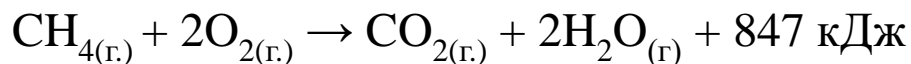
($Q = U_1 - U_2$) при условии, что система не совершила работы над окружающей средой



$\Delta U > 0$, то $Q < 0$ – эндотермический процесс (реакции разложения)



$\Delta U < 0$, то $Q > 0$ - экзотермический процесс (реакции соединения, горения)



Энтальпия

Энтальпия - H – мера теплосодержания системы, кДж

$$\Delta H = -Q$$

Если $\Delta H = H_2 - H_1 < 0$, то реакция экзотермическая.

Если $\Delta H = H_2 - H_1 > 0$, то реакция эндотермическая.

Стандартная энтальпия образования $\Delta H^\circ_{\text{обр}}$ – теплота, выделяемая или поглощаемая при образовании 1 моля вещества из простых веществ, его составляющих, при стандартных условиях, кДж/моль

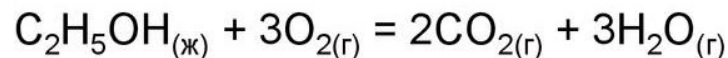
$$p = 1 \text{ атм} = 101325 \text{ Па}, T = 298 \text{ К}, c = 1 \text{ моль/л}$$

$$\Delta H^\circ_{\text{простого вещества}} = 0 \text{ кДж/моль}$$

Закон Гесса: Стандартная энтальпия реакции зависит от стандартных энтальпий реагентов и продуктов и не зависит от пути протекания реакции

Стандартная энтальпия реакции ΔH° - изменение энтальпии в ходе химической реакции :

$$\Delta H^\circ = \sum n_{\text{прод.}} \Delta H^\circ_{\text{прод.}} - \sum n_{\text{исх.}} \Delta H^\circ_{\text{исх.}}$$



$$\begin{aligned} \Delta H^\circ &= 2\Delta H^\circ_{\text{CO}_2} + 3\Delta H^\circ_{\text{H}_2\text{O}} - \Delta H^\circ_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}} = \\ &= 2(-393,8) + 3(-241,8) - (-277,7) = -1235,2 \text{ кДж.} \end{aligned}$$

Энтропия

Энтропия - S - физическая величина, характеризующая степень беспорядка системы, Дж/К

ΔS° - стандартная энтропия образования 1 моля вещества, Дж/моль К

ΔS° - изменение стандартной энтропии

в ходе реакции:

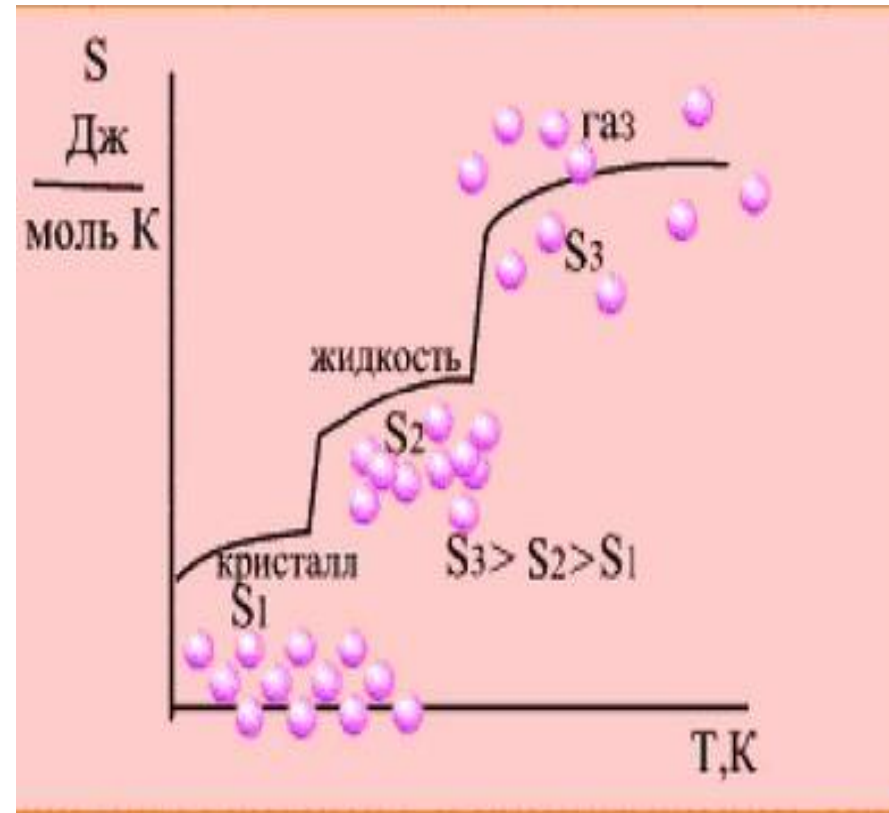
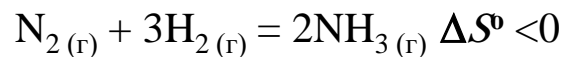
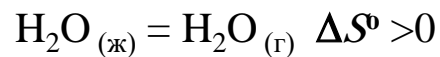
если $\Delta S^\circ > 0$, беспорядок системы растет,

если $\Delta S^\circ < 0$, то беспорядок системы уменьшается.

- для процессов, в которых число частиц растет, мы имеем $\Delta S^\circ > 0$.
- для процессов, в которых число частиц уменьшается, мы имеем $\Delta S^\circ < 0$.



S° (Дж/моль·К)	39	69	189
-----------------------	----	----	-----



$$\Delta S^\circ = \sum n_{\text{прод}} S^\circ_{\text{прод}} - \sum n_{\text{исх.вещ.}} S^\circ_{\text{исх.вещ.}}$$

Энергия Гиббса

Энергия Гиббса - G – это свободная энергия системы, кДж.

Стандартная энергия Гиббса $\Delta G^{\circ}_{\text{обр}}$ – изменение энергии Гиббса при образовании 1 моля вещества из простых веществ, его составляющих, при стандартных условиях, кДж/моль

$\Delta G^{\circ}_{\text{простого вещества}} = 0$ кДж/моль

$$\Delta G^{\circ} = \sum (n_{\text{прод.}} \Delta G^{\circ}_{\text{прод.}}) - \sum (n_{\text{исх.}} \Delta G^{\circ}_{\text{исх.}})$$

Самопроизвольно идут процессы:

с выделением энергии $\Delta H < 0$, и с увеличением энтропии $\Delta S > 0$

Энергия Гиббса:

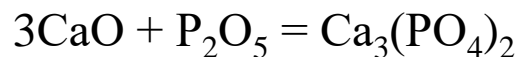
$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

$\Delta G < 0$ - реакции идут самопроизвольно

$\Delta G > 0$ - реакции самопроизвольно не идут

Вещество	ΔH^0 , кДж/моль	$S^0 \cdot 10^3$, ж/моль·К	ΔG^0 , кДж/моль
Fe _(xp)	0	27,15	0
FeO _(xp)	-264,85	60,75	-244,30
Fe ₂ O _{3(xp)}	-822,16	87,45	-740,34
Fe ₃ O _{4(xp)}	-1117,13	146,19	-1014,17
H _{2(r)}	0	130,52	0
HCl _(r)	-92,31	186,79	-95,30
H ₂ O _(r)	-241,81	188,72	-228,61
H ₂ O _(ж)	-285,83	69,95	-237,23
H ₂ S _(r)	-20,60	205,70	-33,50
MgCO _{3(xp)}	-1095,85	65,10	-1012,15
MgO _(xp)	-601,49	27,07	-569,27
NH _{3(r)}	-45,94	192,66	-16,48
NH ₄ Cl _(xp)	-314,22	95,81	-203,22
NO _(r)	91,26	210,64	87,58
O _{2(r)}	0	205,04	0
PbO _(xp)	-217,61	68,70	-188,20
PbS _(xp)	-100,42	91,21	-98,77
PCl _{3(r)}	-287,02	311,71	-267,98
PCl _{5(r)}	-374,89	364,47	-305,10
SO _{2(r)}	-296,90	248,07	-300,21
TiO _{2(xp)}	-944,8	50,33	-889,49

1. При растворении 7,02 г алюминия в соляной кислоте выделилось 21,1 кДж теплоты. Определить энтальпию реакции (кДж).
2. При соединении 2,1 г железа с серой выделилось 3,77 кДж теплоты. Рассчитать теплоту образования сульфида железа.
3. Вычислите тепловой эффект реакции $\text{PCl}_3 + \text{Cl}_2 = \text{PCl}_5$, если известны теплоты образования PCl_3 и PCl_5 , которые равны -317,6 и -454,8 кДж/моль соответственно.
4. Исходя из теплот образования оксидов кальция и фосфора, равных $\Delta H^\circ(\text{CaO}) = -635,5$ кДж/моль и $\Delta H^\circ(\text{P}_2\text{O}_5) = -1492$ кДж/моль, а также теплового эффекта реакции $\Delta H^\circ = -739$ кДж, определить теплоту образования ортофосфата кальция.



5. Вычислите ΔG^0 для реакции $\text{CaCO}_3(\text{к.}) = \text{CaO}(\text{к.}) + \text{CO}_2(\text{г.})$ и определите возможность самопроизвольного протекания процесса при 25, 500 и 1500°C. Зависимостью ΔH^0 и ΔS^0 от температуры пренебречь.

6. Не производя вычислений, установите знак ΔS^0 для следующих процессов:

