**Закономірності перебігу хімічних процесів**

**1 Основні поняття**

**Термодинаміка** – це наука, яка встановлює закони взаємних перетворень різних видів енергії, обміну енергією між системою, що вивчається, і зовнішнім середовищем, а також визначає можливість та напрям самовільного перебігу хімічних і фізико-хімічних процесів за певних умов.

Величини, які характеризують енергетичний стан системи і зміни, що відбуваються в ній, називають **функціями стану**: внутрішня енергія (U), ентальпія (H), ентропія (S), енергія Гіббса (G).

**Хімічна термодинаміка** - наука, яка вивчає перетворення енергії під час протікання хімічних реакцій, базується на основних законах термодинаміки.

***І* *закон термодинаміки:***енергія не зникає і не створюється знову, а тільки перетворюється з одного виду на інший. Закон дозволяє оцінити зміну енергії реакцій за допомогою термодинамічних функцій U и H.

|  |  |
| --- | --- |
| **Термодинамічні функції стану, одиниці вимірювання** | **Фізична суть** |
| **U**- **внутрішня енергія**, кДж | **загальна енергія системи**, яка складається з кінетичної енергії (енергії поступального, коливального та оберталь-ного рухів) і потенційної енергії ( енергії притягання та відштовхування) всіх частинок системи, за винятком потенціальної і кінетичної енергій системи як цілого.Розраховують: **ΔU= U2 - U1**за умови **V = const**$; Δ U=Q v при V= const $ |
| **H**- **ентальпія утворення**, кДж | **повний тепловміст системи** (речовини), міра впорядко-ваності системи, або міра енергії, яка накопичується речовиною при її утворенні (енергія хімічних зв’язків у речовині).Розраховують: **ΔН= Н2 - Н1**за умови **р**$ = const$ **= const** |
| $ ∆Н\_{298}^{0}$**Для сполук:** $ ∆Н\_{298}^{0}$-стандартна ентальпія утворення, кДж/моль | **ентальпія утворення 1 моль** складної речовини з простих речовин (її стійкість) в стандартних умовах р0 =101325 Па, Т0 = 298 К (значення$ ∆Н\_{298}^{0}$ приведені в довідковій літера-турі)Хімічна стійкість сполуки зростає із збільшенням $ ∆Н\_{298}^{0}$ |
| **Для процесів**:$∆Нхр,$ - ентальпія хімічної реакції, $∆Нхр,$кДж  | **тепловий ефект хімічної реакції** за умови р,Т = const **:**- якщо ΔНх.р. < $если ∆Нхр ˂ $0, реакція **екзотермічна** (+Q - теплота виділяється системою в середовище);- якщо ΔНх.р > $если ∆Нхр ˂ $0, реакція **ендотермічна** (–Q - теплота поглинається системою з середовища). Q – **кількість теплоти** як еквівалент обміну енергією між системою та зовнішнім середовищем. |

**Термохімія** - вчення про теплові ефекти хімічних реакцій (ТЕР). Рівняння хімічних реакцій, в яких вказано теплові ефекти, називають **термохімічними рівняннями**.

Теплові ефекти розраховують за **законом Гесса: *тепловий ефект реакції ΔН не залежить від шляху проведення процесу, а залежить від початкового і кінцевого стану системи.*** Із закону Гесса випливає:

$∆Нхр=$ Σν$∆Н\_{298}^{0}$(продуктів реакції) - Σν$∆Н\_{298}^{0}$ (вихідних речовин),

де ν – кількість речовини, що дорівнює стехіометричним коефіцієнтам реак-ції.

**Приклад 1.** Розрахувати стандартну ентальпію нейтралізації хлоридної кислоти гідроксидом натрію.

**Розв’язок**

Рівняння нейтралізації розчину НСl розчином NaOH:

$H^{+}Cl^{-}+ Na^{+}OH^{-}= Na^{+}Cl^{-}+ H\_{2}O^{0}$

Термодинамічне рівняння нейтралізації ( скорочене)

$$Н\_{(р)}^{+}+ ОН\_{(р)}^{-}= Н\_{2}О\_{(ж)}^{0} ∆Н\_{х.р. }- ?$$

Розрахунок **теоретичного значення** $∆Н\_{х.р.}$ по довідковим даним **за законом Гесса**:

$$∆Н\_{х.р.}^{теор.}= ∆Н\_{298}^{0}\left(Н\_{2}О\_{ж}\right)-[∆H\_{298}^{0}\left(Н\_{(р)}^{+}\right)+∆H\_{298}^{0}(ОНр¯)]$$

$$∆H\_{х.р.}^{теор.}= -285,84-\left(0-228,62\right)=-57,22 кДж/моль$$

$$∆Н\_{х.р.}^{теор.} =-57,22\frac{кДж}{моль}<0$$

-$ ∆Н\_{х.р.}^{теор.} $= + Q -$ реакція нейтралізації- экзотермічний процес.$

***ІІ закон* *термодинаміки* –** в ізольованій системі самовільно протіка-ють тільки ті процеси, які супроводжуються збільшенням ентропії.

Закон дозволяє оцінити напрямок реакцій за допомогою термодинамічних функцій S і G. $ $

|  |  |
| --- | --- |
| **S** - **ентропія**, Дж/моль∙К | **міра хаотичності**, **невпорядкованості системи**: нагрівання, плавлення, випаровування, утворення розчинів збільшують невпорядкованість систем (ентропія зростає). |
| **Для сполук:**$S\_{298}^{0}$ - стандартна ентропія утворення,$S\_{298}^{0}$ Дж/моль∙К | **ентропія утворення одного моль** речовини(міра невпорядкованості у речовині в кількості 1моль) за стандартних умов. Ентропія ідеального кристалу при Т = 0 К дорівнює 0.(значення $S\_{298}^{0}$ приведені в довідковій літературі) |
| **Для процесів**:ΔSх.р. – зміна ентропії в хімічній реакції, Дж/К.  | розрахунок ΔSхр за законом Гесса: $∆Sхр=$ ΔSх.р. = Σν$S\_{298}^{0}$(прод. реакції) - Σν$S\_{298}^{0}$ (вих. речовин) |
| **G - енергія Гіббса,** кДж  | **критерій напрямленості процесів,**рушійна сила хімічної реакції, яка враховує ентальпійний та ентропійний фактори.Розраховують: **ΔG = G2 - G1** за умови **р**$ = const$ **= const** |
| **Для сполук:**Δ$ G\_{298}^{0}$- стандартна вільна енергія Гіббса$ G\_{298}^{0}$, кДж/моль | **зміна енергії Гіббса при утворенні** **1 моль** складної речовини з простих речовин в стандартних умовах(значення Δ$ G\_{298}^{0}$приведені в довідковій літературі) |
| **Для процесів**:$∆Gхр,$ ΔGх.р -вільна енергія Гіббса хімічної реакції, $∆Gхр,$ кДж  | розрахунок ΔGх.р за законом Гесса:ΔGх.р = Σν$∆G\_{298}^{0}$(прод.реакції)-Σν$∆G\_{298}^{0}$ вих. речовин)якщо $∆Gхр ˂ $ ΔGх.р < 0, реакція відбувається самовільно в прямому напрямку;якщо$ ∆Gхр ˃0,$ ΔGх.р > 0 реакція не відбувається самовільно, а протікає в зворотному напрямку;якщо ΔGх.р. = 0, система знаходиться в стані хімічної рівноваги.Основне рівняння термодинаміки враховує **ентальпійний** **ΔНх.р та ентропійний ТΔSхр фактори**: Якщо ΔG = 0, то температура рівноваги дорівнюєТравн = $∆Нхр$/$∆Sхр$ |

**2 Контрольні питання і завдання**

1. Термохімія. Тепловий ефект реакції (ТЕР). Екзо- і ендотермічні реакції. Закон Г.І.Гесса , висновки з нього.

2. Перший закон термодинаміки. Енергетика хімічних процесів. Термодинамічні функції: внутрішня енергія - *U* і ентальпія - *Н*, їх фізична суть.

3. Другий закон термодинаміки. Напрямок хімічних процесів. Термодинамічні функції: енергія Гіббса - *G* і ентропія - *S*, їх фізична суть.

4. Стандартні значення величин утворення $ΔН\_{298}^{0}$, $ΔG\_{298}^{0}$ і $S\_{298}^{0}$ , розмірність. Визначення *ΔНхр, ΔGхр* і *ΔSхр* хімічних реакцій за допомогою закону Гесса.

5. Умови проведення експеримента по визначенню ентальпії нейтралізації: устрій калориметра, розрахунок ТЕР за графіком та експериментальними даними.

6. Для реакцій (1-3) скласти термохімічні рівняння, визначити *ΔНх.р*., *ΔGх.р*.і *ΔSх.р*. процесів та зробити висновки щодо зміни енергії, напрямку процесу і температури рівноваги:

1. Са(ОН)2 + 2СО2 → Са(НСО3)2

2. Са(ОН)2 + СО2 → СаСО3 + Н2О

3. Fe2O3 + 3CО → 2Fe + 3CO2