**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** |
| **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** |
| **Для сполук:** -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 приведені в довідковій літера-турі)  Хімічна стійкість сполуки зростає із збільшенням |
| **Для процесів**:  - ентальпія хімічної реакції,  кДж | **тепловий ефект хімічної реакції** за умови р,Т = const **:**  - якщо ΔНх.р. < 0, реакція **екзотермічна** (+Q - теплота виділяється системою в середовище);  - якщо ΔНх.р > 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:

Σν(продуктів реакції) - Σν (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:

Термодинамічне рівняння нейтралізації ( скорочене)

Розрахунок **теоретичного значення** по довідковим даним **за законом Гесса**:

-= + Q -

***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:**  - стандартна ентропія утворення,  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 приведені в довідковій літературі) |
| **Для процесів**:  ΔSх.р. – зміна ентропії в хімічній реакції, Дж/К. | розрахунок ΔSхр за законом Гесса: ΔSх.р. = Σν(прод. реакції) - Σν (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** |
| **Для сполук:**  Δ- стандартна вільна енергія Гіббса, кДж/моль | **зміна енергії Гіббса при утворенні** **1 моль** складної речовини з простих речовин в стандартних умовах  (значення Δприведені в довідковій літературі) |
| **Для процесів**:  ΔGх.р -вільна енергія Гіббса хімічної реакції, кДж | розрахунок ΔGх.р за законом Гесса:  ΔGх.р = Σν(прод.реакції)-Σν вих. речовин)  якщо ΔGх.р < 0, реакція відбувається самовільно в прямому напрямку;  якщо 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 дорівнює  Травн = / |

**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 , і , 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