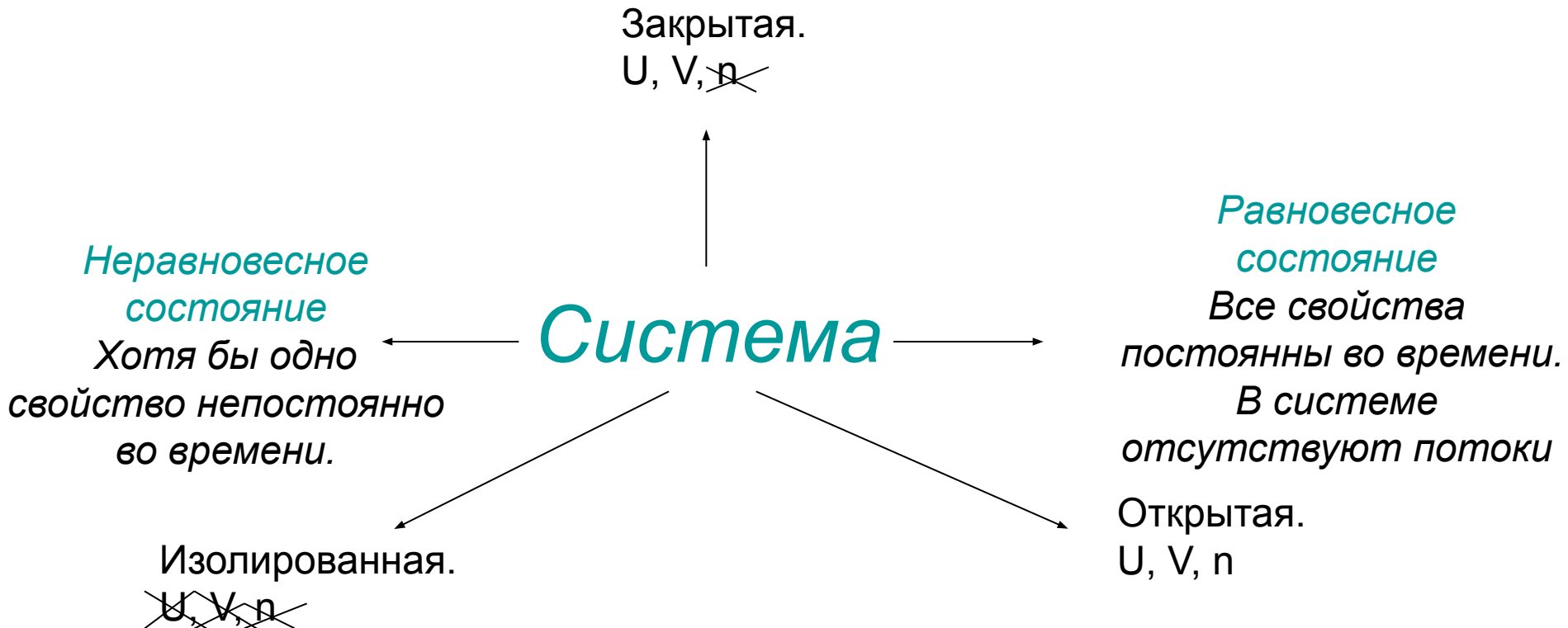


Физическая химия.
Занятие 1.

*Введение в химическую
термодинамику.*

Термодинамическая Система – любой объект, выделенный из окружающей среды реальной или воображаемой поверхностью раздела.

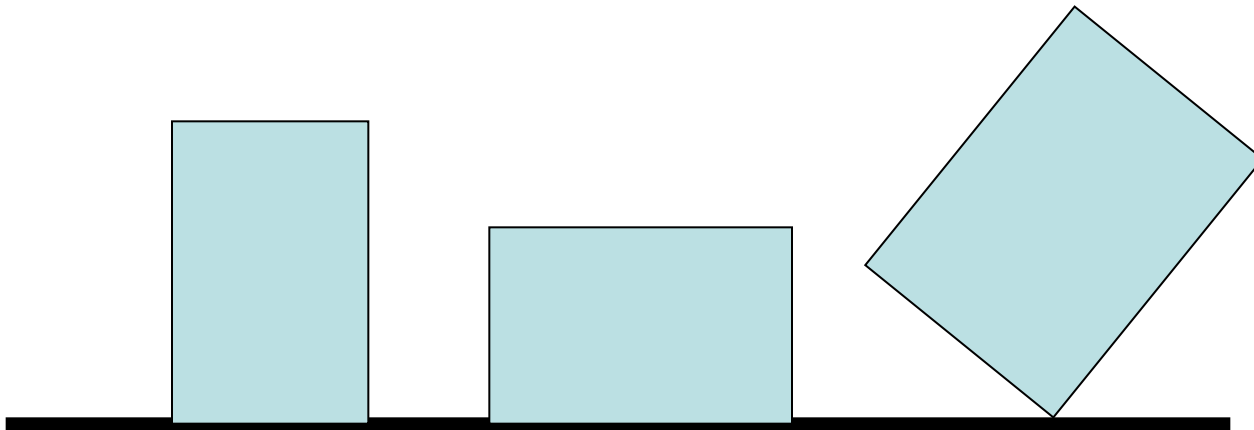


Термодинамические свойства – любые свойства системы, имеющие меру.

Равновесие.

Метастабильное

Стабильное



Неравновесное состояние. Изменение свойств. *Процесс.*

Процессы

```
graph TD; A[Процессы] --> B[Обратимый]; A --> C[Необратимый];
```

Обратимый

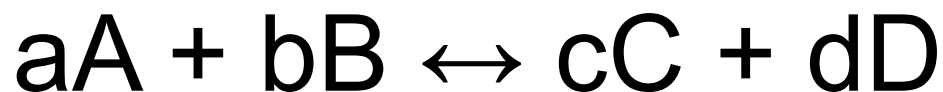
Если в прямом и обратном направлении он проходит через одни и те же состояния, и в результате ни в системе, ни в окружении нет изменений.

Необратимый

Возврат в обратное состояние невозможен.

Равновесие. Константа равновесия.

Химическое равновесие – состояние химической системы, в котором обратимо протекает одна или несколько химических реакций, причем скорости в каждой паре прямая-обратная реакция равны между собой.

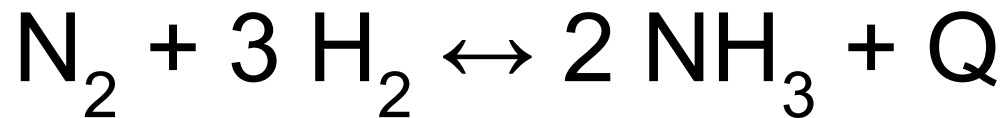


Константа равновесия – величина, определяющая сравнительную глубину протекания прямой и обратной реакций.

$$K_p = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Принцип Ле Шателье.

Если на систему, находящуюся в равновесии, воздействовать извне, изменяя какое-либо условие (температура, давление, концентрация), то равновесие смещается таким образом, чтобы компенсировать это изменение.

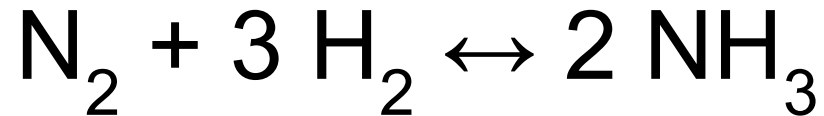


Температура.

При повышении температуры химическое равновесие смещается в направлении эндотермической реакции, при понижении – в направлении экзотермической.

Пример: если надо сместить равновесие **ВЛЕВО**, температуру надо повысить, если **ВПРАВО** – понизить.

Принцип Ле Шателье.

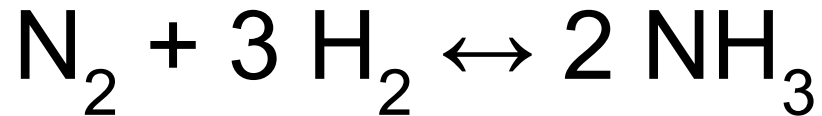


Давление.

При повышении давления химическое равновесие смещается в направлении образования веществ (или исходных продуктов) с меньшим объемом; при понижении сдвигается в сторону с большим объемом.

Пример: если надо сместить равновесие **ВЛЕВО**, давление надо понизить, если **ВПРАВО** – повысить.

Принцип Ле Шателье.



Концентрации.

При повышении концентрации одного из исходных веществ равновесие сдвигается в направлении образования продуктов реакции, одного из продуктов реакции – в направлении образования исходных веществ.

Пример: если надо сместить равновесие **ВЛЕВО**, надо повысить концентрацию NH_3 , если **ВПРАВО** – повысить концентрацию N_2 или H_2 .

1-ый и 2-ой

Постулаты термодинамики

1. О равновесии.

Любая термодинамическая система, будучи изолирована от внешнего воздействия, приходит в состояние равновесие, из которого она не может быть выведена без оказания внешнего воздействия.

2. О транзитивности.

Если система А находится в равновесии с системой В, а система В находится в равновесии с системой С, то системы А и С также находятся в равновесии.

Первый Закон Термодинамики

$$\Delta U = A + Q$$

!!! Знаки !!!

1. **A** Система совершает работу – берем A со знаком «-»

Над системой совершают работу – берем A со знаком «+»

2. **Q** Система передает тепло вовне – Q со знаком «-»

Система получает тепло извне – Q со знаком «+»

U - внутр.
энергия
системы

A -
работа

Q -
количество
теплоты

Энтальпия

- $\Delta H = \Delta U + P \Delta V$
- Стандартная энтальпия
- *...образования вещества X* – это взятый со знаком «минус» тепловой эффект реакции образования 1 моль вещества X из простых веществ в стандартном состоянии
- *...реакции* – это энтальпия реакции между веществами в стандартном состоянии.
Она равна сумме стандартных энтальпий образования продуктов за вычетом суммы стандартных энтальпий образования реагентов.
Также она равна взятому со знаком «минус» тепловому эффекту этой реакции:
 $\Delta H = - Q$

H -энтальпия

U - внутр.
энергия
системы

P - давление

V - объём

Q -
количество
теплоты

Закон Гесса

Тепловой эффект реакции не зависит от способа осуществления процесса и определяется только начальным и конечным состоянием участников реакции при условии при условии, что:

1) Температура реагентов и продуктов одинакова.

2) Единственный вид работы в системе — работа расширения.

U - внутр.
энергия
системы

A - работа

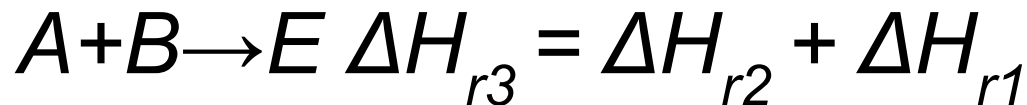
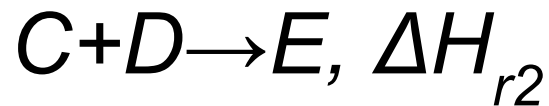
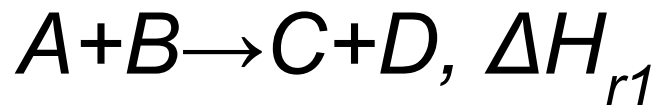
Q -
количество
теплоты

H -
энтальпия

P - давление

Следствие из закона Гесса

Энтальпии можно складывать как угодно.
Например, так:



U - внутр.
энергия
системы

A - работа

Q -
количество
теплоты

H -
энтальпия

P - давление

Второй Закон Термодинамики

- Существует S (энтропия) - функция, описывающая состояние термодинамической системы.
- При протекании в изолированной системе самопроизвольного процесса эта функция возрастает, если процесс необратим, остается неизменной, если процесс обратим.
- «Мера беспорядка» в системе.
- Энтропия идеального кристалла при $T = 0 \text{ K}$ равна нулю => энтропию можно посчитать точно
- $\Delta S = (1/T) \cdot \Delta U + (P/T) \Delta V$

Энтропия изолированной системы не может уменьшаться

U - внутр. энергия системы

A - работа

Q - количество теплоты

H - энтальпия

P - давление

S - энтропия

Энергия Гиббса

- $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$
- При протекании самопроизвольного процесса $\Delta G \leq 0$
- Соотношение $\Delta G = 0$ отвечает положению равновесия.
- **!!! $p, T, n = \text{const}$!!!**
- $\Delta G(\text{процесса}) = G(\text{продуктов}) - G(\text{реагентов})$

U - внутр.
энергия
системы

A - работа

Q -
количество
теплоты

H -
энтальпия

P - давление

S -энтропия

G - энергия
Гиббса