



2. 化学反应的热效应、方向及限度

天津大学

曲建强



2.2.3 热化学方程式(Thermochemical Equation)

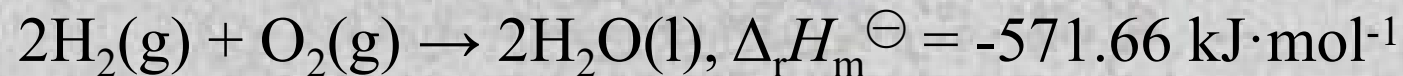
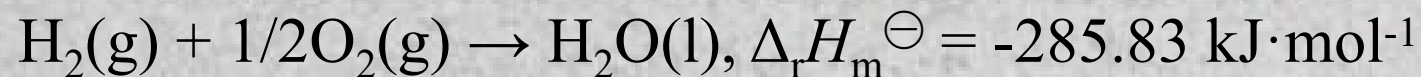
天津大学

曲建强



热化学方程式(Thermochemical Equation)

热化学方程式：表示化学反应与反应热之间关系的方程式。





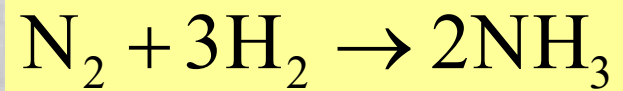
热化学方程式(Thermochemical Equation)

写热化学方程式时应注意：

- ◆ 注明反应条件(p 、 T)；若为100 kPa, 298.15 K可不写出。
- ◆ 注明物质的聚集状态(g、l、s)。
- ◆ 注意有关物质分子式前系数 (计量系数)。
- ◆ 对于可逆反应, $\Delta H_{\text{正}} = -\Delta H_{\text{逆}}$ 。



反应进度(Extent of Reaction)



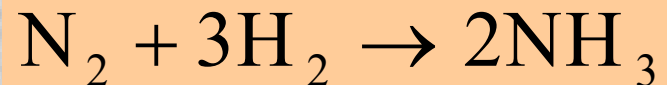
起始 (mol)	2.0	3.0	0
----------	-----	-----	---

2s末 (mol)	1.8	2.4	0.4
-----------	-----	-----	-----

如果总体积为1L。



反应进度(Extent of Reaction)



起始浓度($\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$) 2.0 3.0 0

2s末浓度($\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$) 1.8 2.4 0.4

反应速率:
$$\nu(\text{N}_2) = -\frac{\Delta c(\text{N}_2)}{\Delta t} = -\frac{(1.8-2.0)\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}}{(2-0)\text{s}} = 0.1\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$$

$$\nu(\text{H}_2) = -\frac{\Delta c(\text{H}_2)}{\Delta t} = -\frac{(2.4-3.0)\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}}{(2-0)\text{s}} = 0.3\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$$

$$\nu(\text{NH}_3) = \frac{\Delta c(\text{NH}_3)}{\Delta t} = \frac{(0.4-0)\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}}{(2-0)\text{s}} = 0.2\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$$



反应进度(Extent of Reaction)

此时以不同物质表示反应速度数值不同，所以引入反应进度这一表示反应进行程度的物理量。



反应进度(Extent of Reaction)

反应进度：反应系统中任何一种物质 (反应物或产物)在反应过程中物质的量的变化 dn_B 与该物质的化学计量数 ν_B 的商。单位：mol。

$$d\xi = \frac{dn_B}{\nu_B}$$

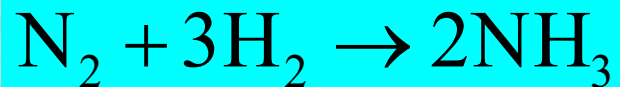
若反应未发生时的 $\xi = 0$ ，则

$$\xi = \frac{\Delta n_B}{\nu_B}$$



反应进度(Extent of Reaction)

ν_B : 化学计量数, 规定反应物的化学计量数为负值, 产物的为正值。



起始 (mol)	2.0	3.0	0
----------	-----	-----	---

2s末 (mol)	1.8	2.4	0.4
-----------	-----	-----	-----

反应进度:

$$\xi = \frac{\Delta n(\text{N}_2)}{\nu(\text{N}_2)} = \frac{-0.2\text{mol}}{-1} = 0.2\text{mol}$$

$$\xi = \frac{\Delta n(\text{H}_2)}{\nu(\text{H}_2)} = \frac{-0.6\text{mol}}{-3} = 0.2\text{mol}$$

$$\xi = \frac{\Delta n(\text{NH}_3)}{\nu(\text{NH}_3)} = \frac{0.4\text{mol}}{2} = 0.2\text{mol}$$



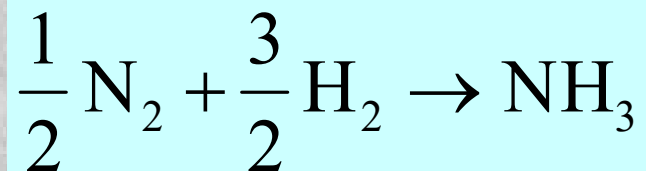
反应进度(Extent of Reaction)

对于同一化学反应，反应进度的数值与选用何种物质的量的变化进行计算无关。



反应进度(Extent of Reaction)

ξ 的数值与化学反应式的写法有关。



起始 (mol)	2.0	3.0	0
----------	-----	-----	---

2s末 (mol)	1.8	2.4	0.4
-----------	-----	-----	-----

反应进度:

$$\xi = \frac{\Delta n(\text{N}_2)}{\nu(\text{N}_2)} = \frac{-0.2\text{mol}}{-\frac{1}{2}} = 0.4\text{mol}$$



反应进度(Extent of Reaction)

思考题

1. 热化学方程式与一般方程式有何异同？书写热化学方程式要注意些什么？
2. 如何理解1 mol反应？