

NHIỆT HOÁ HỌC

Nội năng:

$$\Delta U = (U_2 - U_1) = Q + A$$

nhận (Hấp) $\rightarrow +Q; +A$
sinh $\rightarrow -Q; -A$

lượng nhiệt trao đổi (tho)
lượng công trao đổi (tho)

HUYN P/Ư: $\Delta H > 0 \rightarrow$ Thu nhiệt
 $\Delta H < 0 \rightarrow$ tỏa nhiệt

NHIỆT

ở 25°C, 1atm (kcal/mol)

- Nhiệt sinh** (ΔH_s°): tạo 1mol chất từ các đơn chất bền
- Nhiệt cháy** (ΔH_c°): đốt 1mol chất để tạo oxide cao nhất
- Nhiệt nguyên tử hoá** (ΔH_A°): phân huỷ 1mol chất (x) $\rightarrow$ nguyên tử (x)
= $\sum E$ của all liên kết trong phân tử
- Năng lượng liên kết (E)**: phá vỡ 1mol liên kết $\rightarrow$ nguyên tử (x).

HESS

hiệu ứng nhiệt của phản ứng

$$\begin{aligned}\Delta H_{plu} &= \Delta H_{s,sp} - \Delta H_{s,ta} \\ &= \Delta H_{c,ta} - \Delta H_{c,sp} \\ &= \sum E_{tg} - \sum E_{sp}\end{aligned}$$

QUÁ TRÌNH TỰ DIỄN BIẾN

Tự xảy ra
Bất thuận nghịch

NHÓM 1: N.Lg cao $\rightarrow$ N.Lg thấp ($\Delta H < 0$)
NHÓM 2: TRẬT TỰ $\rightarrow$ HỖN LOẠN

(Entropy) $\Delta S_{plu} > 0$

ENTROPY: S
(mức độ loạn)

$$\Delta S_{plu} = \sum S_{sp} - \sum S_{ta}$$

đơn vị: cal/mol.K
J/mol.K

$$1J = 0,24 cal$$

Năng lượng tự do

QUÁ TRÌNH TỰ DIỄN BIẾN

$$\begin{cases} \Delta H < 0 \\ \Delta S > 0 \\ \Delta G < 0 \end{cases} \quad (\Delta G = 0 \rightarrow \text{hệ cân bằng})$$

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ = \sum \Delta S_{s,sp}^\circ - \sum \Delta S_{s,ta}^\circ$$

ở 25°C
 $T = 298^\circ K$
 $p = 1atm$

$$\Delta G^\circ = -n \cdot F \cdot E^\circ = -R \cdot T \cdot \ln K = -\frac{2,303 \cdot R \cdot T \cdot \lg K}{2,303 \lg e = \lg e}$$

R: 1,987 cal/mol.K = 8,314 J/mol.K (hằng số khí lý tưởng)

K: hằng số cân bằng
n: số e trao đổi trên điện cực
 E° : suất điện động tiêu chuẩn

F: hằng số Faraday: 23,601 cal / dly