

СПРАВОЧНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ РАСЧЁТА ТЕПЛОВЫХ ЭФФЕКТОВ РЕАКЦИЙ

Fomina L.V.

**REFERENCE SOFTWARE FOR THE CALCULATION
OF HEAT EFFECTS OF REACTIONS**

Аннотация. Расчётным путём при стандартных условиях уточнён знак энтальпии образования иона диметиламмония в водном растворе при бесконечном разведении, вычислены теплоты образования нитрата метиламмония в воде, теплоты растворения алкилзамещённых нитратов аммония с образованием предельно-разбавленного водного раствора.

Ключевые слова: энтальпия образования, энтальпия растворения, термодинамический расчёт, водные растворы, амины, соли аммония.

Abstract. By calculation under standard conditions, the sign of the enthalpy of formation of a dimethylammonium ion in an aqueous solution at infinite dilution was specified, the heats of formation of methylammonium nitrate in water, the heats of dissolution of alkyl-substituted ammonium nitrates with the formation of an extremely dilute aqueous solution were calculated.

Keywords: enthalpy of formation, enthalpy of dissolution, thermodynamic calculation, aqueous solutions, amines, ammonium salts.

При организации химического производства обязательным является выполнение термодинамических расчётов изобарно-изотермического потенциала и тепловых эффектов основных и побочных реакций химико-технологического процесса. Расчёт тепловых эффектов химических реакций не составит труда при наличии справочных данных по термическим свойствам веществ [1]. Если химический синтез протекает в растворах, то дополнительно необходимо знать тепловые эффекты растворения реагентов в растворителе, компонентную концентрацию в растворе. Ограниченность доступной справочной литературы по термодинамическим свойствам химических веществ затрудняет выполнение расчётов тепловых эффектов некоторых реакций. Цель данного этапа – оценить возможность расчёта для водного раствора при бесконечном разведении тепловых эффектов химических реакций на примере алкилзамещённых аммониевых солей по теплотам образования и растворения сильных электролитов.

Справочные данные стандартных энтальпий образования в разных источниках для одних и тех же веществ порой отличаются знаком величины или в ряду гомологов органических соединений значения для одного представителя выбиваются из общей закономерности изменения термодинамического потенциала. Такие противоречия, очевидно, связаны с опечатками. Например, энтальпии образования по справочнику химика [2] и данные Карапетьянца М.Х. [3] для пяти из шести алкилзамещённых нитратов аммония близки по абсолютному значению, но противоположны по знаку. Поиск в интернете позволил выйти на электронные базы термодинамических свойств веществ [4-6]. Удобную в работе базу предлагает сервер МГУ им. М.В. Ломоносова [4]. Сотрудниками университета разработан электронный вариант таблиц термодинамических данных ве-

ществ на основе справочника из 10 томов «Термические константы веществ» под ред. В.П. Глушко. Однако в электронной версии справочника есть ограничения для органических веществ по количеству атомов углерода в молекуле, не более трёх. Например, нет данных для пропана, но есть для триметиламина. Информация о свойствах сейчас известных миллионов химических веществ порой недоступна широкому кругу исследователей, поэтому приходится прибегать к приближениям при вычислении энтальпии химических реакций с участием реагентов, для которых нет полной информации о термодинамических свойствах.

Теплота образования иона в водном растворе определяется теплотой его образования из простых веществ, устойчивых в данных условиях, и теплотой его растворения до состояния заданной концентрации в растворе. Теплота образования сильного 1-1-валентного электролита в водном растворе есть сумма теплот образования в водном растворе катиона и аниона данного соединения, иначе – это теплота образования молекулы потенциального электролита в газовой фазе или истинного электролита в кристаллическом состоянии плюс теплота растворения в растворителе до заданной концентрации раствора.

При 298 К и 1 атм в соответствии с законом Гесса выполнена проверка величины энтальпии образования иона диметиламмония в водном растворе при бесконечном разведении, которая, в отличие от справочной величины [4], оказалась отрицательной; рассчитана отсутствующая в справочной литературе [3-6] энтальпия образования в водном растворе при бесконечном разведении нитрата метиламмония; проведены расчёты тепловых эффектов растворения кристаллических алкилзамещённых нитратов аммония в воде с образованием предельно-разбавленного раствора, изменений энтальпий реакций между алкиламинами и хлороводородом в предельно-разбавленных растворах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Стромберг А.Г. Физическая химия. – М.: Высш. шк., 2009. – 528 с.
2. Справочник химика. Т. 1. Общие сведения. Строение вещества. Свойства важнейших веществ. Лабораторная техника. /Под ред. Б.Н. Никольского. – М.-Л.: Химия, 1966. – 1072 с.
3. Карапетьянц М.Х., Карапетьянц М.Л. Основные термодинамические константы неорганических и органических веществ. – М.: Химия, 1968. 500 с.
4. База данных. Термические константы веществ. Интернет ресурс: <http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html> (дата обращ. 05.03.22).
5. NIST Chemistry WebBook, SRD 69 Интернет ресурс: <https://webbook.nist.gov/chemistry/> (дата обращ. 05.03.22).
6. А. Буркат. Термодинамические данные идеального газа в полиномиальной форме для сжигания и загрязнения воздуха. Интернет ресурс: <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html> (дата обращ. 05.03.22).