

Занятие № 2

Тема: Химическая термодинамика и её применение к биосистемам

1. Теория

1. Химическая термодинамика и её практическое значение.
2. Основные понятия термодинамики (определение, классификация, примеры):
 - термодинамическая система,
 - окружающая среда,
 - термодинамические параметры,
 - термодинамическое состояние,
 - термодинамический процесс.
3. Внутренняя энергия и энтальпия: определение понятий, взаимосвязь, влияние различных факторов, расчетные формулы.
4. Стандартная энтальпия простых и сложных веществ. Использование энтальпии для расчёта энергетической ценности пищевых продуктов.
5. Первое начало термодинамики: связь с законом сохранения энергии, формулировка.
6. Применение первого начала термодинамики к биосистемам.
7. Значение и сущность 2-го начала термодинамики. Необратимость естественных (самопроизвольных) процессов. Свободная и связанная энергия.
8. Энтропия как мера связанной энергии. Расчет энтропии веществ в изотермических и изобарных процессах (формулы, выводы), стандартная энтропия (определение, обозначение), расчет ΔS химической реакции. Процессы в организме человека, протекающие с изменением энтропии.
9. Энергия Гиббса. Уравнение Гиббса. ΔG как критерий самопроизвольного протекания изобарно-изотермических процессов. Экзергонические и эндергонические процессы: определение, возможность протекания в организме, примеры.

2. Задачи

1. Рассчитайте тепловой эффект реакции $\text{CaCO}_3 = \text{CaO} + \text{CO}_2$, если:

$$\Delta H_{298\text{обр}}^\circ (\text{CaCO}_3) = -1206,9 \text{ кДж/моль},$$

$$\Delta H_{298\text{обр}}^\circ (\text{CaO}) = -635,5 \text{ кДж/моль},$$

$$\Delta H_{298\text{обр}}^\circ (\text{CO}_2) = -393,5 \text{ кДж/моль}.$$
2. *Определите тепловой эффект реакции $2\text{KClO}_3(\text{т}) = 2\text{KCl}(\text{т}) + 3\text{O}_2(\text{г})$, если:

$$\Delta H_{298\text{обр}}^\circ (\text{KClO}_3) = -391,2 \text{ кДж/моль},$$

$$\Delta H_{298\text{обр}}^\circ (\text{KCl}) = -435,9 \text{ кДж/моль}.$$
3. *Вычислите ΔH_{298}° образования оксида углерода (II) по реакции

$$\text{MnO}_2(\text{т}) + 2\text{C}(\text{т}) = \text{Mn}(\text{т}) + 2\text{CO}(\text{г}), \text{ если}$$

$$\Delta H_{298(\text{р})}^\circ = 301 \text{ кДж}, \Delta H_{298\text{обр}}^\circ (\text{MnO}_2) = -522 \text{ кДж/моль}.$$
4. *Рассчитайте тепловой эффект реакции $\text{N}_2 + \text{O}_2 = 2\text{NO}$, если известно:
 - 1) $2\text{NO} + \text{O}_2 = 2\text{NO}_2 + 112,94 \text{ кДж},$
 - 2) $\text{N}_2 + 2\text{O}_2 = 2\text{NO}_2 + 67,64 \text{ кДж}.$

5. Анаэробный гликолиз (превращение глюкозы в молочную кислоту без участия кислорода) протекает в организме человека в 11 стадий.

Составьте суммарное уравнение реакции для данного процесса.

Подтвердите корректность его написания формулировкой соответствующего закона.

Рассчитайте тепловой эффект реакции.

Назовите составные части выделившейся энергии и пути их использования.

Подтвердите Ваш ответ соответствующим уравнением.

Укажите название конечного продукта по ЗН ИЮПАК.

$$\Delta H^{\circ}_{\text{обр}} (\text{гл.}) = -1274,41 \text{ кДж/моль}; \Delta H^{\circ}_{\text{обр}} (\text{м.к.}) = -673 \text{ кДж/моль}.$$

6. Рассчитайте ΔS°_{298} реакции $2\text{NO}(\text{г}) + \text{O}_2(\text{г}) = 2\text{NO}_2(\text{г})$, если:

$$S^{\circ}_{298} (\text{NO}, \text{г}) = 210,6 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К},$$

$$S^{\circ}_{298} (\text{O}_2, \text{г}) = 205 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К},$$

$$S^{\circ}_{298} (\text{NO}_2, \text{г}) = 240,2 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К}.$$

7. Определите ΔG°_{298} реакции $\text{Fe}_3\text{O}_4 + 4\text{CO} = 3\text{Fe} + 4\text{CO}_2$, если:

$$\Delta G^{\circ}_{298} (\text{Fe}_3\text{O}_4) = -1014 \text{ кДж/моль},$$

$$\Delta G^{\circ}_{298} (\text{CO}) = -137,2 \text{ кДж/моль},$$

$$\Delta G^{\circ}_{298} (\text{CO}_2) = -394 \text{ кДж/моль}.$$

Установите возможность самопроизвольного протекания процесса в стандартных условиях.

8. Глицерин, образующийся в организме человека в результате метаболических процессов, окисляется далее до $\text{CO}_2(\text{г})$ и $\text{H}_2\text{O}(\text{ж})$.

Напишите уравнение реакции окисления глицерина.

Вычислите ΔG°_{298} этого процесса, если $\Delta G^{\circ}_{298\text{обр}} (\text{глицерин}) = -480 \text{ кДж/моль}$,

$\Delta G^{\circ}_{298\text{обр}} (\text{CO}_2, \text{г}) = -393 \text{ кДж/моль}$, $\Delta G^{\circ}_{298\text{обр}} (\text{H}_2\text{O}, \text{ж}) = -286 \text{ кДж/моль}$.

Классифицируйте данную реакцию по знаку перед ΔG_p .

Сделайте вывод о возможности самопроизвольного протекания данного процесса.

9. Установлено, что для гидролиза АТФ (при 36°C и физиологических значениях рН) $\Delta H = -4800 \text{ ккал/моль}$, $\Delta G = -7000 \text{ ккал/моль}$.

Вычислите величину ΔS процесса (кДж/К) для указанных условий.

Сделайте вывод об изменении энтропии (увеличивается или уменьшается).

Объясните (исходя из полученного результата) как меняется при этом неупорядоченность системы.

Подтвердите Ваш тезис соответствующей схемой реакции гидролиза.

10. В биологическом полимере (белке) имеет место следующее превращение:

нативное состояние \rightleftharpoons денатурированное состояние.

Установите знак ΔS° процесса, если $\Delta G^{\circ} < 0$, а $\Delta H^{\circ} > 0$ (при $t = 60^{\circ}\text{C}$).

Объясните, что это означает с точки зрения структуры белка.

Примечания:

1. Задачи № 5-10 оформляются в отдельной тетради (для обязательной самостоятельной внеаудиторной работы).
2. Ход выполнения самостоятельной работы контролируется преподавателем.
3. Контроль знаний осуществляется на занятии (1, 6, 7), на рубежном контроле (6, 7) и на экзамене (5, 8-10).
4. Задачи, отмеченные звездочкой (2-4), необязательны для решения (бонусные).

3. Литература

1. Ершов Ю. А, Попков А. А., Берлянд А. С. и др. Общая химия. Биофизическая химия. Химия биогенных элементов. Под. ред. Ю.А. Ершова – М.: Высшая школа, 1993. С. 10-32.
2. Глинка Н.Л. Общая химия. Л.: Химия. 1979 и далее, глава VI.
3. Равич-Щербо М.И., Новиков В.В. Физическая и коллоидная химия. М.: Высшая школа, 1975, ч. 1, гл. 1, с. 10-20.
4. Ленский А.С. Введение в бионеорганическую и биофизическую химию. М.: Высшая школа, 1989, с. 6-54.