

2.2. Мұнай көмірсутектерінің термиялық реакцияларының термодинамикасы мен кинетикасы

Жоғарғы температураларда мұнай шикізаты көмірсутектерінің реакциялары өте көптүрлі. Молекулалардың термиялық ыдырауымен қатар синтез реакциялары, ішінара изомерлену реакциялары жүреді. Бұл реакциялардың көбі қайтымды. Шикізаттың жеке компоненттері әр түрлі бағытта әрекеттеседі, бірақ әр түрлі жылдамдықпен және бірдей емес термодинамикалық ықтималдылықпен әрекеттесуі мүмкін. Шикізат көмірсутектерінің айналу тереңдігіне, жылдамдығы мен бағытына әсер ететін басты фактор температура болып табылады.

Көмірсутектердің термиялық реакцияларын зерттеу кезінде, алдымен процесс жағдайларының реакция бағытына және бастапқы шикізаттың тепе-теңдік орнаған кездегі айналу дәрежесіне әсері жөніндегі мәселе туындайды. Басқаша айтқанда, реакцияның термодинамикалық ықтималдығын анықтайды және тепе-теңдік тұрақтысын есептейді.

Процестің термодинамикалық ықтималдығы реакция нәтижесіндегі жүйенің Гиббс энергиясының ΔG өзгерісімен анықталады:

$$\Delta G = G_{\text{соңғы}} - G_{\text{баст.}}$$

Гиббс энергиясы дегеніміз - жүйенің жұмысқа айналуы мүмкін ішкі энергиясының бір бөлігі. Ол басқа негізгі термодинамикалық функциялар – энтальпия H және энтропия S мына тендеулерге байланысты болады:

$$G = H - TS$$
$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S,$$

мұндағы T – абсолюттік температура, K .

Тұрақты қысым кезінде жүретін реакциялар үшін ΔH энтальпия өзгерісі кері таңбамен алынған реакцияның жылу эффектісі болып табылады, ал $T\Delta S$ мүшесі жүйенің ішкі энергиясының жұмысқа айналатын бөлігін көрсетеді.

Егер қысым мен температурасы таңдалған жағдайлар кезінде реакция өздігінен солдан оңға қарай жүрсе, онда Гиббс энергиясы азаяды, себебі оның бір бөлігі жұмысқа айналады, бұл кездегі ΔG белгісі минус болады. Химиялық тепе-теңдікке жеткен кезде, соңғы жүйенің G бастапқы жүйе G -ге тең және $\Delta G = 0$ болады. Осыған сәйкес, неғұрлым плюс белгісі бар ΔG абсолюттік мәні көп болған