

$$Q = \Delta U + A.$$

Если химическая реакция протекает при постоянном давлении без изменения объема, то работа  $A = 0$  и

$$Q = \Delta U.$$

Тепловой эффект химической реакции при постоянном объеме, численно равный изменению внутренней энергии системы, принято называть *теплотой реакции*.

Тепловой эффект реакции зависит от агрегатного состояния исходных и конечных продуктов реакции, а также от температуры. Если в результате химической реакции изменяется агрегатное состояние, то в значение теплового эффекта реакции входит значение теплоты фазового перехода (теплоты испарения или конденсации, плавления или затвердевания).

В справочной литературе тепловой эффект реакции обычно относят к стандартным условиям. Тепловой эффект химической реакции рассчитывают на единицу образующихся продуктов реакции, а иногда это значение относят к единице количества исходного или превращенного сырья.

Тепловой эффект химической реакции может быть найден экспериментально либо вычислен в соответствии с законом Гесса.

*Закон Гесса*, являющийся следствием первого начала термодинамики, формулируется следующим образом. Тепловой эффект химической реакции простых веществ зависит от исходного и конечного состояний системы и не зависит от пути, по которому протекает реакция.

Тепловой эффект химической реакции может быть вычислен по закону Гесса как разность сумм теплот образования из элементов продуктов реакции и исходных веществ:

$$Q = \Delta H = \sum (\Delta H_{\text{обр}})_{\text{пр}} - \sum (\Delta H_{\text{обр}})_{\text{исх}} \quad (\text{XXIII.1})$$

или как разность сумм теплот сгорания исходных веществ и продуктов реакции:

$$Q = \Delta H = \sum (\Delta H_{\text{сгор}})_{\text{исх}} - \sum (\Delta H_{\text{сгор}})_{\text{пр}}. \quad (\text{XXIII.2})$$

При расчетах по уравнениям (XXIII.1) и (XXIII.2) теплоты образования и сгорания для стандартного состояния могут быть найдены в справочной литературе.

Значение теплового эффекта реакции химических процессов, используемых в нефтяной промышленности, колеблется в широких пределах, например, для эндотермического процесса пиролиза бензина она составляет от 1400 до 2000 кДж/кг, считая на превращенное сырье, а для экзотермического выжига кокса с катализатора крекинга — от 28 000 до 32 000 кДж/кг.

Как уже отмечено ранее, некоторые процессы представляют собой сочетание химических реакций, имеющих разные знаки теплового эффекта, и поэтому конечный тепловой эффект зависит от глубины процесса. В качестве примера на рис. XXIII-1 приведены данные по значению теплового эффекта  $Q$  реакции каталитического крекинга в зависимости от глубины превращения  $x$  для фракции дизельного топлива. Из графика