**热力学方法概述**

**一、热力学的研究对象**

人们不仅从组成去认识物质，以宏观性质去区分物质，还需从变化去深化对物质的认识。化学工作者要完整考察物质的变化，一般从以下几个方面开展研究：

（1）在给定条件下，当两种或两种以上物质放在一起时，它们能否发生反应？

（2）若能发生反应, 过程将伴随怎样的能量变化？

（3）若能发生反应，它会进行到什么程度，最终产率是多少？

（4）反应进行的速率如何？影响反应速率的因素有哪些？

（5）反应进行的机理是怎样的？如何选择最佳的反应温度、压力、浓度等条件？

前三个问题属于化学热力学的范畴，其实质是涉及能量转换过程伴随的物质变化或物质变化过程伴随的能量转换这两类问题。在这些过程中涉及一些能表征系统特性的重要物理量，以及这些物理量间的关系和规律性。经大量实验事实和经验总结，人们概括出解决前述两类问题的热力学四个定律，其中热力学第零定律与温度概念在普通物理学课程中已作介绍，本书将介绍热力学第一、第二和第三定律。

热力学是以大量分子集合体为研究对象，以实验归纳出的热力学基本定律为基础，讨论平衡系统的宏观性质，从能量转换和物质变化的方向与限度，去深化对物质运动的认识。

**二、热力学方法的特点**

热力学方法是一种演绎的方法，即运用经验所得的基本定律，借助状态函数的特性，通过严密的逻辑推理，讨论由大量质点构成的集合体为具体对象的宏观性质，所得结论具有统计意义，只反映大量质点的平均行为，不适用于个别质点的行为。

热力学方法的特点是不考虑物质的微观结构和变化的机理，就能指出在给定条件下，过程变化的方向和限度。例如在常温条件下制备苯胺，可设计以下的途径来实现：

（1）

（2）

（3） 

在常温、常压下，通过热力学的计算能判断反应（1）、（2）是可以进行的，而反应（3）是不能进行的。此外，通过有关热力学计算，还能得出反应的最大限度即理论产率，为挖潜增产提供理论依据，这些都已经被工业生产实践所证实。任何事物都具有两面性，热力学方法的特点具有明显的优越性，也有一定的局限性，它不能回答过程变化发生的具体细节和微观原因以及完成变化所需的时间。总之，它只是解决了过程变化的可能性问题，如何使这种可能性转变为现实性，需要动力学的知识来解决。尽管如此，由于热力学定律有着极其牢固的实验基础，以这些基本定律为基础通过严密的逻辑推理和计算，热力学得出的结论具有高度的普遍性和可靠性，所以热力学成为非常有用的理论工具，对生产实践和科学研究具有重要指导意义。我国著名物理化学家傅鹰先生曾指出：“在量子力学震撼许多科学的时代，热力学的基础仍然稳如泰山。”