

卫生部规划教材
全国高等医药院校教材

供药学类专业用

物理化学

第四版

侯新朴 主编

人民卫生出版社

全国高等医药院校教材

供药学类专业用

物 理 化 学

第 四 版

侯 新 朴 主 编

编者（以姓氏笔画为序）

许金焜 （北京医科大学）

李三鸣 （沈阳药科大学）

赵长文 （第二军医大学）

徐子猷 （上海医科大学）

徐开俊 （中国药科大学）

曹宗顺 （山东医科大学）

詹先成 （华西医科大学）

人 民 卫 生 出 版 社

图书在版编目 (CIP) 数据

物理化学/侯新朴主编. —北京:

人民卫生出版社, 2000

卫生部规划教材. 供药学类专业用

ISBN 7-117-03532-3

I. 物… II. ①侯… ②许… III. 物理化学-教材
IV. 064

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2000) 第 10851 号

物 理 化 学

第 四 版

主 编: 侯 新 朴

出版发行: 人民卫生出版社 (中继线 67616688)

地 址: (100078) 北京市丰台区方庄芳群园 3 区 3 号楼

网 址: <http://www.pmph.com>

E-mail: pmph@pmph.com

印 刷: 北京隆华印刷厂

经 销: 新华书店

开 本: 787×1092 1/16 印张: 23

字 数: 523 千字

版 次: 1979 年 7 月第 1 版 2000 年 4 月第 4 版第 21 次印刷

印 数: 130 301—140 300

标准书号: ISBN 7-117-03532-3/R·3533

定 价: 22.00 元

著作权所有, 请勿擅自用本书制作各类出版物, 违者必究

(凡属质量问题请与本社发行部联系退换)

全国高等医药院校药学专业 第四轮规划教材修订说明

为适应我国高等药学教育的改革和发展,在总结前三轮药学专业教材编写经验的基础上,卫生部教材办公室于1996年9月决定进行第四轮教材修订,根据药学专业的培养目标,确定了第四轮教材品种和修订的指导思想,药学本科教育的培养对象是从事一般药物制剂、鉴定及临床合理用药等工作的药师,教材修订应紧紧围绕培养目标,突出各学科的基本理论、基本知识,同时又反映学科的新进展。该套教材可供药学及相关专业选用。全套教材共22种,均经卫生部聘任的全国药学专业教材评审委员会审定。教材目录如下:

- | | | | |
|------------------|--------|-----------------|--------|
| 1. 高等数学(第三版) | 毛宗秀 主编 | 11. 药理学(第四版) | 李 端 主编 |
| 2. 医药数理统计方法(第三版) | 刘定远 主编 | 12. 药物分析(第四版) | 刘文英 主编 |
| 3. 物理学(第三版) | 王鸿儒 主编 | 13. 药用植物学(第三版) | 郑汉臣 主编 |
| 4. 物理化学(第四版) | 侯新朴 主编 | 14. 生药学(第三版) | 郑俊华 主编 |
| 5. 无机化学(第三版) | 许善锦 主编 | 15. 药物化学(第四版) | 郑 虎 主编 |
| 6. 分析化学(第四版) | 孙毓庆 主编 | 16. 药剂学(第四版) | 毕殿洲 主编 |
| 7. 有机化学(第四版) | 倪沛洲 主编 | 17. 天然药物化学(第三版) | 姚新生 主编 |
| 8. 人体解剖生理学(第四版) | 龚茜玲 主编 | 18. 中医学基础(第四版) | 李向中 主编 |
| 9. 微生物学与免疫学(第四版) | 李明远 主编 | 19. 药事管理学(第二版) | 吴 蓬 主编 |
| 10. 生物化学(第四版) | 吴梧桐 主编 | 20. 生物药剂学与药物动力学 | 梁文权 主编 |
| | | 21. 分子生物学基础 | 史济平 主编 |
| | | 22. 药学英语(第二版) | 胡廷熹 主编 |
- 以上教材均由人民卫生出版社出版。

卫生部教材办公室

全国药学专业教材第二届评审委员会

主任委员:彭 司 勋

副主任委员:郑 虎

委员(以姓氏笔画为序)

王 夔 安登魁 李万亥 邹立家

郑俊华 胡昌奇 姚新生 梁文权

秘 书:翁玲玲 冉 兰

前 言

本书是根据全国高等医药院校药学专业教材评审委员会关于修订药学专业第四轮教材的指导思想，药学专业的业务培养目标及三版教材的使用情况，在第三版《物理化学》基础上进行修订完成的。

物理化学是药学专业的专业基础课，应满足后续课及专业对物理化学的知识需要，本教材重点阐明物理化学的基本概念、基本理论和基本技能。为便于巩固所学知识，提高实际应用能力，本教材编入适量例题和习题，习题附有答案，全书采用 SI 单位。

本教材共分八章，内容包括热力学第一定律；第二定律；化学平衡；相平衡；电化学；化学动力学；表面化学；胶体。物质结构因单独设课，教材中不再包括。

因编者水平所限，本教材难免会存在一些缺点甚至错误，诚恳希望读者批评指正。

编 者

1999 年 2 月

目 录

绪论	(1)
一、物理化学的任务和内容	(1)
二、物理化学在化学与药学中的地位和作用	(1)
三、物理化学的学习方法	(2)
第一章 热力学第一定律	(3)
第一节 热力学概论	(3)
一、热力学	(3)
二、化学热力学	(3)
三、热力学的方法和局限性	(4)
第二节 热力学基本概念	(4)
一、体系与环境	(4)
二、体系的性质	(4)
三、热力学平衡态	(5)
四、状态函数与状态方程	(5)
五、过程与途径	(6)
六、热和功	(6)
第三节 热力学第一定律	(7)
一、热力学第一定律	(7)
二、内能	(7)
三、热力学第一定律的数学表达式	(8)
第四节 可逆过程与体积功	(8)
一、体积功	(8)
二、不同过程的体积功	(8)
三、可逆过程	(10)
第五节 焓	(11)
第六节 热容	(12)
第七节 热力学第一定律的应用	(12)
一、热力学第一定律应用于理想气体	(12)
二、热力学第一定律应用于实际气体	(17)
第八节 热化学基本概念	(18)
一、化学反应的热效应	(18)
二、反应进度	(19)
三、热化学方程式	(20)
第九节 化学反应热效应的计算	(21)
一、赫斯定律	(21)

二、由标准摩尔生成焓计算 $\Delta_f H_m$	(21)
三、由标准摩尔燃烧焓计算 $\Delta_c H_m$	(22)
四、由键焓估算 $\Delta_f H_m$	(23)
五、离子摩尔生成焓	(25)
六、溶解热与稀释热	(25)
七、不同温度的 $\Delta_f H_m$ ——基尔霍夫定律	(27)
习题	(29)
第二章 热力学第二定律	(33)
第一节 自发过程的特征	(33)
第二节 热力学第二定律	(34)
第三节 卡诺循环	(35)
第四节 卡诺定理	(37)
第五节 熵	(38)
一、熵的导出	(38)
二、热力学第二定律数学表达式——克劳修斯不等式	(39)
三、熵增原理	(40)
第六节 熵变的计算	(41)
一、等温过程中熵变的计算	(41)
二、变温过程中熵变的计算	(43)
第七节 熵函数的物理意义	(45)
一、熵是体系混乱程度的度量	(45)
二、熵与概率	(46)
第八节 热力学第三定律及规定熵	(47)
一、热力学第三定律	(47)
二、规定熵	(47)
三、化学反应过程的熵变	(49)
第九节 吉布斯能、亥姆霍兹能	(49)
一、热力学第一定律、第二定律联合表达式	(49)
二、亥姆霍兹能	(49)
三、吉布斯能	(50)
四、自发变化方向和限度的判据	(51)
第十节 ΔG 的计算	(51)
一、理想气体等温变化中的 ΔG	(52)
二、相变过程的 ΔG	(52)
三、化学变化的 $\Delta_r G^\circ$	(53)
第十一节 热力学函数间的关系	(54)
一、热力学基本关系式	(54)
二、麦克斯韦关系式	(55)
三、 ΔG 与温度的关系式——吉布斯-亥姆霍兹公式	(56)

第十二节 非平衡态热力学简介	(58)
一、开放体系、非平衡态	(58)
二、熵流、熵产生和耗散结构	(59)
三、熵与生命	(60)
第十三节 疏水相互作用	(60)
第十四节 偏摩尔量和化学势	(63)
一、偏摩尔量	(63)
二、化学势	(65)
第十五节 化学势的标准态及其表示式	(68)
一、气体的化学势	(69)
二、溶液中各组分的化学势	(70)
习题	(73)
第三章 化学平衡	(78)
第一节 化学反应的平衡条件	(78)
第二节 化学反应等温方程式和平衡常数	(79)
第三节 平衡常数的表示法	(81)
一、气体反应平衡常数	(81)
二、液相反应平衡常数	(83)
三、有纯态凝聚相参加的理想气体反应	(84)
第四节 平衡常数的测定和平衡转化率的计算	(84)
一、平衡常数的测定	(84)
二、平衡转化率的计算	(85)
第五节 标准状态下反应的吉布斯能变化及化合物的标准生成吉布斯能	(87)
一、标准状态下反应的吉布斯能变化	(87)
二、化合物的标准生成吉布斯能	(88)
第六节 温度对平衡常数的影响	(89)
第七节 其它因素对平衡的影响	(91)
一、压力对化学平衡的影响	(91)
二、惰性气体对化学平衡的影响	(92)
第八节 反应的耦合	(93)
一、反应耦合原理	(93)
二、生物体内的化学平衡	(94)
习题	(95)
第四章 相平衡	(98)
第一节 相律	(98)
一、相	(98)
二、物种数与组分数	(98)
三、自由度	(100)
四、相律的推导	(100)

第二节 单组分体系	(102)
一、水的相图	(102)
二、克劳修斯-克拉珀龙方程	(104)
第三节 完全互溶双液体系	(107)
一、理想的完全互溶双液体系	(107)
二、杠杆规则	(109)
三、非理想的完全互溶双液体系	(109)
四、蒸馏与精馏	(114)
第四节 部分互溶和完全不互溶的双液体系	(116)
一、部分互溶的双液体系	(116)
二、完全不互溶的双液体系	(118)
第五节 二组分固-液体系平衡相图	(119)
一、简单低共熔相图	(120)
二、生成化合物的相图	(124)
三、有固溶体生成的相图	(126)
第六节 三组分体系的相平衡	(128)
一、等边三角形组成表示法	(129)
二、三组分水盐体系	(130)
三、部分互溶的三液体系	(132)
习题	(134)
第五章 电化学	(138)
第一节 电解质溶液的导电性质	(138)
一、电解质溶液的导电机理	(138)
二、法拉第定律	(139)
三、离子的电迁移和迁移数	(140)
第二节 电解质溶液的电导	(143)
一、电导	(143)
二、电导率	(143)
三、摩尔电导率	(143)
四、电导率和摩尔电导率的计算	(144)
五、摩尔电导率与浓度的关系	(145)
六、离子独立运动定律	(146)
第三节 电导的测定及其应用	(148)
一、电导的测定	(148)
二、电导测定的应用	(148)
第四节 强电解质溶液理论	(151)
一、溶液中强电解质的平均活度和平均活度系数	(151)
二、离子强度	(154)
三、强电解质溶液的离子互吸理论	(154)

第五节 原电池	(157)
一、化学反应与电池	(157)
二、可逆电池与不可逆电池	(158)
三、电池的书写方式	(159)
第六节 电池电动势的产生	(159)
一、电极-溶液界面电势差	(160)
二、液体接界电势和盐桥	(160)
第七节 电池电动势的测定	(161)
一、对消法(补偿法)测定电池电动势的原理	(161)
二、标准电池	(162)
第八节 可逆电池热力学	(163)
一、由可逆电池电动势计算电池反应的 $\Delta_r G_m$	(163)
二、由电动势 E 及其温度系数计算电池反应的 $\Delta_r S_m$ 和 $\Delta_r H_m$	(163)
三、计算电池可逆放电反应过程中的热	(164)
四、可逆电池电动势 E 与电池反应中各物质活度的关系	(165)
第九节 电极电势	(166)
一、标准氢电极	(166)
二、任意电极的电极电势	(166)
三、电极电势的能斯特方程	(169)
四、原电池电动势的计算	(170)
第十节 电极的类型	(171)
一、第一类电极	(171)
二、第二类电极	(171)
三、第三类电极	(173)
四、第四类电极	(174)
第十一节 浓差电池	(174)
一、单液浓差电池	(174)
二、双液浓差电池	(174)
第十二节 电动势测定的应用	(175)
一、判断化学反应的方向	(175)
二、求氧化还原反应的标准平衡常数 K°	(176)
三、求难溶盐的活度积	(177)
四、测定溶液的 pH 值	(177)
五、测定电池的标准电动势 E° 及离子平均活度系数 $\gamma_{\pm}$	(178)
六、电势滴定	(180)
第十三节 电极的极化和过电势	(181)
一、分解电压	(181)
二、电极的极化作用	(183)
三、过电势和极化曲线的测定	(186)

第十四节 生物膜电势简介	(187)
一、细胞膜和膜电势	(187)
二、膜电势在生理医学上的研究应用	(188)
习题	(189)
第六章 化学动力学	(192)
第一节 反应速率的表示方法及其测定	(192)
第二节 基元反应与反应分子数	(194)
第三节 反应速率方程与反应级数	(195)
第四节 简单级数反应的速率方程	(197)
一、一级反应	(198)
二、二级反应	(200)
三、零级反应	(204)
四、简单级数反应的速率方程比较	(205)
第五节 反应级数的确定	(206)
一、积分法	(206)
二、微分法	(206)
三、半衰期法	(207)
第六节 温度对反应速率的影响	(208)
一、阿仑尼乌斯经验公式	(208)
二、活化能	(209)
三、药物贮存期预测	(211)
第七节 典型的复杂反应	(215)
一、对峙反应	(215)
二、平行反应	(216)
三、连续反应	(219)
四、链反应	(221)
第八节 光化反应	(223)
一、光化反应的特点	(224)
二、光化学定律	(224)
三、量子效率	(226)
四、药物对光稳定性	(227)
第九节 反应机理的确定	(228)
第十节 溶液中的反应	(231)
第十一节 催化作用的基本概念	(232)
第十二节 酸碱催化	(236)
第十三节 酶催化	(241)
第十四节 碰撞理论	(244)
第十五节 过渡态理论	(247)
第十六节 快速反应研究技术	(250)

一、快速混合法	(250)
二、化学弛豫法	(251)
习题	(252)
第七章 表面化学	(257)
第一节 表面吉布斯能和表面张力	(258)
一、表面吉布斯能	(258)
二、表面张力	(259)
三、表面的热力学关系式	(261)
第二节 曲面的附加压力和蒸气压	(262)
一、曲面的附加压力	(262)
二、曲面的蒸气压	(264)
三、亚稳状态和新相的生成	(266)
第三节 润湿和铺展	(268)
一、固体的润湿	(268)
二、液体的铺展	(269)
第四节 溶液的表面吸附	(271)
一、溶液的表面吸附现象	(271)
二、吉布斯吸附等温式	(272)
三、表面活性物质在吸附层的定向排列	(275)
第五节 不溶性表面膜	(276)
一、表面压及其测定	(277)
二、不溶性表面膜的应用	(277)
第六节 表面活性剂	(279)
一、表面活性剂的分类	(279)
二、表面活性剂的结构性能	(280)
三、表面活性剂的几种重要作用	(284)
第七节 气体在固体表面上的吸附	(286)
一、物理吸附和化学吸附	(286)
二、吸附等温线	(287)
三、弗仑因德立希吸附等温式	(288)
四、单分子层吸附理论——兰格缪尔吸附等温式	(288)
五、多分子层吸附理论——BET 公式	(290)
第八节 固体在溶液中的吸附	(292)
一、吸附特点	(292)
二、吸附量的测定	(292)
三、吸附等温线	(293)
习题	(294)
第八章 胶体	(298)
第一节 分散体系分类及其基本特性	(298)

一、分散体系的分类	(298)
二、基本特性	(300)
第二节 溶胶的制备与净化	(300)
一、溶胶的制备	(300)
二、溶胶的净化	(302)
第三节 溶胶的动力性质	(303)
一、布朗运动	(303)
二、扩散与渗透现象	(304)
三、沉降与沉降平衡	(306)
四、超离心力场下的沉降	(307)
第四节 溶胶的光学性质	(309)
一、光的散射	(310)
二、光的吸收	(310)
三、溶胶粒子大小的测定	(311)
第五节 溶胶的电学性质	(312)
一、电动现象	(312)
二、溶胶粒子表面电荷的来源	(313)
三、双电层理论	(313)
四、电泳测定	(316)
第六节 胶体的稳定性	(318)
一、胶团结构	(318)
二、溶胶的稳定性与聚沉	(319)
三、胶体稳定性理论	(321)
第七节 乳状液、泡沫和气溶胶	(324)
一、乳状液	(324)
二、泡沫	(326)
三、气溶胶	(328)
第八节 大分子化合物结构及平均摩尔质量	(329)
一、大分子化合物的结构特点	(329)
二、大分子化合物的平均摩尔质量	(331)
第九节 大分子溶液的流变性	(332)
一、流体的粘度	(332)
二、流变曲线与流型	(333)
第十节 大分子化合物平均摩尔质量的测定	(335)
一、渗透压法	(335)
二、离心沉降法	(336)
三、粘度法	(336)
第十一节 大分子电解质溶液	(337)
一、大分子电解质溶液的分类	(337)

二、大分子电解质溶液的电性	(338)
三、大分子电解质溶液的粘度特性	(339)
四、大分子电解质溶液的唐南平衡与渗透压	(340)
第十二节 凝胶	(342)
一、凝胶的分类	(342)
二、凝胶的性质	(343)
附录 1 一些物质在 101.325kPa 下的摩尔等压热容	(348)
附录 2 一些物质的热力学函数 ($p = 101.325\text{kPa}$, $T = 298.15\text{K}$)	(350)
附录 3 一些有机物的标准摩尔燃烧焓值	(352)

绪 论

一、物理化学的任务和内容

化学与物理学是紧密相联的，任何一种化学变化总是伴随着物理变化。如发生化学反应时，常伴有体积、压力变化，热量的吸收或放出，光效应及电效应等；同时，温度、压力、光的照射、电磁场等物理因素的作用也都能引起化学变化。人们在长期的实践过程中，注意到化学变化与物理变化的相互联系，并加以总结，逐步形成一门独立的科学分支称之为物理化学。物理化学是从研究物理变化和化学变化的联系入手，探求化学变化的基本规律的一门科学。物理化学又称理论化学。

通常，物理化学包含三方面内容：

1. 化学热力学 研究化学反应能量转化及化学变化的方向及限度。即在指定条件下，某一化学反应能否朝预定方向进行？进行到什么限度？外界条件如温度、压力、浓度等因素对化学反应方向和限度的影响如何？这些问题属于化学热力学范畴。化学热力学是以大量质点构成的体系为研究对象，采用宏观的方法，不考虑体系内部质点的结构，只关注变化的始态和终态，通过宏观量的变化如（ p 、 V 、 T 等）来推知体系内部变化，具有普遍适用性。与化学变化密切相关的相变化、表面现象、电化学等变化过程的方向和限度问题，是化学热力学的重要应用。

2. 化学动力学 研究化学反应的速率和反应机理。一方面，化学动力学从宏观上研究化学反应速率的唯象规律，即研究外界因素（如浓度、温度、催化剂等）对反应速率的影响，进而研究反应机理，即复杂反应的基元步骤。另一方面，从分子间相互作用的微观角度研究化学反应的机理，从而使分子反应动力学得以发展。

3. 物质结构 研究原子在空间结合成分子的规律及结构与性能间的联系。

上述三部分共同构成物理化学的三大支柱，结构化学因单独设课，本教材不再包括。

二、物理化学在化学与药学中的地位和作用

1. 在化学中的地位与作用 物理化学作为化学的理论基础，诞生于工业发展的 19 世纪，1887 年全球第一份物理化学杂志的创刊，可以作为物理化学诞生的标志。1897 年至本世纪 20 年代是其发展的第一阶段，以化学热力学和反应速率唯象规律的建立为主要特征。到本世纪 60 年代为发展的第二阶段，物理化学开始进入分子水平的研究，结构化学得以蓬勃发展。60 年代至今为发展的第三阶段，科技的进步推动物理化学整体在分子水平上的发展。由此，可以看出，物理化学是既古老而又极富生命力的基础学科。随着物理化学学科的发展，化学学科得以从纯经验状态中摆脱出来，面貌为之一新。据统计，本世纪初到 80 年代末，诺贝尔化学奖获得者共 110 位，其中近 70 位是物理化学家或从事物理化学领域研究的科学家，说明近 90 年来化学中最引人瞩目的成就中 60% 集中于物理化学领域。

2. 在药学中的地位与作用 药学科学是研究药物与人体及致病体相互作用的科学。随着社会的进步、人们生活水平提高,对药物的需求也日益增强,除治病外,要求增进健康、益寿延年,因此对药物的品种、数量要求多,药品更新换代周期短。新药设计、药物合成中路线选择、工艺条件确定、反应速率及机理确定需要化学热力学及化学动力学基础;药物剂型的设计与研制,药物在储藏中的稳定性及体内的吸收、分布、代谢都与物理化学内容密切相关。综上所述,物理化学已渗透到药学的各个领域,为药学后续课及专业需要建立必要的理论与实验基础。

三、物理化学的学习方法

学习物理化学的方法并无一定之规,可因人而异,但由于学科本身的特点,若能掌握住学习要领,可以达到事半功倍之效。

1. 抓住三基 物理化学概念多、公式多、计算多,初次接触者常感到内容庞杂,学习不得要领。为此,学习物理化学,首先要抓住每一章中的基本概念、基本理论、基本计算,这样就抓住每章的主要内容,不至舍本求末、主次不分。

2. 学习将定性概念定量化的研究方法 物理化学既是理论化学,就必须对体系的理化性质进行定量的研究。因此,学习物理化学就必须抓住物理化学的这一特点,注重定性概念定量化的方法和技巧。

1) 准确掌握公式的物理意义:物理化学中重视运用数学方法,数学的严密推导可简捷得出物理量间定量关系,学生往往被其繁杂的推证过程所困扰,而忽视了所得公式的条件及其物理意义,就会造成盲目地套用公式,引出错误的结论。要了解数学推导只是获得结果的必要手段,而不是目的,除重要公式外,一般公式推导过程,只要求理解而不要求强记,重要的是掌握数学公式的物理意义、使用条件及如何运用解决实际问题。

2) 学习物理化学思维方法和逻辑推理过程:物理化学是化学之理,要从纷杂的客观事实,高度抽象出基本的规律,如热力学中熵、吉布斯能等函数的导出;研究气体、溶液的性质,引入理想气体、理想溶液的概念,因理想化是对事物本质的高度概括,将所得规律经修正,就可应用于非理想的实际体系。物理化学的抽象化、理想化的处理问题的方法,使初学者不适应,这也是感到物理化学难学的重要原因之一。而这种处理问题的方法是符合认识规律的,通过物理化学学习,应了解并学会这种认识事物的科学方法。

3) 重视习题:习题的作用是复习与巩固已学的知识,掌握对重要定律及公式的应用,教材中给出一定数量的例题进行示范,学生通过解题,不但可以检查学习效果、加深对理论的理解、提高运算技巧,还有助于独立思考和解决问题能力的培养。正确完成习题要强调:一是在复习、理解课堂内容基础上完成习题;二是随课程进行,及时作习题,那种平时积压、考前突击是不能有好效果的。

第一章 热力学第一定律

第一节 热力学概论

一、热 力 学

热力学 (thermodynamics, 来自希腊文的“热”和“力”) 是研究热、功、能相互转换过程中所遵循的规律的科学。就广义来说, 它研究体系的宏观性质之间的关系; 研究物理变化和化学变化过程中所发生的能量效应; 研究在一定条件下某种过程能否自发进行及其进行的程度, 即研究变化的方向和限度的问题。

热力学以热力学第一、第二定律为基础。这两个定律是人们长期实验和科学研究经验的总结, 它不能从理论上加以证明, 但它的正确性是不容置疑的, 已为无数的实践结果所证实。

热力学第一定律是能量守恒定律, 它断言不供给能量而对外源源不断地作功的永动机是永远不可能的。

热力学第二定律是关于热和功之间性质差异的普遍性结论, 它解决在一定条件下某一化学变化或物理变化的方向和限度的问题, 它断言通过等温循环使热完全转变为功是永远不可能的。

热力学第三定律是物质的熵的绝对值定律。它在化学平衡计算时, 给第二定律以不可或缺的补充。

二、化学热力学

热力学基本原理应用于各门科学领域中, 应用于化学反应、物质聚集状态的变化和各种物理化学过程, 就形成化学热力学这一学科。它给我们提供了科学方法, 以判断给定条件下物质的稳定性和它们朝某一方向变化的能力, 它给出化学反应过程或物理变化过程中的热效应, 化学反应的深度, 结晶、蒸馏、萃取的限度的计算方法。

化学热力学对生产实践和科学研究具有重大的指导作用。例如高炉炼铁中的反应:



高炉废气中含有大量的一氧化碳, 人们曾错误地认为是一氧化碳与矿石之间的接触时间过短所致, 因而投入巨大资金加高炉身以延长一氧化碳与矿石的接触时间, 但是事与愿违, 高炉废气中一氧化碳依然存在。后来通过化学热力学的计算, 表明上述反应为可逆反应, 根本不能进行到底, 废气中含一氧化碳是不可避免的。任何企图把热力学上不可能的事情变为现实的努力都是徒劳的, 注定要失败的。又如在上世纪末, 人们试图用石墨制造金刚石, 但无数次的试验均失败了。经热力学的计算指出: 只有压力超过大气压力的 15 000 倍时, 这种转变才有可能。人造金刚石的制造成功, 充分显示了热力学预见性的巨大威力。

化学热力学在新型药物及其新剂型的研制中具有重要作用: 药物合成的可能性及最