

Бейорганикалық заттар  
технологиясындағы  
жүйелерді  
термодинамикалық  
талдау.

# Жоспар

- Энтропия – процестер тепе- теңдігімен өз-өздігін айқындаушы шама.
- Термодинамикалық потенциалдар.
- Тепе- теңдіктің жалпы шарттары.
- Қайтымды және қайтымсыз процестер

- Бейорганикалық қосылыстар мен оларды алу реакцияларының термодинамикалық шамаларын есептеу тәсілдері.
- Химиялық қосылыстардың жылу сыйымдылығын, түзілу және жану жылуларын жуықтап есептеу тәсілдері (В.Ф. Капустинский тәсілі жылулық түзеткіштер тәсілі, М.Х. Карапетянцтың салыстырмалары есептеу тәсілі, Д.П. Коноваловтың теңдеуі). Энтропияны есептеп табу. Химиялық реакциялардағы Гиббс энергиясы өзгерісін есептеп табу. Химиялық реакциялардың жылу балансын изотермиялық және адиабаттық қалыптарда құрастыру тәсілі.

- Энтропия мәліметтері процестердің бағытталуының бағалау қатынасы үшін қажет.
- $\Delta S > 0$  өзіндік пайда болу процесс жағдайында.  $\Delta S$  белгісі бойынша бағытталғандығын, ал абсолютті мағынасы – процестің интенсивтілігін көрсетеді.
- $\Delta S$  энтропиясының толық мағыналы өзгертулері химия-технологиялық процестер энтропия өзгертулерін құрайды, реакциялық жүйенің энтропия компоненттерінің алгебралық суммасы сияқты және ішкі ортада энтропияның ( $\Delta S_{\text{ш.ор.}}$ ), химиялық қатынастар нәтижесіндегі жылудың жұтылуы мен бөлінуі есептеледі

- Бейорганикалық заттар технологиясындағы газды-сұйықтықты күйлердегі өзгерістер термодинамикасы.
- Реальді газдар. Реальді газдар мен қоспалардың калыптық теңдеуі. Заттардың аумалы күйдегі қалыпы. Аумалы қалыпты сипаттайтын шамалар. Реальді газдар қалпының өзгерісі. Газдардың сығылғыштығы. Сығылғыштық шамасы. Ұшқырлық. Ұшқырлыққа қысым мен температураның әсері. Газдардың қасиеттерін экспериментальдық мәліметтер негізінде есептеу. Тұман пайда болуы. Тұман пайда болу шарты. Газдар көлемінде булардың сұйықтануы. Тұманның құрамдасуы мен ыдырауы.

- Төменгі температуралар алу термодинамикасы
- Төменгі температуралар алу тәсілдерінің құрлымдары. Газдардың изоэнталпиялық ұлғаюы. Дифференциалдық және интегралдық және дроссельдік әсер. Газдардың изоэнтропиялық сыртқы жұмыс жасап ұлғаюы. Газ сұйықтануының идеалды циклы. Газ сұйықтануының ең аз теориялық жұмысы. Терең салқындатудың реальді циклдары.

- Термодинамикалық потенциалдардың сипаттамалық функциялары
- Химия-технологиялық процестерді талдау жасауда шешуді қажет ететін ең негізгі мәліметтердің бірі қарастырып отырған заттардың әрекеттесуін айқындауға қажетті шамалардың мүмкінді мәндерін анықтау. Гиббс, Гельмгольц, Вант-Гофф атты ғалымдардың еңбектерінің нәтижесінде осындай шамалар термодинамикалық потенциалдар деп аталады. Олар ретінде ішкі энергия ( $U$ ), энтальпия ( $H$ ), Гиббс және Гельмгольц бос энергиялары ( $G$ ,  $F$ ) қарастырылады

- Жоғарыда келтіргендей олардың арасында процестерге әсер етуші негізгі сыртқы факторларға қатысты қарастырғанда төмендегідей байланыстар бар:

- $U = F + TS$

- $H = U + PV$

- $F = U - TS$

- $G = F + PV$

- $T = \text{const}$ ,  $P = \text{const}$  жағдайларға қатысты технологиялық процестердегі термодинамикалық потенциалдар өзгерістері төмендегідей көрсетіледі:

- $\Delta U = \Delta F + T\Delta S$

$$\Delta F = \Delta U - T\Delta S$$

- $\Delta H = \Delta U + PdV$

$$\Delta G = \Delta F + PdV$$



- Осы теңдеулерден ішкі энергия және энтальпия өзгерістері үшін төмендегідей теңдіктер алынады:
- $\Delta U = \Delta F + T\Delta S$
- $\Delta H = \Delta G + T\Delta S$
- Осы теңдіктерден көрінгендей ішкі энергия өзгерісі екі құрамдастан тұрады: физикалық-химиялық әрекеттесуге жұмсалатын бос энергия  $\Delta F$  және қоршаған ортаға жылу ретінде таралып кететін байланысқан энергия  $T\Delta S$ .
- Осы тұрғыдан қарағанда энтальпия өзгерісі  $\Delta H$  та сәйкес екі құрамдастан тұрады: бос энергия  $\Delta G$  және байланысқан энергия  $T\Delta S$ .



- Осыдан төмендегідей қорытындылар жасауға болады:
- а)  $\Delta F > 0$ ;  $\Delta G > 0$  мәндерінде қарастырылып отырған процесс тура бағытта орын алмайды;
- б)  $\Delta F = 0$ ;  $\Delta G = 0$  мәндерінде қарастырылып отырған процесс тепе-теңдік жағдайда;
- в)  $\Delta F < 0$ ;  $\Delta G < 0$  мәндерінде қарастырылып отырған процесс тура бағытта орын алады;
- г)  $\Delta F$  пен  $\Delta G$  ның абсолюттік сандық мәндері неғұрлым үлкен болса процесс соғұрлым нәтижелі жүреді.

- Жоғарыда келтірілген термодинамикалық потенциалдар  $\Delta U$ ,  $\Delta H$ ,  $\Delta F$ ,  $\Delta G$  өзара белгілі бір заңды байланыста. Ол байланыстарды  $T$ ,  $P$ ,  $V$ ,  $S$ -лық қалыптық көрсеткіштерді пайдаланып қорытындылап шығаруы болатын сипаттамалық термодинамикалық функциялар негізінде көрсетуге болады.
- Мысалыға, ішкі энергия өзгерісі үшін термодинамиканың I бастамасы бойынша :
- $dQ = dU + dA = dU + PdV$
- Ал термодинамика екінші бастамасынан белгілі болғандай
- $dQ/T = dS$  осыдан  $dQ = TdS$
- яғни  $TdS = dU + PdV$  болады
- немесе  $dU = TdS - PdV$  Мұнда қалыпты көрсеткіштер  $S$  және  $V$ .

- **Күрделі жүйелердегі химиялық тепе-тендік**
- Химиялық тепе-тендік тұрақтысы. Біртекті және әртекті реакциялардың химиялық тепе-тендік тұрақтысын есептеу тәсілдері. Тепе-тендік калыпқа әсер етуші факторлар: температура, қысым, әрекеттесуші заттар арасындағы бастапқы қатынас. Тепе-тендікке жуықтаудың шынайы дәрежесі.

- Жүйелерді термодинамикалық талдау және қайтымсыз процестерді термодинамикалық талдау
- Жүйелердің термодинамикалық шамалары. Қалыптық теңдеу. Қайтымды және қайтымсыз процестердің энтропия өзгерісі.
- УГ энтропия-процестер тепе-теңдігі мен өз-өзіндігін айқындаушысы. Термодинамикалық шамалар мен энтропия байланыстылығы. Тепе-теңдіктің жалпы шарттары. Термодинамикалық потенциалдар. Сипаттамалық функциялар. Химиялық потенциал. Орнықты және орнықсыз тепе-теңдік. Жүйелердің тепе-теңдік бірлестігі. Заттар мен энергия тасымалдаудың физика-химиялық алғы шарттары.