Физикалық химия

Дәріс № 3
Тақырып: Химиялық термодинамика негіздері.

МАҚСАТЫ: Термодинамика, термодинамиканың бірінші заңы, термохими. Гесс заңы. Кирхгофф заңдылығымен таныстыру.

ЖОСПАР:

1. Термодинамиканың негізгі түсініктері
2. Термодинамиканың бірінші заңы
3. Термохими. Гесс заңы. Кирхгофф заңдылығы.

ӘДЕБИЕТТЕР:

Негізгі әдебиеттер

1. Akhmetova S.O., Abilkasova S. O. Physical and colloid chemistry [Текст/Электронный ресурс]. - Almaty : ATU, 2019. - 138 p. - ISBN 978-601-263-500-3

2. Құлажанов Қ.С., Таусарова Б.Р., Сүлейменова М.Ш., Абилкасова С.О. Физикалық химия: оқу құралы. - Алматы: АТУ, 2014. - 264 с. ISBN 978-601-263-285-9

3. Кулажанов К.С., Таусарова Б.Р., Сулейменова М.Ш. Физическая химия [текст] : учебное пособие. - Алматы : АТУ, 2016. - 353 с. - ISBN 978-601-263-341-2

4. Зарубин, Д.П. Физическая химия [Текст] : учебное пособие. - М : ИНФРА-М, 2019. - 474 с. - ISBN 978-5-16-010067-8.

5. Щукин, Е.Д. Коллоидная химия [текст] . - 7-е изд.,испр. и доп. - М : Юрайт, 2016. - 444 с. - ISBN 978-5-9916-6948-1

6. Физикалық химия [Текст/Электронный ресурс] : оқулық / Х. Қ. Оспанов, Д. Х. Қамысбаев, Е. Х. Абланова, Г. Х. Шәбікова. - Өнд., толық., 3-бас. - Алматы : Полиграфкомбинат, 2014. - 544 б. - ISBN 978-601-7427-45-0

7. Кудряшева, Н.С. Физическая и коллоидная химия [Текст/Электронный ресурс]: учебник / Н. С. Кудряшева, Л.Г. Бондарева. - 2-е изд.,перераб. и доп. - М : Юрайт, 2016. - 379 с. - (Серия: Бакалавр.Прикладной курс). - ISBN 978-5-9916-7159-0

8. Құлажанов Қ.С., Таусарова Б.Р.,Әбілқасова С.О. Коллоидтық химия [текст]: Оқу құралы. - Алматы : АТУ, 2017. - 285 б. - ISBN 978-601-263-383-2

Қосымша әдебиеттер:

1. Эткинс П.,де Паула Дж. Физикалық химия [Текст/Электронный ресурс] : Оқулық. 3-бөлім. Жылдамдықтар өзгеруінің механизмдері / Эткинс П.,де Паула Дж. ; Ауд. Е.Х. Абланова. - Алматы : Дәуір, 2014. - 512. - ISBN 978-601-217-498-4

2. Белик, В.В. Физическая и коллоидная химия [текст] : учебник. - 9-е изд., стер. - М : Академия, 2015. - 288 с. ISBN 978-5-4468-2311-6

3. Murzagaliyeva, M.G. Physical chemistry for mathematicians in tasks and questions [Текст] : educational manual / M. G. Murzagaliyeva, A. K. Zhusupova, A. S. Tusupbekova. - Almaty : Qazaq university, 2015. - 100 p. - ISBN 978-601-04-1570-6

4. Ospanova, Zh.B. Physical chemistry of foams and aerosols [Текст] : educational manual Ospanova Zh.B., K. B. Musabekov. - Almaty : Qazaq university, 2016. - 72 p. - SBN 978-601-04-2100-4.

Термодинамика –тепе-теңдік жүйелерде және тепе-теңдікке ауысу кезіндегі жылу мен жұмыстың өзара ауысуын зерттейтін ғылым. Химиялық термодинамика – термодинамикалық әдістер химиялық құбылыстарды: химиялық реакцияларды, ерітінділердегі фазалық ауысулар мен процесстерді талдау үшін қолданылатын физикалық химияның бөлімі.
Термодинамикада зерттеу объектісі **жүйе** болып табылады.

Жүйе дегеніміз қоршаған ортадан бөлініп тұрған жеке денелер немесе денелер тобы. Термодинамикалық жүйе дегеніміз денелер мен оның құрамындағы заттар арасындағы өтетін жылу алмасу.

Қоршаған ортамен өзара әрекеттесу сипатына байланысты жүйені ашық, тұйық және оқшауланған деп ажыратады.

Ашық жүйе – бұл қоршаған ортамен энергиясымен де, затымен де алмаса алатын жүйе.

Жабық жүйе деп, қоршаған ортамен затымен алмасуы жоқ, бірақ энергиясымен, жұмысымен алмаса алатын жүйені айтамыз.

Оқшауланған жүйе деп, сыртқы ортамен затымен де, энергиясымен де алмасуы жоқ жүйені айтамыз.

Параметрлері тікелей өлшенетіндер (температура, қысым, көлем, концентрация) ***параметр күйі*** деп аталады.

Тікелей өлшенбейтін параметрлер күйлері (ішкі энергия, энтальпия, энтропия, термодинамикалық потенциалдар) ***күй функциясы*** деп аталады.

Ішкі энергия (U) жүйенің энергиясының жалпы қорын сипаттайды. Ішкі энергияның өзгерісі (ΔU) жүйенің ішкі энергия өлшемінің соңғы (U_2) және бастапқы (U_1) күйінің айырымын көрсетеді:

$$\Delta U = U_2 - U_1$$

ΔU-ішкі энергия өзгерісі. Ішкі энергияның шексіз аз өзгерісін dU деп белгілейді.

Энтальпия (H) – бұл жүйе тұрақты қысымда болғандағы энергия және сандық жағынан ішкі энергия U мен потенциалды энергия pV қосындысына тең.

$$H = U + pV$$

Энтальпия өзгерісі процесстің өту жолына тәуелсіз, ал бастапқы және соңғы жағдайларына тәуелді. $\Delta H = H_{соңғы} - H_{бастапқы}$

Жүйеден сыртқы ортаға энергияның берілуі және керісінше жылу (Q) және жұмыс (А) арқылы іске асады.

Молекулалардың хаостық қозғалысы салдарынан жүйенің бір бөлігінен екіншісіне энергияның берілу формасы ***жылу*** деп аталады.

Жұмыс – жүйеден қоршаған ортаға энергия берілу формасы және керісінше жұмыс өлшемі берілген энергияның сандық сипаттамасы.

Жұмыстың жылудан айырмашылығы жұмыс кезінде энергия молекулалардың реттелген қозғалысы арқылы беріледі.

Термодинамиканың бірінші заңы

Термодинамиканың бірінші заңы (бірінші бастамасы) энергия сақталу заңы болып саналады. Ол: *оқшауланған жүйенің энергиясы тұрақты. Оқшауланбаған жүйеде энергия: а) қоршаған ортада жұмыстың жасалуынан; б) қоршаған ортамен жылу алмасудың болуы есебінен өзгереді деп пайымдайды.*

Жүйе күйінің соңғы өзгерісі үшін термодинамиканың бірінші заңы келесідей теңдеумен көрсетіледі:

$$Q = \Delta U + A$$

Q - Жүйеге берілген немесе жүйеден шығарылған жылу

ΔU - Ішкі энергия өзгерісі

А - Жүйемен істелген жалпы жұмыс.

Шексіз аз элементар процесстердің теңдеуі мынадай:

$$Q = dU + pdV$$

Бұл теңдеу термодинамиканың бірінші заңының математикалық өрнегі болып табылады. Жүйеге берілген немесе жүйеден шығарылған жылу мөлшері ішкі энергия өзгерісіне және жұмыс жасауға кетеді.

Әр түрлі термодинамикалық процесстер үшін термодинамиканың бірінші заңының математикалық теңдеуі келесідей түрде жазылады:

Изобаралық процесс (p = const)

$Q_p = dU + pdV = d(U + pV) = dH,$

$Q_p = \int_1^2 dH = \Delta H, \quad Q_p = \Delta H.$

Изобаралық процессте жылу мөлшері энтальпияның өзгеру шегі болып табылады.

Изохоралық процесс (V = const)

$Q_v = dU$

$Q_v = \int_1^2 dU = \Delta U, \quad Q_v = \Delta U.$

Жүйеге берілген жылу мөлшері ішкі энергия өзгерісіне жұмасалады. Бұл процессте ешбір жұмыс жүргізілуі мүмкін емес.

Изотермиялық процесс (T = const)

$$Q_T = A = pdV$$

Жүйеге тиісті жылу толығымен ұлғаю жұмысына айналады. 1моль газ үшін pV = RT болғанда, теңдеу келесідей түрде болады:

$$p = \frac{RT}{V}, \quad Q_T = RT\frac{dV}{V}$$

$$Q_T = RT\ln\frac{V_2}{V_1} = RT\ln\frac{P_1}{P_2} \quad R = const, \; RT = const \; p_1V_1 = p_2V_2$$

$$Q_T = RT\ln\frac{V_2}{V_1}$$

$$Q_T = RT\ln\frac{P_1}{P_2}$$

Изотермиялық процесте газдың ұлғаю жұмысы тек көлем мен қысымның кері пропорционалдық жағдайындағы өзгеруіне тәуелді және ол жұмыс жүйеге сырттан енгізілген жылу есебінен жүреді.

Гесс заңы

Химиялық реакцияның жылу эффектісі процестің жүру жолына тәуелсіз, ол тек жүйенің бастапқы және соңғы күйлерімен анықталады. Реакцияның жылу эффектісін стандартты жағдайда (p – 1,013 10^5 Па, T – 298 K) жану және түзілу жылуы бойынша есептейді.

Түзілу жылуы деп, 1,013 10^5 Па қысымда, температура 298 K жағдайда 1 моль берілген қосылыстың жай заттардан түзілуге жұмсалған жылу эффектісін айтамыз. Бұл кезде реакцияға қатысушылардың барлығы тұрақты агрегаттық күйде болуы шарт.

Жану жылуы деп, стандарты жағдайда 1 моль зат қарапайым заттарға дейін жанғанда бөлінетін жылуды айтамыз.

Гесс заңының бірінші салдары

Стандартты жағдайда реакцияның жылу эффектісісәйкесінше стехиометриялық коэффициенттерге көбейтілген реакция өнімдері мен бастапқы заттардың түзілу жылулар қосындыларының айырымына тең.

Гесс заңының бірінші салдары

Стандартты жағдайда реакцияның жылу эффектісісәйкесінше стехиометриялық коэффициенттерге көбейтілген бастапқы заттар мен реакция өнімдерінің жану жылулар қосындыларының айырымына тең.

Жылу сыйымдылық

Жылу сыйымдылық деп, затты қыздырған кезде жылу сіңіру қабілетін айтамыз. Меншікті және мольдік жылу сыйымдылықтар болады.

Меншікті жылу сыйымдылық деп заттың бірлік массасын 1 K-ге қыздыру үшін қажет жылу мөлшерін айтамыз.

Мольдік жылу сыйымдылық 1 моль затты 1 K-ге қыздыру үшін қажет жылу мөлшерін айтамыз.

Заттардың жылусыйымдылығы температураға тәуелді, сондықтан жылусыйымдылықтың мәні *нақтылы* және *орташа* болып бөлінеді. *Нақтылы жылу сыйымдылық* деп дененің алған шексіз аз жылу мөлшерінің сәйкесінше оның температура туындысына қатынасын айтамыз.

Орташа жылу сыйымдылық деп заттың 1 моль мөлшеріне енгізілген соңғы жылу мөлшерінің температура айрымына T_2-T_1 қатынасы.

Жылу эффектісінің температурадан тәуелділігі (Кирхгоф заңдылығы)

Химиялық реакция жылу эффектісінің температураға тәуелділігі Кирхгоф теңдеуімен интегралды түрде өрнектеледі:

$$\Delta H_T = \Delta H^0_{298} + \int_{298}^{T} \Delta C_P \, dT$$

ΔC_p мәні өнімдер мен бастапқы заттардың стехиометриялық коэффициенттері ескерілген жылу сыйымдылықтар қосындыларының айырымына тең.