


«ХІМІЧНА ТЕРМОДИНАМІКА»

МЕТОДИЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ

до опанування розділу «Хімічна термодинаміка» з
дисципліни «Фізична хімія пірометалургійних
процесів» за освітньо-професійною програмою
першого (бакалаврського) рівня «Металургія»
(спеціальність 136 Металургія)

*Рекомендовано Науково-методичною радою
ТОВ «ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
«МЕТІНВЕСТ ПОЛІТЕХНІКА»
(протокол № 5 від «03» травня 2024 р.)
Обов'язково до розміщення в репозитарії*

Запоріжжя 2024



Фізична хімія пірометалургійних процесів: методичні рекомендації до вивчення розділу «Хімічна термодинаміка» з дисципліни «Фізична хімія пірометалургійних процесів» за освітньо-професійною програмою першого (бакалаврського) рівня «Металургія» спеціальності 136 Металургія / Уклад. Єфімова В.Г., Запоріжжя, ТОВ «ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «МЕТІНВЕСТ ПОЛІТЕХНІКА», 2024. 29 с.

Методичні рекомендації до вивчення розділу «Хімічна термодинаміка» з дисципліни «Фізична хімія пірометалургійних процесів» включають теоретичний матеріал та практичні завдання, а також перелік основної та додаткової літератури, що сприяє опануванню розділу. Рекомендовано для студентів спеціальності 136 «Металургія» першого (бакалаврського) рівня освіти.

Самостійне електронне текстове мережеве видання

Затверджено на засіданні кафедри
природничо-наукових та
загальноінженерних дисциплін
Протокол № 12 від «22» березня
2024 р.

Узгоджено:
Секретар Редакційної ради


_____ Малій Х. В.
«26» квітня 2024 р.

© ТОВ «ТЕХНІЧНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ
«МЕТІНВЕСТ ПОЛІТЕХНІКА»,
2024



ЗМІСТ

Вступ	4
1. Основні поняття та визначення хімічної термодинаміки	5
2. Перший закон термодинаміки	8
3. Застосування першого закону термодинаміки	9
3.1 Розрахунок теплового ефекту хімічної реакції за стандартних умов	9
3.2 Зв'язок між тепловими ефектами при постійному тиску і об'ємі (ΔH та ΔU)	10
4 Теплоємність	12
4.1 Розрахунок теплоємності в результаті перебігу хімічного процесу за стандартних умов	13
5 Розрахунок теплового ефекту хімічного процесу за температури, що відрізняється від стандартної	14
6 Ентропія. Другий закон термодинаміки	16
6.1 Загальні поняття	16
6.2 Формулювання 2-го закону термодинаміки	17
6.3 Другий закон термодинаміки та його застосування до фізико-хімічних процесів	17
6.4 Розрахунок зміни ентропії при перебігу хімічного процесу за стандартних умов	19
6.5 Зміна ентропії хімічного процесу при температурі, що відрізняється від стандартної реакції	19
7 Термодинамічні потенціали. Критерії напрямку самочинних процесів	21
7.1 Зміна ізобарно-ізотермічного потенціалу в хімічному процесі	21
7.2 Розрахунок зміни ізобарно – ізотермічного потенціалу хімічного процесу при будь-якій заданій температурі	22
8 Вимоги до оформлення індивідуального завдання	24
9 Подання на перевірку індивідуальної роботи та критерії оцінювання	25
10 Список рекомендованої літератури	27
Додаток А. Вихідні дані до індивідуального завдання № 1	28
Додаток В. Приклади оформлення титульного аркушу індивідуального завдання	29



ВСТУП

Фізична хімія, що виникла на стику двох фундаментальних розділів природознавства – фізики та хімії, встановлює взаємозв'язок між перебігом хімічних реакцій і зміною енергії, а також вивчає проблемами будови речовини та її властивостями в різних станах. У процесі становлення фізичної хімії такі її розділи, як хімічна термодинаміка, кінетика та каталіз, квантова хімія, електрохімія, кристалохімія, хімія твердого стану, радіохімія та ін, виділилися в самостійні наукові напрямки. Будучи цілком самостійними, кожен з цих напрямків тісно пов'язаний з іншими областями хімічного знання і входить до певної ієрархічної системи хімічних наук, яка і утворює сучасну хімію. Єдиною універсальною зв'язкою цих наук є методи фізичної хімії.

Підготовка спеціалістів-інженерів включає освоєння ними всіх основних розділів фізичної хімії, у тому числі термодинаміку та різні модельні підходи, а також набуття навичок та умінь із застосування цих методів на практиці для вирішення хімічних та матеріалознавчих завдань.

У методичних вказівках послідовно та докладно викладаються основи рівноважної хімічної термодинаміки у повній відповідності до її сучасного стану.

Для студентів хімічних та нехімічних напрямів підготовки, а також для всіх, хто хоче самостійно опанувати рівноважну хімічну термодинаміку та зацікавлений у придбанні навичок щодо застосування цих знань до вирішення хімічних, металургічних та матеріалознавчих завдань.

Зміст підручника повністю відповідає силабусу дисципліни «Фізична хімія пірометалургійних процесів».

Основна мета методичних вказівок – підготувати студентів металургійного спрямування до фізико-хімічних розрахунків і на конкретних виробничих прикладах розкрити можливості застосування теорії на практиці.

Методичні вказівки охоплюють тему курсу фізичної хімії, що передбачені навчальною програмою, а саме хімічну термодинаміку.

На початку кожного розділу наведені стислі теоретичні відомості і основні формули, що використовуються при вирішенні задач за темою. Далі наводяться приклади використання цих законів і формул з необхідними методичними вказівками при рішенні типових задач, опрацювання яких полегшує роботу студентів при підготованні індивідуального завдання з курсу.



1 ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ ТА ВИЗНАЧЕННЯ ХІМІЧНОЇ ТЕРМОДИНАМІКИ

Термодинамічна система – це тіло, чи сукупність тіл, які знаходяться у взаємодії, можуть обмінюватись між собою речовиною та енергією, та умовно відокремлені від навколишнього середовища.

Приклад: земна куля, реакційний посуд.

Системи поділяються на гомогенні та гетерогенні. *Гомогенні* системи не мають поверхні поділу між складовими частинами. Складові частини такої системи не відрізняються хімічним складом і властивостями. Такі системи можна поділити на:

- однорідні, в яких всі властивості однакові і не має поверхні розділу між складовими частинами. Приклад: розчин солі KCl у воді;
- неоднорідні – це системи, в яких всі властивості однакові, але між складовими частинами є поверхня розділу. Приклад: шматки цукру рафінаду, шматки крейди CaCO_3 .

Гетерогенні, це системи, які складаються з частин, що відрізняються по хімічному складу та термодинамічним властивостям, складові частини такої системи мають поверхню розділу.

Приклад: крига + вода, пара + рідина, розплав + кристали, олія + вода.


За обміном речовиною та енергією з навколишніми середовищем системи поділяються:

- ізольовані, системи, які не обмінюються з навколишнім середовищем ні масою (речовиною) ні енергією. В природі таких систем не існує. Наближеним прикладом таких систем може бути термос з кавою;
- закриті, системи, які обмінюються з навколишнім середовищем енергією, але залишають постійну масу, тобто обмін речовиною не відбувається. Приклад: батареї опалення;
- відкриті системи, які обмінюються з навколишнім середовищем і масою і енергією. Приклад: басейн з водою.

Стан системи описують за допомогою *параметрів стану*, які характеризують будь яку властивість системи, в будь який момент часу. До параметрів стану можна віднести, об'єм (V), температуру (T), тиск (P) та кількість молів речовини (n).

Параметри стану поділяються:

- *екстенсивні* – які прямо пропорційні масі системи чи числу частинок у системі, тобто при складанні частин системи складаються. Приклад – об'єм, маса, ентропія, теплоємність;
- *інтенсивні* – які не залежать від кількості речовини та маси системи і при складанні частин системи вирівнюються. Приклад – температура, тиск.



Якщо зміна параметрів стану залежить тільки від початкового і кінцевого стану системи і не залежить від шляху, по якому здійснюється ця зміна, то такі параметри називаються – *функціями стану*. Приклад – температура, тиск, об'єм, внутрішня енергія, ентальпія і т.п.).

Функції переходу це функції, значення яких залежить від шляху, по якому відбувається зміна системи. Приклад робота (A), теплота (Q).

Якщо у системі хоча б один з параметрів змінюється з часом, то це означає, що у системі протікає *термодинамічний процес*.

Процеси поділяють:

➤ круговий (цикл) – при якому термодинамічна система, виходячи з початкового стану та перетерплює ряд змін вертається тим чи іншим шляхом в початковий стан. Зміна параметрів стану і функцій стану в такому процесі дорівнює нулеві;

➤ оборотній термодинамічний процес - це процес, при якому термодинамічна система, проходить ряд стадій, вертається в початковий стан, при цьому в навколишньому середовищі не залишається будь-яких змін;

➤ рівноважний – це процес, при якому система проходить крізь нескінченно велику кількість рівноважних станів.

Рівноважний стан – це стан системи, який зберігається незмінним з часом, при цьому цей стан не підтримується якимось зовнішнім процесом по відношенню до системи.

В залежності від умов проведення термодинамічного процесу відрізняють процеси:

- ізотермічні, що відбуваються за $T = \text{const}$;
- ізобаричні, що відбуваються за $P = \text{const}$;
- ізохоричні, що відбуваються за $V = \text{const}$;
- адіабатичні, що відбуваються $Q = \text{const}$.

Класична хімічна термодинаміка розглядає лише оборотні процеси. Незважаючи на це, в цих рамках можна з успіхом вирішувати всі технологічні задачі, спираючись на закони хімічної термодинаміки.

Параметри системи пов'язані між собою *рівнянням стану*.


$$f(P, V, T) = 0 \quad (1)$$

Ідеальний газ – це газ, де розмірами молекул, та силами взаємодії між ними можна нехтувати. (Це визначення є справедливим і для реальних газів при низьких тисках та високих температурах.)

Для ідеального газу рівняння стану представляється у вигляді рівняння Менделєєва – Клапейрона:

$$PV = nRT, \quad (2)$$

де P – тиск, (атм, Па); V – об'єм (м^3); n – кількість молів газу (1 моль містить $6,023 \times 10^{23}$ молекул); T – температура, К; R – універсальна газова стала.



Фізичний зміст універсальної газової сталої: це робота, яку здійснює 1 моль газу при розширенні, за умов $P=\text{const}$, за рахунок нагрівання його на 1К.

$$R = 8,31 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}} \text{ чи } R = 0,0821 \frac{\text{атм}}{\text{моль} \cdot \text{л}}.$$

Стан системи в хімічній термодинаміці прийнято порівнювати з властивостями системи в умовах, який прийнято називати стандартними.

Стандартні умови:

$$t = 25 \text{ } ^\circ\text{C}, T = 298,15 \text{ К}$$

$$P = 1 \text{ атм}, 1,013 \cdot 10^5 \text{ Па}; 760 \text{ мм рт ст.}$$

2 ПЕРШИЙ ЗАКОН ТЕРМОДИНАМІКИ

Енергія – це міра здатності системи здійснювати роботу; загальна якісна міра руху і взаємодії матерії. Енергія є невід'ємною властивістю матерії.

Внутрішня енергія системи (ΔU) – це кінетична енергія всіх частинок системи /молекул, атомів, електронів тощо/ та потенціальна енергія їх взаємодії. Це спільний запас енергії системи в цілому. Вона є функцією стану та екстенсивною величиною. Має одиниці виміру $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$.

Форми передачі енергії можуть бути поділені на дві групи:

- теплота – це форма передачі енергії, за рахунок хаотичного руху молекул;
- робота – це форма передачі енергії, яка пов'язана з упорядкованим рухом молекул.

Перший закон термодинаміки є постулатом, він не може бути виведений з будь-яких загальних положень чи бути доведеним більш логічним шляхом. Істина цього постулату підтверджується тим, що не один з його наслідків не знаходить з протиріч опитом. Перший закон термодинаміки встановлює співвідношення між теплотою, роботою і зміною внутрішньої енергії системи.

- ✓ Енергія не зникає без сліду і не виникає з нічого, а тільки переходить з одного виду в інший в еквівалентній кількості.
- ✓ В будь-якій ізольованій системі загальний запас енергії зберігається незмінним.
- ✓ Вічний двигун першого роду, неможливий. Тобто неможливо створити машину періодичної дії, яка би давала роботу не витрачаючи енергію.
- ✓ Теплота, надана системі, витрачається на роботу і збільшення внутрішньої енергії.

Аналітичний вираз 1-го закону термодинаміки має вигляд:

$$Q = \Delta U + A, \quad (3)$$

3 ЗАСТОСУВАННЯ ПЕРШОГО ЗАКОНУ ТЕРМОДИНАМІКИ

Тепловий ефект хімічної реакції – це теплота, яка виділяється чи поглинається в результаті перебігу до кінця хімічної реакції при $P = \text{const}$ дорівнює зміні ентальпії системи (ΔH), а за умов $V = \text{const}$ – зміні внутрішньої енергії системи (ΔU), при цьому мається на увазі, що продукти реакції мають таку ж саму температуру як і вихідні речовини.

Оскільки в термодинаміці прийнято вважати теплоту, яку поглинула система додатною, то:

$\Delta H > 0$ ендотермічна реакція (теплота поглинається);

$\Delta H < 0$ екзотермічна реакція (теплота виділяється).

3.1 Розрахунок теплового ефекту хімічної реакції за стандартних умов

Стандартна теплота утворення хімічної сполуки – це тепловий ефект реакції утворення 1 - го моля речовини з простих речовин за стандартних умов (298 K , $1,013 \times 10^5 \text{ Па}$). При цьому всі учасники реакції повинні бути в стійких агрегатних станах при даній температурі і тиску.

В більшості своїх випадках реакції утворення хімічних сполук з простих речовин не можуть бути експериментально здійснені.

Позначення $\Delta H_{f,298}^0$ $\left[\frac{\text{кДж}}{\text{моль}} \right]$. Верхній індекс (0) – позначає стандартний стан. Нижній (f) – початкова буква слова formation /утворення/.

З визначення «теплота утворення» витікає, що теплоти утворення простих речовин дорівнюють нулеві. Так, для $\Delta H_{f,298}^0 \text{Cl}_2 = 0 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$. Але

для атомарного хлору $\Delta H_{f,298}^0 \text{Cl} = 0 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$, тобто означає, що для

утворення атомарного хлору з молекулярного потребує витрати енергії.

Так утворенню $\text{MgSO}_{4(\text{ТВ})}$ буде відповідати реакція



Якщо в хімічній системі перебігає хімічний процес:



то тепловий ефект буде визначатися рівнянням:

$$\begin{aligned} \Delta H_{298}^0 &= (e \cdot \Delta H_{f,298}^0 E + f \cdot \Delta H_{f,298}^0 F) - (a \cdot \Delta H_{f,298}^0 A + b \cdot \Delta H_{f,298}^0 B) \\ \Delta H_{298}^0 &= \sum (n_i \Delta H_{f,298}^0 i)_{\text{пр.}} - \sum (n_i \Delta H_{f,298}^0 i)_{\text{вих.р.}} \end{aligned} \quad (5)$$

де $(\Delta H_{f,298}^0 E, \Delta H_{f,298}^0 F)$ – теплоти утворення вихідних речовин;
 $(\Delta H_{f,298}^0 A, \Delta H_{f,298}^0 B)$ – теплоти утворення продуктів реакції; a, b, e, f –
 стехіометричні коефіцієнти в рівнянні хімічної реакції.

Таким чином, тепловий ефект хімічної реакції дорівнює алгебраїчній сумі теплот утворення продуктів реакції мінус алгебраїчна сума теплот утворення вихідних речовин.

Теплоти утворення хімічних сполук наведені у довідниках за стандартних умов.

Приклад 1.

Для хімічної реакції $MnO_{2(кр.)} + 2C_{(графіт)} \rightarrow 2CO_{(г.)} + Mn_{(α)}$ визначити тепловий ефект за с.у.

Розв'язок. Згідно з рівнянням (5) запишемо:

$$\Delta H_{298}^0 = (2 \cdot \Delta H_{f,298}^0 CO_{(г.)} + 1 \cdot \Delta H_{f,298}^0 Mn_{(α)}) - (2 \cdot \Delta H_{f,298}^0 C_{(графіт)} + 1 \cdot \Delta H_{f,298}^0 MnO_{2(кр.)})$$

Для цього виписуємо дані з довідника, таблиця 1.1.

Таблиця 1– Теплоти утворення вихідних речовин та продуктів реакції за стандартних умов.

Речовина	$MnO_{2(кр.)}$	$C_{(графіт)}$	$CO_{(г.)}$	$Mn_{(α)}$
$\Delta H_{f,298}^0, \left[\frac{\text{кДж}}{\text{моль}} \right]$	-521,49	0	-110,53	0

$$\Delta H_{298}^0 = (2 \cdot (-110,53) + 1 \cdot 0) - (2 \cdot 0 + 1 \cdot (-521,49)) = 300,43 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$$

3.2 Зв'язок між тепловими ефектами при постійному тиску і об'ємі (ΔH та ΔU)

$$\Delta H = \Delta U + \Delta nRT \quad (6)$$

де $\Delta n = (e + f) - (a + b)$ - зміна кількості молів газоподібних речовин в результаті перебігу хімічного процесу; R – універсальна газова стала,
 $R = 8,31 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$; T – температура, К.

Аналіз цих рівнянь свідчить, що якщо:

$$\Delta n = 0, \text{ то } \Delta H = \Delta U \quad H_2O_{(г.)} + Fe_{(α)} \rightarrow FeO_{(кр.)} + H_2_{(г.)} \quad \Delta n = 1 - 1 = 0;$$

$$\Delta n > 0, \text{ то } \Delta H > \Delta U \quad FeCO_{3(тв.)} \rightarrow FeO_{(тв.)} + CO_{2(г.)} \quad \Delta n = 1 - 0 = 1;$$

$$\Delta n < 0, \text{ то } \Delta H < \Delta U \quad Al_{(кр.)} + O_{2(г.)} \rightarrow 2Al_2O_{3(кр. \text{ корунд})} \quad \Delta n = 0 - 1 = -1.$$

В хімії найчастіше застосовують ізобарні процеси. Тому далі ми будемо розглядати ізобарні теплові ефекти, враховуючи те, що все це стосується і ізохорних теплових ефектів.

Приклад 2.

Для хімічної реакції $\text{MnO}_{2(\text{кр.})} + 2\text{C}_{(\text{графіт})} \rightarrow 2\text{CO}_{(\text{г.})} + \text{Mn}_{(\alpha)}$ визначити зміну внутрішньої енергії при $T = 298\text{K}$.

Розв'язок. Згідно з рівнянням (6) запишемо, що $\Delta H = \Delta U + \Delta nRT$, звідси $\Delta U = \Delta H - \Delta nRT$.

З попередньої задачі випишемо, що $\Delta H_{298}^0 = 300,43 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$,

$$\Delta n = 2 - 0 = 2 \text{ Отже, } \Delta U = 300,43 - 2 \cdot 8,31 \cdot 10^{-3} \cdot 298 = 295,47 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}.$$

Приклад 3.

Для хімічної реакції $\text{MnO}_{2(\text{кр.})} + 2\text{C}_{(\text{графіт})} \rightarrow 2\text{CO}_{(\text{г.})} + \text{Mn}_{(\alpha)}$ визначити різницю між ізобарним та ізохорним тепловими ефектами при $T = 298\text{K}$.

Розв'язок. Користуючись рівнянням (6) запишемо, що

$$\Delta H - \Delta U = \Delta nRT = 2 \cdot 8,31 \cdot 10^{-3} \cdot 298 = 4,95 \text{ кДж}$$

Приклад 4.

Для хімічної реакції $\text{MnO}_{2(\text{кр.})} + 2\text{C}_{(\text{графіт})} \rightarrow 2\text{CO}_{(\text{г.})} + \text{Mn}_{(\alpha)}$ визначити кількість теплоти, яка виділяється при взаємодії 3 кг графіту з $\text{MnO}_{2(\text{кр.})}$ за $T = 298\text{K}$.

Кількість теплоти, яка виділяється при взаємодії 3 кг графіту з $\text{MnO}_{2(\text{кр.})}$ обчислюється як:

$$Q = n \cdot |\Delta H_{298}^0|, \quad (7)$$

Де n – кількість молів речовини $n = \frac{g}{M}$, де g – маса речовини, г; M – молярна маса речовини, $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$.

$$\text{Отже, } n = \frac{g_c}{M_c} = \frac{3000}{12} = 250 \text{ молів, звідси } Q = 250 \cdot 300,43 = 75107,5 \text{ кДж}$$

4 ТЕПЛОЄМНІСТЬ

Теплоємність – це кількість теплоти, що необхідна для нагрівання системи на один градус.

Істинна теплоємність – відношення безмежно малої кількості теплоти dQ , яка підведена до системи, до відповідно безмежно малої зміни температури.

$$C = \frac{dQ}{dT} \quad (8)$$

Середня теплоємність – відношення кількості підведеної теплоти в систему до викликаної цим зміни температури.

$$\bar{C} = \frac{Q}{T_2 - T_1} \quad (9)$$

Оскільки $dQ_p = \Delta H$ $dQ_v = \Delta U$, то істинна та середня теплоємності при

$$P = \text{const}: \bar{C}_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p \quad \bar{C} = \frac{\Delta H}{\Delta T}; \quad V = \text{const}: \bar{C}_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v \quad \bar{C} = \frac{\Delta U}{\Delta T}.$$

Взаємозв'язок середньої та істинної теплоємностей описується:

$$C = \frac{1}{T_2 - T_1} \int_{T_1}^{T_2} C_p dT \quad (10)$$

Теплоємність речовини – це кількість теплоти, яка необхідна для нагрівання певної кількості речовини на 1К.

Молярна теплоємність C_p має розмірність $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$, а питома

$$C'_p = \frac{\text{Дж}}{\text{г} \cdot \text{К}}, \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}.$$

Взаємозв'язок молярної та питомої теплоємностей визначається рівнянням:

$$C'_p = \frac{C_p}{M}. \quad (11)$$

Подальше підвищення температури від $T_{\text{кімн.}}$ до $T_{\text{пл.}}$ викликає безперервне збільшення теплоємності. Для нього емпірична залежність $C = f(T)$ виражається у вигляді ступеневих рядів:

$$C_p = a + bT + c'T^{-2} - \text{для неорганічних речовин} \quad (12)$$

Значення коефіцієнтів a , b , c' знайдені апроксимацією експериментально встановленої залежності теплоємності від температури, наводяться у довідниках фізико-хімічних величин та відповідають тільки певному температурному інтервалу.

Приклад 7.

Визначити молярну та питому теплоємності Al_2O_3 при $T=500K$.

Розв'язок. Відповідно рівнянню 12 при $T=500K$

$C_p Al_2O_3 = a + \epsilon T + c' T^{-2}$, виписуємо з довідника
 $a = 114,55$; $\epsilon = 12,89 \cdot 10^{-3}$; $c' = -34,31 \cdot 10^5$.

$$C_p = 114,55 + 12,89 \cdot 10^{-3} \cdot 500 + (-34,31 \cdot 10^5) \cdot 500^{-2} = 107,27 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$$

$$\text{Згідно з рівнянням (11) } C'_p = \frac{C_p}{M_{Al_2O_3}} = \frac{107,27}{102} = 1,05 \frac{\text{Дж}}{\text{г} \cdot \text{К}}.$$

4.1 Розрахунок теплоємності в результаті перебігу хімічного процесу за стандартних умов

Якщо в хімічній системі перебігає хімічний процес (4), то зміна теплоємності в результаті реакції визначається рівнянням:

$$\Delta C_{p,298}^0 = (\epsilon \cdot C_{p,298}^0 E + f \cdot C_{p,298}^0 F) - (a \cdot C_{p,298}^0 A + b \cdot C_{p,298}^0 B) \quad (13)$$
$$\Delta C_{p,298}^0 = \sum (n_i C_{p,298}^0 i)_{\text{прод.}} - \sum (n_i C_{p,298}^0 i)_{\text{вих.реч.}}$$

де $C_{p,298}^0 F$ та $C_{p,298}^0 E$ – стандартні ізобарні теплоємності продуктів реакції;
а $C_{p,298}^0 A$ та $C_{p,298}^0 B$ – стандартні ізобарні теплоємності вихідних речовин.

Таким чином, зміна теплоємності в результаті протікання хімічної реакції дорівнює сумі теплоємностей продуктів реакції мінус сума теплоємності вихідних речовин з урахуванням стехіометричних коефіцієнтів.

Зміна теплоємності в результаті перебігу хімічного процесу може бути:

$$\Delta C_{p,298}^0 > 0; \Delta C_{p,298}^0 < 0; \Delta C_{p,298}^0 = 0.$$

Приклад 9. Розрахувати за с.у. зміну теплоємності в результаті перебігу хімічного процесу $MnO_{2(кр.)} + C_{(графіт)} \rightarrow 2CO_{(г.)} + Mn_{(а)}$.

Розв'язок. Згідно з рівнянням (14) запишемо:

$$\Delta C_{p,298}^0 = (1 \cdot C_{p,298}^0 Mn_{(а)} + 2 \cdot C_{p,298}^0 CO_{(г.)}) - (1 \cdot C_{p,298}^0 MnO_{2(кр.)} + 2 \cdot C_{p,298}^0 C_{(графіт)}).$$

Для цього виписуємо дані з довідника, таблиця 2.

Таблиця 2 – Стандартні теплоємності вихідних речовин та продуктів реакції.

Речовина	$MnO_{2(кр.)}$	$C_{(графіт)}$	$CO_{(г.)}$	$Mn_{(а)}$
$\Delta C_{p,298}^0, \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$	54,02	8,54	29,14	26,28

$$\text{Отже, } \Delta C_{p,298}^0 = (1 \cdot 26,28 + 2 \cdot 29,14) - (1 \cdot 54,02 + 2 \cdot 8,54) = 13,46 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$$

5 РОЗРАХУНОК ТЕПЛОВОГО ЕФЕКТУ ХІМІЧНОГО ПРОЦЕСУ ЗА ТЕМПЕРАТУРИ, ЩО ВІДРІЗНЯЄТЬСЯ ВІД СТАНДАРТНОЇ

Залежність теплового ефекту хімічного процесу від температури ілюструє закон Кірхгофа.

$$\frac{d\Delta H^0}{dT} = \Delta C_p^0, \quad (14)$$

де $\frac{d\Delta H^0}{dT}$ – температурний коефіцієнт теплового ефекту.

Температурний коефіцієнт теплового ефекту процесу дорівнює зміні теплоємності системи в наслідок цього процесу.

Аналіз рівняння Кірхгофа

Якщо $\Delta C_p > 0$, то зі зростанням температури:

тепловий ефект ендотермічного процесу ($\Delta H^0 > 0$) – збільшується;
тепловий ефект екзотермічного процесу ($\Delta H^0 < 0$) – зменшується.
Зменшення температури чинить протилежну дію.

Якщо $\Delta C_p < 0$, то зі зростанням температури:

тепловий ефект ендотермічного процесу ($\Delta H^0 > 0$) – зменшується;
тепловий ефект екзотермічного процесу ($\Delta H^0 < 0$) – збільшується.
Зменшення температури чинить протилежну дію.

Якщо $\Delta C_p = 0$, то

тепловий ефект реакції не залежить від температури.

Якщо відомий тепловий ефект реакції за с.у. ΔH_{298}^0 , то за законом Кірхгофа можна розрахувати його для іншої температури:

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^T \Delta C_p^0 dT. \quad (15)$$

При наближених розрахунках:

1) за умови, що $\Delta C_p^0 = 0$, тоді $\Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0$ або


$$\Delta H_T = \Delta H_{298}^0 = \sum (n_i \Delta H_{f,298}^0)_{\text{пр.}} - \sum (n_i \Delta H_{f,298}^0)_{\text{вих.р.}}; \quad (16)$$

2) В невеликому інтервалі температур можна припустити, що $\Delta C_p^0 = \text{const}$:

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0 + \Delta C_{p,298}^0 (T - 298); \quad (17)$$

3) При точних розрахунках потрібно враховувати температурну залежність ΔC_p^0 від температури:

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^T (\Delta a + \Delta bT + \Delta cT^{-2}) dT. \quad (18)$$



Приклад 10. Розрахувати тепловий ефект хімічного процесу $\text{MnO}_{2(\text{кр.})} + \text{C}_{(\text{графіт})} \rightarrow 2\text{CO}_{(\text{г.})} + \text{Mn}_{(\alpha)}$ за умов, що $\Delta C_p = \text{const}$ при температурі 500 К.

Розв'язок. З попередніх прикладів випикуємо, що $\Delta H_{298}^0 = 300,43 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$, а $\Delta C_{p,298}^0 = 13,46 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$. Користуючись рівнянням (17), запишемо:

$$\Delta H_T^0 = 300,43 + 13,46 \cdot 10^{-3} (500 - 298) = 304,87 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$$

Звідси випливає, що тепловий ефект даного хімічного процесу збільшується з підвищенням температури.

6 ЕНТРОПІЯ. ДРУГИЙ ЗАКОН ТЕРМОДИНАМІКИ

У першому законі термодинаміки не дає жодних указівок про можливість хімічних процесів та їх напрямок, тому його замало для повного пояснення перебігу термодинамічного процесу. Цей висновок привів до встановлення другого закону термодинаміки, який визначає які з процесів в системі при заданих температурі, тиску і т.п. можуть протікати самочинно. 2-ий закон носить статистичний характер і має відношення до систем, які складаються з великої кількості частинок.

6.1 Загальні поняття

Процеси, які протікають у системі поділяються:

Самочинний - процес, який протікає без будь якого впливу зовні і приближує систему до стану рівноваги. Ці процеси термодинамічно є необоротними, тобто після їх протікання систему і навколишнє середовище неможливо одночасно повернути в вихідний стан. Ці процеси йдуть в бік вирівнювання інтенсивних параметрів (P, T, C).

Приклад: змішування двох розчинів з різною концентрацією речовин призводить до усереднення концентрацій; перехід теплоти від гарячого тіла до холодного.

Несамочинні – процеси, при протіканні яких потребується затрата енергії зовні і вони віддаляють систему від стану рівноваги.

Приклад: розклад CaCO_3 , стиснення газу.

Для будь-якої термодинамічної системи при даних умовах її існування завжди є деякий загальний критерій, який характеризує можливість, напрямок та межу протікання самодовільного термодинамічного процесу. Для ізольованих систем таким критерієм є термодинамічний параметр, який має назву **ентропія (S)**.

Ентропія – функція стану, екстенсивна величина, міра неупорядкованості системи. Чим більше неупорядкованість системи, тим більшим числом способів можна розкласти систему на складові частини. (молекули, атоми...)

$$S \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$$

Фізичний зміст ентропії.

Будь – яка форма енергії – механічна, хімічна може повністю переходити у теплоту. Однак зворотній перехід теплоти здійснити неможливо, оскільки частина теплової енергії розсіюється. Ентропія характеризує ступень незворотності енергетичних переходів під час перебігу фізико-хімічних процесів і є мірою розсіювання енергії, тобто вона характеризує ту частину загального запасу енергії, яка не може бути перетворена в корисну роботу.

6.2 Формулювання 2-го закону термодинаміки

- Теплота не може самодовільно переходити від більш холодного тіла до гарячого /постулат Клаузіуса/
- Процес, єдиним результатом якого є перетворення теплоти в роботу, неможливий /постулат Томпсона/
- Не можливо побудувати машину періодичної дії, яка б лише охолоджувала тепловий резервуар і виконувала роботу /1-ий постулат Планка/
- Будь яка форма енергії може повністю перетворитися в теплоту, але теплота перетворюється в інші види енергії лише частково /2-ий постулат Планка/
- В ізольованій системі при протіканні оборотних процесів ентропія не змінюється, а при протіканні необоротних процесів ентропія зростає.

Математичний вираз 2-го закону термодинаміки:

$$dS \geq \frac{\delta Q}{T} \begin{cases} \delta Q = 0 \\ dQ \geq 0 \end{cases} \quad \text{для ізольованої системи}$$

> - для необоротних процесів;

= - для оборотних.

- При перебігу самочинного процесу енергія, за рахунок якої здійснюється корисна робота, витрачається та її запас у системі зменшується. При цьому ентропія зростає до максимуму, тобто виражає ту частину енергії системи, яка не може бути перетворена у корисну роботу.

Значення ентропії речовин при с.у. наводяться у довідних термодинамічних величин (с. 72-89 стовпчик 2) і зветься стандартними

(S^0_{298}), одиниці виміру $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$.

6.3 Другий закон термодинаміки та його застосування до фізико-хімічних процесів

Зміна ентропії в фізичних процесах

1. Нагрівання при сталому тиску:

$$S_T = S^0_{298} + \int_{298}^T \frac{C_{P,298}^0 dT}{T}. \quad (19)$$

а) при розрахунках в невеликому інтервалі температур можна прийняти, що $C_{P,298}^0 = \text{const}$, тоді інтегрування цього рівняння дає:

$$S_T = S_{298}^0 + C_{P,298}^0 \ln \frac{T}{298}. \quad (20)$$

б) при точному розрахунку потрібно враховувати залежність теплоємності від температури:

$$S_T = S_{298}^0 + a \ln \frac{T_2}{298} + b(T_2 - 298) - \frac{c'}{2} \left(\frac{1}{T_2^2} - \frac{1}{298^2} \right) \quad \text{— для} \quad (21)$$

неорганічних речовин.

Приклад 12. Розрахувати наближену ентропію кристалічного магнію при $T = 700 \text{ K}$.

Розв'язок. Випишемо з довідника:

$$S_{298}^0 (\text{Mg}_{(\text{кр.})}) = 32,68 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{K}}; \quad C_{P,298}^0 (\text{Mg}_{(\text{кр.})}) = 24,89 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{K}}.$$

Користуючись рівнянням (21), запишемо:

$$S_T = 32,68 + 24,89 \ln \frac{700}{298} = 33,53 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{K}}.$$

2. Зміна ентропії при фазових переходах (агрегатних перетвореннях) чистих речовин

$$\Delta S_{\text{ф.п.}} = \frac{\Delta H_{\text{ф.п.}}}{T_{\text{ф.п.}}} \quad (22)$$

Ентропія при фазових переходах змінюється стрибкоподібно. При цьому, якщо фазовий перехід відбувається в напрямі зростання температури, ентропія також зростає ($\Delta S_{\text{ф.п.}} > 0$), а при зворотних процесах (конденсація, кристалізація) зменшується ($\Delta S_{\text{ф.п.}} < 0$).

Приклад 13. Визначити зміну ентропії при плавленні олова при $T = 505 \text{ K}$.

З попереднього прикладу випишемо, що $\Delta H_{\text{пл.}}^0 = 7,03 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$. У відповідності з рівнянням (22) знаходимо:

$$\Delta S_{\text{ф.п.}} = \frac{7,03 \cdot 10^3}{505} = 13,92 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{K}}.$$

3. Зміна ентропії в результаті ізотермічного розширення ідеального газу

$$T = \text{const} \quad \Delta S = R \ln \frac{V_2}{V_1} = R \ln \frac{P_2}{P_1} \quad (23)$$

$$V = \text{const} \quad \Delta S = C_V \ln \frac{T_2}{T_1} = C_V \ln \frac{P_2}{P_1} \quad (24)$$

$$P = \text{const} \quad \Delta S = C_P \ln \frac{T_2}{T_1} = C_P \ln \frac{V_2}{V_1} \quad (25)$$

6.4 Розрахунок зміни ентропії при перебігу хімічного процесу за стандартних умов

Якщо в системі перебігає хімічний процес (4), то зміна ентропії при перебігу хімічної реакції

$$\Delta S_{298}^0 = (e \cdot \Delta S_{298}^0 E + f \cdot \Delta S_{298}^0 F) - (a \cdot \Delta S_{298}^0 A + b \cdot \Delta S_{298}^0 B) \quad (26)$$

чи

$$\Delta S_{298}^0 = \sum (n_i \Delta S_{f,298}^0 i)_{\text{пр.}} - \sum (n_i \Delta S_{f,298}^0 i)_{\text{вих.р.}}$$

де $S_{298}^0 A$ і $S_{298}^0 B$ – стандартні ентропії вихідних речовин; $S_{298}^0 E$, $S_{298}^0 F$ – стандартні ентропії продуктів реакції; a , b , e , f – стехіометричні коефіцієнти в рівнянні хімічної реакції.

Таким чином, *зміна ентропії хімічної реакції дорівнює алгебраїчній сумі ентропій продуктів реакції мінус алгебраїчна сума вихідних речовин.*

Приклад 14. Для хімічної реакції $MnO_{2(кр.)} + 2C_{(графіт)} \rightarrow 2CO_{(г.)} + Mn_{(α)}$ визначити зміну ентропії за с.у.

Розв'язок. Згідно з рівнянням (1.34) запишемо:

$$\Delta S_{298}^0 = (1 \cdot S_{298}^0 Mn_{(кр.)} + 2 \cdot S_{298}^0 CO_{(г.)}) - (2 \cdot S_{298}^0 C_{(графіт)} + 1 \cdot S_{298}^0 MnO_{2(кр.)})$$

Для цього виписуємо дані з довідника (див. таблиця 3).

Таблиця 13 – Стандартні ентропії продуктів реакції та вихідних речовин.

Речовина	$MnO_{2(кр.)}$	$C_{(графіт)}$	$CO_{(г.)}$	$Mn_{(α)}$
S_{298}^0 $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$	53,14	5,74	97,55	32,01

$$\Delta S_{298}^0 = (1 \cdot 32,01 + 2 \cdot 97,55) - (2 \cdot 5,74 + 1 \cdot 53,14) = 362,49 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$$

Зміна ентропії внаслідок перебігу хімічної реакції може бути додатною ($\Delta S > 0$, ентропія системи в реакції зростає), від'ємною ($\Delta S < 0$, ентропія зменшується), дорівнювати нулю ($\Delta S = 0$, ентропія в ході реакції залишається сталою).

6.5 Зміна ентропії хімічного процесу при температурі, що відрізняється від стандартної реакції

У відповідності з другим законом термодинаміки для необоротних ізобарних процесів:

$$d\Delta S = \frac{d\Delta H^0}{T}, \quad (27)$$

де $d\Delta H^0 = \Delta C_p^0 dT$, тоді $d\Delta S^0 = \frac{\Delta C_p^0 dT}{T}$, звідки $\int_{T_1}^{T_2} d\Delta S^0 = \int_{T_1}^{T_2} \frac{\Delta C_p^0 dT}{T}$ або

$\Delta S_{T_2}^0 - \Delta S_{T_1}^0 = \int_{T_1}^{T_2} \frac{\Delta C_p^0 dT}{T}$. Якщо $T_1 = 298\text{K}$, то вираз для розрахунку ентропії

процесу, який відбувається при температурі T буде набувати наступного вигляду:

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \int_{298}^T \frac{\Delta C_p^0 dT}{T}. \quad (28)$$

При цьому, якщо

1) $\Delta C_p^0 \approx 0$ для конденсованих систем, то

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0; \quad (29)$$

2) $\Delta C_p^0 = \text{const}$, то

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \Delta C_{p,298}^0 \ln \frac{T}{298}; \quad (30)$$

3) $\Delta C_p^0 = f(T)$, то

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \int_{298}^T \frac{(\Delta a + \Delta bT + \Delta cT^{-2}) dT}{T}. \quad (31)$$

Приклад 15. Для хімічної реакції $\text{MnO}_{2(\text{кр.})} + 2\text{C}_{(\text{графіт})} \rightarrow 2\text{CO}_{(\text{г.})} + \text{Mn}_{(\alpha)}$ визначити зміну ентропії при $T = 500\text{K}$, за умов, що $\Delta C_p^0 = \text{const}$.

Розв'язок. З попередніх прикладів випишемо, що $\Delta S_{298}^0 = 362,49 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$, $\Delta C_{p,298}^0 = 13,46 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$. Скориставшись рівнянням (30), визначаємо:

$$\Delta S_T^0 = 362,49 + 13,46 \ln \frac{500}{298} = 369,45 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}.$$

7 ТЕРМОДИНАМІЧНІ ПОТЕНЦІАЛИ. КРИТЕРІЙ НАПРЯМКУ САМОЧИННИХ ПРОЦЕСІВ

При $P=\text{const}$ і $T=\text{const}$ критерієм напрямку процесу є ізобарно-ізотермічний потенціал або енергія Гіббса G .

Самочинні ізобарно-ізотермічні процеси перебігають в напрямку зменшення ізобарного потенціалу до стану рівноваги, яке відповідає мінімальному для даної системи значенню G (умови рівноваги $dG=0$).

7.1 Зміна ізобарно-ізотермічного потенціалу в хімічному процесі

Якщо в системі протікає процес (4), то зміна ізобарно-ізотермічного потенціалу буде визначатися як:

$$\Delta G_{298}^0 = (e \cdot \Delta G_{f,298}^0 E + f \cdot \Delta G_{f,298}^0 F) - (a \cdot \Delta G_{f,298}^0 A + b \cdot \Delta G_{f,298}^0 B) \quad (32)$$

$$\Delta G_{298}^0 = \sum (n_i \Delta G_{f,298}^0 i)_{\text{пр.}} - \sum (n_i \Delta G_{f,298}^0 i)_{\text{вих.р.}}$$

де $\Delta G_{f,298}^0 A$ і $\Delta G_{f,298}^0 B$ – стандартні енергії Гіббса (ізобарно-ізотермічні потенціали) утворення вихідних речовин; $\Delta G_{f,298}^0 E$ і $\Delta G_{f,298}^0 F$ – стандартні енергії Гіббса (ізобарно-ізотермічні потенціали) утворення продуктів реакції; a, b, e, f – стехіометричні коефіцієнти в рівнянні хімічної реакції.

Таким чином, зміна енергії Гіббса в результаті перебігу хімічної реакції дорівнює алгебраїчній сумі ізобарно-ізотермічних потенціалів утворення продуктів реакції мінус алгебраїчна сума ізобарно-ізотермічних потенціалів вихідних речовин.

Приклад 16. Для хімічної реакції $\text{MnO}_{2(\text{кр.})} + 2\text{C}_{(\text{графіт})} \rightarrow 2\text{CO}_{(\text{г.})} + \text{Mn}_{(\alpha)}$ визначити зміну енергії Гіббса за с.у.(напрямок перебігу процесу за с.у.)

Розв'язок. Згідно з формулою (1.40) запишемо:

$$\Delta G_{298}^0 = (1 \cdot \Delta G_{f,298}^0 \text{Mn}_{(\alpha)} + 2 \cdot \Delta G_{f,298}^0 \text{CO}_{(\text{г.})}) - (2 \cdot \Delta G_{f,298}^0 \text{C}_{(\text{графіт})} + 1 \cdot \Delta G_{f,298}^0 \text{MnO}_{2(\text{кр.})})$$

Для цього виписуємо дані з довідника (див. таблиця 1.4).

Таблиця 4 – Стандартна енергія Гіббса продуктів реакції та вихідних речовин.

Речовина	$\text{MnO}_{2(\text{кр.})}$	$\text{C}_{(\text{графіт})}$	$\text{CO}_{(\text{г.})}$	$\text{Mn}_{(\alpha)}$
$\Delta G_{298}^0 \left[\frac{\text{кДж}}{\text{моль}} \right]$	-466,68	0	-137,15	0

$$\Delta G_{298}^0 = (2 \cdot (-137,15) + 1 \cdot 0) - (2 \cdot 0 + 1 \cdot (-466,68)) = 192,38 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$$

Оскільки $\Delta G > 0$, то реакція перебігає в зворотному напрямку. Якщо при розрахунках:

$\Delta G_{x.p.}^0 < 0$ – це означає, що коли всі речовини, які беруть участь у хімічному процесі, знаходяться у стандартних умовах, реакція перебігає у прямому напрямку;

$\Delta G_{x.p.}^0 > 0$ – це означає, що прямий процес за даних умов неможливий, а вірогідне протікання зворотнього процесу.

$\Delta G_{x.p.}^0 = 0$ – це означає, що система знаходиться у стані рівноваги.

7.2 Розрахунок зміни ізобарно – ізотермічного потенціалу хімічного процесу при будь-якій заданій температурі

Виходячи з рівняння Гіббса – Гельмгольца $\Delta G_T^0 = \Delta H_T^0 - T\Delta S_T^0$, в свою чергу

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^T \Delta C_P dT, \quad \Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \int_{298}^T \frac{\Delta C_P dT}{T}, \quad \text{відповідно}$$

$$\Delta G_T^0 = \Delta H_{298}^0 - T\Delta S_{298}^0 + \int_{298}^T \Delta C_P dT - T \int_{298}^T \frac{\Delta C_P^0 dT}{T}. \quad (33)$$

1. $\Delta C_P^0 = 0$:

$$\Delta G_T^0 = \Delta H_{298}^0 - T\Delta S_{298}^0 \quad (\text{у конденсованих системах}); \quad (34)$$

2. $\Delta C_P^0 = \text{const}$, то $\Delta C_P^0 = \Delta C_{P,298}^0$

$$\Delta G_T^0 = \Delta H_{298}^0 - T\Delta S_{298}^0 + \Delta C_{P,298}^0 (t - 298) - T\Delta C_{P,298}^0 \ln \frac{T}{298}; \quad (35)$$

3. $\Delta C_P^0 = f(T)$, тоді

$$\Delta G_T^0 = \Delta H_{298}^0 - T\Delta S_{298}^0 + \int_{298}^T (\Delta a + \Delta b + C'T^{-2}) dT - T \int_{298}^T \frac{(\Delta a + \Delta b + C'T^{-2}) dT}{T} \quad (36)$$


Приклад 17. Для хімічного процесу

$\text{MnO}_{2(\text{кр.})} + 2\text{C}_{(\text{графіт})} \rightarrow 2\text{CO}_{(\text{г.})} + \text{Mn}_{(\alpha)}$ визначити зміну енергії Гіббса за умов, що $\Delta C_{P,298}^0 = 0$, та $\Delta C_P^0 = \text{const}$ за $T = 500 \text{ K}$.

Розв'язок. $\Delta S_{298}^0 = 362,49 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{K}}; \quad \Delta H_{298}^0 = 300,43 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}};$

$$\Delta C_{P,298}^0 = 13,46 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{K}}.$$

$\Delta C_{P,298}^0 = 0$. Згідно з рівнянням (34) запишемо:


$$\Delta G_{500}^0 = 300,43 - 500 \cdot 362,49 \cdot 10^{-3} = 119,18 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}.$$

$\Delta C_p^0 = \text{const}$, рівняння (35):

$$\begin{aligned} \Delta G_{500}^0 &= \Delta H_{298}^0 - T \Delta S_{298}^0 + \Delta C_{p,298}^0 (T - 298) - T \Delta C_{p,298}^0 \ln \frac{T}{298} = \\ &= 300,43 - 500 \cdot 364,91 \cdot 10^{-3} + 13,46 \cdot 10^{-3} (500 - 298) - 500 \cdot 13,46 \cdot 10^{-3} \ln \frac{500}{298} = \\ &= 121,22 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}. \end{aligned}$$



8 ВИМОГИ ДО ОФОРМЛЕННЯ ІНДІВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ

Мовою індивідуального завдання бакалавра є державна мова.

Передбачається виконання двох індивідуальних аналітично-розрахункових завдань, які формують індивідуальне завдання (по 15 балів за кожну частину).

Текст кожного індивідуального завдання магістра розміщується на сторінці книжкової орієнтації, яка обмежується полями: лівим – 30 мм, правим – 10 мм, верхнім – 20 мм, нижнім – 20 мм. Текст роботи друкується шрифтом Arial або Times New Roman, кеглем 14 з полуторним міжрядковим інтервалом. При оформленні роботи не використовується підкреслений шрифт.

Робота починається з титульного аркуша (додаток А). За титульним аркушем розміщують послідовно: зміст індивідуальної роботи та основні розрахунки.

Нумерація сторінок має бути наскрізною, починаючи з титульного аркуша і до останньої сторінки, арабськими цифрами у нижньому правому кутку сторінки без крапки в кінці. Титульний аркуш вважається першою сторінкою і номер на ньому не проставляється.



9 ПОДАННЯ НА ПЕРЕВІРКУ ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ

Контроль виконання, подання на перевірку і представлення закінченої індивідуальної роботи здійснюється на освітній платформі Moodle, для чого створюється поточна активність, куди здобувачі освіти прикріплюють підготовлену роботу відповідно до графіку подання матеріалів на перевірку і представлення закінченої індивідуальної роботи.

Протягом наступного тижня згідно семестрового графіку після отримання роботи викладач надає здобувачу освіти свої зауваження, коментарі, рекомендації, на підставі яких він виправляє роботу. Викладач оцінює тільки завершену роботу і виставляє оцінку у Moodle.

Підсумкова оцінка за виконання індивідуального завдання виставляється на підставі наступних критеріїв:


15 – 14 балів – проведені розрахунки та висновки до них свідчать про узагальнення і творче осмислення теоретичних основ та практичного вирішення проблеми. Сформульовані в роботі пропозиції обґрунтовані і достатні. Завдання термодинамічних розрахунків досягнуто. Оформлення роботи цілком відповідає вимогам;

13-12 балів – проведені розрахунки свідчать про узагальнення і творче осмислення теоретичних основ та практичного вирішення проблеми. Допущені незначні помилки у формулюванні висновків. В цілому завдання дослідження виконані і мета дослідження досягнута. Текст роботи викладений логічно, послідовно, науково-професійною державною мовою з коректним використанням професійної термінології. В оформленні роботи допущені незначні помилки;

11 – 10 - текст роботи свідчить про помилки в оволодінні навичками самостійного (під керівництвом викладача) проведення термодинамічних розрахунків, при формулюванні висновків допущені суттєві помилки. В основному завдання дослідження виконані і мета дослідження досягнута. Текст роботи викладений достатньо логічно і послідовно, але є помилки у використанні професійної термінології. В оформленні роботи є суттєві невідповідності вимогам;

8 – 8 - текст роботи свідчить про суттєві помилки в оволодінні навичками самостійного (під керівництвом викладача) проведення термодинамічних розрахунків. Завдання дослідження в основному виконані і мета дослідження досягнута. Текст роботи викладений недостатньо логічно і послідовно, містить стилістичні помилки, використання професійної термінології не завжди коректне. В оформленні роботи є суттєві невідповідності вимогам;

7 – 3 текст роботи свідчить про суттєві помилки в оволодінні навичками самостійного (під керівництвом викладача) проведення термодинамічних розрахунків. Сформульовані в роботі пропозиції не є



достатньо обґрунтованими і повними. Не всі завдання виконані, але мета дослідження в цілому досягнута. Текст роботи викладений недостатньо логічно і послідовно, містить стилістичні помилки, професійна термінологія не використовується або використовується некоректно. В оформленні роботи є суттєві невідповідності вимогам.

2 – 0 робота не представлена у встановлений термін (0 балів). Робота в цілому свідчить про відсутність навичок самостійного (під керівництвом викладача) проведення термодинамічних розрахунків. Оцінені можуть бути лише окремі елементи виконаного розрахунків. Текст роботи викладений недостатньо логічно і послідовно, містить стилістичні і граматичні помилки, професійна термінологія не використовується або використовується некоректно. Оформлення роботи не відповідає вимогам.



10 СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

Базові

1. Чумак В.Л. Фізична хімія/ В.Л. Чумак, С.В. Іванов//– К: Книжкове видавництво НАУ, 2007. – 645 с.
2. Мчедлов – Петросян М.О. Основи колоїдної хімії: фізико – хімія поверхневих явищ і дисперсних систем: підручник /М.О. Мчедлов – Петросян, В.І. Лебідь, О. М. Глазкова та ін.// – Х.: ХНУ ім.. В.Н. Карабіна, 2004. – 300 с.
3. Ковальчук, Є.П. Фізична хімія: Підручник. / Є.П. Ковальчук, О.В. Решетняк – Львів: Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2007. – 800 с.

Додаткові

4. Гомонай В.І. Фізична та колоїдна хімія : підручник для студ. вищ. навч. заклад. / В.І. Гомонай. – Вид. 3-тє. – Вінниця : Нова Книга, 2014. – 496 с.
5. Яцков М.В., Буденкова Н.М., Мисіна О.І. Фізична та колоїдна хімія. Навч. посібник. – Рівне : НУВГП, 2016 – 164с. 3. Фізична та колоїдна хімія : підручник / О. Д. Мельник, Т. І. Калин, Л. Я. Побережний [та ін.]. – Івано-Франківськ : ІФНТУНГ Факел, 2007. – 174 с.
6. Костришцький А.І., Фізична та колоїдна хімія. Навчальний посібник. [Текст] / А.І. Костришцький, О.Ю. Калінков, В.М. Тіщенко, О.М. Берегова. - Дніпропетровськ.: ЦУЛ, 2008. – 496с.
7. Слободянюк Р.Є. Фізична і колоїдна хімія. Навчальний посібник. [Текст] / Р.Є. Слободянюк. - Львів.: Компакт –ЛВ, 2007. – 336 с. 6. Кабачний В.І. Фізична і колоїдна хімія / Кабачний В.І., Осіпенко Л.К., Грицан Л.Д. та ін. – Х.: Прапор, Видавництво УкрФА, 1999. – 368 с.
8. Кабачний В.І. Фізична та колоїдна хімія. Збірник задач: Навч. посібник для студ. вищ. фармац. Закладів освіти / В.І. Кабачний, Л.К. Осіпенко, Л.Д. Грицан та ін.; За ред. В.І. Кабачного.– Вид-во НФАУ: Золоті сторінки, 2001.– 208 с.

Вихідні дані до індивідуального завдання № 1

Варі-ант	Реакція	T, K	Речовина
1	$\text{Pb}_{(\text{тв.})} + \frac{1}{2} \text{O}_{2(\text{г.})} \rightarrow \text{PbO}_{(\text{червона, тв.})}$	400	Al _(тв.)
2.	$\text{Pb}_{(\text{тв.})} + \text{Cl}_{2(\text{г.})} \rightarrow \text{PbCl}_{2(\text{тв.})}$	400	Ca _(β, тв.)
3.	$2\text{PbO}_{(\text{червона, тв.})} + \text{C}_{(\text{графіт, тв.})} \rightarrow 2\text{Pb}_{(\text{тв.})} + \text{CO}_{2(\text{г.})}$	500	CaF _{2(β, тв.)}
4.	$4\text{FeS}_{2(\alpha, \text{тв.})} + 11\text{O}_{2(\text{г.})} \rightarrow 2\text{Fe}_2\text{O}_{3(\text{тв.})} + 8\text{SO}_{2(\text{г.})}$	500	CoO _(тв.)
5.	$\text{Mn}_3\text{O}_4(\text{тв.}) + 4 \text{C}_{(\text{графіт, тв.})} \rightarrow 3 \text{Mn}_{(\alpha, \text{тв.})} + 4\text{CO}_{(\text{г.})}$	600	Cu _(тв.)
6.	$\text{Fe}_{(\alpha, \text{тв.})} + 2\text{O}_{2(\text{г.})} \rightarrow \text{Fe}_3\text{O}_4(\alpha, \text{тв.})$	800	Cu ₂ O _(тв.)
7.	$6\text{Fe}_2\text{O}_3(\text{тв.}) \rightarrow 4\text{Fe}_3\text{O}_4(\text{тв.}) + \text{O}_{2(\text{г.})}$	400	FeS _(γ, тв.)
8.	$2\text{FeO}_{(\text{тв.})} \rightarrow 2\text{Fe}_{(\alpha, \text{тв.})} + \text{O}_{2(\text{г.})}$	500	CO _(г.)
9.	$\text{H}_2\text{O}_{(\text{г.})} + \text{C}_{(\text{графіт, тв.})} \rightarrow \text{CO}_{(\text{г.})} + \text{H}_{2(\text{г.})}$	400	CaC _{2(β, тв.)}
10.	$\text{FeO}_{(\text{тв.})} + \text{C}_{(\text{графіт})} \rightarrow \text{CO}_{(\text{г.})} + \text{Fe}_{(\alpha, \text{тв.})}$	700	Co _(α, тв.)
11.	$4\text{Cu}_{(\text{тв.})} + \text{O}_{2(\text{г.})} \rightarrow 2\text{Cu}_2\text{O}_{(\text{тв.})}$	500	Fe _(α, тв.)
12.	$2\text{Ni}_{(\alpha, \text{тв.})} + \text{O}_{2(\text{г.})} \rightarrow 2\text{NiO}_{(\alpha, \text{тв.})}$	400	Fe ₃ C _(α, тв.)
13.	$\text{FeCO}_3(\text{тв.}) \rightarrow \text{FeO}_{(\text{тв.})} + \text{CO}_{2(\text{г.})}$	400	FeS _(α, тв.)
14.	$\text{Al}_{(\text{тв.})} + \text{O}_{2(\text{г.})} \rightarrow 2\text{Al}_2\text{O}_3(\text{тв.})$	500	FeCO _{3(тв.)}
15.	$\text{Ni}_{(\alpha, \text{тв.})} + \frac{1}{2} \text{S}_{2(\text{г.})} \rightarrow \text{NiS}_{(\text{тв.})}$	500	Pb (тв.)
16.	$\text{Ni}_{(\alpha, \text{тв.})} + \text{O}_{2(\text{г.})} \rightarrow 2\text{NiO}_{(\alpha, \text{тв.})}$	900	Pb (р.)
17.	$2\text{Mn}_{(\alpha)} + \text{O}_{2(\text{г.})} \rightarrow 2\text{MnO}_{(\text{тв.})}$	400	PbCl _{2(тв.)}
18.	$\text{Mn}_{(\alpha, \text{тв.})} + \text{O}_{2(\text{г.})} \rightarrow \text{Mn}_3\text{O}_4(\text{тв.})$	500	S (р.)
19.	$\text{Cr}_{(\text{р.})} + \text{O}_{2(\text{г.})} \rightarrow \text{Cr}_2\text{O}_3(\text{р.})$	600	SnCl _{2(тв.)}
20.	$\text{C}_{(\text{графіт, тв.})} + \frac{1}{2} \text{O}_{2(\text{г.})} \rightarrow \text{CO}_{(\text{г.})}$	400	Ni _(β, тв.)

ПРИКЛАД ОФОРМЛЕННЯ ТИТУЛЬНОГО ЛИСТА

ТОВ «ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «МЕТІНВЕСТ ПОЛІТЕХНІКА»
Кафедра природничо – наукових та загальноінженерних дисциплін

ІНДІВІДУАЛЬНЕ ЗАДАННЯ 1

за освітньою компонентою:

«Фізична хімія пірометалургійних процесів»:

Виконав(ла): здобувач(ка) вищої освіти
першого (бакаларського) рівня
групи _____

(Прізвище, ім'я, по батькові)

Перевірив: _____

(Посада, науковий ступінь, вчене звання)

(Прізвище, ім'я, по батькові)

Запоріжжя 202_