Определяне на посоката на химична реакция чрез компютърна обработка на термодинамични данни

Теменужка Хараланова, Марийка Петрова

Defining the direction of a chemical reaction by computer processing of thermodynamic data: *Depending on the conditions, chemical reactions can take different courses. In this work we have shown how students, using their knowledge in thermodynamics and information technologies, can quickly and easily calculate the thermodynamic function G (Gibs energy) and to assume theoretically the course of any chemical reaction with a known stichiometric equation in certain temperature and pressure.*

Key words: *chemical reaction, computerize, function of condition, Gibs energy, database*

ВЪВЕДЕНИЕ

В зависимост от условията химичните реакции могат да протичат в една или друга посока. Често химичните реакции протичат при изобарно-изотермични условия. При постоянна температура и налягане възможността за спонтанно протичане на даден химичен процес може да се определи като се използва функцията на Гибс (G). Тя намалява, когато протича процес ($\Delta G<0$) и добива минимална стойност при достигане на състоянието на термодинамично равновесие - $(dG)_{p,T}=0$, а G остава постоянна [1,2,7]. Функцията на Гибс се използва широко в химията, защото химиците най-често се интересуват от посоката на химичната промяна и от условията за равновесие, когато системата се намира при изобарно-изотермични условия. Например за една произволна реакция:

Изходни реагенти→ продукти на реакцията

ΔG=G(продукти) – G(реагенти).

При резултат $\Delta G<0$ реакцията има естествена тенденция да протича спонтанно в посока от изходните реагенти към продуктите на реакцията.

За да могат да се използват съвременните технологии е много важно при изграждане и използване на бази от данни свързани с числови преработки и пресмятания, да се изисква обвързването им с компютърна обработка. За да стане това е необходимо правилно ориентиране в данните с които ще се работи, избор на подходящ софтуер за алгоритмичното решение и на методите за математическа обработка (числения анализ на задачата). Функцията на Гибс (G) може да се използва като свързващо звено на информационните и химичните технологии.

ИЗЛОЖЕНИЕ

По дефиниция G=H-TS . Изчисляването на $(\Delta G)_{x.p.}$ може да се извърши по уравнението:

$$(\Delta G)_{x.p.}=(\Delta H)_{x.p.} - T(\Delta S)_{x.p.}, \qquad (1)$$

където $(\Delta H)_{x.p.}$ и $(\Delta S)_{x.p.}$ са съответно промяната на енталпията и на ентропията за химичната реакция. Начина на изчисляване на тези функции е дискутиран в предишни наши работи [5,6]. Удобството тук е, че може да се използва изградената вече термохимична таблица (таблица1) от данни в Microsoft Excel и числения анализ за пресмятане на енталпията и на ентропията.

таблица 1. Термохимична таблица

№	Вещество	ΔH0f,298kj/mol	S0298,J/(mol,K)	α	103β	10-5c'	cp,298,J/(mol,K)	k(темп. инт)	k(темп. инт)
1	Ag	0	42,69	23,97	5,28	-0,25	25,48	273	1234
2	Al	0	28,31	20,67	12,39	0	24,34	298	933
3	An	0	47,45	23,68	5,19	0	25,23	298	1336
4	B	0	5,87	6,14	18,4	0	11,96	273	1200

Така, изчисляйки ($\Delta G)_{x.p.}$ за дадена температура може теоретично да се предположи посоката на всяка химична реакция с известно стехиометрично уравнение на базата на справочни данни. Ако изразим най-общо коя и да е химична реакция с уравнението:

$$\nu_1 A_1 + \nu_2 A_2 \underset{\nu_1^{I}}{\overset{\nu_1}{\rightleftarrows}} \nu_1^{I} A_1^{I} + \nu_2^{I} A_2^{I}$$

за да изчислим ($\Delta G)_{x.p.}$ може да използваме следния алгоритъм:

- Изчисляваме $(\Delta H)_{x.p.}$, аналогично на изчислението показано в работа [5] ;

елементи от лявата страна на уравнението		коефициент пред елемента	$\Delta H^0_{f,298}$kj/mol	α	$10^3\beta$	$10^{-5}c'$
задайте елемент1	Al	2	0	20,67	12,39	0
задайте елемент2	O_2	1,5	0	31,46	3,39	-3,77
задайте елемент3						
задайте елемент4						
елементи от дясната страна на уравнението		коефициент пред елемента	$\Delta H^0_{f,298}$kj/mol	α	$10^3\beta$	$10^{-5}c'$
задайте елемент1	Al_2O_3	1	-1675	114,56	12,89	-34,31
задайте елемент2						
задайте елемент3						
задайте елемент4						
		ΔH^o_{298}=	-1675			
T_1	298		$\Delta\alpha$=	26,03		
T_2	900			$\Delta\beta$=	-16,975 *10^{-3}	
				$\Delta c'$=	-28,655 *10^5	
		ΔH^o_{900}=	-1671,8698			

фигура 1. Изчисляване изменението на енталпията за химична реакция

Задават се елементите от химичната реакция и коефициентите пред елементите като входни данни. Автоматично за посочените елементи се извличат стойностите по термохимичната таблица (таблица 1) и записът на всеки елемент се запълва хоризонтално. След посочване стойностите на T_1 и T_2 се изчислява и извежда стойността на $(\Delta H)_{x.p.}$.

- Изчисляваме $(\Delta S)_{x.p.}$, аналогично на изчисленията ,показани в работа [4] ;

елементи вляво на уравнението	елемент	коефициент пред елемента	S^0_{298}j/(mol.K)	α	$10^3\beta$	$10^{-5}c'$
задайте елемент1	Al	**2**	28,31	20,67	12,39	0
задайте елемент2	O_2	**1,5**	205,03	31,46	3,39	-3,77
задайте елемент3						
задайте елемент4						
елементи вдясно на уравнението	елемент	коефициент пред елемента	S^0_{298}j/(mol.K)	α	$10^3\beta$	$10^{-5}c'$
задайте елемент1	Al_2O_3	**1**	50,94	114,56	12,89	-34,31
задайте елемент2						
задайте елемент3						
задайте елемент4						
T1	298					
T2	900					
РЕЗУЛТАТИ		ΔS^o_{298}= **-313,225**		$\Delta\alpha$= **26,03**		
		$\Delta\beta$= -16,975	$*10^{-3}$			
		$\Delta c'$= **-28,655**	$*10^{-3}$			
		ΔS^o_{900}= -310,0948				

фигура 2. Изчисляване изменението на ентропията за химична реакция

В задаването на входните данни и извеждането на резултатаите се спазва аналогията от предходните изчисления. Задават се елементите от химичната реакция и коефициентите пред елементите като входни данни. Автоматично за посочените елементи се извличат стойностите по термохимичната таблица (таблица1) и записът на всеки елемент се запълва хоризонтално. След посочване стойностите на T_1 и T_2 се изчислява и извежда стойността на $(\Delta S)_{x.p.}$.

- Прилагаме за посочената по-горе реакция уравнение (1);

  И така, ако получим $(\Delta G)_{x.p.}<0$, то реакцията ще протича от ляво на дясно. Ако $(\Delta G)_{x.p.}>0$, то реакцията ще протича от дясно на ляво. А ако $(\Delta G)_{x.p.}=0$, то протичат както правата, така и обратната реакции, като и двете реакции имат една и съща скорост.

Логическите решения лесно могат да се обвържат с компютърната обработка по търсене на входните данни за елементите от двете страни на уравнението и извеждане на изходните резултати.

От съществено значение е да се анализира и управлява точността на пресметнатите резултати.

РЕЗУЛТАТИ И ОБСЪЖДАНЕ

В настоящата работа ние показваме как студентите използвайки знанията си по термодинамика и по информационни технологии, както и ползвайки известни справочни данни могат да пресметнат, освен топлинния ефект на химичната реакция[5] и изменението на ентропията[6] при същата реакция, но и $(\Delta G)_{x.p.}$ за

същите температури. На базата на всички тези изчисления студентите могат да предположат теоретично посоката на всяка химична реакция с известно стехиометрично уравнение.

Този тип разработки, при които една и съща база данни се използва многократно, е много удачен пример за включване на новите технологии при обучението на студенти. Пред тях нагледно се демонстрират предимствата от автоматизиране на изчислителния процес – бързина, удобство и минимизирана възможност за грешки. От друга страна се дава възможност да се осъзнае необходимостта от добро владеене на алгоритмичните похвати и техниките за обработка на информация. Обучаваните разбират, че за да се постигне правилен избор на подходящия софтуер, трябва да се знае софтуерното компютърно осигуряване на високо ниво и е необходимо да се следят всички новости в това направление.

Например:

За химичната реакция:

$$2Al + 1{,}5O_2 \underset{V_2}{\overset{V_1}{\rightleftarrows}} Al_2O_3$$

при T_1=298K и T_2=900K

Съгласно [3] $\Delta H^0_{298} = -1675kJ$, а $\Delta H_{900} = -1671{,}8698kJ$. Според работа [6] $\Delta S^0_{298} = -313{,}22J/mol.K$, а $\Delta S_{900} = -310{,}0948J/mol.K$. Така като се вземе в предвид и уравнение (1) изменението на енергията на Гибс при съответните ще бъде:

$$\Delta G^0_{298} = -1675000 - 298(-313{,}22) = -1665kJ$$

$$\Delta G_{900} = -16751869{,}8 - 900(-310{,}0948) = -1393kJ$$

Въз основа на получените резултати можем да предположим, че и при двете температури избраната реакция ще протича в права посока.

Когато се автоматизира процесът на изчисляване на функцията на Гибс (G), трябва да се следи много строго за мерните единици на всички учатващи елементи и при необходимост да се напарви съответното за тяхното изравняване.

Належащо е, численият анализ на изпълнението да интерпретира отговорите в съответствие с техния истински смисъл, за да се избегнат грешките. Добре е да се проиграе изпълнението в различните посоки на протичане и да се засекат изходните данни с очакваните резултати.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ:

1. Описания в работата алгоритъм дава възможност за теоретично предполагане на посоката на химична реакция на базата на справочни данни.
2. От получените стойности за ΔG при двете различни температури е направен извод за възможността за протичане на изследваната реакция – и при двете температури - правата реакция е възможна.
3. Добре е да се автоматизира процесът на изчисляване на ΔG, като се използва автоматизираният процес на изчисляване на функциите $(\Delta H)_{х.р.}$ и $(\Delta S)_{х.р.}$, съответно промяната на енталпията и на ентропията за химичната реакция.
4. Свързването на двете автоматизирани дейности в една използвайки функцията на Гибс (G), дава възможност за надграждане на знанията по информационни технологии, математика и информатика в конкретни практически условия. Знанията и уменията които се изискват са с

дефинирано реално приложение и необходимостта от тяхното овладяване става мотивирана и осъзната.

5. Настоящото приложение демонстрира изграждането на интердисциплинарни връзки на информационните технологии с химията. Нагледно се демонстрира модерно обучение по химия чрез използването на най-съвременни компютърни методи.
6. Microsoft Excel е едно приложение с огромна мощност и гъвкавост.[7] Ако се използва програмирането в Excel, разработката може да се усъвършенства и да претърпи редица подобрения и развитие.
7. Като друг вариант за разработка, може да се предложи реализацията на приложението на предпочитан от студентите програмен език.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Вълчева, Е., Е. Лазарова, С. Велева, Ц. Николов, А. Гиргинов, М. Христов, 1996, Сборник задачи по физикохимия, Разград.

[2] Дамянов, Д., 1994, Физикохимия том първи, Бургас.

[3] Роман, С., 2007, Да напишем макроси в Excel,София.

[4] Фрай, К., Microsoft Office Excel 2007, СофтПрес.

[5] Хараланова,Т., М. Петрова, 2010, Научни трудове, том 49, серия 9. 1, Русе.

[6] Хараланова,Т., М. Петрова, 2011, Научни трудове, том 50, серия 9. 1, Русе.

[7] Цветанова, А., С. Калчева, М. Мачкова, А. Попова, И. Каназирски, 2005, Практикум по Физикохимия и колоидна химия, София.

За контакти:

Теменужка Николова Хараланова – главен асистент доктор Катедра „ Химия и химични технологии” РУ „Ангел Кънчев”, Филиал Разград, Бул. „Априлско въстание” 47, 7200 гр. Разград, България E-mail: haralanova97@abv.bg

Марийка Георгиева Петрова – главен асистент Катедра „ Химия и химични технологии” РУ „Ангел Кънчев”, Филиал Разград, Бул. „Априлско въстание” 47, 7200 гр. Разград, България E-mail: maria.mat@abv.bg

Докладът е рецензиран.