

Изчисляване изменението на ентропията при химична реакция чрез компютърна обработка на справочни данни

Теменужка Хараланова, Марийка Петрова

Abstract: *Chemical reactions, in case of chemical balance, can be considered thermo dynamical reversible. The change of entropy, which is a function of the condition, can be calculated. The influence of the temperature on the changing of the entropy can be judged and also can be calculated with the help of a reference book data. The use of computer treatment limits the chance of errors and makes the calculating process fast and easy.*

Key words: *Chemical reaction, function of the condition, entropy, heat capacity, initial data, references.*

ВЪВЕДЕНИЕ

Първият принцип на термодинамиката дава връзката между погълнатата топлина и извършената работа от една система, без да поставя каквито и да е ограничения върху този процес. Наблюдения водят до обобщението, че процесите в природата винаги протичат в една предпочитана посока, при което системите се приближават към равновесното си състояние. Именно спонтанният характер на процесите в природата и ограничението превръщане на топлината в работа се третира от втория термодинамичен принцип – общата формулировка и математическият израз, на който изискват въвеждането на термодинамичната величина ентропия(S) [1,2].

Изменението на ентропията в една изолирана система зависи единствено от това, дали процесът е обратим или необратим. Като се има предвид също, че процесите в природата са необратими, въз основа на втория термодинамичен принцип може да се направи обобщеното заключение, че протичането на природните процеси винаги е свързано с увеличение на ентропията и че посоката на процеса винаги е тази, която води до увеличение на ентропията. Трябва също да се отбележи, че ако една система не е изолирана, в нея биха могли да протекат процеси, свързани с намаление на ентропията – например втечняване, изкристализиране и др. В тези случаи намалението на ентропията в системата се компенсира с увеличение на ентропията на средата, обграждаща системата. Това би могло да се докаже, ако системата и околността и се разглеждат като части на една изолирана система. В системи, които не са изолирани и обменят работа и топлина с околната среда, са възможни процеси, съпроводени както с нарастване, така и с намаляване на ентропията. Поради това за еднозначно решение на въпроса за посоката на процеса в неизолирана система стигаме до извода, че в нея трябва да се включат всички тела, участващи в обмена на енергия, така че тя да се превърне в изолирана. След това трябва да се пресметне промяната на ентропията в така образуваната изолирана система, която би настъпила при протичане на процеса [3,4]. Ако се окаже, че ентропията се увеличава, можем да заключим, че процесът е възможен. Обратното, ако процесът води до намаляване на ентропията – той е невъзможен.

Табличният процесор Microsoft Excel е предназначен за автоматизирано изграждане на различни видове данни, попълване, обработка и отпечатване на таблични документи. Тъй като разполага с множество вградени изчислителни възможности, средата на MS Excel става много подходяща за изчисляване на изменението на ентропията при химични реакции.

При компютърната обработка, базата данни се въвежда еднократно, а се използва многократно в изчислителния процес. В настоящото приложение ще

използваме база данни, която създадохме за други изчислителни дейности [5], защото тя съдържа същите вещества (таблица 1).

таблица 1

№	Вещество	$\Delta H^0_{298K}/\text{mol}$	$S^0_{298K}/(\text{mol}\cdot\text{K})$	α	$10^3\beta$	$10^5\epsilon$	$c_{p,298K}/(\text{mol}\cdot\text{K})$	к(темп. инт)	к(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	-	24,34	298	933
3	An	0	47,45	23,68	5,19	-	25,23	298	1336
4	B	0	5,87	6,14	18,4	-	11,96	273	1200
5	Ba	-	64,9	22,26	13,18	-	26,36	298	643
6	Ba	0	-	10,45	29,3	-	-	643	983
7	Bi	0	56,9	18,79	22,59	-	25,52	298	544
8	Br ₂	30,92	152,8	-	-	-	75,71		
9	Br ₂	1,897	245,35	37,2	0,71	-1,19	36	298	1500
10	C	0	2,38	9,12	13,22	-6,19	6,07	298	1200
11	C	0	5,74	17,15	4,27	-8,79	8,53	298	2300
12	Ca	121,3	41,62	22,2	13,9	-	26,28	273	713
13	Cl	0	165,09	23,14	-0,67	-0,96	21,84	298	2000
14	Cl ₂	0	223	36,69	1,05	-2,52	33,84	273	1500

Следователно, ако разполагаме с тази база данни ще си спестим изграждането на макета (структурата) на таблицата и остава да се реализират само следващите две стъпки от основната технология за създаване на таблици:

Въвеждане на формулите, чрез които се реализират изчисленията в таблицата;
Тестване на формулите при различни набори от данни, с цел проверка работоспособността на таблицата [7].

ИЗЛОЖЕНИЕ

Химичните реакции при условие на химично равновесие могат да се разглеждат като термодинамично обратими.

Промяната на ентропията, която е функция на състоянието, може да се пресметне по уравнението:

$$\Delta S_{\text{x.p.}}^0 = \sum_i \nu_i S_i^0$$

/1/

където ν_i са стехиометричните коефициенти (отрицателни за реагентите и положителни за продуктите на реакцията), а S_i^0 са абсолютните ентропии на всички компоненти на реакционната система при стандартни условия (298K и 0.1MPa).

Влиянието на температурата върху промяната на ентропията на химична реакция може да се оцени и пресметне с помоща на израза:

$$(\Delta S_{\text{x.p.}})_{T_2} = (\Delta S_{\text{x.p.}})_{T_1} + \int_{T_1}^{T_2} (\Delta C_p / T) dT$$

/2/

Решението на интеграла се определя от температурната функция на ΔC_p

$$\Delta C_p = \Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^2 + \Delta d \cdot T^3 + \Delta c' / T^2$$

/3/

Където $\Delta a = \sum \nu_i a_i$; $\Delta b = \sum \nu_i b_i$; $\Delta c = \sum \nu_i c_i$; $\Delta d = \sum \nu_i d_i$; $\Delta c' = \sum \nu_i c'_i$;

Стойностите на коефициентите a , b , c , d и c' за всички реагенти и продукти могат да се намерят в справочник. За неорганичните вещества обикновено $c=d=0$, а за органичните $c'=0$.

При компютърната реализация на пресмятанията се тръгва от химичната реакция. Като входни данни се задават елементите, които участват в химичната реакция и тези, които се получават. Входни данни са коефициентите пред съответните елементи, те участват в изчислителния процес и е задължително тяхното задаване от потребителя, както и стойностите на $T1$ и $T2$ (фигура 1).

елементи вляво на уравнението	елемент	коефициент пред елемента	$S^0_{298j}/(\text{mol.K})$	α	$10^3\beta$	$10^{-5}c'$
задайте елемент1	Al					
задайте елемент2	O ₂					
задайте елемент3						
задайте елемент4						
елементи вдясно на уравнението	елемент	коефициент пред елемента	$S^0_{298j}/(\text{mol.K})$	α	$10^3\beta$	$10^{-5}c'$
задайте елемент1	Al ₂ O ₃					
задайте елемент2						
задайте елемент3						
задайте елемент4						
T1						
T2						
РЕЗУЛТАТИ		$\Delta S^0_{298} =$		$\Delta \alpha =$		
		$\Delta \beta =$				
		$\Delta c' =$				
		$\Delta S^0_{900} =$				

фигура 1

За справочник използваме базата данни на веществата описани чрез MS Excel в таблица 1. След въвеждане стойностите на входните данни, автоматично от таблица 1 се вземат стойностите на посочените елементи и по предварително зададените формули се извършват необходимите изчисления. На работния екран се извеждат както стойностите от справочника, така и резултатите от пресмятанията (фигура 2), с точност която потребителят може си избере.

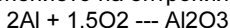
елементи вляво на уравнението	елемент	коефициент пред елемента	$S^0_{298j}/(\text{mol.K})$	α	$10^3\beta$	$10^{-5}c'$
задайте елемент1	Al	2	28,31	20,67	12,39	0
задайте елемент2	O ₂	1,5	205,03	31,46	3,39	-3,77

задайте елемент3						
задайте елемент4						
елементи вдясно на уравнението	елемент	коэффициент пред елемента	$S^{\circ}_{298j}/(\text{mol.K})$	α	$10^3\beta$	$10^{-5}c'$
задайте елемент1	Al ₂ O ₃	1	50,94	114,56	12,89	-34,31
задайте елемент2						
задайте елемент3						
задайте елемент4						
T1	298					
T2	900					
РЕЗУЛТАТИ		$\Delta S^{\circ}_{298} = -313,225$		$\Delta\alpha = 26,03$		
		$\Delta\beta = -16,975$		$\cdot 10^{-3}$		
		$\Delta c' = -28,655$		$\cdot 10^{-3}$		
		$\Delta S^{\circ}_{900} = -310,0948$				

фигура 2

РЕЗУЛТАТИ И ОБСЪЖДАНЕ

В нашата работа ние показваме как студентите използвайки знанията си по физикохимия и по информационни технологии, биха могли да превърнат справочните данни в база данни от табличен вид и да автоматизират процеса на пресмятане, освен на топлинния ефект на химичната реакция [5], но и на изменението на ентропията при същата реакция, за същите температури:



при $T_1=298\text{K}$ и $T_2=900\text{K}$

Съгласно уравнение (1) изменението на ентропията на реакцията при T_1 ще бъде:

$$\Delta S^{\circ}_{298} = \Delta S^{\circ}_{\text{Al}_2\text{O}_3} - 2\Delta S^{\circ}_{\text{Al}} - 1.5\Delta S^{\circ}_{\text{O}_2} = 50.94 - 2 \cdot 28.31 - 1.5 \cdot 205.03 = -313.225 \text{ J/mol.K}$$

За T различна от 298K съгласно уравнение (2), изменението на ентропията при реакцията ще бъде:

$$\Delta S^{\circ}_{900} = \Delta S^{\circ}_{298} + \int_{298}^{900} (\Delta\alpha + \Delta\beta T + \Delta c'/T^2) dT/T =$$

$$= \Delta S^{\circ}_{298} + \Delta\alpha \int_{298}^{900} dT/T + \Delta\beta \int_{298}^{900} T dT/T + \Delta c' \int_{298}^{900} dT/T^3 +$$

$$\Delta\alpha = \alpha \text{Al}_2\text{O}_3 - 2\alpha \text{Al} - 1.5\alpha \text{O}_2 = 26.03 \text{ J}/(\text{mol.K})$$

$$\Delta\beta = \beta \text{Al}_2\text{O}_3 - 2\beta \text{Al} - 1.5\beta \text{O}_2 = -16.975 \cdot 10^{-3} \text{ J}/(\text{mol.K})$$

$$\Delta c' = c' \text{Al}_2\text{O}_3 - 2c' \text{Al} - 1.5c' \text{O}_2 = -28.655 \cdot 10^{-3} \text{ J}/(\text{mol.K})$$

$$\Delta S^{\circ}_{900} = -310.0948 \text{ J}/(\text{mol.K})$$

Стойностите на α , β , c' се вземат от справочник, а в настоящата разработка автоматично се извеждат от предварително зададената база данни (таблица 1).

Необходимо е да се зададе контрол за коректност на входните данни и да се следи за вярното съответствие на мерните единици с които се работи. Добре е да зададете защита на формулите и базата данни с които се работи.

Въпреки, че MS Excel е едно приложение с огромна мощност и гъвкавост, ако има неща, които Excel не ви позволява да правите или не ви дава възможност да извършвате свободно през неговия потребителски интерфейс, е добре да се обърнете към програмирането в Excel [8].

ИЗВОДИ

1. На базата на данни от термохимични таблици е определено изменението на ентропията при конкретна химична реакция за две различни температури.

2. От получените стойности за ΔS при двете различни температури е направен извод за възможността за протичане на изследваната реакция – и при двете температури правата реакция не е възможна.

3. Описания в работата метод позволява да бъде определено изменението на ентропията на всяка химична реакция, за която има справочни данни.

4. Чрез компютърното автоматизиране на процеса по търсене, пресмятане на данните и извеждане на крайния резултат, изчислителният процес става привлекателен и приятен за студентите.

5. Процесът на тестване на приложението с различни входни данни провокира студентите да правят непрекъснати допълнителни подобрения и да овладяват нови похвати в света на информационните технологии.

ЛИТЕРАТУРА:

- [1.] Михайлова, Д., 1997, Физикохимия, София.
- [2.] Вълчева, Е., Е. Лазарова, С. Велева, Ц. Николов, А. Гиргинов, М. Христов, 1996, Сборник задачи по физикохимия, Разград.
- [3.] Дамянов, Д., 1994, Физикохимия том първи, Бургас.
- [4.] Цветанова, А., С. Калчева, М. Мачкова, А. Попова, И. Каназирски, 2005, Практикум по Физикохимия и колоидна химия, София.
- [5.] Хараланова, Т., М. Петрова, 2010, Научни трудове, том 49, серия 9.1, Русе.
- [6.] Кънчева, А., С. Парушева, М. Тодорова, Д. Колева, Я. Александрова, 2005, MS Excel теория и практика, Варна.
- [7.] Роман, С., 2007, Да напишем макроси в Excel, София.
- [8.] Фрай, К., Microsoft Office Excel 2007, СофтПрес.

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