

ISSN 1991-3494

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ

Х А Б А Р Ш Ы С Ы

ВЕСТНИК

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

THE BULLETIN

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

1944 ЖЫЛДАН ШЫҒА БАСТАҒАН
ИЗДАЕТСЯ С 1944 ГОДА
PUBLISHED SINCE 1944

4

АЛМАТЫ
АЛМАТЫ
ALMATY

2016

ШІЛДЕ
ИЮЛЬ
JULY

Б а с р е д а к т о р

ҚР ҰҒА академигі

М. Ж. Жұрынов

Р е д а к ц и я а л қ а с ы:

биол. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Айтхожина Н.А.**; тарих ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Байпақов К.М.**; биол. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Байтулин И.О.**; биол. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Берсімбаев Р.И.**; хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Газалиев А.М.**; а.-ш. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Дүйсенбеков З.Д.**; а.-ш. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Елешев Р.Е.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Қалменов Т.Ш.**; фил. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Нысанбаев А.Н.**; экон. ғ. докторы, проф., ҰҒА академигі **Сатубалдин С.С.**; тарих ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Әбжанов Х.М.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Әбішев М.Е.**; техн. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Әбішева З.С.**; техн. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Абсадықов Б.Н.** (бас редактордың орынбасары); а.-ш. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Баймұқанов Д.А.**; тарих ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Байтанаев Б.А.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Давлетов А.Е.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Қалимолдаев М.Н.**; геогр. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Медеу А.**; техн. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Мырхалықов Ж.У.**; биол. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Огарь Н.П.**; техн. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Таткеева Г.Г.**; а.-ш. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Үмбетаев И.**

Р е д а к ц и я к е ñ е с і:

Ресей ҒА академигі **Велихов Е.П.** (Ресей); Әзірбайжан ҰҒА академигі **Гашимзаде Ф.** (Әзірбайжан); Украинаның ҰҒА академигі **Гончарук В.В.** (Украина); Армения Республикасының ҰҒА академигі **Джрбашян Р.Т.** (Армения); Ресей ҒА академигі **Лаверов Н.П.** (Ресей); Молдова Республикасының ҰҒА академигі **Москаленко С.** (Молдова); Молдова Республикасының ҰҒА академигі **Рудик В.** (Молдова); Армения Республикасының ҰҒА академигі **Сагян А.С.** (Армения); Молдова Республикасының ҰҒА академигі **Тодераш И.** (Молдова); Тәжікстан Республикасының ҰҒА академигі **Якубова М.М.** (Тәжікстан); Молдова Республикасының ҰҒА корр. мүшесі **Лупашку Ф.** (Молдова); техн. ғ. докторы, профессор **Абиев Р.Ш.** (Ресей); техн. ғ. докторы, профессор **Аврамов К.В.** (Украина); мед. ғ. докторы, профессор **Юрген Аппель** (Германия); мед. ғ. докторы, профессор **Иозеф Банас** (Польша); техн. ғ. докторы, профессор **Гарабаджиу** (Ресей); доктор PhD, профессор **Ивахненко О.П.** (Ұлыбритания); хим. ғ. докторы, профессор **Изабелла Новак** (Польша); хим. ғ. докторы, профессор **Полещук О.Х.** (Ресей); хим. ғ. докторы, профессор **Поняев А.И.** (Ресей); профессор **Мохд Хасан Селамат** (Малайзия); техн. ғ. докторы, профессор **Хрипунов Г.С.** (Украина)

Главный редактор

академик НАН РК

М. Ж. Журинов

Редакционная коллегия:

доктор биол. наук, проф., академик НАН РК **Н.А. Айтхожина**; доктор ист. наук, проф., академик НАН РК **К.М. Байпаков**; доктор биол. наук, проф., академик НАН РК **И.О. Байтулин**; доктор биол. наук, проф., академик НАН РК **Р.И. Берсимбаев**; доктор хим. наук, проф., академик НАН РК **А.М. Газалиев**; доктор с.-х. наук, проф., академик НАН РК **З.Д. Дюсенбеков**; доктор сельскохоз. наук, проф., академик НАН РК **Р.Е. Елешев**; доктор физ.-мат. наук, проф., академик НАН РК **Т.Ш. Кальменов**; доктор фил. наук, проф., академик НАН РК **А.Н. Нысанбаев**; доктор экон. наук, проф., академик НАН РК **С.С. Сатубалдин**; доктор ист. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Х.М. Абжанов**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **М.Е. Абишев**; доктор техн. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **З.С. Абишева**; доктор техн. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Б.Н. Абсадыков** (заместитель главного редактора); доктор с.-х. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Д.А. Баймуканов**; доктор ист. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Б.А. Байтанаев**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **А.Е. Давлетов**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **М.Н. Калимолдаев**; доктор геогр. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **А. Медеу**; доктор техн. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Ж.У. Мырхалыков**; доктор биол. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Н.П. Огарь**; доктор техн. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Г.Г. Таткеева**; доктор сельскохоз. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **И. Умбетаев**

Редакционный совет:

академик РАН **Е.П. Велихов** (Россия); академик НАН Азербайджанской Республики **Ф. Гашимзаде** (Азербайджан); академик НАН Украины **В.В. Гончарук** (Украина); академик НАН Республики Армения **Р.Т. Джрбашян** (Армения); академик РАН **Н.П. Лаверов** (Россия); академик НАН Республики Молдова **С. Москаленко** (Молдова); академик НАН Республики Молдова **В. Рудик** (Молдова); академик НАН Республики Армения **А.С. Сагиян** (Армения); академик НАН Республики Молдова **И. Тодераш** (Молдова); академик НАН Республики Таджикистан **М.М. Якубова** (Таджикистан); член-корреспондент НАН Республики Молдова **Ф. Лупашку** (Молдова); д.т.н., профессор **Р.Ш. Абиев** (Россия); д.т.н., профессор **К.В. Аврамов** (Украина); д.м.н., профессор **Юрген Аппель** (Германия); д.м.н., профессор **Иозеф Банас** (Польша); д.т.н., профессор **А.В. Гарабаджиу** (Россия); доктор PhD, профессор **О.П. Ивахненко** (Великобритания); д.х.н., профессор **Изабелла Новак** (Польша); д.х.н., профессор **О.Х. Полещук** (Россия); д.х.н., профессор **А.И. Поняев** (Россия); профессор **Мохд Хасан Селамат** (Малайзия); д.т.н., профессор **Г.С. Хрипунов** (Украина)

«Вестник Национальной академии наук Республики Казахстан». ISSN 1991-3494

Собственник: РОО «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы)

Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации и архивов Министерства культуры и информации Республики Казахстан №5551-Ж, выданное 01.06.2006 г.

Периодичность: 6 раз в год

Тираж: 2000 экземпляров

Адрес редакции: 050010, г. Алматы, ул. Шевченко, 28, ком. 219, 220, тел. 272-13-19, 272-13-18.

www: nauka-nanrk.kz, bulletin-science.kz

© Национальная академия наук Республики Казахстан, 2016

Адрес типографии: ИП «Аруна», г. Алматы, ул. Муратбаева, 75

Editor in chief

M. Zh. Zhurinov,
academician of NAS RK

Editorial board:

N.A. Aitkhozhina, dr. biol. sc., prof., academician of NAS RK; **K.M. Baipakov**, dr. hist. sc., prof., academician of NAS RK; **I.O. Baitulin**, dr. biol. sc., prof., academician of NAS RK; **R.I. Bersimbayev**, dr. biol. sc., prof., academician of NAS RK; **A.M. Gazaliyev**, dr. chem. sc., prof., academician of NAS RK; **Z.D. Dyusenbekov**, dr. agr. sc., prof., academician of NAS RK; **R.Ye. Yeleshev**, dr. agr. sc., prof., academician of NAS RK; **T.Sh. Kalmenov**, dr. phys. math. sc., prof., academician of NAS RK; **A.N. Nysanbayev**, dr. phil. sc., prof., academician of NAS RK; **S.S. Satubaldin**, dr. econ. sc., prof., academician of NAS RK; **Kh.M. Abzhanov**, dr. hist. sc., prof., corr. member of NAS RK; **M.Ye. Abishev**, dr. phys. math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **Z.S. Abisheva**, dr. eng. sc., prof., corr. member of NAS RK; **B.N. Absadykov**, dr. eng. sc., prof., corr. member of NAS RK (deputy editor); **D.A. Baimukanov**, dr. agr. sc., prof., corr. member of NAS RK; **B.A. Baytanayev**, dr. hist. sc., prof., corr. member of NAS RK; **A.Ye. Davletov**, dr. phys. math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **M.N. Kalimoldayev**, dr. phys. math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **A. Medeu**, dr. geogr. sc., prof., corr. member of NAS RK; **Zh.U. Myrkhalykov**, dr. eng. sc., prof., corr. member of NAS RK; **N.P. Ogar**, dr. biol. sc., prof., corr. member of NAS RK; **G.G. Tatkeeva**, dr. eng. sc., prof., corr. member of NAS RK; **I. Umbetayev**, dr. agr. sc., prof., corr. member of NAS RK

Editorial staff:

E.P. Velikhov, RAS academician (Russia); **F. Gashimzade**, NAS Azerbaijan academician (Azerbaijan); **V.V. Goncharuk**, NAS Ukraine academician (Ukraine); **R.T. Dzhrbashian**, NAS Armenia academician (Armenia); **N.P. Laverov**, RAS academician (Russia); **S.Moskalenko**, NAS Moldova academician (Moldova); **V. Rudic**, NAS Moldova academician (Moldova); **A.S. Sagiyan**, NAS Armenia academician (Armenia); **I. Toderas**, NAS Moldova academician (Moldova); **M. Yakubova**, NAS Tajikistan academician (Tajikistan); **F. Lupaşcu**, NAS Moldova corr. member (Moldova); **R.Sh. Abiyev**, dr.eng.sc., prof. (Russia); **K.V. Avramov**, dr.eng.sc., prof. (Ukraine); **Jürgen Appel**, dr.med.sc., prof. (Germany); **Joseph Banas**, dr.med.sc., prof. (Poland); **A.V. Garabadzhiu**, dr.eng.sc., prof. (Russia); **O.P. Ivakhnenko**, PhD, prof. (UK); **Isabella Nowak**, dr.chem.sc., prof. (Poland); **O.Kh. Poleshchuk**, chem.sc., prof. (Russia); **A.I. Ponyaev**, dr.chem.sc., prof. (Russia); **Mohd Hassan Selamat**, prof. (Malaysia); **G.S. Khripunov**, dr.eng.sc., prof. (Ukraine)

Bulletin of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.

ISSN 1991-3494

Owner: RPA "National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan" (Almaty)

The certificate of registration of a periodic printed publication in the Committee of Information and Archives of the Ministry of Culture and Information of the Republic of Kazakhstan N 5551-Ж, issued 01.06.2006

Periodicity: 6 times a year

Circulation: 2000 copies

Editorial address: 28, Shevchenko str., of. 219, 220, Almaty, 050010, tel. 272-13-19, 272-13-18,

<http://nauka-nanrk.kz/>, <http://bulletin-science.kz>

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2016

Address of printing house: ST "Aruna", 75, Muratbayev str, Almaty

ON A CERTAIN DIRECTION OF CHEMICAL REACTIONS

K. A. Altai, G. Baymukasheva, Zh. Zhanat, B. K. Kuspanova, R. Nasirov

Atyrau State University H. Dosmukhamedov, Kazakhstan.

E-mail: Rnasirov.48@mail.ru

Key words: enthalpy, entropy, Helmholtz free energy, Gibbs free energy, standard terms and conditions.

Abstract. This article discusses the change in entropy and enthalpy at standard conditions, and the Gibbs equation can calculate the orientation of the chemical reaction.

УДК 536.775

ХИМИЯЛЫҚ РЕАКЦИЯЛАРДЫҢ ЖҰРУ БАҒЫТЫН АНЫҚТАЙТЫН ЖАЙЛАР

Қ. А. Алтай, Ғ. Баймұқашева, Ж. Жанат, Б. Қ. Құспанова, Р. Насиров

Х. Досмұхамедов атындағы Атырау мемлекеттік университеті, Қазақстан

Түйін сөздер: энтальпия, энтропия, Гельмгольц еркін энергиясы, Гиббстің еркін энергиясы, стандартты жай.

Аннотация. Мақалада химиялық реакциялар үшін стандартты жағдайда энтальпия және энтропия мәндерінің Гиббс теңдеуі бойынша (P,t-const.) бір мезгілде есептей білу, реакциялардың жүру жайын анықтауға өте керек екендігі сөз болады.

Жоғарғы оқу орындарында физикалық- химия пәнінен жылу динамикасы заңдарын химиялық процеске қолдану кезінде энтальпия және энтропия сияқты күй функциялары өзгерістерін түсінгеннен кейін, олардың химиялық реакция үшін бір мезгілдегі өзгерістерінің мәнін есептей білу казіргі заманғы технологиялық процестерді түсінудегі практикалық маңызы өте зор.

Стандартты жағдайда берілген заттың энтальпия, энтропия мәндерін пайдаланып, химиялық реакцияларды жүргізбей-ақ, олардың жүру бағытын есептеуге мүмкіндік аламыз. Ал, егер химиялық реакциялар кезінде энтропия өзгермесе, онда реакцияның жүру бағыты энтальпияның өзгерісімен анықталады және реакция өзінен-өзі энтальпияның кемуі бағытында жүреді. Егерде белгілі бір химиялық процесс жүрген кезде энергетикалық өзгеріс болмаса, онда химиялық реакцияның жүру бағыты энтропияның өсуі бағытында өзінен-өзі жүреді.

Көпшілік жағдайда, химиялық реакциялар кезінде, жүйенің энергиясы мен ретсіздік мөлшері – энтропия бір мезгілде өзгереді [1-4].

Міне, осының негізінде $V = \text{const}$, $T = \text{const}$ жағдайында жүйе күйінің жаңа функциясы болып табылатын F функциясы енгізілді және оны *еркін энергия* немесе *изохора-изотермиялық потенциал* деп атады. Бұл функцияны Г. Гельмгольц ашты, сондықтан оның құрметіне *Гельмгольцтің еркін* немесе *айырылмайтын энергиясы* деп атайды. Сонымен $V = \text{const}$, $T = \text{const}$ жағдайында бұл функция ішкі энергияны және энтропияны былайша байланыстырады:

$$F = U - TS.$$

Ал оның өзгерісі:

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

$$\text{==== 226 =====}$$

мұндағы $T\Delta S$ – ішкі энергияның пайдалы жұмысқа айналмайтын бөлігі, сондықтан оны Гельмгольц кезінде *айырылмайтын энергия* деп атады.

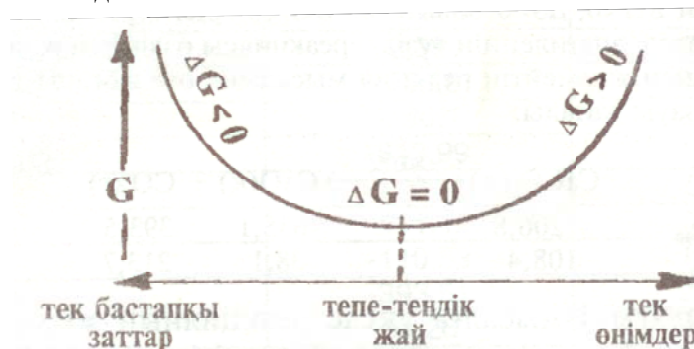
Ал $P = \text{const}$, $T = \text{const}$ жағдайында G -функциясы енгізілді және оны еркін энергия немесе *изобарлы-изотермиялық потенциал* деп атады. Бұл функцияны ашқан Д. Гиббс, сондықтан оны *Гиббстің еркін энергиясы* деп атайды. Сонымен $P = \text{const}$, $T = \text{const}$ жағдайында Гиббстің еркін энергиясы энтальпияны және энтропияны былайша байланыстырады:

$$G = H - TS.$$

Ал оның өзгерісі:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S.$$

Біз жоғарыда көптеген химиялық реакциялардың ашық ыдыста $P = \text{const}$, $T = \text{const}$ жағдайында жүретіндігін білдік, ал мұндай реакциялардың жүру мүмкіндігін Гиббстің еркін энергиясы арқылы түсіндіруге болады. Химиялық реакциялар кезінде энтальпияның да және энтропияның да өзгерісін ескеретін Гиббстің еркін энергиясы бойынша, реакциялардың өздігінен жүруі оның кемуі бағытында $\Delta G < 0$ болады. Егер реакция жүйесі өзінің тепе-теңдік жағдайына келсе (бұл газдар арасында және сұйық еріткіште жүретін реакциялар үшін де орындалады), онда G – өзінің ең төмен мәніне ие болады, ал оның өзгерісі $\Delta G = 0$ болады (1-сурет). Ал өздігінен жүрмейтін процестер үшін оның мәні $\Delta G > 0$ болады.



1-сурет – ΔG -ге байланысты реакция бағытының өзгеру схемасы

Гиббстің теңдеуі негізінде реакциялардың жүру мүмкіндігінің негізгі заңдылықтарын көрсетуге болады:

1) егер $\Delta H < 0$ және $\Delta S > 0$ болса, онда $\Delta G < 0$. Бұл жағдайда химиялық реакция өздігінен жылу бөле жүреді;

2) егер $\Delta H > 0$ және $|\Delta H| < T\Delta S$ болса, мұнда сіңірілетін жылу энтропияның өсуімен теңестіріледі. Реакция өнімдерінің газ түрінде түзілуі кезінде энтропияның өзгерісі өте көп болып, бұл эндотермиялық реакциялардың жүру мүмкіндігін анықтайды;

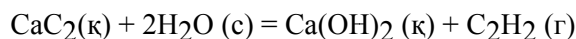
3) егер $\Delta H > 0$ және $|\Delta H| > T\Delta S$ болса, онда $\Delta G > 0$ оң шамаға тең болып, химиялық реакцияның өздігінен жүру мүмкіндігі жоқ екендігі шығады;

4) егер $\Delta G = 0$ болса, онда жүйе тепе-теңдік күйе болады.

Осы айтылған болжамдарға төмендегі мысалдар арқылы көз жеткізуге болады.

Мысалдар:

1. Өздігінен жүретін химиялық реакцияның мысалы ретінде кальций карбидінің сумен реакциясын алуға болады:



$\Delta H_{f,298}^0$	-59,8	-285,8	-985,1	-226,7
S_{298}^0	70	70	33,4	200,8

Мәліметші кестеден бұл реакцияның бастапқы және оның өнімдерінің төменгі тұсына олардың стандартты жағдайдағы жай заттардан түзілу энтальпиясы мәндерін жазамыз. Оны қалыпты жағдайда (298 К және 1 атмосфера) $\Delta H_{f,298}^0$ деп белгілейді (мұндағы f-formation – түзілу деген сөзді білдіреді). Бұның астына және S_{298}^0 мәндерін мәліметші кестесінен ала отырып жазамыз, өйткені

оларда Гиббстің теңдеуінен ΔG өзгерісін анықтау үшін өте қажет. Гесс заңы негізінде бұл реакция кезіндегі жылу эффектісін төмендегіше анықтаймыз:

$$\Delta H = \sum m \Delta H_{f,298}^0 - \sum n \Delta H_{f,298}^0 = \Sigma -985,1 - 226,7 - \Sigma -59,8 - 2 \cdot 285,8 = -580,4 \text{ кДж/моль.}$$

өнімдер бастапқы заттар

Ал, энтропия өзгерісі:

$$\Delta S = S^0_{\text{өнімдер}} - S^0_{\text{бастапқы заттар}} = 33,4 + 200,8 - (70 + 2 \cdot 70) = 24,2 \text{ Дж/моль} \cdot \text{К}$$

болады, демек энтропия (заттың ретсіздігі) өседі.

Енді Гиббс теңдеуі көмегімен еркін энергия өзгерісін анықтаймыз:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S = -580,4 - 298 \cdot 24,2 = -587 \text{ кДж/моль.}$$

Сонымен $\Delta H < 0$, $\Delta S > 0$ болып, ал ΔG өзгерісі теріс шамаға тең болып тұр. Олай болса, ацетиленнің түзілуі реакциясы бөлме температурасында өздігінен жүретін реакция.

2. Өздігінен жүрмейтін реакция мысалына өте жоғары температурада CaCO_3 ыдырауы жатады:

	$\text{CaCO}_3(\text{к}) \rightarrow \text{CaO}(\text{к}) + \text{CO}_2(\text{г})$		
$\Delta H_{f,298}^0$	-1206,8	-635,1	-393,5
S_{298}^0	108,4	38,1	213,7

Жоғарыдағы 1-мысалға ұқсас реакцияның жылу эффектісін $\Delta H = 178,2$ кДж/моль және энтропия өзгерісін $\Delta S = 143,4$ Дж/моль·К анықтаймыз. Осылардың негізінде Гиббстің еркін энергиясы мынаған тең болады:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S = 178,2 \text{ кДж/моль} - (298\text{К} - 0,143 \text{ кДж/моль} \cdot \text{К}) =$$

$$= 178,2 \text{ кДж/моль} - 42,9 \text{ кДж/моль} = 135,2 \text{ кДж/моль.}$$

Бұл реакция үшін $\Delta H > 0$, ал оның абсолют шамасы $|\Delta H| > T\Delta S$ болып тұр, демек $\Delta G > 0$, реакция нәтижесінде энтропия өскенде, оның шамасы әлдеқайда ΔH -тан кіші болып тұр. Сондықтан кальций карбонатының ыдырауы 25°C (298K) температурада өздігінен жүрмейді.

Екінші жағынан қандай температурада бұл реакция өздігінен жүре алады, егерде ΔH және ΔS шамалары температураға байланысты болмасын деп ұйғаралық. Бұл реакция өздігінен жүре алады, егерде $\Delta G < 0$ болса немесе $\Delta H - T\Delta S < 0$ болса. Соңғы теңдікті мына түрге келтірсек $T\Delta S > \Delta H$ немесе $T > \Delta H / \Delta S$. Біздің жағдайымызда реакцияның өздігінен жүретін температурасы $T > 178,2 \text{ кДж/моль} / 143 \text{ Дж/моль} \cdot \text{К} > 178,2 \cdot 10^3 \text{ Дж/моль} / 143 \text{ Дж/моль} \cdot \text{К} > 1106 \text{ К}$. Бұдан реакцияның өздігінен жүру температурасы 1106K .

3. Енді химиялық тепе-теңдікке температураның тигізетін әсерін қарастырайық.

Екі азоттың төрт тотығымен N_2O_4 тепе-теңдікте болатын азоттың қос тотығы толтырылған, бір-бірімен жалғастырған екі колба алайық (2-сурет). Бұл тепе-теңдік төменгі қайтымды реакция нәтижесінде қалыптасады.

	$2\text{NO}_2(\text{г}) \leftrightarrow \text{N}_2\text{O}_4(\text{г})$		
$\Delta H_{f,298}^0$, кДж/моль	33,85	9,66	
S_{298}^0 , Дж/моль·К	240,2	304,3	

Оның төменгі жағына реакцияның бастапқы және өнімінің астына термодинамикалық сипаттамаларын мәліметші кестені пайдаланып жазамыз. Азоттың қос тотығы NO_2 қара қоңыр түсті газ, ал N_2O_4 тотығы түссіз, екеуінің қоспасы әрқайсысының мөлшеріне қарай түрлі түсті, солғын сарыдан қара қоңыр түске дейін болады. NO_2 улы газ болғандықтан тәжірибені тартпа шкафта жүргізу керек. Азоттың қос тотығының балқу температурасы ($-11,2^\circ\text{C}$) болып, ал молекуласы парамагнитті қасиетке ие болады [5]. Оны зертханада мысқа қойылтылған азот қышқылымен әсер етіп аламыз.

Гесс заңын пайдаланып, стандарт жағдайдағы реакция жылу эффектісін анықтайық

$$\Delta H = \Delta H_{\text{өнім}} - 2\Delta H_{\text{бастапқы зат}} = -58,0 \text{ кДж.}$$

Ле-Шателье принципіне сәйкесті температура жоғарылағанда тепе-теңдік солға NO_2 түзілуіне қарай ығысады, бұның нәтижесінде колбадағы газ қоспасы түсі қызыл қоңырға ие болады және парамагнитті қасиеті өседі. Оны ЭПР қондырғысында да бақылауға болады. Бұнда дара электрон тығыздығы азотқа локалданған, сондықтанда ол димер түзуге өте қабілетті. Ал, бұған керісінше температура төмендесе тепе-теңдік оңға N_2O_4 түзілуіне қарай ығысады. Реакция бағыты Гиббстің еркін энергиясымен анықталады. Мәліметші кестеден алған мәліметті пайдаланып, энтропияның өзгерісін анықтаймыз

$$\Delta S = S_{\text{өнім}}^0 - 2S_{\text{бастапқы зат}}^0 = -176,5 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К.}$$

Энтальпия мен энтропияның өзгерістерін біле отырып, 298К – температурадағы изобаралық (Гиббстың) потенциалды есептеуге болады

$$\Delta G_{298} = 58,0 - (-298 \cdot 0,176) = -5,4 \text{ кДж.}$$

Гиббс функциясының теріс мәні 298К температурада тепе-теңдіктің оңға, димердің үлкен концентрациясына қарай ығысатынын көрсетеді. Бұл бағытта димердің түзілуіне байланысты ретсіздік (энтропия) азаяды. Енді газдар қоспасының тепе-теңдік шарты орындалатын температураны анықтайық, ол үшін $\Delta G = 0$ болсын, онда

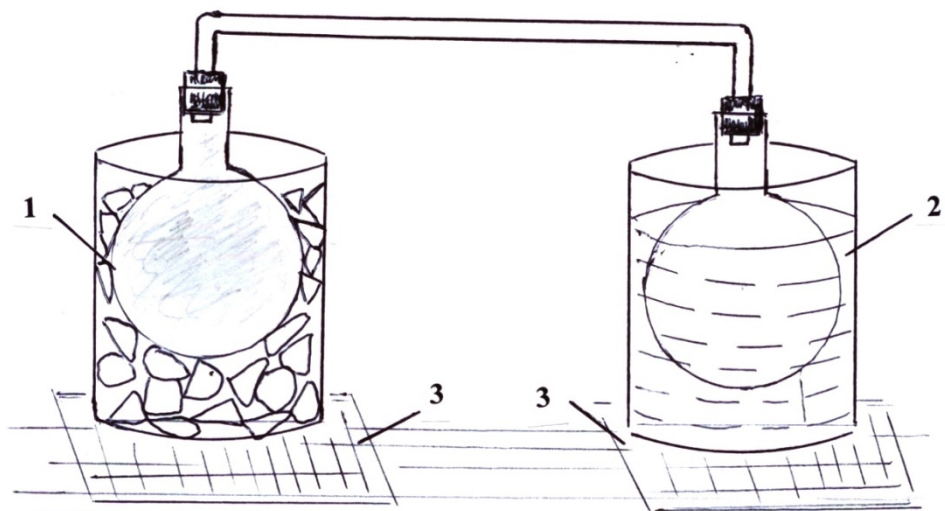
$$\Delta H = T\Delta S$$

$$T = \Delta H / \Delta S$$

$$T = -58,0 / 0,176 = 329 \text{ К (55}^\circ\text{C).}$$

55°C болатынын анықтаймыз. Міне осы температурада газ қоспасы тепе-теңдікте болады.

Бұл алынған мәліметтерге тәжірибе жасапта көз жеткізуге болады. Ол үшін 2-суреттегі қондырғыны 0°C салқындатылған және 100°C ысытылған суға салып ΔG_{273} , ΔG_{373} -ті есептендер. Химиялық тепе-теңдік әрбір ыдыста қалай ығысады?



2-сурет – Химиялық жүйедегі тепе-теңдікті зерттеуге арналған қондырғы:

1 – мұз сынықтары; 2 – қайнатылған су; 3 – асбест торлары

Ле-Шателье принципіне сүйене бақылған құбылысқа түсінік беріңдер.

ӘДЕБИЕТ

- [1] Базезин С.А., Ерофеев Б.В., Подобаев Н.И. Основы физической и коллоидной химии. – М.: Просвещение, 1975. – 397 с.
- [2] Насиров Р. Жалпы және аорганикалық химия. – Алматы: Ғылым, 2003. – 359 б.
- [3] Кудряшева Н.С., Бондарева Л.Г. Физическая химия. – М.: Юрайт, 2012. – 340 с.
- [4] Савиткин Н.И., Авдеев Я.Г., Батраков В.В., Горичев И.Г. Физическая химия: сборник вопросов и задач. – Ростов-на-Дону: Феникс, 2014. – 320 с.
- [5] Гринвуд Н., Эрншо А. Химия элементов. Лаборатория знаний. – I-т. – М.: Бинوم, 2008. – 607 с.

REFERENCES

- [1] Balezin S.A., Erofeev B.V., Podobaev N.I. Osnovy fizicheskoy i kolloidnoj himii. M.: Prosveshhenie, 1975. 397 p.
- [2] Nasirov R. Zhalpy zhәне anorganikalық himija. Almaty: Fylym, 2003. 359 p.
- [3] Kudrjasheva N.S., Bondareva L.G. Fizicheskaja himija. M.: Jurajt, 2012. 340 p.
- [4] Savitkin N.I., Avdeev Ja.G., Batrakov V.V., Gorichev I.G. Fizicheskaja himija: sbornik voprosov i zadach. Rostov-na-Donu: Feniks, 2014. 320 p.
- [5] Grinvud N., Jernsho A. Himija jelementov. Laboratorija znaniy. Vol. I. M.: Binom, 2008. 607 p.

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ НАПРАВЛЕННОСТИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

К. А. Алтай, Г. Баймукашева, Ж. Жанат, Б. К. Куспанова, Р. Насиров

Атырауский государственный университет им. Х. Досмухамедова, Казахстан

Ключевые слова: энтальпия, энтропия, свободная энергия Гельмгольца, свободная энергия Гиббса, стандартные условия.

Аннотация. В статье рассматривается изменение энтропии и энтальпии в стандартных условиях, и расчет направленности химической реакции по уравнению Гиббса.

Поступила 21.06.2016 г.

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see <http://www.elsevier.com/publishingethics> and <http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics>.

Submission of an article to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan implies that the described work has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see <http://www.elsevier.com/postingpolicy>), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the Cross Check originality detection service <http://www.elsevier.com/editors/plagdetect>.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

www.nauka-nanrk.kz

<http://www.bulletin-science.kz/index.php/ru/>

Редакторы *М. С. Ахметова, Д. С. Аленов*
Верстка на компьютере *Д. Н. Калкабековой*

Подписано в печать 07.07.2016.
Формат 60x881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
17,4 п.л. Тираж 2000. Заказ 4.