

# Фізична хімія сьогодні: базові визначення

# Предмет та задачі курсу фізичної хімії

- **Фізична хімія** – теоретичне підґрунтя хімії, що пояснює хімічні явища на підставі загальних принципів фізики. Фізична хімія надає інженеру-практику розуміння природи хімічних речовин і хімічних процесів, можливість кількісного розрахунку їх характеристик і, нарешті, можливість керувати властивостями хімічних речовин та перебігом технологічних процесів.
- **Предмет фізичної хімії** - системи, в яких перебігають хімічні перетворення, дослідження змін, що відбуваються в цих системах і супроводжуються переходом хімічної енергії в інші види енергії (теплову, електричну, випромінювання, і т.і.)
- **Головне завдання фізичної хімії** – прогнозування закономірностей перебігу хімічного процесу і кінцевого результату на підставі даних про будову і властивості молекул, тобто її можна позиціонувати як **теорію хімічних процесів**.
- **Фізична хімія** надає розуміння щодо застосування методів експериментальної фізики до задач хімії – сучасні інструментальні методи визначення характеристик хімічних речовин і хімічних процесів.

# Програма фізичної хімії: ВИТОКИ

Харьковскій Технологическій Институтъ  
ИМПЕРАТОРА АЛЕКСАНДРА III.

## СБОРНИКЪ ПРОГРАММЪ

всѣхъ читаемыхъ въ Институтѣ предметовъ.



ХАРЬКОВЪ  
Типографія и Литографія М. Зильбербергъ и С-ви.  
Донецъ-Захаржевская ул., с. д. № 6.

1909.



## ПРОГРАММА ПО ФИЗИКО-ХИМИИ.

1. *Элементы термодинамики.* Первое начало. Понятіе объ энергіи. Механической эквивалентъ тепла. Круговой процессъ. Внутренняя энергія идеальнаго газа. Направленіе процессовъ. Естественные процессы. Равновѣсные процессы: сжатіе газа подъ собственнымъ давленіемъ, изотермической переходъ тепла. Обратимые и необратимые процессы. Второе начало термодинамики. Энтропія. Измѣненіе энтропіи при обратимыхъ и необратимыхъ процессахъ. Понятіе о связанной и свободной энергіи. Уравненіе свободной энергіи.

2. *Стехиометрія газообразнаго состоянія.* Законы Мариотта-Бойля, Гей-Люссака, Дальтона и Авогадро. Газовая константа. Отступленія отъ указанныхъ законовъ. Кинетическая теорія газовъ. Скорость движенія газовыхъ частицъ. Собственный объемъ молекулъ и ихъ притяженіе. Уравненіе состоянія ванъ-деръ-Ваальса. Теплоемкость газовъ: зависимость ея отъ температуры, степени диссоціаціи. Теплоемкость газа при постоянномъ давленіи и постоянномъ объемѣ: соотношеніе между ними.

3. *Стехиометрія жидкостей.* Молекулярный вѣсъ жидкостей. Уравненіе Рамзая и Шильдса: ассоціированныя и неассоціированныя жидкости. Теплота испаренія. Внешняя работа при испареніи. Зависимость скрытаго тепла испаренія отъ температуры и давленія. Уравненіе Клаузіуса-Клапейрона. Измѣненіе упругости пара съ температурой. Критическія явленія. Три объема вещества. Связь между критическими константами и константами уравненія ванъ-деръ-Ваальса. Уравненіе соответственныхъ состояній. Приведенныя температуры, давленія и объемы. Одинаковость расширенія жидкостей при „соответственномъ“ нагрѣваніи. Вычисленіе удѣльныхъ вѣсовъ и объемовъ жидкостей при любыхъ температурахъ. Теплоемкости жидкостей. Правило Трутона о связи между скрытымъ тепломъ испаренія, молекулярнымъ вѣсомъ и абсолютной

# Розділи фізичної хімії :

- Хімічна термодинаміка
- Фазові рівноваги
- Розчини
- Електрохімія
- Хімічна кінетика
- Каталіз
- Фізико-хімічні методи досліджень
- Будова речовини

# Структура фізичної хімії

Термодинаміка

Кінетика

Будова речовини

- Методично курс фізичної хімії побудовано на базі трьох основних частин, які водночас відображають його внутрішню логіку і глибину відтворення властивостей хімічних систем:
- Хімічна термодинаміка (напрям перебігу процесів та опис хімічної рівноваги в системах різної складності залежно від зовнішніх умов),
- Хімічна кінетика (швидкість хімічних процесів та механізм взаємодії),
- Будова речовини (хімічний зв'язок, властивості молекул та конденсованих тіл) - ґрунтується на квантово-хімічних розрахунках.

# Класифікація речовин

Принциповою відміною стану речовин є поняття “**частинка**”, характер розташування яких зумовлює **агрегатний стан** речовини:

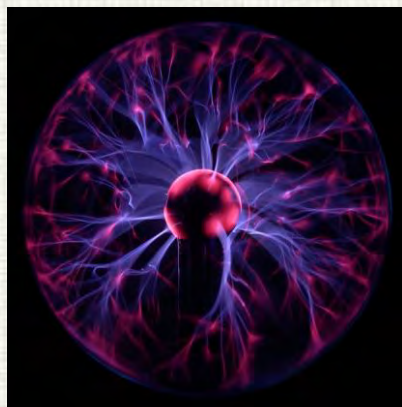
- **Газоподібний** – частинки розташовані на значній відстані та рухливі.
- **Рідина** – частинки розташовані поблизу одна до одної, але мають здатність до вільного пересування
- **Тверде тіло** – частинки зафіксовані одна біля одної і не мають здатності до пересування, коливаються біля деякого фіксованого стану
- До числа агрегатних станів залучають і стан **плазми**, до якого переходять гази за рахунок іонізації при підвищенні температури і фіксованому тиску. Особливістю такого стану є відсутність різкої межі переходу до плазменного стану.
- Існують і інші агрегатні стани.

# Класифікація речовин: приклади



Bromine solid and liquid

Bromine gas and liquid



плазма



# *Властивості речовин*

## **Фізичні і хімічні перетворення**

**Фізичні властивості** – властивості, що можуть бути виміряні без зміни природи речовини. Приклади: **колір, запах, густина**

**Інтенсивні властивості** – не залежать від кількості речовини (температура).

**Екстенсивні властивості** – залежать від кількості речовини (наприклад, маса).





# Визначення властивостей речовин

## запах

## колір



Електронний ніс **Cyranose 320**, розроблений компанією **Cyranose Sciences Inc.** з Пасадени (Каліфорнія) в 2000 р

# ***Властивості речовин***

## **Фізичні і хімічні перетворення**

***Фізичні перетворення*** – перетворення фізичних властивостей речовини

- В фізичних перетвореннях може змінюватись зовнішній вигляд, але не природа речовини.

Вода (крига) → Вода (рідина)

***Хімічні перетворення*** (хімічні реакції) – перетворення вихідних речовин у такі, що хімічно різняться від реагентів.

- Коли чисті кисень і водень взаємодіють, вони утворюють чисту воду.

# Класифікація хімічних систем

Хімічна система –  
сукупність речовин і  
процесів взаємодії в  
обмеженому об'ємі

**ВІДКРИТА**

$$\Delta m \neq 0$$

$$\Delta Q \neq 0$$

**ЗАКРИТА**

$$\Delta m = 0$$

$$\Delta Q \neq 0$$

**ІЗОЛЬОВАНА**

$$\Delta m = 0$$

$$\Delta Q = 0$$

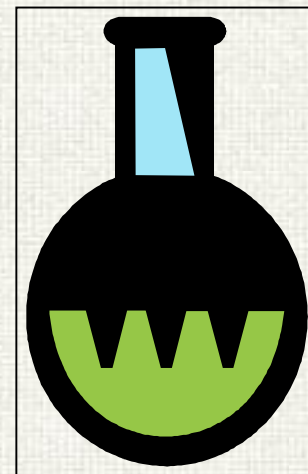
# ***Класифікація хімічних систем***



**Відкрита  
система**



**Закрита  
система**



**Ізольована  
система**

# Характеристики хімічних систем

- В будь який проміжок часу термодинамічна система характеризується сукупністю фізичних і хімічних властивостей, які визначають її стан.
- Охарактеризувати стан системи можна за допомогою **термодинамічних параметрів** : об'єм ( $V$ ), температура ( $T$ ), тиск ( $P$ ), концентрація ( $C$ ), теплоємність ( $C_p, C_v$ ) та ін.
- і **функцій стану** (внутрішня енергія ( $U$ ), ентальпія ( $H$ ), ентропія ( $S$ ), енергія Гіббса ( $G$ ) та ін.). До числа термодинамічних параметрів зазвичай відносять такі термодинамічні змінні, значення яких можна безпосередньо виміряти.
- **Функцією стану** називають таку термодинамічну змінну, значення якої однозначно визначається станом системи, але не залежить від шляху (історії, способу), яким система прийшла в даний стан. До числа функцій стану можна віднести і деякі термодинамічні параметри ( $V, P, T$ ).
- **Функцією процесу** називають таку термодинамічну змінну, значення якої залежить від маршруту, за яким система прийшла в даний стан (теплота, робота).

# Характеристики Хімічних систем

Параметри  
можуть бути виміряні

Маса  $m$ ,  
Температура  $T$ ,  
Тиск  $P$ ,  
Кількість речовини  $n$ ,  
Концентрація  $c$

Функції стану  
Абсолютні значення не можна  
виміряти

Внутрішня енергія  $E$ ,  
Ентальпія  $H$ ,  
Ентропія  $S$ ,  
Вільна енергія Гіббса  $G$   
Вільна енергія Гельмгольца  $F$

# Типи хімічних реакцій

## Хімічні реакції

```
graph TD; A[Хімічні реакції] --- B[Екзотермічні Q>0  
(ΔH_m<0)  
Теплота вивільнюється  
у довкілля]; A --- C[Ендотермічні Q<0  
(ΔH_m>0)  
Теплота поглинається  
з довкілля]
```

**Екзотермічні  $Q>0$**   
 **$(\Delta H_m < 0)$**

Теплота вивільнюється  
у довкілля

**Ендотермічні  $Q<0$**   
 **$(\Delta H_m > 0)$**

Теплота поглинається  
з довкілля

# Хімічна термодинаміка. Базові визначення

- **Хімічна термодинаміка** ставить завданням застосування законів термодинаміки до опису хімічних і фізико-хімічних явищ, зокрема:
  - Побудова теплового балансу процесу
  - Розрахунок фазових рівноваг
  - Розрахунок хімічних рівноваг.
- **Термодинамічна система** – сукупність матеріальних тіл в обмеженому об'ємі в фіксований проміжок часу, які перебувають у взаємодії з навколишніми тілами і можуть обмінюватися з ними енергією і частинками.
- Розрізняють **екстенсивні властивості** системи, кількісний вираз яких пропорційний масі, та **інтенсивні** – кількісна міра яких не залежить від маси. Саме цьому стан системи характеризують сукупністю її інтенсивних властивостей, які називають **термодинамічними параметрами стану**.  
Головні параметри стану піддаються безпосередньому вимірюванню (температура, тиск, густина, концентрація, питомий та молярний об'єм), а інші розглядаються як функції головних (внутрішня енергія, ентропія, ентальпія...), тобто **термодинамічні функції стану**.



# Хімічна термодинаміка. Базові визначення

Термодинамічні параметри стану характеризують лише поточний стан системи і не несуть інформацію про попередні стани. Саме цьому *при переході системи від одного стану в інший зміна її властивостей не залежить від шляху переходу (процесу), а визначається лише початковим і кінцевим її станами, тобто термодинамічними параметрами у цих двох станах.*

- **Процес** – це будь яка зміна, що відбувається в термодинамічній системі і пов'язана зі зміною хоча б одного з її *параметрів стану.*