

Моделирование температурной зависимости энергии Гиббса реакции восстановления хинона в гидрохинон

Л.В. Боровская, С.С. Коваленко, Е.С. Бачурина, Д.Е. Бондаренко,
ФБГОУ Кубанский государственный технологический университет

Одним из важнейших разделов физической химии является химическая термодинамика, и определение термодинамического потенциала системы на основании второго начала термодинамики занимает центральное место в этом разделе физической химии.

В основе одной из работ лабораторного практикума по физической химии «Определение изменения изобарно-изотермического потенциала окислительно-восстановительной системы методом ЭДС» лежит реакция восстановления хинона в гидрохинон. Реальные лабораторные условия не позволяют проводить эту реакцию в широком диапазоне температур, кроме того, процесс определения изобарно-изотермического потенциала окислительно-восстановительной системы методом ЭДС требует длительного времени, поэтому метод имитационного моделирования здесь является наиболее уместным.

Нами был смоделирован процесс восстановления хинона в гидрохинон и прогнозирование температурной зависимости энергии Гиббса по реальным экспериментальным данным, полученным нами в изотермических условиях.

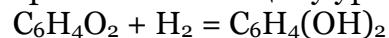
Инструментом для создания виртуальной модели процесса мы выбрали универсальную моделирующую среду Stratum – 2000.

Инструментальная среда Stratum – 2000 предназначена для математического и имитационного моделирования, и является одним из инструментов, позволяющих в короткие сроки спроектировать систему и провести эксперимент на имитационной модели как в реальном, так и в ускоренном времени. Созданная на базе современных информационных технологий, среда Stratum – 2000 позволяет быстро спроектировать новую или проанализировать ужеирующую систему, к какой бы прикладной области она не относилась. Визуальные средства проектирования среды дают возможность построить прототип системы из объектов (имиджей), поведение которых моделирует основные закономерности реального физического (технологического) объекта-прототипа. Имиджи объединяются в схему проекта информационными связями, являющимися отражением материальных, энергетических и информационных связей лабораторной установки или технологической системы. Имеющиеся в среде Stratum графические и мультимедийные инструменты позволяют "оживить" воспроизведение функционирования моделируемой системы.

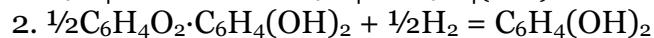
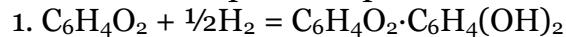
Для построения имитационной модели нами был проведен лабораторный эксперимент в гальваническом элементе в условиях, близких к термодинамически обратимым, при этом полезная работа системы максимальна и равна убыли энергии Гиббса $\Delta G = -A_{max}$. Для создания термодинамически равновесных условий применяют компенсационный метод измерения ЭДС - к полюсам элемента прикладывают извне ЭДС батареи, которая равна и противоположна ЭДС элемента. В этом случае Е элемента отличается от ЭДС батареи на величину, равную dE, которую не могут обнаружить даже самые чувствительные

гальванометры. При этом через элемент проходит настолько малый ток, что реакция протекает с предельно малой скоростью, а потенциалы электродов сохраняют свое равновесное значение.

Реакция восстановления хинона в гидрохинон протекает по общему уравнению:



В нашем эксперименте реакция идет через промежуточный продукт - хингидрон - в 2 стадии:



$\text{C}_6\text{H}_4\text{O}_2$ - хинон; $\text{C}_6\text{H}_4\text{O}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_4(\text{OH})_2$ - хингидрон; $\text{C}_6\text{H}_4(\text{OH})_2$ – гидрохинон.

Работой гальванического элемента является электрохимическая работа, и поэтому $A_{\max} = nFE$, где:

n - число электронов, участвующих в элементарной стадии процесса,

F - число Фарадея, равное 96500Кл,

E - общая ЭДС элемента в вольтах.

В нашем случае общая ЭДС складывается из ЭДС двух элементов, работающих за счет первой и второй стадий, и ЭДС хлорсеребряного электрода, используемого в качестве электрода сравнения: $E = E_1 + E_2 + 2E_{xc}$

С учетом вышесказанного, получаем: $\Delta G = -nF(E_1 + E_2 + 2E_{xc})$.

Это уравнение положено в основу имитационной модели определения энергии Гиббса методом ЭДС.

В результате виртуального эксперимента нами были получены температурные зависимости изобарно-изотермического потенциала (энергии Гиббса) системы хинон-гидрохинон, что не представляется возможным в реальных лабораторных условиях.

Данные виртуального эксперимента представлены в таблице.

Таблица

Температурные изменения энергии Гиббса

t, °C	20	25	30	35	40	45	50
$\Delta G^* \cdot 10^3$ Дж/моль	-122,57	-123,92	-125,27	-126,62	-127,97	-129,32	-130,67
t, °C	55	60	65	70	75	80	85
$\Delta G^* \cdot 10^3$ Дж/моль	-132,02	-133,38	-134,72	-136,08	-137,43	-138,78	-140,13

Полученные в ходе моделирования эксперимента данные по изменению энергии Гиббса приведены на графике (рис. 1). Угловой коэффициент полученной прямой равен dE/dT .

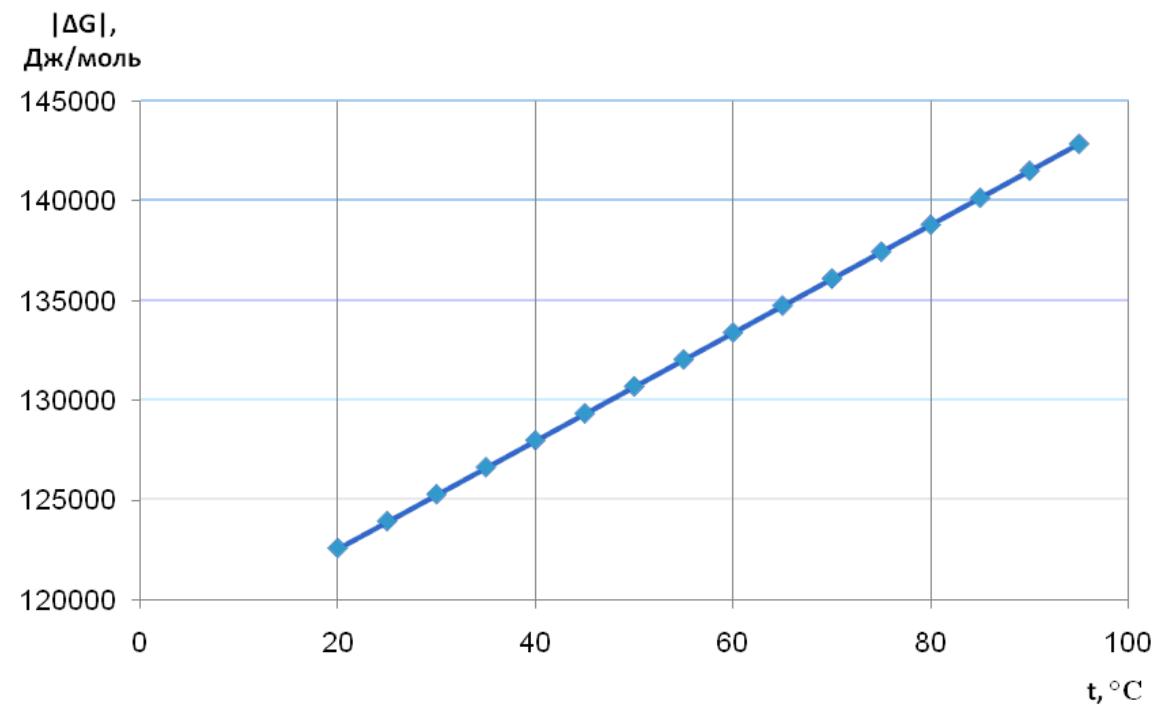


Рис.1

Главное окно эксперимента представлено на рис. 2, а окно результатов выполненной виртуальной работы - на рис. 3.

Определение изменения изобарно-изотермического потенциала окисительно-восстановительной системы методом ЭДС

Подсказки

- [Первый шаг](#)
- [Второй шаг](#)
- [Третий шаг](#)

Теоретическая информация по работе

Показания: E1=0.4271V E2=0.3982V

Первая стадия

- Добавить смеси хинсон + хинклинсон [Выполнить](#)
- Прилити раствор H_2SO_4 в правый стакан [Выполнить](#)
- Прилити раствор H_2SO_4 в левый стакан [Выполнить](#)
- Поставить в стакан платиновый электрод [Выполнить](#)
- Поставить в стакан хлорсеребр. электрод [Выполнить](#)
- Поставить в стаканы электролитический ключ [Выполнить](#)
- Включить потенциометр, снять его показания [Выполнить](#)
- Перейти ко второй части лабораторной работы [Выполнить](#)

Вторая стадия

- Добавить смеси гидрокинсон + хин-гидрон [Выполнить](#)
- Прилити раствор H_2SO_4 в правый стакан [Выполнить](#)
- Прилити раствор H_2SO_4 в левый стакан [Выполнить](#)
- Поставить в стакан платиновый электрод [Выполнить](#)
- Поставить в стакан хлорсеребр. электрод [Выполнить](#)
- Поставить в стаканы электролитический ключ [Выполнить](#)
- Включить потенциометр, снять его показания [Выполнить](#)
- Перейти к расчетам [Выполнить](#)

Рис. 2

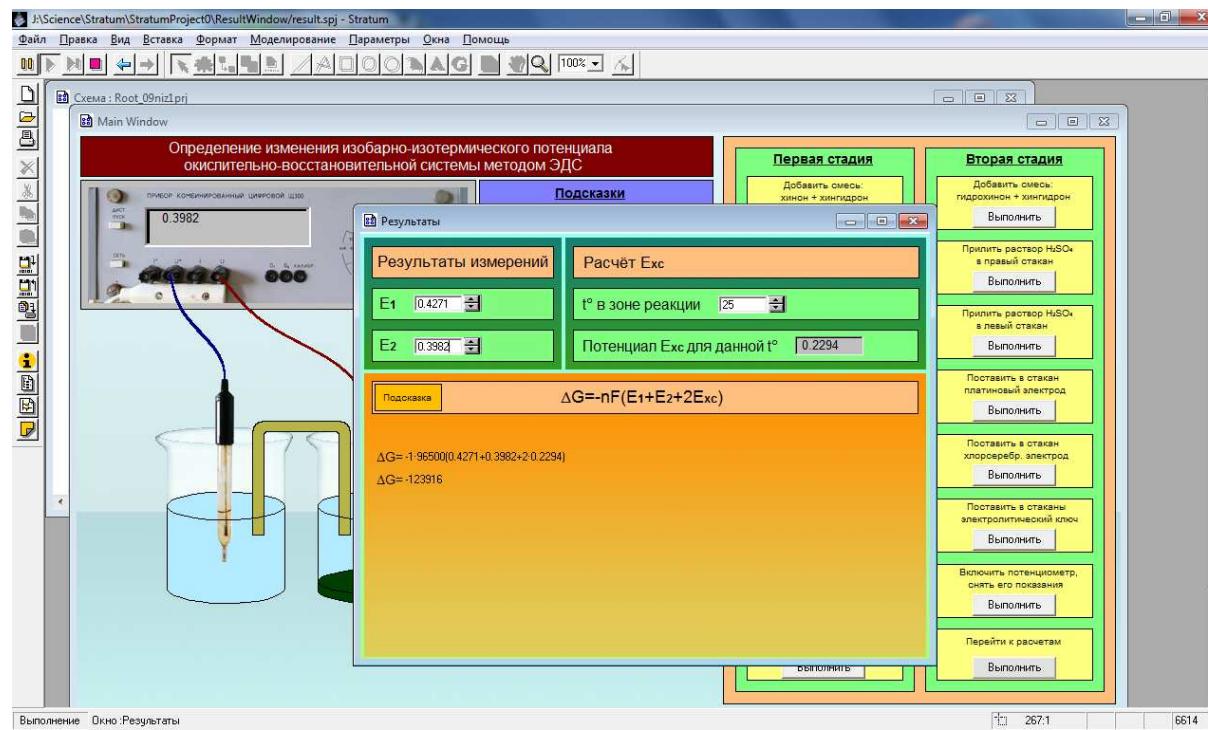


Рис. 3

С полной версией виртуальной лабораторной работы можно ознакомиться на сайте <http://freechemist.narod.ru>

Литература:

1. Руководство к лабораторным работам по физической химии. Изд. КубГТУ, Краснодар, 2009
2. Краснов К.С. Физическая химия т.2, М.: Высшая школа, 2001
3. Электронный ресурс: Stratum Modeling Laboratory, РЦИ, ПГТУ (Режим доступа: <http://stratum.pstu.ac.ru>)