

# ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ОВР СИСТЕМЫ

**Л.В. Боровская, С.С. Коваленко, Е.С. Бачурин, 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.

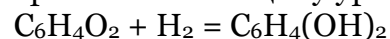
Нами был смоделирован процесс восстановления хинона в гидрохинон и прогнозирование температурной зависимости энергии Гиббса по реальным экспериментальным данным, полученным нами в изотермических условиях.

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

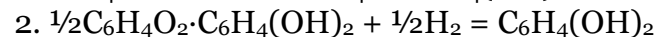
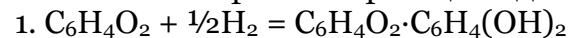
Инструментальная среда Stratum – 2000 предназначена для математического и имитационного моделирования, и является одним из инструментов, позволяющих в короткие сроки спроектировать систему и провести эксперимент на имитационной модели как в реальном, так и в ускоренном времени. Созданная на базе современных информационных технологий, среда Stratum – 2000 позволяет быстро спроектировать новую или проанализировать уже работающую 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  $E$  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:



$C_6H_4O_2$  - хинон;  $C_6H_4O_2 \cdot C_6H_4(OH)_2$  - хингидрон;  $C_6H_4(OH)_2$  - 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 96500 Кл,

$E$  - 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  $dE/dT$ .

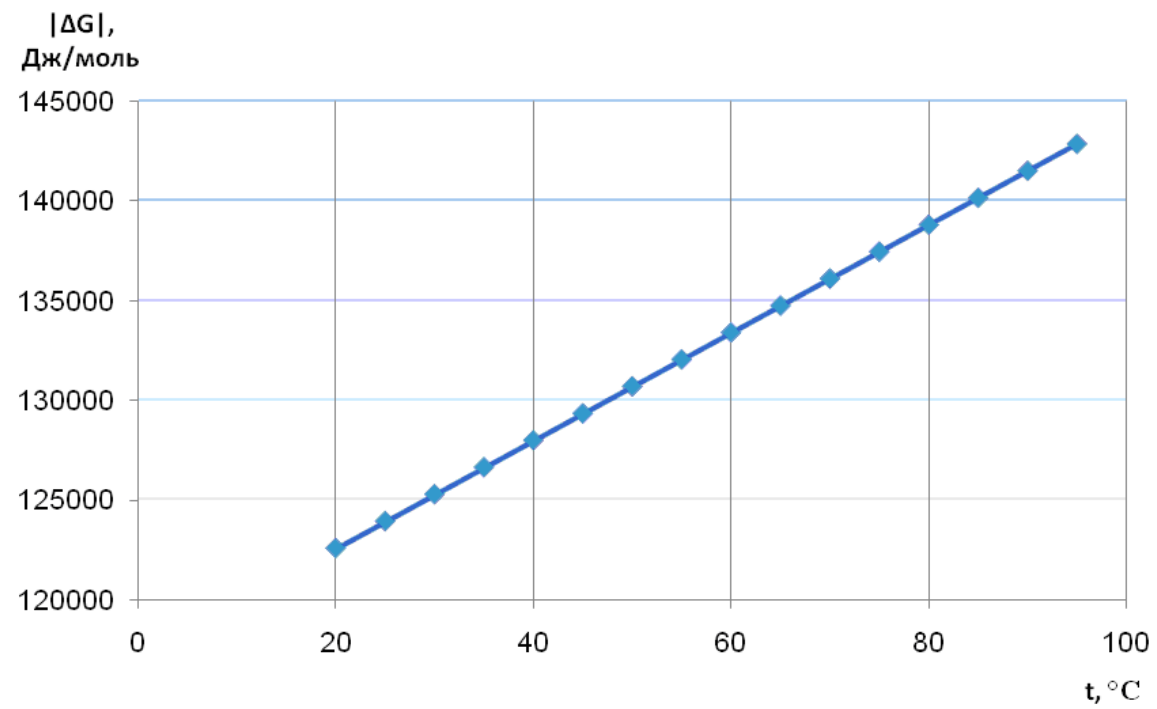


Рис.1

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

**Определение изменения изобарно-изотермического потенциала окислительно-восстановительной системы методом ЭДС**

ПРИСОР КОМБИНИРОВАННЫЙ ЦИФРОВОЙ ЦД30

0.3982

0.001 0.01 0.1 1 10 100 1000

0.001 0.01 0.1 1 10 100 1000

**Подсказки**

Первый шаг    Второй шаг    Третий шаг

Теоретическая информация по работе

Показания: E1=0.4271V E2=0.3982V

Первая стадия	Вторая стадия
Добавить смесь: хинон + хингидрон <input type="button" value="Выполнить"/>	Добавить смесь: гидрохинон + хингидрон <input type="button" value="Выполнить"/>
Прилить раствор H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> в правый стакан <input type="button" value="Выполнить"/>	Прилить раствор H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> в правый стакан <input type="button" value="Выполнить"/>
Прилить раствор H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> в левый стакан <input type="button" value="Выполнить"/>	Прилить раствор H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> в левый стакан <input type="button" value="Выполнить"/>
Поставить в стакан платиновый электрод <input type="button" value="Выполнить"/>	Поставить в стакан платиновый электрод <input type="button" value="Выполнить"/>
Поставить в стакан хлорсеребр. электрод <input type="button" value="Выполнить"/>	Поставить в стакан хлорсеребр. электрод <input type="button" value="Выполнить"/>
Поставить в стаканы электролитический ключ <input type="button" value="Выполнить"/>	Поставить в стаканы электролитический ключ <input type="button" value="Выполнить"/>
Включить потенциометр, снять его показания <input type="button" value="Выполнить"/>	Включить потенциометр, снять его показания <input type="button" value="Выполнить"/>
Перейти ко второй части лабораторной работы <input type="button" value="Выполнить"/>	Перейти к расчетам <input type="button" value="Выполнить"/>

Рис. 2

