

МАГИСТРАТУРА

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ХИМИИ И МЕТАЛЛУРГИИ

А. Г. Морачевский, И. Б. Сладков
Е. Г. Фирсова



www.e.lanbook.com



ЛАНЬ®

ЭБС
ЛАНЬ

А. Г. МОРАЧЕВСКИЙ,
И. Б. СЛАДКОВ,
Е. Г. ФИРСОВА

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ХИМИИ И МЕТАЛЛУРГИИ

Учебное пособие



ЛАНЬ®
САНКТ-ПЕТЕРБУРГ
МОСКВА · КРАСНОДАР
2021

ББК 24.53я73

М 79

Морачевский А. Г., Сладков И. Б., Фирсова Е. Г.

М 79 Термодинамические расчеты в химии и металлургии: Учебное пособие. — СПб.: Издательство «Лань», 2021. — 208 с.: ил. — (Учебники для вузов. Специальная литература).

ISBN 978-5-8114-3023-9

В учебном пособии изложены вопросы, связанные с термодинамическими расчетами химических реакций и термодинамическими свойствами одно-, двух- и трехкомпонентных систем. Большое внимание уделено оценке термодинамических и других свойств индивидуальных неорганических веществ при отсутствии необходимых справочных данных. Специальное внимание уделено термодинамическому описанию фаз переменного состава, парциальным и интегральным термодинамическим характеристикам двойных и тройных систем, свойствам разбавленных растворов.

Учебное пособие предназначено для студентов, обучающихся по *магистерским программам направлений подготовки и специальностей*, входящих в УГС «Химия», «Химические технологии», «Физико-технические науки и технологии», «Технологии материалов». Книга может быть полезна широкому кругу аспирантов, научным и инженерно-техническим работникам предприятий и организаций химической и металлургической промышленности.

ББК 24.53я73

Рецензенты:

А. И. ДЕМИДОВ — доктор химических наук, профессор кафедры физико-химии и технологий микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого;

Л. В. ЦЫМБУЛОВ — доктор технических наук, профессор, зав. лабораторией пирометаллургии ООО «Институт Гипроникель».

Обложка
Е. А. ВЛАСОВА

© Издательство «Лань», 2021

© Коллектив авторов, 2021

© Издательство «Лань»,
художественное оформление, 2021

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие.....	5
1. Расчет термодинамических характеристик химической реакции	8
1.1. Основные понятия и соотношения.....	8
1.2. Расчет теплового эффекта и энтропии химической реакции.....	12
1.3. Расчет стандартного изменения энергии Гиббса и константы равновесия реакции.....	16
1.3.1. Энтропийный метод расчета.....	16
1.3.2. Расчет, основанный на функциях статистической термодинамики.....	20
Список литературы к главе 1.....	24
2. Расчет химических равновесий.....	25
2.1. Расчет характеристик полноты протекания реакции.....	25
2.2. Расчет равновесного состава газовой фазы.....	27
2.3. Расчет сложных химических равновесий.....	31
3. Расчет термодинамических свойств веществ приближенными методами.....	44
3.1. Расчет стандартной теплоты образования.....	44
3.2. Расчет стандартной энтропии.....	63
3.2.1. Твердые вещества.....	63
3.2.2. Жидкости.....	73
3.2.3. Газы.....	75
3.3. Расчет температуры и теплового эффекта фазовых превращений.....	79
3.4. Расчет теплоемкости.....	96
3.4.1. Твердые вещества.....	96
3.4.2. Жидкости.....	109
3.4.3. Газы.....	118
Список литературы к главе 3.....	127
4. Методы расчета термодинамических функций в двух- и трехкомпонентных системах.....	132
4.1. Общие термодинамические соотношения для фаз переменного состава.....	132

4.2. Термодинамические соотношения в двухкомпонентных системах.....	136
4.2.1. Избыточные термодинамические функции. Активность. Коэффициент активности.....	138
4.2.2. Интегрирование уравнения Гиббса – Дюгема для двухкомпонентных систем.....	144
4.3. Термодинамические соотношения в трехкомпонентных системах.....	146
4.3.1. Интегрирование уравнения Гиббса – Дюгема для трехкомпонентных систем.....	146
4.3.2. Расчет термодинамических свойств тройных систем на основании данных о граничных двойных системах.....	152
4.3.3. Правило Здановского и его применение к металлургическим системам: жидкие металлические сплавы, солевые и сульфидные расплавы.....	157
Список литературы к главе 4.....	164
5. Аналитическое представление концентрационной зависимости термодинамических функций в двух- и трехкомпонентных системах.....	167
5.1. Двухкомпонентные системы.....	169
5.1.1. Регулярные растворы.....	169
5.1.2. Атермические растворы.....	174
5.1.3. Уравнения Крупковского.....	175
5.1.4. Применение простейших степенных полиномов.....	177
5.1.5. Различные алгебраические выражения.....	183
5.2. Полиномиальные методы расчета термодинамических свойств трехкомпонентных систем.....	185
Список литературы к главе 5.....	187
6. Термодинамические свойства разбавленных растворов.....	190
6.1. Предельные значения парциальных молярных величин.....	192
6.2. Законы Генри и Рауля.....	193
6.3. Расчет предельных значений парциальных молярных термодинамических функций и коэффициентов активности компонентов в двойных системах.....	197
Список литературы к главе 6.....	203