

152.212
162.635
172.329
181.415
190.742

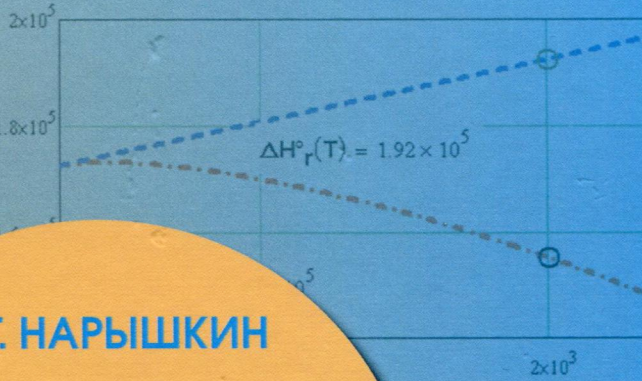
Введите значение температуры, К: $T = 2000$

$\Delta H_r^\circ(T)$

$\Delta H_r^\circ(T)$

$\Delta H_r^\circ(T)$

$\Delta H_r^\circ(T)$



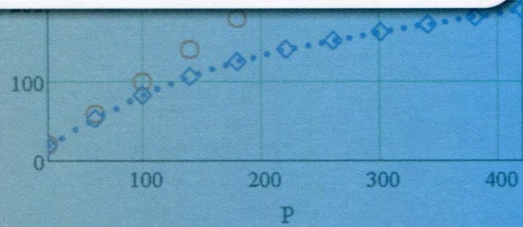
ности реакции Будуара

Д. Г. НАРЫШКИН

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

ВОЗМОЖНОСТИ
КОМПЬЮТЕРНОЙ МАТЕМАТИКИ

260
300
340
380
420



$$f(P) := e^{\ln f(P)}$$

$$\Delta c_{p,r}(T) = \Delta a_r + \Delta b_r T + \frac{\Delta c_{1,r}}{T^2}$$

Уравнение температурной зависимости изменения теплоемкости
 $C + CO_2 = 2CO$

$$T_{\text{min}} = 298 \dots 2500 \quad \Delta c_{p,r}(T) \rightarrow -0.00761 T + \frac{1.616e6}{T^2} - 4.18$$

$f(P) =$
19.275
53.46
82.365
106.313
125.401
140.266
152.212
162.635



«Инфра-Инженерия»

$$\Delta H_r^\circ(T) := \Delta H_{r,298}^\circ + \int_{298}^T$$

температуры, К: $T = 20$

Д. Г. НАРЫШКИН

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ
ВОЗМОЖНОСТИ КОМПЬЮТЕРНОЙ МАТЕМАТИКИ

Учебное пособие

Москва Вологда
«Инфра-Инженерия»
2025

УДК 544
ББК 24.5
Н30

Рецензенты:

д. т. н., проф. кафедры ХиЭЭ НИУ «МЭИ» *С. Е. Смирнов*;
д. х. н., проф. РХТУ им. Д. И. Менделеева *В. Ю. Конюхов*

Нарышкин, Д. Г.

Н30 Физико-химические расчеты. Возможности компьютерной математики : учебное пособие / Д. Г. Нарышкин. – Москва ; Вологда : Инфра-Инженерия, 2025. – 200 с. : ил., табл.
ISBN 978-5-9729-2316-8

Рассмотрены основные проблемы обработки результатов физико-химических экспериментов при изучении курса «Физическая химия». Рассмотрены алгоритмы обработки результатов физико-химических экспериментов, сформулированных в виде системы уравнений – химических (химическая модель системы), термодинамических или кинетических (математическая модель), возможности графической иллюстрации табличных данных физико-химических экспериментов или справочных данных и их аппроксимации аналитической зависимостью. Каждая задача основана или на справочном материале, или на материале реальной научной работы, ссылки на которые приводятся.

Для студентов и аспирантов всех специальностей и направлений, изучающих курс «Физическая химия».

УДК 544
ББК 24.5

ISBN 978-5-9729-2316-8

© Нарышкин Д. Г., 2025
© Издательство «Инфра-Инженерия», 2025
© Оформление. Издательство «Инфра-Инженерия», 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	5
ВВЕДЕНИЕ	8
Глава 1. Интерактивная сетевая версия термодинамической базы данных и справочника физико-химических величин	15
1. Интерактивная сетевая версия термодинамической базы данных	17
1.1. Термодинамические свойства простых веществ	18
1.2. Термодинамические свойства неорганических соединений	22
1.3. Термодинамические свойства углеводородов	27
1.4. Термодинамические свойства кислородсодержащих органических соединений	32
1.5. Интерактивная сетевая версия прогнозирования свойств	34
2. Интерактивная сетевая версия справочника физико-химических величин	38
2.1. Температурные зависимости констант равновесия важнейших газовых реакций	38
2.2. Температурные зависимости логарифмов констант равновесия образования неорганических веществ	40
2.3. Температурные зависимости логарифмов констант равновесия образования органических соединений – углеводородов	41
2.4. Температурные зависимости логарифмов констант равновесия образования кислородсодержащих органических соединений	42
2.5. Температурные зависимости логарифмов констант равновесия образования галогенсодержащих органических соединений	43
2.6. Средние ионные коэффициенты активности сильных электролитов в водных растворах в зависимости от молярной концентрации при 298 К	43
2.7. Ионное произведение и pH воды в диапазоне 0–100 °С	44
2.8. Температурная зависимость произведения растворимости и растворимость труднорастворимых соединений	45
2.9. Предельная молярная электрическая проводимость ионов в воде в зависимости от температуры	46
2.10. Молярная электрическая проводимость разбавленного водного раствора электролита при 298 К в зависимости от концентрации раствора, моль/л	46
2.11. Истинные атомные и молекулярные теплоемкости веществ в интервале температур 10–298 К	47
Глава 2. Температурная зависимость теплоемкости	50
2.1. Определение аналитической температурной зависимости теплоемкости по экспериментальным данным	50

2.2. Определение теплоемкости по экспериментальным данным о приращении энтальпии	58
Глава 3. Реальные системы.....	62
3.1. Зависимость энергии Гиббса от давления. Реальные газы. Расчет летучести.....	62
Глава 4. Термодинамические характеристики процессов образования растворов	81
4.1. Интегральная теплота растворения	81
4.2. Теплота смешения	86
4.3. Объем раствора в зависимости от состава	88
4.4. Парциальные мольные величины	90
Глава 5. Фазовые равновесия однокомпонентных гетерогенных систем.....	97
Глава 6. Диаграммы состояния двухкомпонентных систем.....	107
6.1. Расчетные методы построения диаграмм плавкости	107
6.2. Гетерогенные равновесия в бинарных системах жидкость – пар.....	113
Глава 7. Прямая и обратная задачи химического равновесия.....	121
7.1. Расчет термодинамических характеристик химических процессов	121
7.2. Расчет равновесий в идеальных газовых системах	139
7.3. Генераторы водорода	148
Глава 8. Прямая и обратная задачи химической кинетики.....	159
Глава 9. Кинетические кривые некоторых реакций	170
9.1. Газовые реакции первого порядка.....	170
9.2. Газовые реакции второго порядка.....	171
9.3. Реакции в растворах (растворитель вода).....	173
9.4. Реакции третьего порядка	175
Глава 10. Адсорбционное равновесие на поверхности твердых тел... 178	178
10.1. Изотерма адсорбции Лэнгмюра.....	178
10.2. Изотерма Брунауэра – Эммета – Теллера (изотерма БЭТ).....	188
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.....	197