ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫНЫҢ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТІРЛІГІ
ӘЛ-ФАРАБИ АТЫНДАҒЫ ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

Екі және үш компонентті жүйелердің фазалық тепе-теңдігі және фармацевтикалық композицияларды әзірлеу негіздері

Химия және химиялық технология факультеті, Физикалық химия, катализ және мұнайхимия кафедрасының оқытушысы

PhD Савденбекова Б.Е.

Алматы, 2026

Дәрістің мақсаты

Екі және үш компонентті жүйелердегі фазалық тепе-теңдіктің негізгі заңдылықтарын түсіндіру, классикалық фазалық диаграммалардың құрылымы мен ерекшеліктерін қарастыру және оларды фармацевтикалық композициялардың құрамын таңдау, компоненттердің үйлесімділігін және дәрілік қалыптардың физикалық тұрақтылығын бағалауда қолдану принциптерімен таныстыру.

Бақылау сұрақтары

1. Екі компонентті жүйелердегі фазалық тепе-теңдікті түсіндіріңіз. Толық араласатын, эвтектикалық және сұйық-сұйық фазалық бөліну жүйелерінің ерекшеліктерін сипаттаңыз.
2. Эвтектикалық фазалық диаграмманың құрылымын сипаттаңыз. Эвтектикалық нүктенің физикалық мағынасын түсіндіріп, фармацевтикалық композиция әзірлеудегі маңызын көрсетіңіз.
3. Үш компонентті фазалық диаграмманың құрылысын түсіндіріңіз. Үшбұрыштың төбелері мен ішкі аймақтарының компоненттер құрамын көрсету принципін сипаттаңыз.
4. Фазалық диаграммалардың фармацевтикалық композицияларды әзірлеудегі маңызын негіздеңіз. Гиббстің фазалар ережесін келтіріп, оның жүйедегі фазалар мен еркіндік дәрежесі арасындағы байланысты сипаттаңыз.

Жоспар

-Фазалық тепе-теңдік туралы негізгі түсініктер және Гиббстің фазалар ережесі.
- Бір компонентті жүйелердің фазалық диаграммалары және олардың негізгі элементтері.
- Екі компонентті жүйелердегі фазалық тепе-теңдік және күй диаграммалары.
- Екі компонентті жүйелердің негізгі түрлері: эвтектикалық, қатты ерітінді түзетін және химиялық қосылыс түзетін жүйелер.
- Үш компонентті жүйелер және үшбұрышты фазалық диаграммалар.
- Фазалық диаграммаларды фармацевтикалық композицияларды зерттеуде қолдану.
- Компоненттердің үйлесімділігін және дәрілік қалыптардың физикалық тұрақтылығын бағалау.

Фазалық тепе-теңдік

Фазалық тепе-теңдік — жүйедегі әртүрлі фазалардың температура, қысым және компоненттердің химиялық потенциалдары бойынша тепе-теңдік күйде болуы.

Негізгі терминдер:

- **Жүйе** — зерттеу үшін таңдалған заттар жиынтығы.
- **Компонент** — жүйенің құрамын сипаттауға қажетті тәуелсіз химиялық зат.
- **Фаза** — жүйенің физикалық және химиялық қасиеттері біртекті, шекара бетімен бөлінген бөлігі.
- **Фазалық ауысу** — заттың бір фазадан екінші фазаға өтуі.
- **Фазалық диаграмма** — температура, қысым және құрамның өзгеруіне байланысты жүйедегі фазалық күйлерді көрсететін графикалық бейне.

$$F = C - P + 2$$

Мұндағы:

- F — еркіндік дәрежелерінің саны;
- C — компоненттер саны;
- P — фазалар саны.

Егер қысым тұрақты болса:

$$F = C - P + 1$$

Мысал: Бір компонентті жүйеде сұйық және бу фазалары тепе-теңдікте болса, қысым тұрақты жағдайда $F = 1$. Демек, фазалар тепе-теңдігін сақтай отырып, температураны өзгертуге болмайды — ол тепе-теңдік қысымының өзгеруін талап етеді.

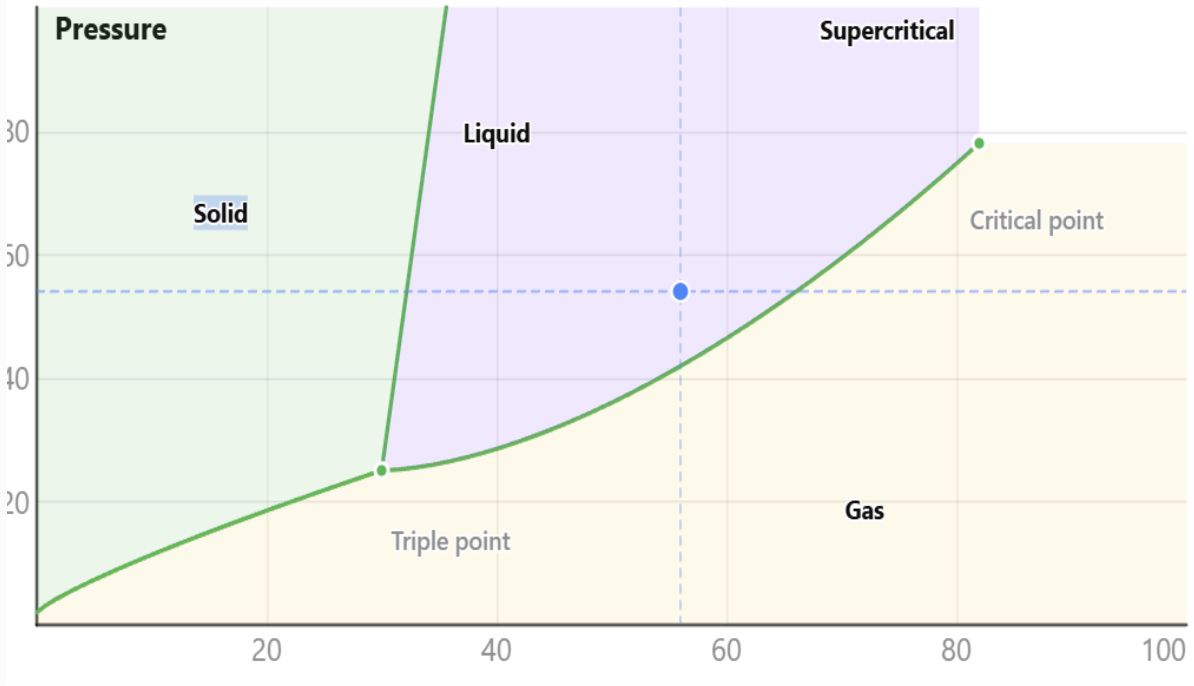
Бір компонентті жүйенің фазалық диаграммасы

Бір компонентті жүйенің классикалық мысалы — су. Оның фазалық диаграммасы температура мен қысымның өзгеруіне байланысты қатты, сұйық және газ тәрізді күйлердің тұрақтылық аймақтарын көрсетеді.

Фазалық диаграмманың негізгі элементтері:

1. **Қатты фаза аймағы** — заттың кристалдық күйі тұрақты болатын аймақ.
2. **Сұйық фаза аймағы** — сұйық күй тұрақты болатын аймақ.
3. **Газ фазасы аймағы** — бу немесе газ күйі тұрақты болатын аймақ.
4. **Сублимация қисығы** — қатты және газ фазаларының тепе-теңдік шекарасы.
5. **Балқу қисығы** — қатты және сұйық фазалардың тепе-теңдік шекарасы.
6. **Булану қисығы** — сұйық және газ фазаларының тепе-теңдік шекарасы.
7. **Үштік нүкте** — үш фазаның бір мезгілде тепе-теңдікте болатын жағдайы.
8. **Критикалық нүкте** — сұйық және газ фазалары арасындағы шекара жойылатын нүкте.

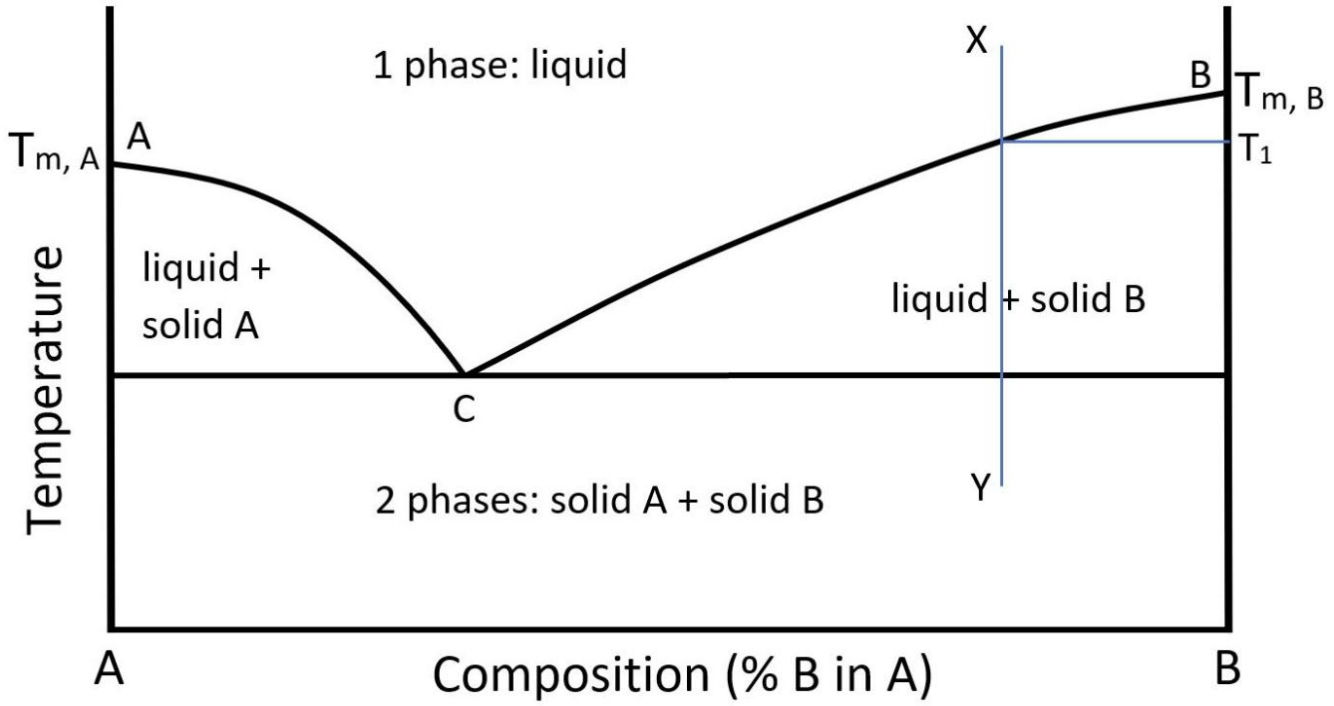
Фармацевтикалық маңызы: Температура мен қысымның дәрілік заттардың агрегаттық күйіне, балқуына, булануына, сублимациясына және кептіру жағдайларына әсерін түсіндіреді. Мысалы, лиофильді кептіру кезінде мұздың сублимациясы қолданылады.



Екі компонентті жүйенің фазалық диаграммасы

Екі компонентті жүйе екі тәуелсіз химиялық заттан тұрады. Мұндай жүйелерде фазалық тепе-теңдік температура мен компоненттердің құрамына тәуелді болады.

Қысым тұрақты болған жағдайда Гиббстің фазалар ережесі: $F = C - P + 1 = 3 - P$



Екі компонентті диаграмманың осьтері:

- Ордината осі — температура, T.
- Абсцисса осі — компоненттердің құрамы, мысалы, x_B немесе B компонентінің массалық үлесі.
- Диаграммадағы аймақтар — жүйеде болатын фазалардың түрлері мен саны.

Негізгі сызықтар:

- Ликвидус — сұйық фаза пайда болатын немесе толық сұйық күйге өтетін шекара.
- Солидус — қатты фазаның толық түзілуін немесе қатты күйден сұйық фаза пайда болуын сипаттайтын шекара.

Фармацевтикалық мысал: Екі дәрілік компоненттің немесе дәрілік зат пен қосымша заттың балқу температурасы мен өзара үйлесімділігін зерттеу.

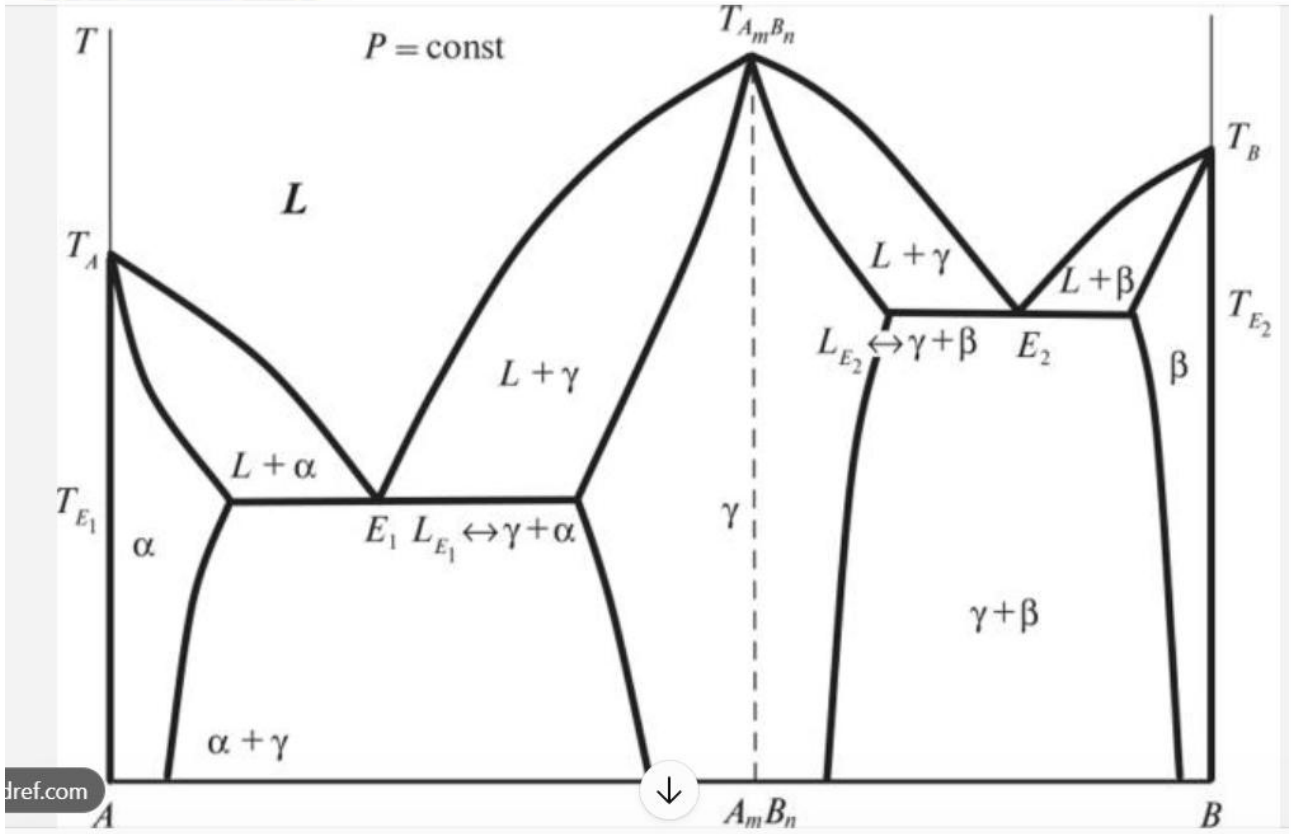
Екі компонентті жүйелерде:

- Бір фазалы жүйеде $P = 1$, $F = 2$: температура мен құрамды өзгертуге болады.
- Екі фазалы жүйеде $P = 2$, $F = 1$: бір тәуелсіз параметрді өзгертуге болады.
- Үш фазалы жүйеде $P = 3$, $F = 0$: жүйе инвариантты, яғни тепе-теңдік жағдайындағ параметрлер тұрақты.

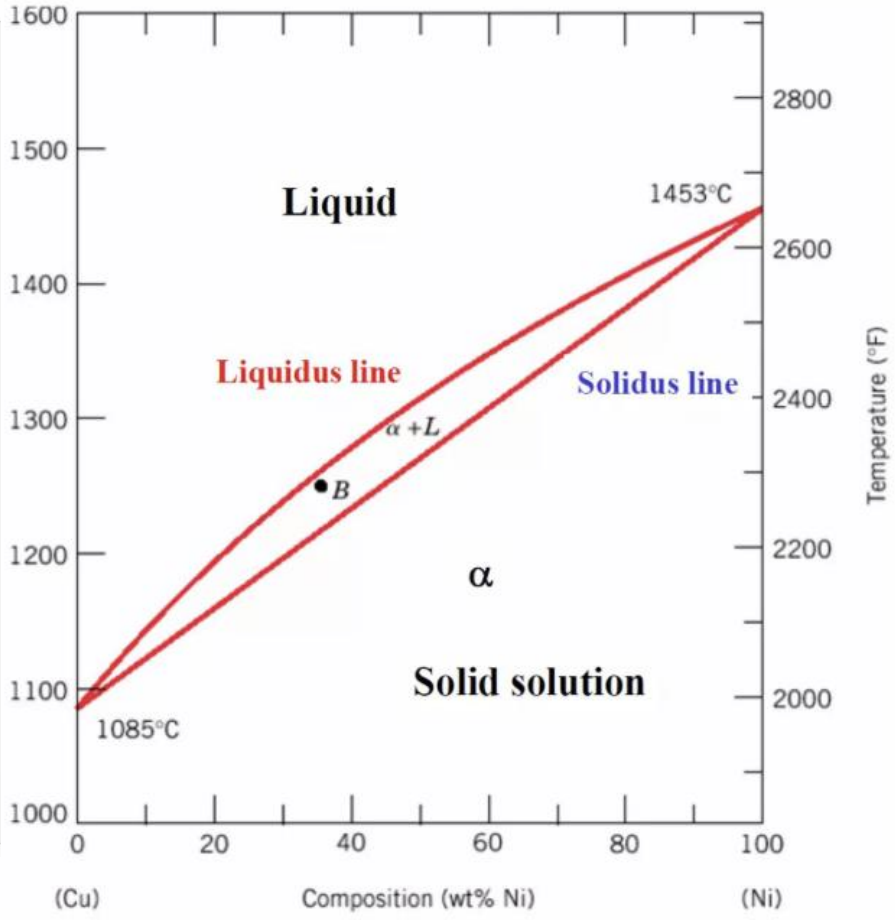
Екі компонентті жүйенің фазалық диаграммасы

Екі компонентті жүйелердің фазалық диаграммалары компоненттердің қатты және сұйық күйдегі өзара ерігіштігіне байланысты бірнеше түрге бөлінеді.

Химиялық қосылыс түзетін жүйе

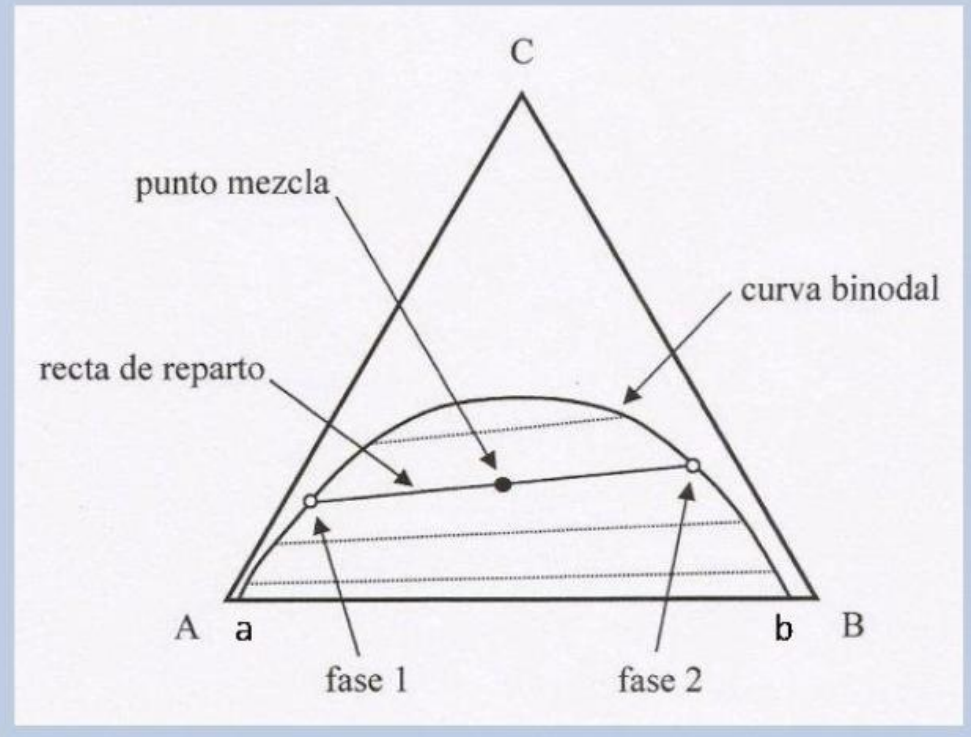


Қатты күйде толық ерітінді түзетін жүйе



Үш компонентті жүйенің фазалық диаграммасы

Үш компонентті жүйе үш тәуелсіз заттан тұрады. Олардың құрамын графикалық түрде көрсету үшін үшбұрышты диаграммалар қолданылады.



Фазалық аймақтар:

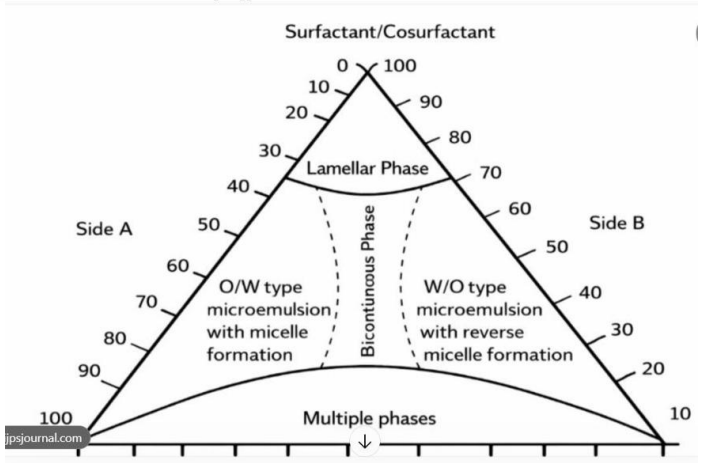
- Бір фазалы аймақ — компоненттер біртекті жүйе түзеді.
- Екі фазалы аймақ — жүйе екі бөлек фазаға бөлінеді.
- Үш фазалы аймақ — үш фаза тепе-теңдікте болуы мүмкін.

Үшбұрышты диаграмманың құрылымы:

- Үшбұрыштың төбелері — таза компоненттер (100% A, 100% B, 100% C).
- Қабырғалары — екі компонентті қоспалардың құрамын көрсетеді.
- Үшбұрыштың ішіндегі нүктелер — үш компонентті қоспалардың құрамын сипаттайды.
- Фазалық шекара — бір фазалы және екі фазалы аймақтарды бөледі.
- Байланыстырушы сызықтар (*tie-lines*) — тепе-теңдіктегі екі сұйық фазаның құрамдарын байланыстырады.

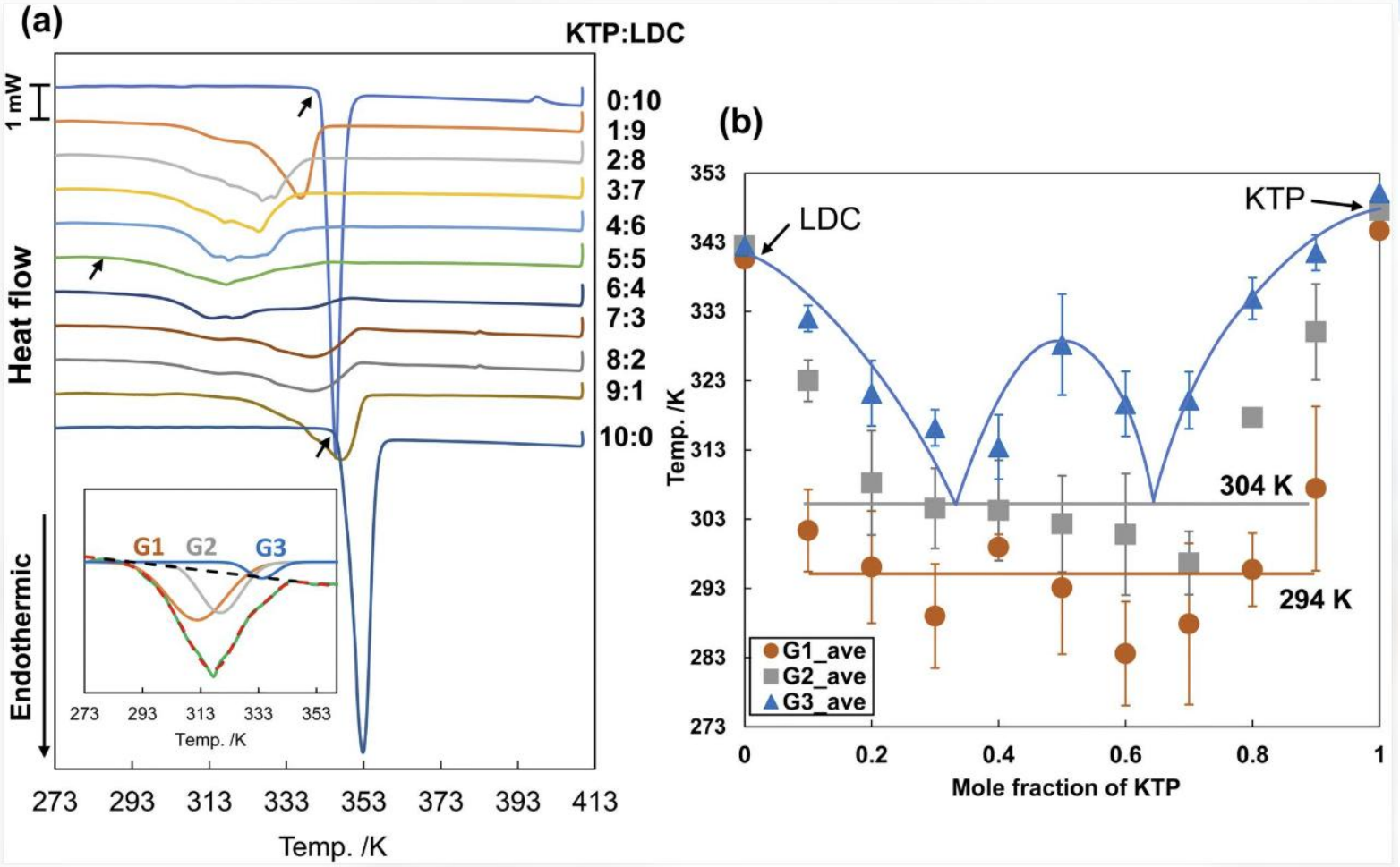
Фазалық диаграммаларды фармацевтикалық композицияларды таңдауда қолдану

Фазалық диаграммалар дәрілік зат пен қосымша компоненттердің өзара үйлесімділігін, ерігіштігін және жүйенің фазалық тұрақтылығын зерттеуде маңызды.



Мысалы, белсенді фармацевтикалық ингредиент пен полимер немесе басқа қосымша зат қоспасының фазалық мінез-құлқы зерттеледі.

- Балқу температурасының өзгеруі анықталады.
- Эвтектикалық құрамның болуы бағаланады.
- Қатты ерітінді немесе жаңа кристалдық фазаның түзілу мүмкіндігі зерттеледі.
- Қоспаның сақтау кезіндегі физикалық өзгерістеріне болжам жасалады.



Үш компонентті фармацевтикалық жүйелер

Үш компонентті жүйе үш тәуелсіз заттан тұрады. Олардың құрамын графикалық түрде көрсету үшін үшбұрышты диаграммалар қолданылады.

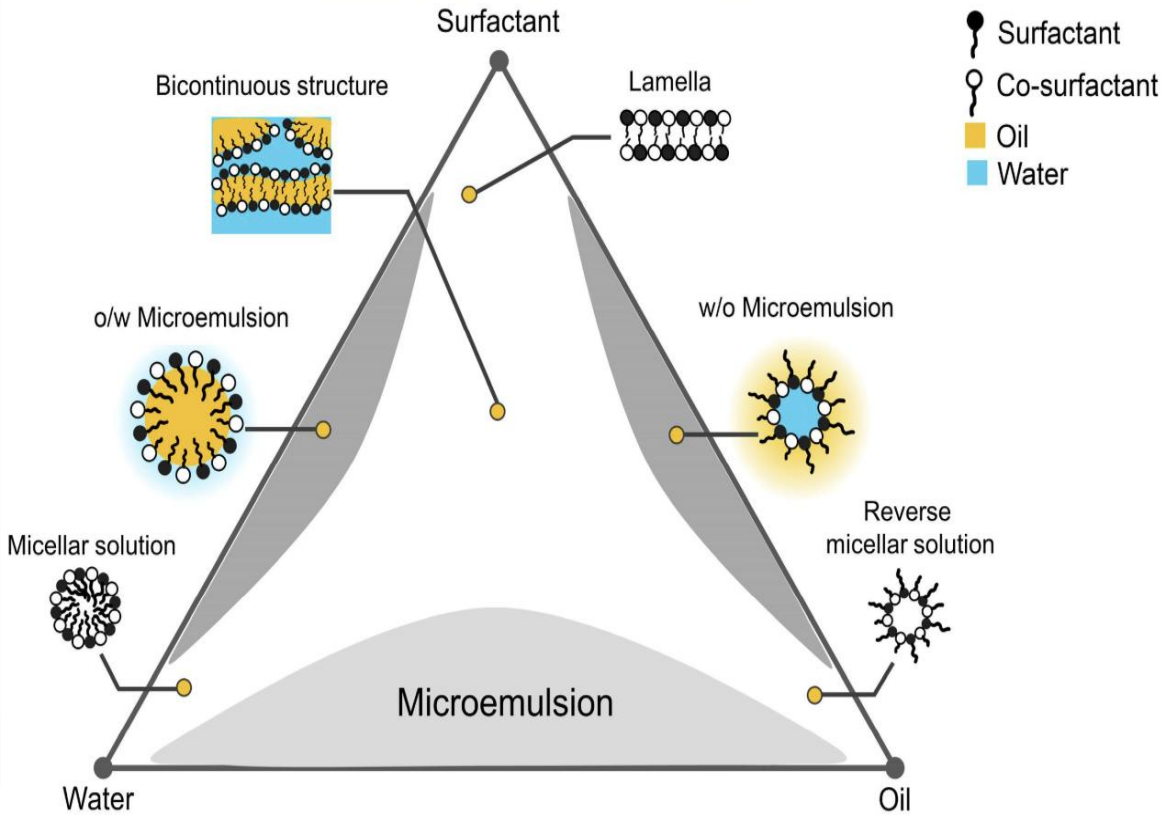
Мысалы, су–май–БАЗ жүйесі:

- Су — полярлы фаза.
- Май — липофильді фаза.
- БАЗ — фазалар арасындағы беттік керілуді төмендететін компонент.

Үшбұрышты диаграмма арқылы мөлдір бір фазалы жүйелердің, эмульсиялардың және екі фазалы қоспалардың құрамдық аймақтарын анықтауға болады.

Практикалық қолданылуы:

- Эмульсия мен микроэмульсия құрамын таңдау.
- Еріткіштер қоспасының еріту қабілетін бағалау.
- Дәрілік заттың ерігіштігін арттыратын құрамдарды таңдау.
- Полимерлік жүйелер мен гидрофильді/липоф ↓ ді компоненттердің үйлесімділігін бағалау.



Пайдаланған әдебиеттер тізімі

1. Физикалық химия (химиялық кинетика және электрохимия): оқулық / Ә.Қ. Оспанова, Г.А. Сейілханова; Әл-Фараби атын. ҚазҰУ. - Алматы : Қазақ ун-ті, 2023. - 243, [1] б. - ISBN 978-601 04-6459-9 :
2. Оспанова, Әлия Қапанқызы. Физикалық химияның теориялары мен мәселелері : оқу құралы / Ә. Қ. Оспанова, Г. Х. Шәбікова, Л. И. Сыздықова ; Әл-Фараби атын. ҚазҰУ. - Алматы : Қазақ ун-ті, 2021. - 188, [1] б. - ISBN 978-601-04-5546-7 :
3. Физикалық химия пәні бойынша есептер. (Химиялық кинетика және электрохимия) : оқулық / Г. Х. Шабікова, Ә. Қ. Оспанова, Н. С. Ашимхан ; ҚР Білім және ғылым м-гі, Әл-Фараби атын. ҚазҰУ. - Алматы : Қазақ ун-ті, 2016. - 285
4. Физикалық химия : оқулық / С.Х. Хұсайын ; ҚР Білім және ғылым м-гі, Қ.И. Сәтбаев атын. ҚазҰТУ. - Алматы : ҚазҰТУ, 2014. - 403, [1] б. : сур. - Библиогр.: 355-356 б. - ISBN 978-601-228 643-4