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

Фазалық ауысулар және фармацевтикалық технологиядағы олардың маңызы: балқу, кристалдану, булану және сублимация. Бір компонентті жүйелердің фазалық тепе-теңдігі және дәрілік заттардың полиморфтық түрленулері

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

PhD Савденбекова Б.Е.

Алматы, 2026

Дәрістің мақсаты

Білім алушыларға фазалық тепе-теңдік пен фазалық ауысулардың негізгі термодинамикалық заңдылықтарын түсіндіру; Гиббс фазалар ережесін меңгерту және еркіндік дәрежесінің физикалық мағынасын ашу; бірінші текті фазалық ауысулардың ерекшеліктерін, жасырын жылу мен Клапейрон теңдеуінің мәнін түсіндіру; судың \(P-T\) фазалық диаграммасын талдау арқылы қатты, сұйық және газ тәрізді фазалардың тұрақтылық облыстарын, үштік және критикалық нүктелердің физикалық мағынасын анықтау дағдыларын қалыптастыру.

Бақылау сұрақтары

1. Гиббс фазалар ережесін жазыңыз. Еркіндік дәрежесі ұғымын түсіндіріп, оның физикалық мағынасын көрсетіңіз.
2. Бірінші текті фазалық ауысу ұғымын түсіндіріңіз.
3. Бірінші текті фазалық ауысуға мысалдар келтіріп, оның негізгі ерекшеліктерін сипаттаңыз.
4. Судың фазалық диаграммасын P-T координаталарында салыңыз. Қатты, сұйық және газ тәрізді фазалар орналасқан облыстарды, үштік нүктені және критикалық нүктені көрсетіп, олардың физикалық мағынасын түсіндіріңіз.

Жоспар

-Фазалық тепе-теңдік туралы негізгі түсініктер: жүйе, фаза және компонент.
- Гиббстің фазалар ережесі және еркіндік дәрежесінің физикалық мағынасы.
- Фазалық ауысулардың түрлері және бірінші текті фазалық ауысулардың ерекшеліктері.
- Фазалық ауысулар кезіндегі жасырын жылу және энтальпияның өзгеруі.
- Клапейрон және Клаузиус–Клапейрон теңдеулері.
- Судың қысым–температура (\(P-T\)) фазалық диаграммасы.
- Үштік және критикалық нүктелердің физикалық мағынасы және фармацевтикалық үдерістердегі маңызы.

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.

Клапейрон және Клаузиус–Клапейрон теңдеулері

Фазалық тепе-теңдік кезінде температура мен қысым арасындағы байланысты Клапейрон теңдеуі сипаттайды.

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta H_{\text{ауысу}}}{T\Delta V}$$

Мұндағы:

- dP/dT — тепе-теңдік қисығының көлбеулігі;
- $\Delta H_{\text{ауысу}}$ — фазалық ауысудың мольдік энтальпиясы;
- T — абсолют температура;
- ΔV — фазалық ауысу кезіндегі мольдік көлем өзгерісі.

Теңдеудің физикалық мағынасы: Фазалық тепе-теңдікті сақтау үшін қысымды өзгерткенде температураның қалай өзгеруі керектігін сипаттайды.

Қолданылуы:

- Қысымның өзгеруіне байланысты қайнау температурасын есептеу.
- Булану жылуын эксперименттік анықтау.
- Қысым төмендегенде еріткіштің қайнау температурасының төмендеуін түсіндіру.
- Вакуумдық кептіру мен лиофилизация үдерістерін негіздеу.

Клаузиус–Клапейрон теңдеуі

$$\frac{d\ln P}{dT} = \frac{\Delta H_{\text{булану}}}{RT^2}$$

$$\ln\frac{P_2}{P_1} = -\frac{\Delta H_{\text{булану}}}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

Фазалық ауысулар және бірінші текті фазалық ауысулар

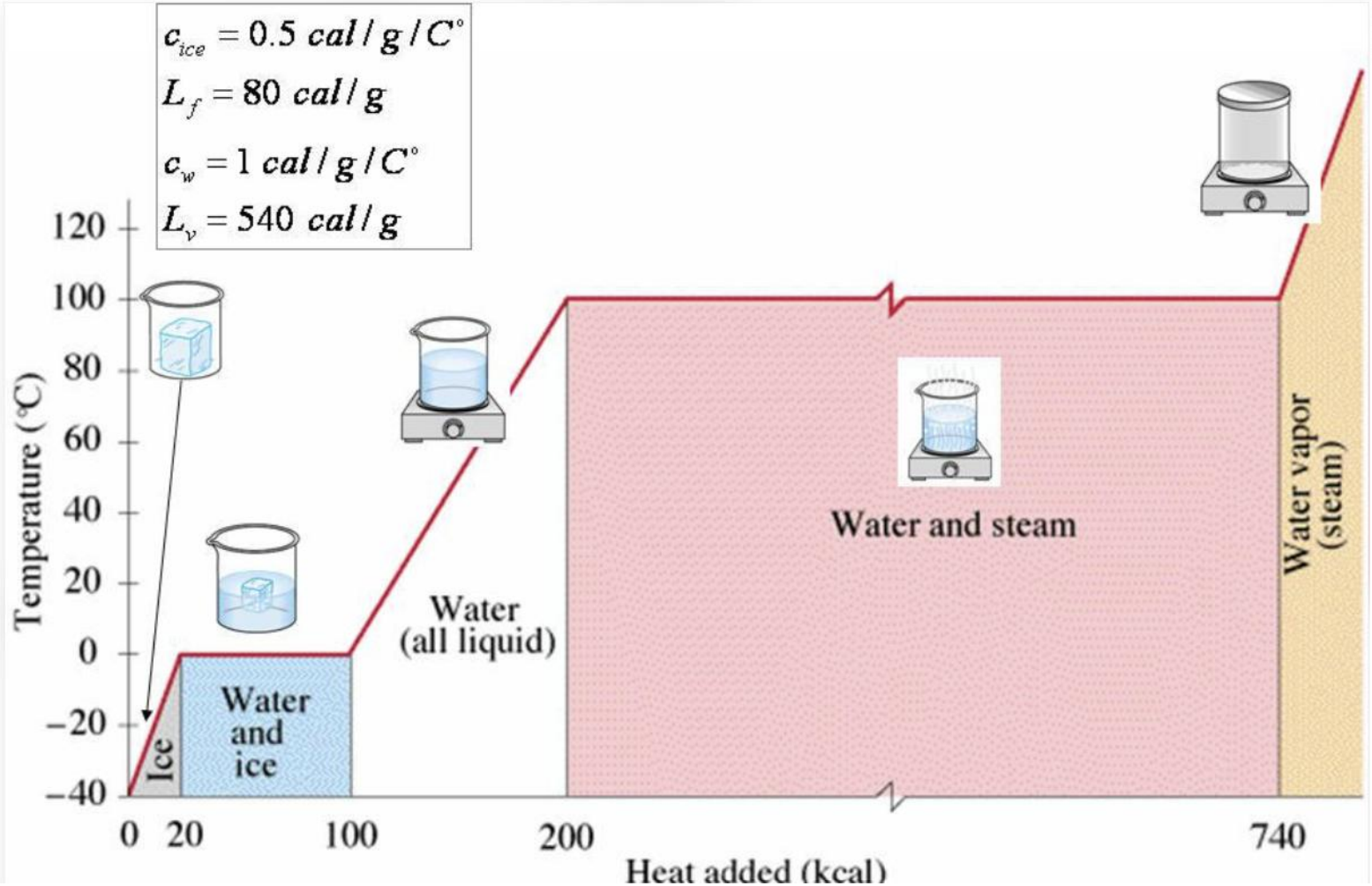
Бірінші текті фазалық ауысу — ауысу температурасында Гиббс энергиясының бірінші туындыларының бірі үзіліспен өзгеретін, энтальпия мен энтропия өзгерісімен және жасырын жылу бөлінуі немесе жұтылуымен жүретін фазалық ауысу.

Бірінші текті ауысуларға:

- Балқу және кристалдану.
- Булану және конденсация.
- Сублимация және десублимация жатады.

Бірінші текті фазалық ауысудың ерекшеліктері:

1. Белгілі температура мен қысымда жүреді.
2. Фазалардың молярлық көлемдері әртүрлі болуы мүмкін.
3. Энтальпия мен энтропия өзгереді.
4. Жасырын жылу жұтылады немесе бөлінеді.
5. Фазалардың шекарасы айқын байқалады.



Фазалық ауысулар және бірінші текті фазалық ауысулар

1. Балқу

Қатты заттың сұйық фазаға ауысуы:

$$\text{қатты} \rightarrow \text{сұйық}$$

Балқу кезінде зат жылу жұтады. Мысалы, мұздың суға айналуы.

2. Кристалдану

Сұйық фазаның қатты фазаға ауысуы:

$$\text{сұйық} \rightarrow \text{қатты}$$

Кристалдану кезінде жылу бөлінеді.

3. Булану

Сұйықтың газ тәрізді фазаға ауысуы:

$$\text{сұйық} \rightarrow \text{газ}$$

Булану кезінде жасырын жылу жұтылады.

4. Конденсация

Газдың сұйыққа айналуы:

$$\text{газ} \rightarrow \text{сұйық}$$

Конденсация кезінде жылу бөлінеді.

5. Сублимация

Қатты фазаның сұйық фазаны айналып өтіп, тікелей газға айналуы:

$$\text{қатты} \rightarrow \text{газ}$$

6. Десублимация

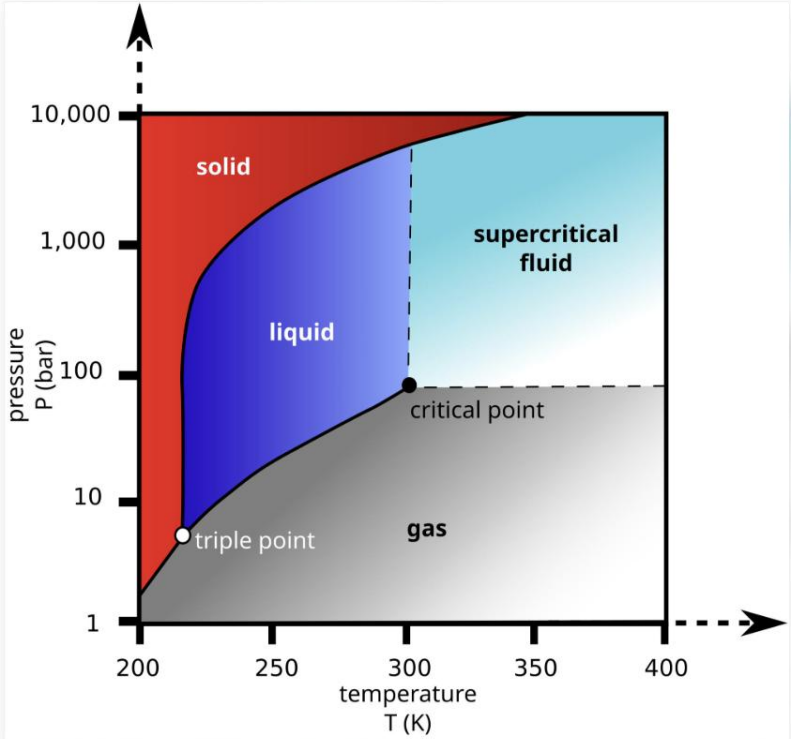
Газдың тікелей қатты фазаға айналуы:

$$\text{газ} \rightarrow \text{қатты}$$

Фазалық ауысулар және бірінші текті фазалық ауысулар

Фазалық ауысулар кезінде:

Үдеріс	Жылу эффектісі
Балқу	Жылу жұтылады
Қатаю	Жылу бөлінеді
Булану	Жылу жұтылады
Конденсация	Жылу бөлінеді
Сублимация	Жылу жұтылады
Десублимация	Жылу бөлінеді



Фармацевтикалық үдерістердегі маңызы:

Құбылыс	Қолданылуы
Балқу және кристалдану	Дәрілік заттардың қатты күйін зерттеу
Булану және конденсация	Еріткіштерді бөлу және кептіру
Сублимация	Лиофильді кептіру
Үштік нүкте	Мұздың сублимация жағдайларын түсіндіру
Критикалық құбылыстар	Суперкритикалық CO_2 көмегімен экстракция және бөлшек алу

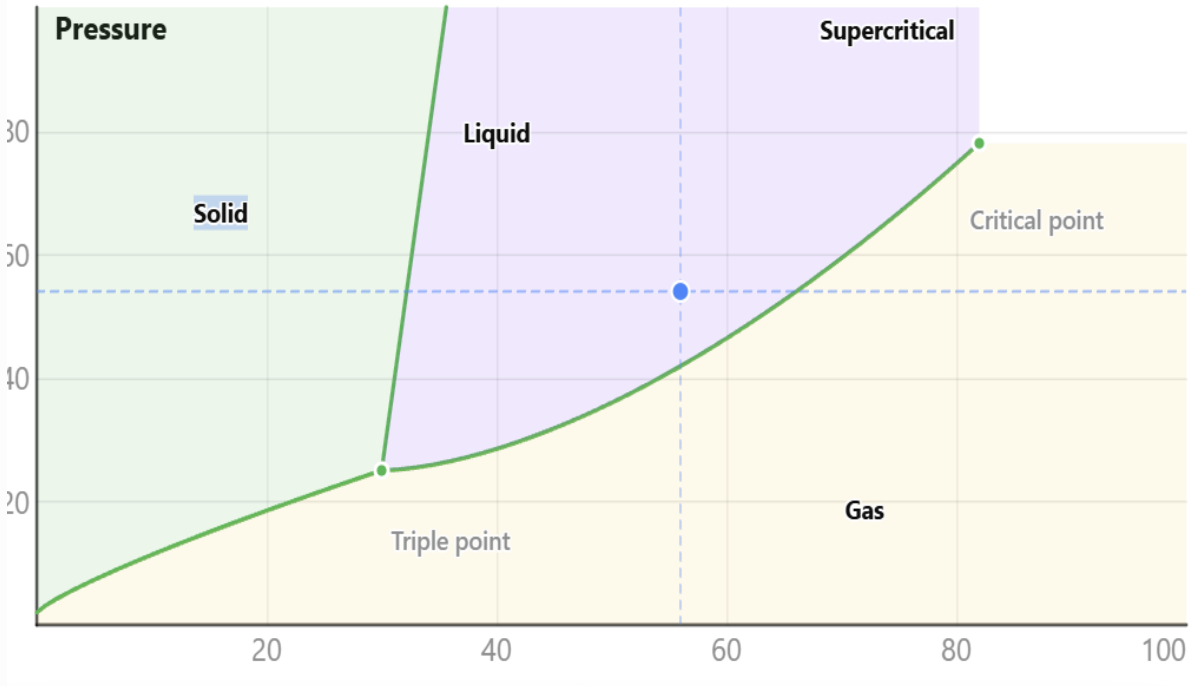
Бір компонентті жүйенің фазалық диаграммасы

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.

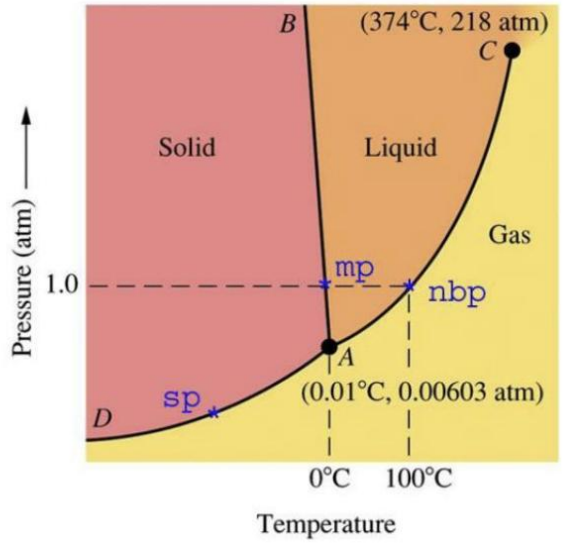
Фармацевтикалық маңызы: Температура мен қысымның дәрілік заттардың агрегаттық күйіне, балқуына, булануына, сублимациясына және кептіру жағдайларына әсерін түсіндіреді. Мысалы, лиофильді кептіру кезінде мұздың сублимациясы қолданылады.



Фазалық диаграммаларды фармацевтикалық композицияларды таңдауда қолдану

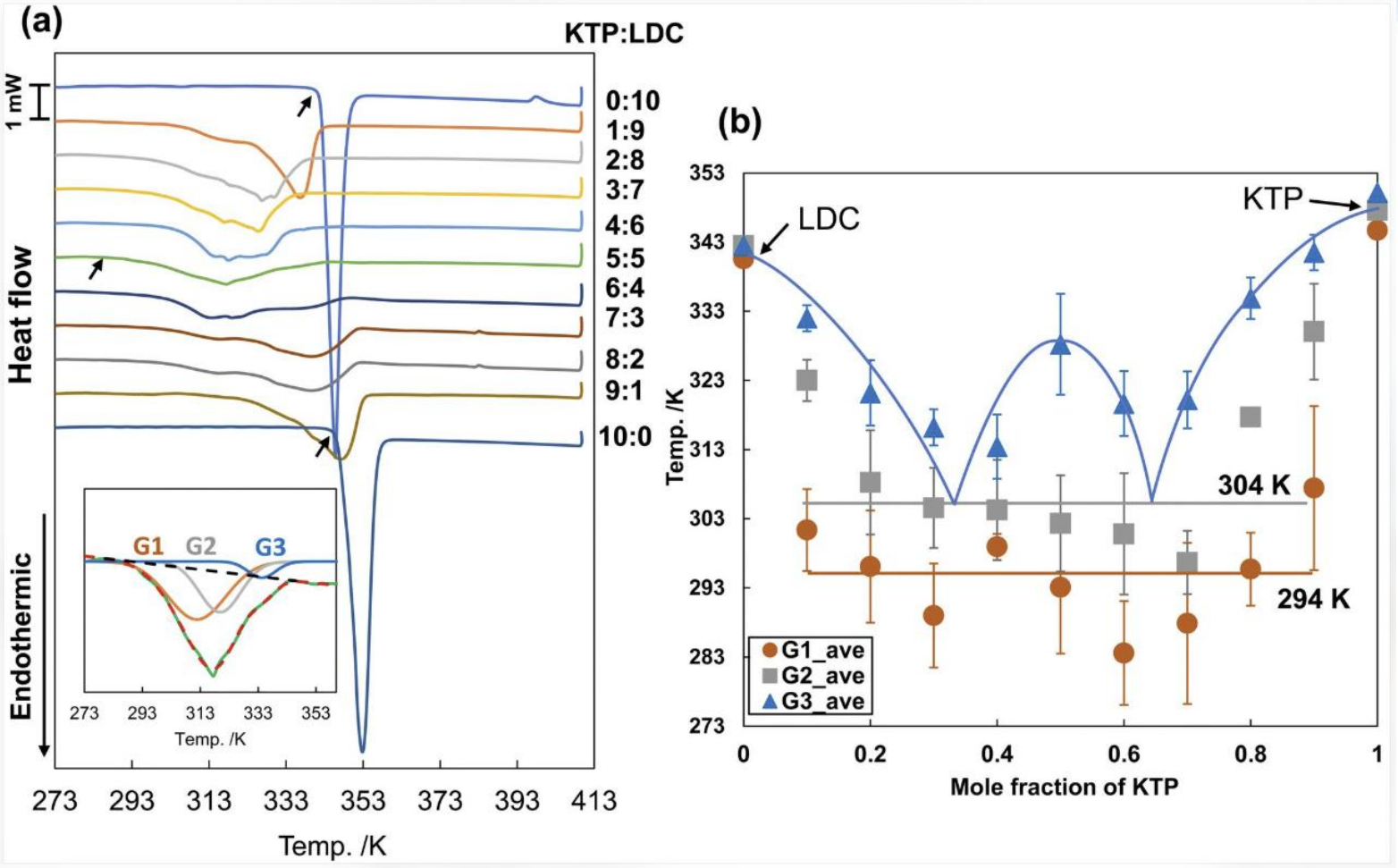
Фазалық диаграммалар дәрілік зат пен қосымша компоненттердің өзара үйлесімділігін, ерігіштігін және жүйенің фазалық тұрақтылығын зерттеуде маңызды.

C = 1



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.



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