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

Гиббс энергиясы: химиялық процестердің термодинамикалық мүмкіндігі және дәрілік заттар синтезінің энергетикалық критерийлері

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

PhD Савденбекова Б.Е.

Алматы, 2026

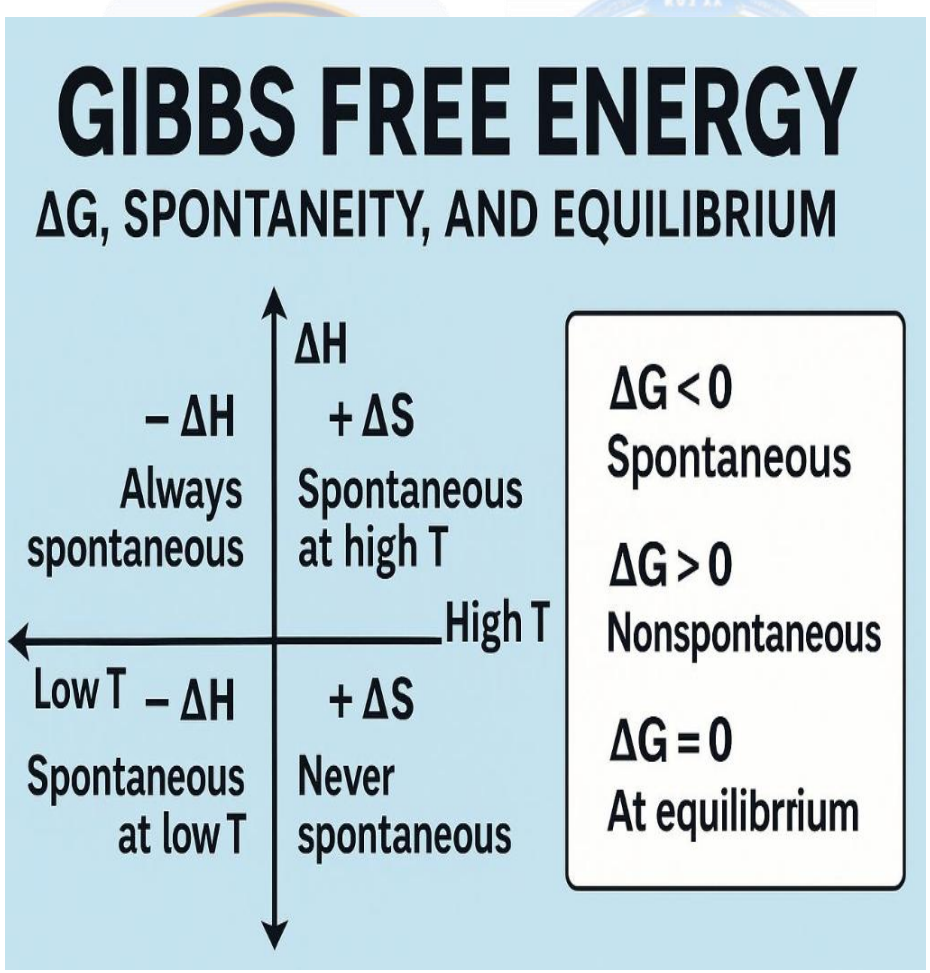
Дәрістің мақсаты — Гиббс энергиясының физикалық-химиялық мәнін түсіндіру, оның химиялық реакциялардың өздігінен жүру мүмкіндігін бағалаудағы рөлін қарастыру және дәрілік заттар синтезінің энергетикалық тиімділігін термодинамикалық критерийлер арқылы бағалау жолдарын меңгерту.

Бақылау сұрақтары:

1) Гиббс энергиясы дегеніміз не және ол қандай термодинамикалық шамаларға тәуелді?
2) Гиббс энергиясының өзгерісі химиялық реакцияның бағытын қалай ΔG0 және ΔG=0 жағдайларының физикалық мағынасын Энтальпия мен энтропия өзгерістерінің химиялық процестің термодинамикалық мүмкіндігіне әсері қандай?
3) Гиббс энергиясы мен тепе-теңдік константасының арасындағы байланысты жазыңыз.
4) Дәрілік заттар синтезінде Гиббс энергиясын анықтаудың практикалық маңызы қандай?
5) Реакцияның термодинамикалық мүмкіндігі жылдамдығының арасындағы айырмашылықты түсіндіріңіз.

Дәріс жоспары

- Гиббс энергиясы туралы түсінік және оның термодинамикалық мәні.
- Гиббс энергиясының энтальпия және энтропиямен байланысы.
- Гиббс энергиясының өзгерісі және химиялық реакциялардың өздігінен жүру критерийлері.
- Стандартты Гиббс энергиясы және химиялық реакциялардың тепе-теңдігі.
- Гиббс энергиясының температураға, қысымға және концентрацияға тәуелділігі.
-Дәрілік заттар синтезіндегі термодинамикалық тиімділікті бағалау.
- Гиббс энергиясын фармацевтикалық үдерістерді талдауда қолдану.



1. Гиббс энергиясы және оның термодинамикалық мәні

Гиббс энергиясы (G) – тұрақты температура мен қысым жағдайында химиялық процестің өздігінен жүру мүмкіндігін сипаттайтын термодинамикалық күй функциясы. Ол жүйенің энтальпиясы мен энтропиясына тәуелді және мына теңдеумен өрнектеледі:

$$G = H - TS$$

мұндағы:

- (G) – Гиббс энергиясы, Дж немесе кДж;
- (H) – энтальпия, Дж немесе кДж;
- (T) – абсолюттік температура, К;
- (S) – энтропия, Дж/(моль·К).

Химиялық реакция кезінде Гиббс энергиясының өзгерісі G реакцияға дейінгі және реакциядан кейінгі жүйенің энергетикалық күйінің айырмашылығын көрсетеді:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

мұндағы ΔH – энтальпия өзгерісі, ал ΔS – энтропия өзгерісі.

Гиббс энергиясының өзгерісі	Процестің термодинамикалық сипаты
$\Delta G<0$	Процесс өздігінен жүруге термодинамикалық тұрғыдан мүмкін
$\Delta G>0$	Процесс өздігінен жүрмейді, сыртқы энергия қажет
$\Delta G=0$	Жүйе химиялық тепе-теңдік күйінде болады

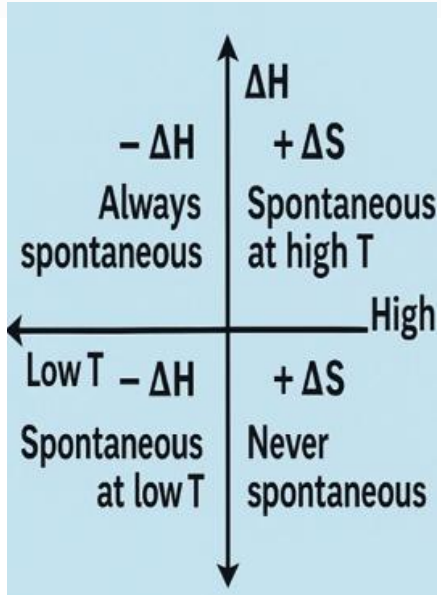
$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Гиббс энергиясының физикалық мағынасы:

- Жүйенің тұрақты температура мен қысымдағы термодинамикалық күйін сипаттайды.
- Химиялық реакциялардың жүру бағытын бағалауға мүмкіндік береді.
- Жүйенің тепе-теңдік күйіне жету тенденциясын көрсетеді.
- Тұрақты температура мен қысымда қайтымды процестің максимал пайдалы (кеңеюлік емес) жұмысына теріс таңбамен тең.

Реакцияның термодинамикалық мүмкіндігін бағалауда төрт жағдай қарастырылады:

1. $\Delta H<0$, $\Delta S>0$: процесс барлық температурада термодинамикалық тұрғыдан тиімді.
2. $\Delta H>0$, $\Delta S<0$: процесс барлық температурада термодинамикалық тұрғыдан тиімсіз.
3. $\Delta H<0$, $\Delta S<0$: процесс төмен температурада тиімді.
4. $\Delta H>0$, $\Delta S>0$: процесс жоғары температурада тиімді.



Стандартты Гиббс энергиясы және химиялық тепе-теңдік

$$\Delta G^{\circ}_{\text{реакция}} = \sum \nu \Delta G^{\circ}_{f}(\text{өнімдер}) - \sum \nu \Delta G^{\circ}_{f}(\text{реагенттер})$$

мұндағы:

- ΔG°_{f} – заттың стандартты түзілу Гиббс энергиясы;
- ν – реакция теңдеуіндегі стехиометриялық коэффициент.

Дәрілік заттар синтезінің энергетикалық тиімділігін бағалауда келесі критерийлер ңызды:

- Гиббс энергиясының өзгерісі ΔG – реакцияның термодинамикалық мүмкіндігін анықтайды.
- Энтальпия өзгерісі ΔH – синтез кезінде бөлінетін немесе сіңірілетін жылу мөлшерін сипаттайды.
- Энтропия өзгерісі ΔS – жүйедегі ретсіздік пен бөлшектердің энергетикалық таралуын сипаттайды.
- Температура – реакцияның термодинамикалық тиімділігіне әсер етеді.

Гиббс энергиясының өзгерісі және химиялық реакциялардың өздігінен жүру критерийлері

$\Delta G < 0$ — Өздігінен жүреді

Жүйе тепе-теңдікке қарай өздігінен өзгереді.

$\Delta G = 0$ — Тепе-теңдік

Тура және кері процестердің термодинамикалық қозғаушы күші теңеседі.

$\Delta G > 0$ — Өздігінен жүрмейді

Берілген жағдайда тура бағыт термодинамикалық тұрғыдан тиімсіз; кері бағытқа артықшылық беріледі.

Гиббс энергиясы мен тепе-теңдік константасының байланысы:

$$\Delta_r G^\circ = -RT \ln K$$

Мұндағы:

- R — универсал газ тұрақтысы;
- T — абсолют температура;
- K — термодинамикалық тепе-теңдік константасы.

Тепе-теңдік константасына байланысты:

Шарт	Тепе-теңдік сипаттамасы
$\Delta_r G^\circ < 0$	$K > 1$, өнімдер жағына ығысқан
$\Delta_r G^\circ = 0$	$K = 1$
$\Delta_r G^\circ > 0$	$K < 1$, реагенттер жағына ығысқан

Ескерту: Стандартты Гиббс энергиясы реакцияның нақты жағдайдағы бағытын әрдайым жеке өзі анықтамайды. Нақты реакциялық қоспа үшін реакцияның Гиббс энергиясын есептеу қажет.

Гиббс энергиясын фармацевтикалық үдерістерде қолдану

Гиббс энергиясы дәрілік заттардың синтезі мен технологиялық өңделуіндегі әртүрлі процестердің термодинамикалық мүмкіндігін бағалауға қолданылады.

Синтезді термодинамикалық бағалау кезеңдері:

1. Реакция теңдеуін және стехиометриялық коэффициенттерді анықтау.
2. Бастапқы заттар мен өнімдердің термодинамикалық деректерін жинау.
3. Реакцияның стандартты Гиббс энергиясын есептеу.
4. Тепе-теңдік константасын анықтау.
5. Температура мен концентрацияның реакция бағытына әсерін бағалау.
6. Қолайлы технологиялық жағдайларды таңдау.

Фармацевтикалық қолданылу бағыттары:

- **Дәрілік заттар синтезі:** реакцияның термодинамикалық тиімділігін және тепе-теңдік бағытын бағалау.
- **Еріту процесі:** дәрілік заттың еріткіште еруінің термодинамикалық қолайлылығын зерттеу.
- **Комплекстүзілу:** дәрілік зат пен металл иондары немесе басқа молекулалар арасындағы әрекеттесуді бағалау.
- **Кристалдану:** кристалдық фазаның түзілуі мен тұрақтылығын зерттеу.
- **Деградация:** дәрілік заттардың химиялық ыдырауының термодинамикалық мүмкіндігін бағалау

Маңызды: Теріс ΔG реакцияның термодинамикалық қолайлылығын білдіреді, бірақ жоғары өнім шығымын немесе төмен өндірістік шығынды автоматты түрде қамтамасыз етпейді. Ол үшін кинетика, селективтілік, катализатор, еріткіш, тазарту және энергия шығыны да ескеріледі.

Гиббс энергиясы мен тепе-теңдік константасының байланысы:

Гиббс энергиясы дәрілік заттарды өндіру және олардың физика-химиялық қасиеттерін зерттеу кезінде маңызды рөл атқарады.

Қолданылу бағыттары:

1. **Дәрілік заттарды синтездеу:** реакцияның энергетикалық тиімділігін және қолайлы температуралық жағдайларын бағалау.
2. **Дәрілік заттардың еруі:** заттың ерітіндіге өтуінің термодинамикалық мүмкіндігін анықтау.
3. **Кристалдану:** дәрілік заттардың кристалдық күйге өтуін және полиморфтық түрлерінің тұрақтылығын бағалау.
4. **Дәрілік заттардың тұрақтылығы:** химиялық ыдырау және басқа да өзгерістердің термодинамикалық мүмкіндігін зерттеу.
5. **Экстракция:** белсенді компоненттердің әртүрлі фазалар арасында таралуын түсіндіру.



3. Дәрілік заттардың кристалдануы

Кристалдық формалардың термодинамикалық тұрақтылығын және кристалдану бағытын бағалау.

Фармацевтикалық процестердегі мысалдар:



1. Дәрілік заттың еруі

Дәрілік заттың ерітіндіге өтуінің термодинамикалық тиімділігін бағалау. Еру процесі үшін Гиббс энергиясының өзгерісі маңызды.



2. Лиофильді кептіру

Мұздың сублимациялануы арқылы суды жою процесін түсіндіру. Температура мен қысым фазалық тепе-теңдікке әсер етеді.

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