



ӘЛ-ФАРАБИ АТЫНДАҒЫ ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ ХИМИЯ ЖӘНЕ ХИМИЯЛЫҚ ТЕХНОЛОГИЯ ФАКУЛЬТЕТІ



СӨЖ

Тақырыбы: Әртүрлі заттардың кристаллдық тор энергиясын, сольваттану энергиясын, гидратация жылуын есептеу

Орындағандар:
Бақытқан.Б.
Қадылбекова.А
401-ХИ
Тексерген: х.ғ.д.,
профессор
Оспанова.А.К

Алматы,
2017

ЖОСПАР:

- 1. Теориялық кіріспе
- 2. Есептеу барысы
- 3. Нәтижелерді өңдеу
- 4. Қорытынды

БЕРІЛГЕН ТАПСЫРМА:

1. NaCl типті кристалдық торы бар, рубидий және калий, натрий, литий иодидтері үшін Борн моделі бойынша кристалдық тор энергиясын есепте. Моделунг константасы 1,7480. n константасын мына мәндерге сәйкес 6,20; 8,00; 9,30 және 9,50-ге тең. Кристалдық радиустың шамасын “Краткий справочник физико-химических величин” атты анықтамалықты қолданып алыңдар.

Алынған мәндердің негізінде кристалдық тор энергиясының иондық радиус шамасынан тәуелділігі туралы қорытынды жаса.

2. NaCl типті кристалдық торы бар, рубидий және калий, натрий, литий иодидтері үшін Капустинский моделі бойынша кристалдық тор энергиясын есепте.

Кристалдық радиустың шамасын “Краткий справочник физико-химических величин” атты анықтамалықты қолданып алыңдар.

Алынған мәндердің негізінде кристалдық тор энергиясының иондық радиус шамасынан тәуелділігі туралы қорытынды жаса.

3. NaCl типті кристалдық торы бар, рубидий және калий, натрий, литий иодидтері үшін сольваттану энергиясын есепте. Кристалдық радиустың шамасын “Краткий справочник физико-химических величин” атты анықтамалықты қолданып алыңдар.

Алынған мәндердің негізінде сольваттану энергиясының иондық радиус шамасынан тәуелділігі туралы қорытынды жаса.

4. 25⁰C-та болған кездегі, NaCl типті кристалдық торы бар рубидий және калий, натрий, литий иодидтері үшін Борн-Бьеррум теңдеуі бойынша гидратация жылуын есепте. Кристалдың радиус шамасын “Краткий справочник физико-химических величин” атты анықтамалықты қолданып алыңдар.

Алынған мәндердің негізінде гидратация жылуының иондық радиус шамасынан тәуелділігі туралы қорытынды жаса.

ТЕОРИЯЛЫҚ КІРІСПЕ:

Кристалдық тор энергиясын есептеудегі Макс Борнның әдісі (1920 ж.)

Кристалдық тор энергиясы- вакуумдегі иондарды шексіз үлкен арақашықтыққа бөлуге жұмсалатын $+z_1$ және $-z_2$ зарядтардың арасындағы жұмыс. (Дж/моль): $+z_1$ және $-z_2$

электростатикалық тартылыс күші : $F_{эл} = -z_1 z_2 e_0^2 / 4\pi\epsilon r^2$

Электрон қабықшаларының тебілу күші белгісіз, бірақ болжамды түрде : $F_{теб} = B / r^{n+1}$

Олай болса, әрекеттесудің қосынды күштері :

$$F = F_{эл} + F_{теб} = -z_1 z_2 e_0^2 / 4\pi\epsilon r^2 + B / r^{n+1}$$

Тепе-теңдік жағдайда $F=0$, $r = r_0$. Сәйкесінше: $B/r^{n+1} = z_1 z_2 e_0^2 / 4\pi\epsilon r^2$

$$z_1 z_2 e_0^2 / 4\pi\epsilon r^2 = 0 ,$$

$$B = z_1 z_2 e_0^2 r_0^2 / 4\pi\epsilon$$

Анықтама бойынша, $F = -dU/dr$, U -жүйенің потенциалдық энергиясы. Иондарды шексіз арақашықтыққа бөлуге энергиясы мынағал:

$$\Delta U = - \int_{r_0}^{\infty} \left(-\frac{z_1 z_2 e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} + \frac{B}{r^{n+1}} \right) dr = \frac{z_1 z_2 e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} - \frac{B}{n r_0^n} = \frac{z_1 z_2 e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

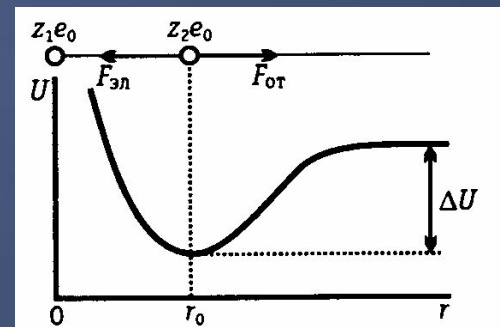


Рис. 2.1. К расчету энергии взаимодействия двух ионов

Бұл иондық жұптардың 1 молін бұзуға қажетті энергия. Борн бойынша кристаллдық тор энергиясы: