



Әл-фараби атындағы қазақ ұлттық университеті Химия және химиялық технология факультеті

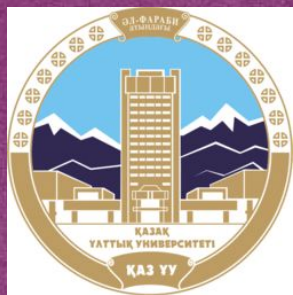


СӨЖ

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



Жұмыстың мақсаты:



- Кристалдық тор энергиясына, сольваттану энергиясына, гидратация жылуына иондық радиустың әсерін, яғни тәуелділігін анықтау.

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. 25°C-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 жұмыс. (Дж/моль). $+Z_1$ және $-Z_2$ зарядтардың арасындағы 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: $B/r_0^{n+1} - z_1 z_2 e_0^2 / 4\pi\epsilon r_0^2 = 0$

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

Анықтама бойынша, $F = -dU/dr$, U -жүйенің потенциалдық энергиясы.

Иондарды шексіз арақашықтыққа бөлу энергиясы мынаған тең:

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

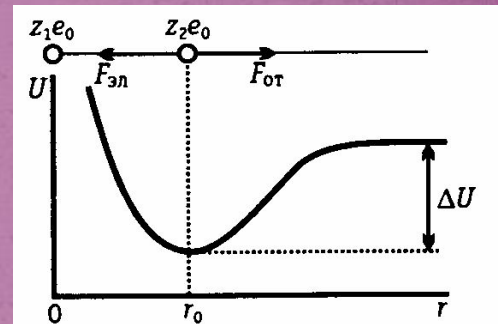


Рис. 2.1. К расчету энергии взаимодействия двух ионов

Есептелу жолы:

3-тапсырма.

Қажетті формула :
$$\Delta G = N_A A \frac{z_1 z_2 e_0^2}{4\pi \epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

$$e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$$

$$\epsilon = 0.88542 \cdot 10^{-11} \text{ Ф/м}$$

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ г/моль}$$

Есептелуі:

* $r(\text{NaCl}) = 3.68 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ $\Delta G = 655 \text{ кДж}$

* $r(\text{CsCl}) = 3.52 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ $\Delta G = 688 \text{ кДж}$

* $r(\text{CsBr}) = 3.1 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ $\Delta G = 771 \text{ кДж}$

* $r(\text{CsI}) = 2.8 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ $\Delta G = 870 \text{ кДж}$

За-тапсырма

Қажетті формула :

$$\Delta G_{K2} = 1202.4 \cdot 10^{-10} \nu \frac{|Z_+||Z_-|}{r_+ + r_-} - 414.8 \cdot \nu \frac{10^{-20}}{(r_+^2 + 2r_+r_- + r_-^2)}$$

Есептелуі: