Физикалық химия

Дәріс № 2
Тақырып: Молекула құрылысы. Молекулалық рефракция.

МАҚСАТЫ: Молекула құрылысы, молекулалардың поляризациясы, молекулярлық рефракциямен таныстыру.

ЖОСПАР:

1. Молекула құрылысы. Полярлы және полярлы емес молекулалар.
2. Молекулалардың поляризациясы. Дебай, Клаузис - Моссоти теңдеулері.
3. Лорентц - Лоренц теңдеуі. Молекулярлық рефракция.

ӘДЕБИЕТТЕР:

Негізгі әдебиеттер

1. Akhmetova S.O., Abilkasova S. O. Physical and colloid chemistry [Текст/Электронный ресурс]. - Almaty : ATU, 2019. - 138 p. - ISBN 978-601-263-500-3

2. Құлажанов Қ.С., Таусарова Б.Р., Сүлейменова М.Ш., Абилкасова С.О. Физикалық химия: оқу құралы. - Алматы: АТУ, 2014. - 264 с. ISBN 978-601-263-285-9

3. Кулажанов К.С., Таусарова Б.Р., Сулейменова М.Ш. Физическая химия [текст] : учебное пособие. - Алматы : АТУ, 2016. - 353 с. - ISBN 978-601-263-341-2

4. Зарубин, Д.П. Физическая химия [Текст] : учебное пособие. - М : ИНФРА-М, 2019. - 474 с. - ISBN 978-5-16-010067-8.

5. Щукин, Е.Д. Коллоидная химия [текст] . - 7-е изд.,испр. и доп. - М : Юрайт, 2016. - 444 с. - ISBN 978-5-9916-6948-1

6. Физикалық химия [Текст/Электронный ресурс] : оқулық / Х. Қ. Оспанов, Д. Х. Қамысбаев, Е. Х. Абланова, Г. Х. Шәбікова. - Өнд., толық., 3-бас. - Алматы : Полиграфкомбинат, 2014. - 544 б. - ISBN 978-601-7427-45-0

7. Кудряшева, Н.С. Физическая и коллоидная химия [Текст/Электронный ресурс]: учебник / Н. С. Кудряшева, Л.Г. Бондарева. - 2-е изд.,перераб. и доп. - М : Юрайт, 2016. - 379 с. - (Серия: Бакалавр.Прикладной курс). - ISBN 978-5-9916-7159-0

8. Құлажанов Қ.С., Таусарова Б.Р.,Әбілқасова С.О. Коллоидтық химия [текст]: Оқу құралы. - Алматы : АТУ, 2017. - 285 б. - ISBN 978-601-263-383-2

Қосымша әдебиеттер:

1. Эткинс П.,де Паула Дж. Физикалық химия [Текст/Электронный ресурс] : Оқулық. 3-бөлім. Жылдамдықтар өзгеруінің механизмдері / Эткинс П.,де Паула Дж. ; Ауд. Е.Х. Абланова. - Алматы : Дәуір, 2014. - 512. - ISBN 978-601-217-498-4

2. Белик, В.В. Физическая и коллоидная химия [текст] : учебник. - 9-е изд., стер. - М : Академия, 2015. - 288 с. ISBN 978-5-4468-2311-6

3. Murzagaliyeva, M.G. Physical chemistry for mathematicians in tasks and questions [Текст] : educational manual / M. G. Murzagaliyeva, A. K. Zhusupova, A. S. Tusupbekova. - Almaty : Qazaq university, 2015. - 100 p. - ISBN 978-601-04-1570-6

4. Ospanova, Zh.B. Physical chemistry of foams and aerosols [Текст] : educational manual Ospanova Zh.B., K. B. Musabekov. - Almaty : Qazaq university, 2016. - 72 p. - SBN 978-601-04-2100-4.

Молекулалардың поляризациясы және поляризацияланғыштығы

Ядроға қатысты электрондық тығыздығы симметриялы таралумен сипатталатын бірдей (H_2 ,O_2, Cl_2, N_2) немесе бірнеше атомнан құралған молекулалар (CO_2, CS_2, CH_4., C_6H_6) поляссыз (полярлы емес) деп аталады.

Ядроға қатысты электрондық тығыздығы симметриясыз таралумен сипатталатын молекулар (H_2O, CH_3COOH, HCl) полярлы деп аталады.

Молекуланың симметриялығын диполь моменті көрсетеді. Диполь моменті зарядтың зарядтар арақашықтықтығына көбейтіндісіне тең.

$$\mu = q \cdot \ell \quad (1.1)$$

μ – диполь моменті, кулон·м

q– заряд

l–зарядтардың арақашықтығы.

Полярсыз молекулалардың $\mu = 0$, полярлы молекулалар үшін $\mu \leq 1$. Химиялық қосылыстардың диполь моменті молекуладағы атомдардың орналасуынан тәуелді.

Сыртқы электр өріс әсерінен атомдардың, электрондардың ығысуын, сондай-ақ молекулалардың бағытталуын поляризация деп атайды. Молекулалардың поляризациясы электрондық ($П_{эл}$), атомдық ($П_{ат}$) және бағытталу ($П_{баг}$) поляризацияларынан құралады:

$$П = П_{ат} + П_{эл} + П_{баг} \quad (1.2)$$

$П_{ат}$ – молекула атомдарының ығысуы

$П_{эл}$– электрон бұлттарының ығысуы

$П_{баг}$ –молекулалардың электр өрісінде бағытталуы

Молекулалардың поляризациялану қасиетінің сандық сипаттамасын полярланғыштық(α) дейді. Молекулалардың полярланғыштығы электрондық, атомдық және бағытталу полярланғыштарының қосындысына тең:

$$\alpha = \alpha_{ат} + \alpha_{эл} + \alpha_{баг} \quad (1.3)$$

Деформациялық полярланғыштық ядро мен электрон бұлттарының орналасуына қатысты ығысуын сипаттайды және электрондық, атомдық полярланғыштықтардың қосындысына тең:

$$\alpha_{д} = \alpha_{ат} + \alpha_{эл} \quad (1.4)$$

Электрондық және атомдық полярланулар температурадан тәуелсіз.

Бағытталу поляризациясы абсолюттік температураға кері пропорционал, себебі молекулалардың ретсіз жылулық қозғалыстары бағытталуды бұзады:

$$\alpha_{баг} = \frac{\mu^2}{3\kappa T} \quad (1.5)$$

μ - диполь моменті.

κ – Больцман тұрақтысы

Молекулалары полярлы және өзіндік диполь моментімен сипатталатын заттар үшін, сондай-ақ бағытталу поляризациялары Дебай теңдеуімен өрнектеледі:

$$П = П_{деф} + П_{баг} = \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \cdot \frac{M}{\rho} = \frac{4}{3}\pi N_a \alpha + \frac{4\pi N_a \mu^2}{9\kappa T}$$

немесе

$$П = \frac{4}{3}\pi N_a \left(\alpha + \frac{\mu^2}{3\kappa T} \right) \quad (1.6)$$

ε– диэлектрлік тұрақтысы, *M* – заттың молекулалық массасы, ρ –тығыздық N_a– Авогадро тұрақтысы, κ – Больцман тұрақтысы, *T* – абсолюттік температура

$П$ – молярлық поляризация, μ – диполь моменті, α– полярланғыштық

Дебай теңдеуін пайдалана отырып, белгілі ε, М және ρ-ның мәндері бойынша молекулалардың полярлануын, диполь моментінің мәнін анықтауға болады.

Полярсыз молекулалардың поляризациясы μ=0 және температурадан тәуелсіз:

$$\frac{4\pi N_a \mu^2}{9 \quad \kappa T} = 0 \quad (1.7)$$

Теңдеу келесідей түрде болады :

$$П = \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \cdot \frac{M}{\rho} = \frac{4\pi N_a}{3} \cdot \alpha \quad (1.8)$$

Клаузиус-Моссоти теңдеуі (1.8) полярсыз молекулаларға тән.

Жоғарыдағы поляризация механизмдері тұрақты сыртқы электр өрісінде қарастырылды. Бірақта поляризация ауыспалы электр өрісінде болуы мүмкін. Сыртқы ауыспалы электр өріс жиілігінде $\nu > 10^{15}$ $с^{-1}$ тек электрондық поляризация сақталады. Шексіз үлкен толқын ұзындығында диэлектрлік өткізгіштік сыну көрсеткішіне тең екенін ескерсек $\varepsilon = n^2$ мольдік рефракция R_Mэлектрондық поляризацияны көрсетеді және Лоренц- Лоренц теңдеуімен өрнектеледі:

$$Пэл = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \cdot \frac{M}{\rho} \quad (1.9)$$

Лоренц- Лоренц теңдеуі көрінетін және УК-аймақа сәйкес жоғары жиілікті ауыспалы электр өрісі үшін орындалады және сыну көрсеткішін өлшеуге негізделген зерттеулер мен сараптау әдістері – рефрактометрияның негізі болып табылады.

Молекулалардың рефракциясы

Мольдік рефракция R_M электрондық поляризацияны көрсетеді және Лоренц- Лоренц теңдеуімен (1.9) өрнектеледі:

$$Пэл = R_M = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \cdot \frac{M}{\rho}$$

R_M – мольдік рефракция, $м^3$/ моль n – сыну көрсеткіші M – заттың мольдік массы
ρ– тығыздық

Молекулалардың рефракциясын аддитивтілік ережесі бойынша да есептеуге болады:

$$R_M = \sum Ram + \sum Rбай \quad (1.10)$$

$R_{ат}$– атомдар рефракциясы, $R_{бай}$– байланыстар рефракциясы

Атомдар, байланыстар рефракция мәндері тәжірбиеде анықталып, кестеде келтірілген. Тәжірбиелік және аддитивтілік ережемен табылған мольдік рефракция мәндерін салыстыра отырып, заттың құрылысын, электрондық поляризациясын, молекулалардың диполь моментін, өлшемін (радиусын) анықтауға анықтауға болады.

Заттың бір грамына қатысты рефракция, меншіктірефракция деп аталады:

$$r = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \cdot \frac{1}{\rho} \quad (1.11)$$

r–меншікті рефракция.

Заттың сыну көрсеткішін және тығыздығын біле отырып, заттың негізігі сипаттамасы мольдік рефракцияны анықтауға болады.