

## **Физикалық және коллоидтық химия**

**Дәріс № 2**

**Тақырып: Молекула құрылысы. Молекулалық рефракция.**

**МАҚСАТЫ:** Молекула құрылысы, молекулалардың полярлануы, молекулярлық рефракциямен таныстыру.

**ЖОСПАР:**

1. Молекула құрылысы. Полярлы және полярлы емес молекулалар.
2. Молекулалардың полярлануы. 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. Шукин, 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.,Әбілкасова 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 полярлануы және полярланғыштығы**

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

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

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

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

$\mu$  – диполь моменті, кулон·м

$q$  – заряд

$\ell$  – 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 ( $P_{эл}$ ), атомдық ( $P_{ат}$ ) және бағытталу ( $P_{бағ}$ ) поляризацияларынан құралады:

$$P = P_{ат} + P_{эл} + P_{бағ} \quad (1.2)$$

$P_{ат}$  – молекула атомдарының ығысуы

$P_{эл}$  – электрон бұлттарының ығысуы

$P_{бағ}$  – молекулалардың электр өрісінде бағытталуы

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

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

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

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

*Электрондық және атомдық полярланулар температурадан тәуелсіз.*

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

$$\alpha_{бағ} = \frac{\mu^2}{3kT} \quad (1.5)$$

$\mu$  – диполь моменті.

$k$  – Больцман тұрақтысы

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

$$P = P_{деф} + P_{бағ} = \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \cdot \frac{M}{\rho} = \frac{4}{3} \pi N_a \alpha + \frac{4 \pi N_a \mu^2}{9 kT}$$

немесе

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

$\varepsilon$  – диэлектрик тұрақтысы,  $M$  – заттың молекулалық массасы,  $\rho$  – тығыздық

$N_a$  – Авогадро тұрақтысы,  $k$  – Больцман тұрақтысы,  $T$  – абсолюттік температура

$\Pi$  – молярлық поляризация,  $\mu$  – диполь моменті,  $\alpha$  – поляриланғыштық

Дебай теңдеуін пайдалана отырып, белгілі  $\varepsilon$ ,  $M$  және  $\rho$ -ның мәндері бойынша молекулалардың полярилануын, диполь моментінің мәнін анықтауға болады.

Полярсыз молекулалардың поляризациясы  $\mu=0$  және температурадан тәуелсіз:

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

Теңдеу келесідей түрде болады :

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

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  $\nu > 10^{15} \text{ c}^{-1}$  тек электрондық поляризация сақталады. Шексіз үлкен толқын ұзындығында диэлектрлік өткізгіштік сыну көрсеткішіне тең екенін ескерсек  $\varepsilon = n^2$  мольдік рефракция  $R_M$  электрондық поляризацияны көрсетеді және Лоренц- Лоренц теңдеуімен өрнектеледі:

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

Лоренц- Лоренц теңдеуі көрінетін және УК-аймаққа 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:

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

$R_M$  – мольдік рефракция,  $\text{м}^3/\text{моль}$   $n$  – сыну көрсеткіші  $M$  – заттың мольдік массы  
 $\rho$  – тығыздық

Молекулалардың рефракциясын аддитивтілік ережесі бойынша да есептеуге болады:

$$R_M = \sum R_{\text{ат}} + \sum R_{\text{бай}} \quad (1.10)$$

$R_{\text{ат}}$  – атомдар рефракциясы,  $R_{\text{бай}}$  – 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 негізгі сипаттамасы мольдік рефракцияны анықтауға болады.