әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті

Химия және химиялық технология факультеті

Физикалық химия, катализ және мұнайхимия кафедрасы

«Физикалық химияның теориясы және мәселелері »

№3 лекция

Сольватация энергиясын есептеудегі Борн моделі және Борн–Габер циклі. Ионофорлар мен ионогендер

Автор: PhD Савденбекова Б.Е.



Дәрістің мақсаты:
Сольваттану энергиясының физикалық-химиялық мәнін түсіндіру, иондардың еріткішпен әрекеттесуінің энергетикалық ерекшеліктерін қарастыру және Борн әдісінің көмегімен иондардың вакуумнан диэлектрлік ортаға ауысу кезіндегі сольваттану энергиясын анықтау принципін меңгерту.

Бақылау сұрақтары:

1. Сольваттану энергиясы дегеніміз не және оның еру процесіндегі маңызы қандай?
2. Иондардың сольваттану процесі қандай энергетикалық өзгерістермен сипатталады?
3. Борн әдісінің негізгі қағидасы неде?
4. Борн әдісі бойынша ионның вакуумнан еріткішке ауысуы қандай үш сатыдан тұрады?
5. Еріткіштің диэлектрлік тұрақтылығы сольваттану энергиясына қалай әсер етеді?
6. Борн теңдеуіндегі ион радиусы мен зарядының энергетикалық процеске әсерін түсіндіріңіз.
7. Сольваттану энергиясының электролиттердің еру процесіндегі кристалдық торды бұзуға тигізетін әсері қандай?

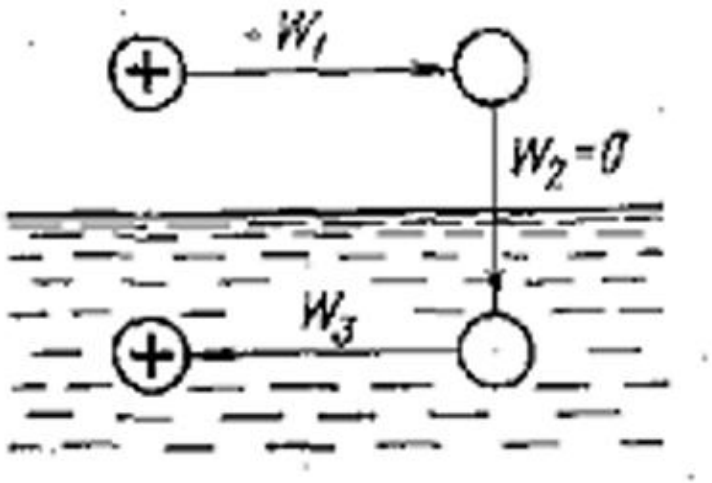
Дәріс жоспары:

Сольватация және гидратация туралы негізгі түсініктер.
Сольватация энергиясының физика-химиялық мәні.
Сольватация энергиясын есептеудегі Борн моделінің теориялық негіздері.
Борн теңдеуі және оның есептеулерде қолданылуы.
Борн–Габер циклі: құрылымы және термохимиялық негіздері.
Борн–Габер циклі арқылы иондық қосылыстардың энергиясын есептеу.
Ионогендер: анықтамасы, түрлері және иондану механизмі.
Ионофорлар: құрылымы, жіктелуі және иондарды тасымалдау механизмі.
Ионофорлар мен ионогендердің өзара айырмашылықтары.
Фармацевтикадағы және биологиялық жүйелердегі қолданылуы.

Сольваттану энергиясы (Борн әдісі)

Еріткіштің сольваттану қасиеті еру процесінің маңызды роль атқарады, себебі еріген кезде кристалдық торды бұзу және иондарды ерітіндіге ауыстыру керек, ал ол үшін белгілі бір энергия қажет.

Сольваттану энергиясы – *1 моль ионның вакуумнан еріткішке көшу процесінің энергиясы.* Бұл энергияға еріткішке әрбір келесі ионды енгізгенде болатын электростатикалық әрекеттесу кірмейді. Осыған байланысты ерітінді электробейтарап болу қажет, яғни оған қарама-қарсы иондар қажетті мөлшерде енгізіледі, ал катиондар мен аниондар арасындағы тартылысты ерітіндіні (шексіз) сұйылту арқылы азайтып болдырмайды.



Борн әдісі бойынша сольваттану энергиясын есептеу

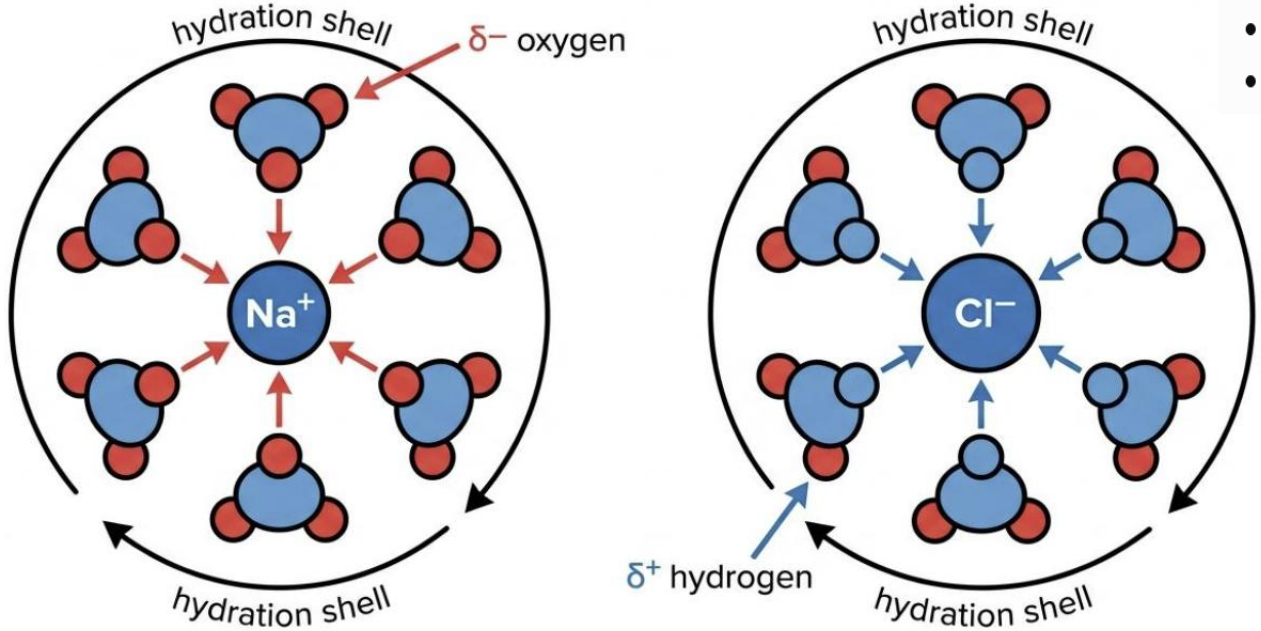
1) вакуумда шардың зарядсыздануы;
2) зарядсызданған шарды вакуумнан еріткішке ауыстыру;
3) шардың ортада зарядталуы (2-сурет).

Сольватация және гидратация туралы негізгі түсініктер

Егер еріткіш су болса, бұл процесс **гидратация** деп аталады.

Сольватация кезінде:

- еріген зат бөлшектері еріткіш молекулаларымен әрекеттеседі;
- еріткіш молекулалары еріген бөлшектердің айналасында белгілі бір бағытта орналасады;
- иондар мен молекулалардың сольваттық қабаты қалыптасады;
- жүйенің энтальпиясы мен энтропиясы өзгеруі мүмкін.



Мысал: натрий хлоридінің суда еруі

$$NaCl_{(s)} \rightarrow Na^{+}_{(aq)} + Cl^{-}_{(aq)}$$

Су молекуласының полярлы құрылымына байланысты:

- оттек атомының теріс полюсі Na^{+} катионына бағытталады;
- сутек атомдарының оң полюстері Cl^{-} анионына бағытталады.

Сольватация энергиясының қорытылуы

$$F = \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon\ r^2} \longrightarrow X = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon\ r^2} \longrightarrow \varphi = -\int_{\infty}^{r_i} X dr = -\int_{\infty}^{r_i} \frac{q dr}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon\ r^2} = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon\ r_i}$$

$$\longrightarrow W = \int_0^q \varphi dq = \frac{q dq}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon\ r_i} = \frac{q^2}{8\pi\varepsilon_0\varepsilon\ r_i} \longrightarrow W_1 = \frac{z_i^2 e_0^2}{8\pi\varepsilon_0\varepsilon\ r_i},\quad W_3 = \frac{z_i^2 e_0^2}{8\pi\varepsilon_0\varepsilon\ r_i}, \longrightarrow \Delta G = N_A \sum_i W_i$$

$$-\Delta G = N_A \frac{z_i^2 e_0^2}{8\pi\varepsilon_0 r_i}\left(1 - \frac{1}{\varepsilon}\right)$$

Борн теңдеуі және сольватация энергиясын есептеу

$$\Delta G_{\text{Born}} = -\frac{N_A z^2 e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}\left(1 - \frac{1}{\varepsilon_r}\right)$$

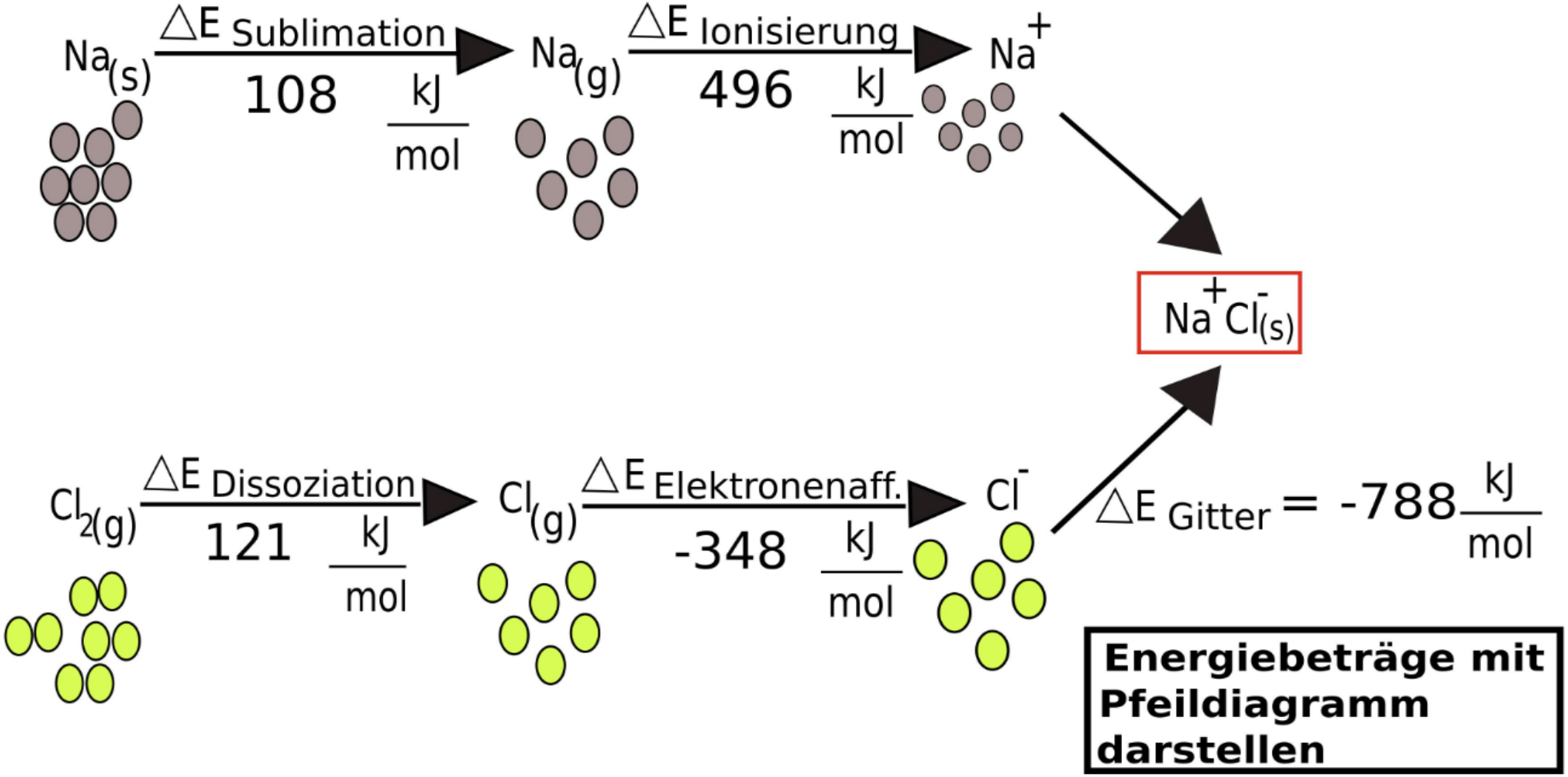
Мұндағы:

- ΔG_{Born} — Борн моделі бойынша сольватацияның электростатикалық Гиббс энергиясы, Дж/моль;
- N_A — Авогадро тұрақтысы;
- z — ион зарядының саны;
- e — элементар заряд;
- ε_0 — вакуумның электр тұрақтысы;
- r — ионның тиімді радиусы, м;
- ε_r — еріткіштің салыстырмалы диэлектрлік өтімділігі.

Теңдеуден шығатын негізгі заңдылықтар:

1. Ион зарядының модулі артқан сайын сольватация энергиясының абсолюттік мәні артады, себебі ол z^2-қа пропорционал.
2. Ион радиусы кішірейген сайын электростатикалық сольватация күшейеді.
3. Еріткіштің диэлектрлік өтімділігі жоғарылаған сайын сольватация энергиясы теріс мәнге қарай өзгереді.
4. Бірдей заряд пен радиус жағдайында Борн моделі оң және теріс иондар үшін бірдей энергия болжайды.

Борн–Габер циклі және оның термохимиялық негіздері



Борн–Габер циклі және оның термохимиялық негіздері

Борн–Габер циклі — иондық кристалдардың түзілу энтальпиясын және кристалдық тор энтальпиясын есептеуге арналған термохимиялық цикл. Ол Гесс заңына негізделеді.

Бұл циклде иондық қосылыс элементтердің стандартты күйінен бірнеше аралық саты арқылы түзіледі.

Негізгі сатылары:

1. Натрийдің сублимациясы:

$$Na_{(s)} \rightarrow Na_{(g)}$$

2. Натрийдің иондалуы:

$$Na_{(g)} \rightarrow Na^{+}_{(g)} + e^{-}$$

3. Хлор молекуласының атомдарға диссоциациялануы:

$$\frac{1}{2}Cl_{2(g)} \rightarrow Cl_{(g)}$$

4. Хлор атомының электрон қосып алуы:

$$Cl_{(g)} + e^{-} \rightarrow Cl^{-}_{(g)}$$

5. Иондық кристалдық тордың түзілуі:

$$Na^{+}_{(g)} + Cl^{-}_{(g)} \rightarrow NaCl_{(s)}$$

$$Na_{(s)} + \frac{1}{2}Cl_{2(g)} \rightarrow NaCl_{(s)}$$

Пайдаланылған дереккөздер тізімі

1. Оспанов Х.Қ., Қамысбаев Д.Х., Абланова Е.Х., Шабикова Г.Х. Физикалық химия. - Өскемен: ШҚМУ баспасы, 1997. - 575 с.
2. Ә. Қ.Оспанова., Г.А. Сейлханова Химиялық кинетика және электрохимия. – Алматы,2006, 2010. 2-ші басылым. – 200 б.
3. Ә.Қ. Оспанова., Г.А. Сейлханова Физикалық химияның таңдаулы тараулары. – Алматы, 2011 ж. – 149 б.
4. Шабикова Г.Х., Оспанова А.К., Ашимхан Н.С. Физикалық химия бойынша есептер мен мысал есептер. – Алматы: КазНУ, 2013. – 272
5. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. – М.: Химия, Колос С, 2006. – 672 с.
6. Васильев В.П. Термодинамические свойства элдектролитов. М. 1984.
7. Г.Х. Шабикова, Л.И. Сыздыкова Современное состояние теории сольватации и растворения. Алматы.2010.
8. **Интернет-ресурстары**