

М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті

ӘОЖ: 577.1:66.06

Қолжазба құқығында

ЕРМЕКОВ САЯТ РАКИМБАЙУЛЫ

Сулы –тұзды жүйелердегі құрамдық, күйлік, құрылымдық және физика– химиялық өзгерістер заңдылықтарын анықтау, олардың галургиялық технологиядағы қолданбалық маңыздылығы

Бейорганикалық заттардың химиялық технологиясы

Философия докторы (PhD) дәрежесін
алу үшін дайындалған диссертация

Ғылыми кеңесші
техника ғылымдарының
докторы, профессор
Бестереков У.
М.Әуезов атындағы ОҚУ
Шет елдік ғылыми кеңесші
техника ғылымдарының
докторы, профессор
Петропавловский И.А.
Д.И. Менделеев атындағы МХТУ

Қазақстан Республикасы
Шымкент, 2020

МАЗМҰНЫ

НОРМАТИВТІК СІЛТЕМЕЛЕР	4
АНЫҚТАМАЛАР	5
БЕЛГІЛЕУЛЕР МЕН ҚЫСҚАРТУЛАР	6
КІРІСПЕ	7
1 ӘДЕБИ ШОЛУ	11
1.1 Галургиялық технология – өзіндік ерекшелікті өндірістік сала	11
1.2 Табиғи тұздар мен қоршаған ортада қордаланған тұзды қалдықтар - галургиялық технология үшін негіздік шикізат	14
1.3 Тұздардың кристалдық торлары, олардың кристалдық тор энергиясы	20
1.4 Судың құрылымы мен қасиеттері туралы	25
1.5 Сулы-тұзды жүйелер туралы	31
1.5.1 Екі құрамдасты жүйелер сипаттамалары	33
1.5.2 Үш құрамдасты жүйелер сипаттамалары	34
1.6 Сулы-тұзды жүйелер құрамдастарының элементтік бөлшектері туралы	37
1.6.1 Атомдық бөлшектердің құрылымы мен өлшемдері	38
1.6.2 Иондық бөлшектердің құрылымы мен өлшемдері	46
2 ЗЕРТТЕУДІ ЖҮРГІЗУ ӘДІСІ МЕН ӘДІСТЕМЕСІ	54
3 ХИМИЯЛЫҚ ЭЛЕМЕНТТЕРДІҢ АТОМДАРЫ МЕН ИОНДАР РАДИУСТАРЫН ЖӘНЕ ОЛАРДЫҢ МЕНШІКТІ ЭНЕРГЕТИКАЛЫҚ КӨРСЕТКІШТЕРІН ЕСЕПТЕУ НӘТИЖЕЛЕРІ	57
3.1 Элементтердің атомдары радиустарын есептеу нәтижелері	57
3.2 Элементтердің иондары радиустарын есептеу нәтижелері	64
3.3 Элементтердің меншікті энергетикалық көрсеткіштерін есептеу нәтижелері	73
3.4 Тұздардың кристалдық тор энергия шамасын есептеу нәтижелері	76
4 СУЛЫ-ТҰЗДЫ ЖҮЙЕЛЕРДІҢ ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІНІҢ ТҰЗДАРДЫҢ КРИСТАЛДЫҚ ТОР ЭНЕРГИЯСЫНА ТӘУЕЛДІ ӨЗГЕРУ ЗАҢДЫЛЫҚТАРЫ	81
4.1 Сулы-тұзды жүйелер шоғырлық өзгерістері заңдылықтары	81

4.2	Сулы-тұзды жүйелердегі тұтқырлық өзгерістері заңдылықтары	85
4.3	Сулы-тұзды жүйелердегі тығыздық өзгерістері заңдылықтары	89
4.4	Сулы-тұзды жүйелердегі жылу өткізгіштік өзгерістері заңдылықтары	93
4.5	Сулы-тұзды жүйелердегі жылу сиымдылық өзгерістері заңдылықтары	97
5	СУЛЫ-ТҰЗДЫ ЖҮЙЕЛЕРДЕГІ ҚҰРАМДЫҚ, КҮЙЛІК, ҚҰРЫЛЫМДЫЛЫҚ ӨЗГЕРІСТЕР ЗАҢДЫЛЫҚТАРЫ	102
5.1	Сулы-тұзды жүйелердегі құрамдық өзгерістер заңдылықтары	102
5.2	Сулы-тұзды жүйелердегі күйлік, құрылымдылық өзгерістер заңдылықтары	120
6	ЗЕРТТЕУ НӘТИЖЕЛЕРІНІҢ ГАЛУРГИЯЛЫҚ ТЕХНОЛОГИЯДАҒЫ ҚОЛДАНБАЛЫҚ МАҢЫЗДЫЛЫҒЫ	132
	ҚОРЫТЫНДЫ	145
	ПАЙДАЛАНЫЛҒАН ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ	147
	Қосымшалар	153

НОРМАТИВТІК СІЛТЕМЕЛЕР

Докторлық диссертацияда келесідей нормативтік белгілер қолданылды:

МЕСТ 2.111-68 Конструкторлық құжаттамалардың бірыңғай жүйесі. Нормобақылаушы.

МЕСТ 8.417-81 Өлшеу бірліктерінің мемлекеттік жүйесі. Физикалық өлшем бірліктері.

МЕСТ 27065-86 – Су сапасы. Терминдер мен анықтамалар.

МЕСТ 7.54-88 Кітапханалық және баспалау жұмыстары бойынша қалыпты жүйелік ақпараттар. Жалпы талаптар.

МЕСТ 6.38-90 Құжаттамалар жүйесі. Ұйымдастыру құжаттамаларының жүйесі. Құжаттамаларды безендіру талаптары.

МЕСТ 7.1-2003 Кітапханалық және баспалау жұмыстары бойынша қалыпты жүйелік ақпараттар. Библиографикалық жазбалар. Орыс тіліндегі сөздердің қысқартулары. Жалпы талаптар мен ережелер.

МЕСТ 7.9-95 (ИСО 214-76) Кітапханалық және баспалау жұмыстары бойынша қалыпты жүйелік ақпараттар. Реферат және аннотация. Жалпы талаптар.

МЕСТ 2.105-95 Конструкторлық құжаттамалардың бірыңғай жүйесі. Құжаттамаларға жалпы талаптар.

МЕСТ 7.32-2001 Ғылыми ізденушілік жұмыстар бойынша есеп. Безендіру құрылымдары және талаптары.

АНЫҚТАМАЛАР

Докторлық диссертацияда келесідей анықтамалар қолданылды:

Гидратация – ионмен, атоммен немесе молекуламен қосылысқан су.

Тұтқырлық – сұйықтықтар бөлшектерінің салыстырмалы орын ауыстыруына немесе жылжыуына кедергі көрсететін сұйықтың қасиеті.

Жылу сиымдылық - дене температурасын 1°C-ге жоғарылату үшін берілетін жылу мөлшері.

Жылу өткізгіштік - дененің температура айырмасы бар нүктелері арасында бір нүктеден екінші нүктеге жылу энергиясын жеткізуі.

Атомдық радиус – атомаралық қашықтықты бағалауға мүмкіндік беретін шама.

Сольватация – ерітілген заттың иондары (немесе молекулалары) мен еріткіш молекулалары арасында жаңа байланыстардың пайда болу үрдісі.

Металдық кристалдық тор - метал атомдарынан құрылған кристалдық торлар.

БЕЛГІЛЕУЛЕР МЕН ҚЫСҚАРТУЛАР

Докторлық диссертацияда келесідей белгілер мен қысқартулар қолданылды:

КТЭ - кристалды тор энергиясы

МКТ – металдық кристалдық тор

ААҚ – ашық акционерлік қоғам

ТМД – тәуелсіз мемлекеттер достығы

ρ – тығыздық, г/см³

η – тұтқырлық, Па·с

r_a – атом радиусы, Å

r_i – ион радиусы, Å

G – ионның заряд тығыздығы, Кл/Å

t – температура, °С

$E_A^{\text{моль}}$ – тұз анионының мольдік энергиясы, кДж/моль;

$E_K^{\text{моль}}$ – тұз катионының мольдік энергиясы, кДж/моль;

КІРІСПЕ

Зерттеу тақырыбының өзектілігі. Сулы-тұзды жүйелер бейорганикалық заттар технологиясында жие қолданылады, оның ішінде галургиялық технология үшін олар бірегей негіздік әрекеттесу орталығы болып табылады. Олардағы құрамдық, күйлік, құрылымдық және физика-химиялық өзгерістер заңдылықтарын меңгеру бүгінгі күнде де ғылыми-қолданбалық маңызы жоғары мәселе. Өйткені галургиялық тәсілмен әртүрлі тұздар қоспалары түріндегі минералдық шикізаттардың судағы ерітінділерінен олардың жеке түрлерін қоспасыз таза күйде бөліп алуға іске асырылатын технологиялық іс-әрекеттер аталған заңдылықтарға толықтама тәуелді, олардың мақсатты жетістіктері толығымен сулы-тұзды жүйелерде орын алатын құрамдық, күйлік, құрылымдық және физика-химиялық өзгерістер нәтижелері болып табылады. Сулы-тұзды жүйелердегі негіздік элементтік материалдық бөлшектер - атомдар мен иондар, олардың өлшемдері, меншікті энергетикалық көрсеткіштері сулы-тұзды жүйелерде жүзеге асырылатын үрдістердің күтімді нәтижелеріне шешуші әсер етеді. Бүгінгі таңда атомдар мен иондардың радиустары мен меншікті энергетикалық көрсеткіштері туралы белгілі мәліметтер өзара үлкен айырмашылықты анықтамалық жинақтар болып табылады. Мұның басты себебі - олар негізінен тәжірибелік-жанама зерттеу әдістерінің нәтижелері, осы себепті шындыққа толығымен сәйкес келмейді. Сондықтан, оларды пайдаланып сулы-тұзды жүйелерде орын алатын құрамдық, күйлік, құрылымдық және физика-химиялық өзгерістер заңдылықтарын дәйекті де, сенімді анықтау мүмкін емес. Осы себепті атомдар мен иондардың шынайы радиустары мәндерін анықтаудың жаңа мүмкіндіктерін қарастыру, сенімділігі күмәнсіз атомдық және иондық радиустық, меншікті энергетикалық көрсеткіштер мәндерін табу, олардың қолданысында сулы – тұзды жүйелердегі құрамдық, күйлік, құрылымдық және физика – химиялық өзгерістер заңдылықтарын анықтап, осы кезде қол жеткен тың нәтижелердің сан алуан өндірістік іс-әрекеттердің қалтықсыз салдары ретінде қоршаған ортада өңделмей аса қомақты мөлшерлерде қордалана бастаған, бұрын соңды табиғатта кездеспеген, минералды тұздар қоспаларының жаңа түрлерін галургиялық тәсілдермен өңдеп зиянсыздандыруда, пайдаға асыруда қолданбалық маңыздылығын айқындау заманауи аса өзекті мәселелер болып табылады.

Зерттеудің мақсаты мен міндеттері:

– атомдық және иондық бөлшектердің шынайы бірегей орбиталдық радиустарын есептік жолмен анықтаудың ғылыми негізделген тәсілдерін дайындау, олардың қолданысында аталған элементтік бөлшектер мен жеке дара минерал тұздардың меншікті энергетикалық көрсеткіштері мен кристалдық тор энергия шамалары мәндерін анықтау;

– алынған нәтижелердің сенімділік дәрежесін бағалау;

– атомдар мен иондардың, минерал тұздардың меншікті энергетикалық көрсеткіштері мен кристалдық тор энергиясы шамаларының жаңадан анықталған мәндері қолданысында олардың сулы –тұзды жүйелердегі

құрамдық, күйлік, құрылымдық және физика – химиялық өзгерістер заңдылықтарына әсерін анықтау;

– алынған нәтижелердің заманауи өндірістік іс-әрекеттердің қалтықсыз салдары болып табылатын, минералды заттардың табиғатта кездеспейтін жаңа қоспалары түрлемдері түрлерінде қоршаған ортада қордаланып жатқан техногендік қалдықтарды галургиялық технология тәсілдерімен зиянсыздандырудағы, пайдаға асырудағы ілімдік - қолданбалық маңыздылығын айқындап, оларды іс-тәжірибеге ендіру бойынша ұсыныстар дайындау;

– тұздар құрамды өндіріс қалдықтарынан өнімдік таза тұздарды галургиялық тәсілмен өндірудің технологиясын дайындап, ұсыну.

Зерттеу жұмысының нысандары:

– Д.И.Менделеевтің периодтық жүйесіндегі элементтердің атомдары мен иондары радиустары, меншікті энергетикалық көрсеткіштері, олардың сулы – тұзды жүйелердегі құрамдық, күйлік, құрылымдық және физика – химиялық өзгерістерге әсері;

– минерал тұздардың кристалдық тор энергиясы, оның хлоридтер, фторидтер, бромидтер, иодидтер топтары тұздары мысалдары қолданысындағы мәндері;

– тұздардың кристалдық тор энергиясы шамасының сулы-тұзды жүйелердегі физика-химиялық өзгерістерге әсері;

– сулы-тұзды жүйелердегі шоғырлық өзгерістер;

– сулы-тұзды жүйелердегі тұтқырлық өзгерістер;

– сулы-тұзды жүйелердегі жылуөткізгіштік өзгерістер;

– сулы-тұзды жүйелердегі жылусиымдылық өзгерістер;

– сулы-тұзды жүйелердегі құрамдық өзгерістер;

– сулы-тұзды жүйелердегі күйлік өзгерістер;

– сулы-тұзды жүйелердегі құрылымдық өзгерістер;

– ізденістер нәтижелерінің галургиялық технологиядағы қолданбалық маңыздылығы;

– тұзды қалдықтардан таза өнімдік тұздарды өндірудің галургиялық технологиясы.

Жұмыстың ғылыми жаңалығы:

– атомдар мен иондардың радиустары өлшемдерін анықтаудың ғылыми негізделген жаңа әдістері дайындалды, Д.И.Менделеевтің периодтық жүйесі элементтерінің сенімділігі жоғары атомдық, иондық радиустары, меншікті энергетикалық көрсеткіштері мәндері анықталды, олардың сулы – тұзды жүйелердегі құрамдық, күйлік, құрылымдық және физика – химиялық өзгерістер заңдылықтарына әсері анықталды;

– минерал тұздардың кристалдық тор энергия шамаларын анықтаудың жаңа әдісі дайындалды, оның қолданысында заманауи галургиялық өңдеу үрдістерінде жиі қолданыс табатын хлоридтер, иодидтер, бромидтер, фторидтер топтамалары өкілдерінің кристалдық тор энергия шамалары мәндері анықталды, олардың сулы-тұзды жүйелердегі физика-химиялық өзгерістерге

әсері туралы жаңа ғылыми тұжырымдамалар жасалынды;

– NaCl-H₂O жүйесінің күй айнасы негізінде сулы-тұзды жүйелердегі құрамдық, күйлік, құрылымдылық өзгерістер нәтижелері ғылыми негізделіп, санды және сапалы сипатталды;

– зерттеулер нәтижесінде қол жеткен нәтижелердің галургиялық технологиядағы қолданбалық маңыздылығы анықталды;

– галургиялық тәсілмен галитті қалдықтардан таза өнімдік натрий хлоридін өндірудің технологиясы дайындалып, оның режимдік және 1 тонна шикізатқа қатысты шығымдық көрсеткіштері анықталды.

Зерттеліп отырған мәселердің шешілу дәрежесі. Қазіргі таңда ерітінділер саласын зерттеу толығымен дамыған жоқ. Сулы –тұзды жүйелердің құрамдық, күйлік, құрылымдылық және физика-химиялық қасиеттері туралы әртүрлі көптеген эксперименттік және дәлелдемелік материалдар бар. Олардың ішінде жинақталған жоғары деңгейлі құнды материалдардың басым бөлігі ғылыми негіздерге ие бола алмауда. Қазіргі кезде заманауи әдістермен зерттеулерді қолдана отырып сулы-тұзды жүйелердің құрамдық, күйлік, құрылымдылық және физика-химиялық қасиеттері туралы шетел ғалымдары да айналысуда.

Осындай зерттеулер АҚШ, Жапония, Германия, Канада, Англия, Франция секілді алпауыт мемлекеттерде жүргізілген. Жақын алыс шетелдік ғалымдардың, ғылыми нәтижелері бүгінде де аса жоғары бағалы, олардың ең көрнекті өкілдері ретінде Нобель сыйлығының химия саласындағы лауреаттары Малликен Сандерсонды, Нильс Борды және Лаинус Полингты атап өтуге болады.

Мәселенің даму дәрежесі. Ғылыми -ілімдік химия саласында қазіргі кезде қол жеткен нәтижелерді талдау көрсеткендей, иондық бөлшектердің және олардың материалдық негізі болып табылатын атомдардың радиустары туралы шынайылығы жоғары, толықтама ғылыми дәйектелген мәліметтер жоқ. Жалпылама белгілі Д.И.Менделеевтің химиялық элементтердің периодтық жүйесі кестесі шеңберіндегі атом мен әр ион үшін, сан алуан физика-химиялық жолдармен анықталған мәліметтер бойынша 30-ға жуық шкалалық мәндер келтіріледі. Аталған жағдайға нақты мысал ретінде бүгінде оқу-ғылыми іс-тәжірибелерде кең қолданыста жүрген атаулы анықтамалық оқулықтардың құрамындағы иондық және атомдық бөлшектер радиустары туралы Мелвин-Хьюз, Гольдшмидт, Полинг, Ингольд, Боки ізденістері нәтижелерін келтіруге болады.

Тақырыптың ғылыми-зерттеу жұмыстарымен және мемлекеттік бағдарламалармен байланысы. Диссертациялық ізденістер мемлекеттік бюджеттік Б-16-02-03 «Фосфор мен көмір өндірісінің қалдықтары негізінде күрделі тыңайтқыштар өндірудің жаңа технологияларын әзірлеу» тақырыбының «Сулы-тұзды қоспалардың физика-химиялық қасиеттерінің иондардың меншікті энергетикалық көрсеткіштеріне тәуелділігін анықтау» бөлімі жоспарына сәйкес жүргізілді.

Докторанттың жеке үлесі- диссертациялық зерттеу тақырыбы бойынша әдеби материалды талдауда, зерттеу және талдау әдістерін таңдауда, ілімдік зерттеулер жасауда, ізденістер нәтижелерін математикалық өңдеуде, алынған нәтижелерді ғылыми қорытындылауда және технологиялық үлгілерді дайындауда.

Жарияланымдар туралы мәліметтер. Диссертациялық зерттеудің негізгі нәтижелері 22 баспа басылымында жарияланды,оның ішіндіScopus базасына енген 1 мақала «EurAsian Journal of BioSciences» (Түркия) 2020ж. журналында, Қазақстан Республикасы Білім және ғылым саласындағы бақылау комитеті ұсынған басылымдарда 7 мақала, шетелдік халықаралық ғылыми-практикалық конференциялар жинақтарында 3 мақала,Қазақстан Республикасындағы халықаралық және республикалық конференциялардың материалдарында 5 мақала, басқа да ғылыми басылымдар мен журналдарда 3 мақала жарияланды, 2 ұжымдық оқулық М.Әуезов атындағы ОҚМУ баспасында баспаланды, зерттеу нәтижелері бойынша ұсынылған тәсілдерге авторлық құқықпен қорғалатын объектілер мәліметтерін енгізіу туралы 3 куәлік алынды.

Диссертацияның құрылымы мен көлемі. Диссертациялық жұмыс нәтижелері баспалық мәтіннің 164 беттерінде орналастырылды, онда 47 сурет пен 64 кесте келтірілген. Жұмыс кіріспе, әдеби шолу, зерттеу әдістері, нәтижелері, оларды талқылау, қорытынды бөлімдерінен және 109 атаулы пайдаланылған әдебиеттер тізімінен құралған.

1ӘДЕБИ ШОЛУ

1.1 Галургиялық технология – өзіндік ерекшелікті өндірістік сала

Галургиялық технология ғылыми таным мен химиялық өндірістің өзіндік ерекшелінген саласы. Оның негізгі қолданбалық маңыздылығы табиғи тұзды байлықтарды -құрамдары әр-түрлі қазба тұздарын, көл тұздықтарын, минералданған су көздері мен теңіз суларын және т.б. сулы-тұзды қоспаларды зерттеумен және игерумен айналысуында.

Бүгінде галургиялық технология тұзды кен орындарының қалыптасу шарттарымен, құрылымдарымен, тұзды шикізаттардың физика-химиялық қасиеттерімен, оларды өндірістік жағдайда тиімді өндіру мен өңдеу тәсілдерімен айналысатын аса маңызды ерекше ғылыми қолданбалы бағыт болып қалыптасты.

Галургиялық технологияға қойылатын негізгі мақсат - табиғи минералды тұзды шикізаттарды өндіру әдістерін дайындау, оларды тазалау және өңдеу. Осы мақсатты іс-шараларды іске асыруда өндірілетін маңызды өнімдер қатарына KCl , K_2SO_4 , $NaCl$, Na_2SO_4 , Na_2CO_3 , $MgCO_3$, $MgSO_4$, $CaSO_4$ және де басқа таза йод, бром олардың қосылыстарын келтіруге болады. Осы кезде, жеке дара мемлекеттер көлемінде қарастырғанның өзінде, галургиялық технологиямен өндірілетін натрий хлоридінің мөлшері бірнеше ондаған миллион тоннаны, калий хлоридінің мөлшері елу миллион тоннаны, калий сульфатының мөлшері үш миллион тоннаны, магний сульфатының мөлшері 500 мың тоннаны құрайды. Қағаз, целлюлоза, шыны өндірістерінде, химиялық өндірістердің басқа салаларында да кең қолданыс табатын натрий сульфаты да негізінен галургиялық технологияның өнімі болып табылады. Сонымен қатар, сусыз шенит, лангбенит, сорель цементі және әр-түрлі сулы-тұзды гидраттық қоспаларды да өндірудің ең тиімді тәсілі галургиялық болып табылады [1].

Галургиялық технологияда қолданылатын табиғи тұздарды ажырату және байытып бөліп алу тәсілдері сан алуан. Осы кезде еріту, изотермиялық және политермиялық буландыру, салқындату, тұнбаландыру, флотациялау және т.б. үрдістер табиғи жағдайларда да, өндірістік қондырғыларда да қолданылады.

Галургиялық үрдістер бірнеше заттардан құралған және олардың арасында жылу мен масса алмасу орын алатын физика-химиялық жүйелерде (немесе қысқаша – галургиялық жүйелерде) жүргізіледі. Осындай физика-химиялық жүйелер күйлер санымен, олардың агрегаттық калпымен, құрамдастар санымен және олардың еркіндік дәрежелерімен сипатталады. Осы кезде әр күйдің термодинамикалық қасиеттері Ван-дер-Ваальстың күй теңдеуіне сәйкес қалыптық көрсеткіштерге меншікті тәуелділікте болады. Галургиялық физика-химиялық жүйелердегі күйлер газды, сұйықтықты және қатты түрлерге бөлінеді [2].

Галургиялық жүйелер бір немесе бірнеше газдық және сұйықтықтық күйден тұрады. Олардағы қатты күйлер саны жүйе құрамдастары санына байланысты жай, қосарлы, үштік және әр-түрлі гидраттар түрлерінде кездеседі.

Кей жағдайларда қатты күйлер өзгермелі құрамды болып қалыптасады. Олар әдетте қатты ерітінділер деп аталады.

Галургиялық жүйедегі ең аз саны оның кез-келген күйі құрамын білдіруге жеткілікті тәуелсіз құрамдас бөліктері (жеке заттары) жүйенің құрамдастары деп аталады. Тәуелсіз құрамдастардың санына қарай галургиялық жүйе 1,2,3 және одан да көп құрамдасты болады.

Галургиялық жүйенің қалпын айқындаушы тәуелсіз термодинамикалық көрсеткіштер еркіндік дәрежелері деп аталады. Оларға температура, қысым және ерітінді шоғыры жатады. Олар белгілі бір шекті аралықтарда жүйедегі күйлер саны мен сипатын өзгертпей еркін өзгере алады.

Галургиялық жүйедегі құрамдастар (Қ), күйлер (К) және еркіндік дәрежелері (Е) сандары арасындағы байланыс Гиббстің күй ережесімен сипатталады [3]:

$$E = Q + 2 - K$$

Сәйкестік және сабақтастық қағидалары бойынша, галургиялық жүйелердегі күйлік тепе-теңдіктер қалпы графикалық тәсілдердің қолданысында күйлік диаграммаларымен көрсетіледі. Мұндай диаграммалар ерекше атауларға ие нүктелер, сызықтар, беттер және көлемдер түріндегі геометриялық элементтерден тұрады.

Күйлік диаграммалар жазықтықтық және көлемдік диаграммалар түрінде қолданыс табады. Құрамдастар саны бірден үшке дейінгі галургиялық жүйелерде жүйенің күйлік құрамын жазықтықта бейнелеу ыңғайлы. Кез келген екі құрамдас жүйе кем дегенде бір күйден тұрады. Сондықтан, күй ережесіне сәйкес, ондағы еркіндік дәрежесі 3-ке тең болады да оның қалпы үш өзгермелі шамалармен – қысыммен, температурамен, еріген заттың шоғырымен анықталады, яғни оның графикалық моделі үш өлшемді фигура болады[3]. Әдетте екі құрамдасты жүйе су буының өзіндік тұрақты қысымында қарастырылады да, оның күйлік диаграммасы жазықтықта температура мен бір құрамдастың шоғыры арасындағы жазықтықтықтағы байланыс түрінде келтіріледі. Кез келген үш құрамдасты жүйе кем дегенде бір күйден тұрады. Осы себепті, күй ережесіне сәйкес, ондағы еркіндік дәрежесі 4-ке тең болып, оның қалпы төрт өзгермелі шамалармен анықталып, оның графикалық моделі төрт өлшемді фигура болады. Аталған жүйені, екі құрамдас жүйеге ұқсас, су буының өзіндік тұрақты қысымында температураның және екі құрамдастар шоғырларының сызықтық остеріне бағытты қарастырып, үш өлшемді моделге айналдырады. Ары қарай, бұл үш өлшемді моделдің тікбұрышты ұшбұрыш немесе тең қабырғалы ұшбұрыш түрлеріндегі изотермиялық кесінділері қолданысқа алынады.

Көп - төрт, бес, алты құрамдасты жүйелерді графикалық жолмен қарастыру көптеген шарттылықтарды қабылдауды қажет етіп, галургиялық технологияда шектеулі қолданыс табады. Мұндай жүйелердің күйлік қалпы көп өлшемді кеңістікте бірнеше жазықтықтық проекциялардың көмегімен бейнелеуді қажет етеді.

Галургиялық жүйелерді графикалық тәсілдермен бейнелеудің қайсы бір тәсілдерін таңдау тек қана жүйе құрамдастары санымен емес, сонымен қатар, оның құрамын білдіру тәсілдеріне де байланысты. Жүйедегі заттардың мөлшері көбінше төмендегідей беріледі: сандық және молярлық пайыздармен; 100 грамм еріткішке қатысты граммдармен; 1000 моль еріткішке қатысты мольдермен немесе грамм-эквиваленттермен; 1 литр ерітіндідегі мольдермен немесе граммдармен; 100 моль немесе 100 грамм-эквивалент еріген заттарға қатысты мольдермен немесе грамм –эквиваленттермен [4].

Сулы-тұзды жүйелерді күй диаграммалары арқылы графикалық бейнелеу екі мақсатта жасалады: жүйені және онда орын алатын үрдістерді айқын бейнелеу және аталған үрдістерді есептеу. Осы кезде кез келген үрдісті екі элементтік үрдістердің салдары - екі өзге кешенінен бір кешен түзіледі және бір кешен өзге екі кешенге ыдырайды деп қарастырып, байланыстыратын түзу заңдылығы негізінде, бірнеше есептік тәсілдер қолданылады: Рычаг тәсілі, өзгермейтін құрамдас тәсілі, материалдық баланс тәсілі.

Галургиялық технологияның ғылыми – қолданбалық маңыздылығы бүгінгі химиялық технологияда жоғары деңгейде. Заманауи ғылым мен техника оған көптеген тиімді жаңа әдістер мен тәсілдер, технологиялық тәртіптер мен шешімдеренгізіп келеді. Кезінде М.В.Ломоносов, Д.И.Менделеев, Карпинский, И.А.Курнаков Н.С.Каблукова, С.Е.Илинский, А.И.Дзенс-Литовкий, В.И.Вернадский, М.С.Виноградова, А.В.Николаева, А.П.Федченко, Г.Г.Густавсон, В.В.Марковников, А.Б.Здановкий, А.П.Кашкаров, Н.Н.Соколов, Н.Д.Зелинский, И.Н.Лепешков және т.б. секілді бұрынғы КСРО елдерінің талантты ізденіскерлері еңбектері нәтижесінде бастама алып, қалыптасқан галургиялық технология көп тонналы тұздық шикізаттарды өндіру мен оларды өңдеп көп салалы қажеттілікті тұздық өнімдерге айналдырумен айналысатын арнайы салаға айналды [5]. Осы салада жинақталған ғылыми - қолданбалық нәтижелер көптеген журналдық басылымдардағы мақалаларға, монографияларға негіз болуда. Алайда, осы сала жетістіктерін арнайы салалық қызметкерлер мен мамандар сұраныстарына толықтама сәйкес етуге қажетті басылымдар мен ғылыми шығармаларды жарыққа шығаруда әліде елеулі кемшіліктер орын алып отыр[6]. Олардың қатарында сулы-тұзды жүйелердегі күйлік, құрылымдылық, құрамдық, физика-химиялық өзгерістерге шешуші әсер ететін еріткіш – судың, ондағы атомдық және иондық элементтік бөлшектердің өлшемдеріне, қасиеттеріне, құрылымына, құрамына қатысты анықталған заманауи химиялық ғылымның жетістіктерін қолданбауды келтіруге болады. Аталған мәселелер орынды шешілген жағыдайларда галургиялық технологияның жетістіктері артып, ондағы үрдістердің технологиялық шарттар мен көрсеткіштері тиімділеніп, саланың техника-экономикалық көрсеткіштері күмәнсіз оңды еселенеді. Дайындалған диссертациялық жұмыс осы мақсаттарды іске асыру бағытында жоспарланып, орындалған ізденістердің бірі болып табылады.

1.2 Табиғи тұздар мен қоршаған ортада қордаланған тұзды қалдықтар - галургиялық технология үшін негіздік шикізат

Галургия (галес) тұз және (ургия) іс деген грек сөздеріне байланысты қабылданып, «тұзды іс» деген мағынаны білдіреді. Аталған іс міндетті түрде еріткіштің-судың қатысуында іске асырылады. Осы себепті сулы-тұзды жүйелер галургиялық технологияда ең маңызды орын алады. Осы кезде еріткіш суға ерекше талаптар қойылмайды. Әдетте еріткіштік қажеттілік үшін табиғи тұщы су қорлары пайдаланылады. Олардың мысалдары ретінде өзен, көл және жер асты суларын келтіруге болады. Аталған су көздері суларын галургиялық технологияда пайдалануы үшін арнаулы өңдеулерден өткізілмейді. Олардағы еріген тұздардың мөлшері табиғи тұщы сулар құрамындағы тұз құрамдарына қойылған қалыптық шекті шамадан аспаса болғаны. Сонымен қатар, олардың құрамында табиғи және техногендік органикалық қоспалардың, зиянды микроорганизмдердің болмауы талап етіледі[7].

Галургиялық технологияда маңызды рөл атқаратын сулы-тұзды жүйелердің негізгі шикізаттық құрамдастары саналуан табиғи тұздар мен олардың қоспалары. Олар салыстырмалы таза бір құрамдас немесе көп құрамдас түрлерінде қатты және сұйық күйде бола алады.

Табиғи қатты минералды тұздар қорлары жерде ұзақ геологиялық мерзімде пайда болған. Олар аталған мерзімдердегі климаттық жағыдайларға байланысты минералогиялық құрамдары да және қорлары да әр-түрлі болып қалыптасқан[8]. Олардың мысалдары ретінде Сібір жазықтығымен Пакистан және Персі бұғазы жағалауындағы тұздар қорын, солтүстік, оңтүстік Америка, Түркіменстан, Африка, Англия, Орта Азия, Испания, Турция, Франция және тағы басқа елдердегі тас тұзы мен калий тұздары қорын, Украинамен Ресейлердегі галит қорларын, солтүстік Америка мен Канададағы полигалит пен карналит қорларын келтіруге болады [9,10].

Қазіргі уақытта «Мозыр тұз» ААҚ ТМД мен Шығыс Еуропадағы ірі тұз өндірушілердің ішінде көшбасшы болып табылады да күніне 1000 тоннадан астам «Полесье» сортты тұзы өндіріледі. Оны күн сайын Еуропа мен Азиядағы 50 миллионнан астам адам тұтынады. Компанияның клиенттері болып шет елдің атақты Galina Blanka, Nestle, McDonalds, Procter&Gamble және тағы басқа секілді фирмалары табылады. Табиғи тұздар арасында галургиялық технология үшін аса маңызды шикізат көздері болып калийлі тұздар, тас тұз, көл тұзы және натрий тұздары жатады.

Негізгі калий құрамдас минералдар қатарына сильвин KCl ; карналит $KCl \cdot MgCl_2 \cdot 6H_2O$; лангбейнит $K_2SO_4 \cdot 2MgSO_4$; кайнит $KCl \cdot MgSO_4 \cdot 3H_2O$; шенит $K_2SO_4 \cdot 2MgSO_4 \cdot 6H_2O$; глазерит $K_2SO_4 \cdot Na_2SO_4 \cdot 2CaSO_4 \cdot 2H_2O$; полигалит $K_2SO_4 \cdot 2MgSO_4$; алунит $K_2SO_4 \cdot Al_2(SO_4)_3 \cdot 4Al(OH)_3$ жатады[11].

Кайнит құрамы калий (K) 14—18%, магний тотығы (MgO) 15—17%, хлор (Cl) 14—19%, күкірт тотығы (SO_3) 28,34%, су (H_2O) 18—21% тұрады. Кайнит минералы Германияның Штассфурт, Галле, Магдебург, Эрфурт, Зуль Гессен, Ганновер аймақтарының кен орындарында кеңінен таралған. Айтарлықтай мөлшерде Батыс Украинаның Калуш пен Стебник кен

орындарында кездеседі. Лангбейнит минералының құрамы (%): K_2O — 22,2 – 22,7; MgO — 19 – 20; SO_3 — 43 – 58 құрайды. Карналлит минералының құрамын 8,7% Mg , 14,1% K , 38,3% Cl құрайды. Шенит құрамы K_2O — 23,39 %; MgO — 10,01 %; SO_3 — 39,76 %; H_2O — 26,84 % тұрады [12]. Полигалит құрамы калий тотығы (K_2O) 7—14%, магний тотығы (MgO) 4—7,5%, кальций тотығы (CaO) 17—25%, күкірт тотығы (SO_3) 47,5—53%, су (H_2O) 6—8% тұрады. Алунит құрамы K_2O — 11,4%, Al_2O_3 — 37,0%, SO_3 — 38,6%, H_2O — 13,0%. Алунит минералының кен орындары Ресейде, Азербайджанда, Украинада, АҚШ-да, Қытайда, Австралияда, Мексикада, Иранда бар [13].

Осылардың қатарында галургиялық технологиямен өндірістік жағдайларында калий қосылыстарын өндіру үшін негізінен сельвинит, карналит, лангбейнит қолданылады.

Қазақстандағы калий тұзының қоры 0,3 млрд.т., олардың мекен жайлары Ақтөбе және Атырау және Батыс Қазақстан облыстарында бар. Құрамы бойынша ол сульфатты калийлі магнезиальды, ең негізгісі сельвинит [14,15].

Калий тұздары ТМД елдерінде Эльтодда, Басқұншақта, Қырымда, Қазақстанда, Уралда (Соликамск), Украинада, шет елдерде Величкада (Польша), Пенджабта (Үндістан), Кадзаста (АҚШ), Табрис (Ирад), Стассфурт (Германия) т. б. кездеседі [16].

Табиғи тас тұз қоры жерде ең көп мөлшерде қордаланған. Олардың ТМД шеңберіндегі тек шығыс Сібірдегі қоры $17 \cdot 10^5$ млрд. тоннаны құрайды, ал Украинада ол $16 \cdot 10^4$ млрд. тонна шамасында. Осындай мөлшердегі тас тұз қоры Башкирияда да табылған. Тас тұз қоры орта Азияда Туркмения, Тәжікстан, Өзбекстанда да және Арменияда да өте мол. Олардың жалпы қоры 40000-50000 млрд. тоннадан асады. Тастұздар Қарағанды облысында, Чюладар мекен жайында бар. Олардың құрамындағы минерал тенардит және галит түрінде болады. Ас тұзы ретінде натрий тұздары Қазақстанның Оңтүстік облысында Созақ өңірінде, Қызылорда облысы Арал өңірінде бар. Осы мекен жайлардағы тұздардың құрамында мерабилит, тенардит, астрахалит минералдары кездеседі. Астрахалит, сонымен қатар, Жамбыл облысында тұзды көлде кездеседі, солтүстік аймақта Шығанақ жерінде өндіріледі. Астрахалит қоры 4-6 млн.т. құрайды [17].

Қазақстанда жылына 1 млн. тоннаға жуық тұз өндіріледі. Ол Қазақстанның, Орта Азия республикаларының және Батыс Сібірдің сұранысын толық қамтамасыз етеді. Индердің тас тұзы, Жамантұз және Тайқоңырдың тұздары сода өнеркәсібінде қолданылады [18].

1 - кестеде бірқатар елдердегі тас тұзының өндірілген мөлшерлері келтірілген.

Кесте -1 Тас тұзының өндірілген мөлшері

Елдер	Өңделген тұз(тонн)	Елдер	Өңделген тұз(тонн)
1	2	3	4
АҚШ	46 500 000	Египет	2 400 000
Қытай	37 101 000	Украина	2 300 000

1 Кестенің жалғасы

1	2	3	4
Индия	15 000 000	Түркия	2 250 000
Канада	14 125 000	Иран	2 000 000
Австралия	11 211 000	Болгария	1 800 000
Мексика	8 180 000	Польша	1 600 000
Франция	7 000 000	Пәкістан	1 320 000
Бразилия	6 500 000	Вьетнам	1 300 000
Чили	6 000 000	Жапония	1 251 000
Ұлыбритания	5 800 000	Аргентина	1 200 000
Норвегия	5 000 000	Таиланд	1 000 000
Италия	3 600 000	Бағам аралдары	900 000
Испания	3 200 000	Израиль	800 000
Ресей	2 800 000	Оңтүстік Корея	800 000
Румыния	2 450 000		

Көл тұздары әдетте бірнеше қабатты болып қалыптасады. Олар бір-бірінен түсі, кристалдық пішіні, физика-химиялық қасиеттері және құрамы бойынша ерекшеленеді. Осыған байланысты көл тұздары вертикаль бағытта жаңадан тұнбаланған, ескілей тұнбаланған, тамырлық тұз және гранаткалы болып бөлінеді. Әдетте, орташа мөлшерде жаңадан тұнбаланған көл тұзы құрамы NaCl – 98,2; CaSO_4 –0,07; CaCl_2 – 0,05; MgCl_2 – 0,05; ерімейтін қалдық – 0,21, ал гранатка құрамы NaCl – 96,5– 99,3; ерімейтін қалдық – 0,10– 0,90; Ca^{2+} – 0,05– 0,08; Mg^{+2} – 0,01– 0,10 пайызбен құралады.

ТМД көлемінде көл тұзы қорының ең мол аймағы Қазақстанда Арал маңында және Павлодар облысында орналасқан. Мұндағы жаңа тұнбаланған тұздар құрамы NaCl – 96,9; CaSO_4 –0,04; MgSO_4 – 0,63; MgCl_2 – 0,23; ерімейтін қалдық – 1,19, ал гранатка түріндегі тұздар құрамы NaCl – 98,9 – 82,8; CaSO_4 – 0,10–0,34; MgSO_4 – 0,49–0,79; Na_2SO_4 –9,6–16,2; ерімейтін қалдық – 6,8 – 13,4 пайызды құрады. Табиғи натрий сульфаты қоры төрт түрлі болып кездеседі: глауберит, астраханит, мирабелит және тенардит түрлеріндегі қатты тұздар қоспалары; көз тұнбалары ретіндегі мирабелит және астраханит қоспалары; жер асты натрий сульфат құрамды тұздар.

ТМД елдерінде натрий сульфатты құрамды тұздар қоры орта Азия мен батыс Сібір маңдарында орналасқан және өте мол. Олардың мысалында Каспий теңізі маңындағы Қара-Боғаз-Көл, Алтай аймағындағы Кучук көлін, Арал аймағындағы Жақсы –Қылыш көлін келтіруге болады. Олардағы жалпы тұздар қоры жүздеген миллион тоннаны құрайды. Оның ішінде сульфат натрий тұзы мөлшері ондаған миллион тоннадан асады [19]. 2 – кестеде кейбір көл кен орындарының сипаттамалары келтірілген.

Кесте -2 Көл кен орындарының сипаттамалары

Көл	NaCl	CaSO_4	CaCl_2	CaCO_3	MgSO_4	MgCl_2	Na_2SO_4	Ері.тұнба
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Басқұншақ	98,6	0,07	0,05	-	-	0,27	-	0,9

2 Кестенің жалғасы

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Құлын	98	0,3	-	-	0,25	0,3	-	-
Жақсы қылыш	98,2	4,34	-	-	3,26	1,09	1,6	1,41
Қалқаман	98,4	0,53	-	-	0,11	0,22	-	0,56

Алыс шет елдерде сульфатты шикізаттың қомақты қоры Канада мен АҚШ-да кездеседі. Олардың құрамы негізінен мирабилиттен және тенардиттен тұрады. Аталған елдердегі сульфатты шикізатты қоры 800 миллион тоннадан асады. Европа елдерінде мирабилит және тенардит түріндегі натрий сульфатты қорлары Испания мен Италияда орналасқан. Олардағы натрий сульфаты қоры бірнеше миллион тоннаны құрайды. Қомақты натрий сульфаты қоры Ресейде де табылған [20-21]. 3 – кестеде тұз кен орындарының тұздар құрамы берілген.

Кесте-3 Әртүрлі гидрохимиялық типтегі тұздар (тұздықтар) құрамы[7].

Тұздықтар	Тұздық құрамы, % масс							
	Na ₂ CO ₃	Na ₂ SO ₄	CaSO ₄	MgSO ₄	MgCl ₂	CaCl ₂	KCl	NaCl
Содалы типті								
Сирлс өзен тұздығы (АҚШ)	4,8	6,8	-	-	-	-	5,0	16,0
Танатар өзен тұздығы (Ресей)	7,60	1,55	0,83	-	-	-	-	3,92
Петухов өзен тұздығы (Ресей)	0,08	0,89	0,23	-	-	-	-	0,96
Сульфатты типті								
Малинов өзен тұздығы (Ресей)	-	8,06	0,01	1,68	-	-	-	22,42
Кулундинск өзен тұздығы (Ресей)	-	0,29	-	1,13	-	-	-	4,01
Кучук өзен тұздығы (Ресей)	-	0,45	-	6,63	-	-	-	22,12
Сульфатты –хлоридті типті								
Мұхитар	-	-	0,13	0,23	0,32	-	0,07	2,7
Қара-Боғаз-Көл	-	-	0,07	0,24	0,05	-	0,01	0,63
Сасық өзен тұздығы (Украина)	-	-	0,89	0,74	1,22	-	-	7,48
Солен өзен тұздығы (АҚШ)	-	-	-	2,76	2,51	-	1,33	21,92
Хлоридті типті								
Ходжа-Момын (Тәжікстан)	-	-	0,40	-	0,08	0,15	0,08	25,86

Қазіргі уақытта тау-кен өнеркәсібі, атап айтқанда калий саласы да өте қарқынды дамуда: резервтік алаңдар жете зерттелуде, жаңа кен орындары

зерттелуде және игерілуде, калий-магний кен орындарының жаңа кен орындары ашылуда.

Калий тыңайтқыштарын өндіру суда еритін калий бар кендердің жер асты шоғырларын және үлкен тұзды көлдердің шөгінді тұздарын өңдеу арқылы жүзеге асырылады. Құрамында калий бар суда еритін минералдар

Минерал	Химиялық формуласы	Құрамындағы K_2O мөлшері, %
Сильвинит	KCl	63,17
Карналит	$KCl \cdot MgCl_2 \cdot 6H_2O$	16,95
Каинит	$KCl \cdot MgSO_4 \cdot 2,75 H_2O$	19,26
Лангбейнит	$K_2SO_4 \cdot 2MgSO_4$	22,7
Кизерит	$MgSO_4 \cdot H_2O$	
Галит	$NaCl$	
Ангидрит	$CaSO_4$	
Полигалит	$K_2SO_4 \cdot CaSO_4 \cdot 2MgSO_4 \cdot 2H_2O$	15,62

Өнеркәсіптік маңызы бар ірі тұзды көлдердің калий кендері мен шөгінді тұздарының жалпы әлемдік барланған қорлары 40 млрд.т. K_2O құрайды. Негізгі шикізат-сильвинит кендері, сильвинит (KCl), галит ($NaCl$), карналит ($KCl \cdot MgCl_2 \cdot 6H_2O$) және сазды-карбонатты минералдар мен ангидрит. Құрамында калий бар шикізаттың негізгі кен орындары және олармен шектелген калий кәсіпорындары Канадада, Ресей Федерациясында, Беларусь Республикасында, Германияда, АҚШ-та, Испанияда, Иорданияда, Израильде шоғырланған.

Қазақстанда калий кендеріне бай өңірлерге –Каспий маңы ойпаты, Ақтөбе өңірі және Бозашы түбегі жатады. Қазақстан Республикасының калий тұздары қорларының мемлекеттік балансында төрт кен орны ескерілген: Жилианск, Сатимолла, Индер, No99. Олардың ішіндегі ең ірісі – Жилианск (Ақтөбе облысы). Кен орнының теңгерімдік қоры 426 293 мың тонна шикі кенді құрайды.

Сатимола бор-калий тұздары кен орны. Батыс Қазақстан облысы Ақжайық ауданының аумағында Индер күмбезінен солтүстік-шығысқа қарай 40 км жерде орналасқан. Сатимола тау-химиялық шикізат кен орны 1964 жылы ашылды. Индер калий тұз кен орны (Атырау облысы).Каспий маңы ойпатының ірі тұзды күмбезді ландшафтарының бірі. Индер тұзды күмбезді ауданы болып табылады. Бор-калий тұздары кен орны No99 (Атырау облысы). Индер күмбезінің оңтүстік - шығыс бөлігінде орналасқан No99 кен орнында кен-химиялық шикізат, бор-калий және калий тұздарының кен орындары барланған.

Құрамында калий бар әртүрлі тыңайтқыштар өндірісінде қалдықтардың едәуір мөлшері пайда болады. Сильвиниттен хлорлы калий алу кезінде галургиялық әдістермен өндірістің негізгі қалдықтары галит үйінділері мен сазды-тұзды шламдар болып табылады. Сильвинит кендерін өңдеу кезінде әр

тонна өнімдік калий хлоридін өндіруде 3-4 тонна галит қалдықтары пайда болады. Галит қалдықтарының негізгі компоненті—натрийхлориді. Сонымен қатар, галит қалдықтарында аз мөлшерде магний хлориді, кальций сульфаты, бром, ерімейтін қалдық және басқа да компоненттер бар. KCl – 2,57% , NaCl – 95,19%, MgCl₂ – 0,15%, CaCl₂ – 0,20%, CaSO₄ – 0,42% [22].

Бүгінгі таңда, галит қалдықтары жер бетінде 25-30 м биіктіктегі тұз үйінділері түрінде сақталады. Қоршаған ортаны қорғау және жер алқаптарын сақтау үшін алаң игеріліп, жоғары қабатты қалдықтарды жинау әдісі қолданылады. Қалдықтарды биіктігі 100 м тұз үйінділеріне үш қатарлы жинау кезінде иеліктен шығарылатын жерлер 3 – 3,5 есе қысқарады, сондай-ақ атмосфералық жауын-шашынның түсуінен тұздардың түзілуі төмендейді. Қалдықтардың құрамында оңай еритін компоненттер (калий, натрий және магний хлоридтерімен) және микроэлементтер (стронций, марганец, никель, кобальт, хром, мырыш және т.б.), сондай-ақ пайдалы қазбаларды байыту үшін қолданылатын реагенттер бар. Қазіргі кезде 270 млн тоннадан астам галит қалдықтары және 30 млн м³ астам саз-тұз шламдары жинақталған [23].

Галит үйінділері, олар орналасқан аудандардағы жер асты сулары топырағының тұздануының тұрақты көзі болып табылады. Тұз мөлшері 300 г/л – ге дейінгі тұз үйінділерін атмосфералық торлармен еріту, конденсациялық ылғал, бастапқы ылғалдылығы 10-12% болатын жаңа галит қалдықтарын сығу есебінен түзіледі, ол төмен түскен кезде 5-8% – ға дейін сақталады. Алынған тұздықтар жер асты суларына еніп, су өткізгішке жетіп, жер асты суларының бетіне шыққанға дейін көлденең бағытта таралады. Топырақтың айналасындағы тұз үйінділерінің техногендік тұздану және фитоценоздарға ингибиторлық әсер ету қаупі бар. Тұз үйінділерін және шлам қоймаларын жер бетіне орналастыру қоршаған ортаға теріс әсер етеді:

- ✓ маңызды жер ресурстары ауданының тұз үйінділері мен шлам қоймалары 1000 гектардан астамын алады. Ол калий өндірісінің перспективалық дамуын ескере отырғанда, 2-3 мың гектарға жетуі мүмкін;

- ✓ үйінді-шлам шаруашылығының объектілері гидросфераны ластаудың тұрақты көзі болып табылады-өнеркәсіптік ағындардың жер үсті гидросферасына ашық ағызылуы және тұзды жер асты суларына сүзілуі шаруашылық-тұрмыстық сумен жабдықтау көздеріне қауіп төндіретін гидросфераның тұздануының ауқымды қалыптасуына әкелді;

- ✓ уақыт өте келе калий өндірісінің қалдық жинағыштарының жанында топырақтың, жер асты және жер үсті суларының тұздануы пайда болады. Олардың мөлшері мен формасы көбінесе жер үсті және жер асты ағындарының жылдамдығы мен бағытымен анықталады. Халық арасында калий кендерін өндіру және байыту жөніндегі кәсіпорындардың өндірістік қызметінің мұндай салдарларының болмай қоймайтындығы туралы пікірдің кеңінен таралуы, әсіресе бұрын жаңа калий-магний кен орындарын игеру жүргізілмеген аумақтарда жұртшылықтың зор алаңдаушылығын туғызады.

Осыған байланысты соңғы жылдары қоршаған ортаны қорғау және табиғи ресурстарды ұтымды пайдалану мәселелері бойынша қабылданған Үкіметің

шешімдерінде калий кәсіпорындарының қалдықтарын азайту, оларды өңдеу және өсімдіктер мен жануарлар әлеміне зиянды әсерді азайту мәселесі өткір қойылып отыр. Қойылған міндеттердің кешенді шешімі [24]:

- кен орындарын селективті игеруді енгізу;
- тұз үйінділерін тиімді пайдалану;
- галит қалдықтарынан ас тұзын өндіру.

Галит қалдықтарын пайдаланудың ең перспективалы және экономикалық тиімді бағыты-ас тұзын өндіру. Хлорид немесе ас тұзы – ең маңызды химиялық шикізат, сонымен қатар малды тамақтандыру үшін тағамға тең консервант ретінде қолданылады. Бір адамға тұз тұтынудың орташа жылдық мөлшері 8-8,5 кг құрайды, ал кейбір елдерде өнеркәсіптік тұтыну жылына 75 кг-ға жетеді.

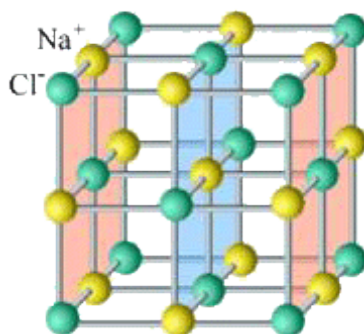
Сонымен, жоғарыда келтірілген мәліметтер негізінде, галургиялық технология қолданысы үшін қажетті табиғи шикізаттар жер бетінде кең таратылған деуге болады. Олардың қоры галургиялық технологияны бүгін де, алдағы ұзақ мерзімді болашақта да қамтамасыз етуге жеткілікті. Осы себепті, галургиялық технологияның қалыптасқан әдістері мен тәсілдерін ары қарай жетілдіріп, оның тиімділігін арттыратын жаңа шешімдер мен ұсыныстар дайындап, оларды іс-тәжірибеге қолданысқа енгізу мақсаттарында ізденістер жүргізу ғылыми да қолданбалық маңызды мақсаттар қатарына жатады. Осы кезде аса көңіл аударар мәселелер галургиялық технологияларда қолданыста болатын үрдістер мен тәсілдердің технологиялық көрсеткіштеріне еріткіш судың, сулы-тұзды жүйелердегі иондық бөлшектердің, тұздар ерітінділерінің құрылымы, құрамы, физика-химиялық қасиеттері туралы заманауи ғылыми жетістіктер нәтижелерін қолданысқа өндіру жаңа мүмкіндіктерін айқындау болып табылады.

1.3 Тұздардың кристалдық торлары, олардың кристалдық тор энергиясы

Тұздардың барлығы дерлік кристалдық торлардан тұрады. Бұлар кеңістікте тор пішінді боп орналасады. Кристалдық тор дегеніміз кристалдар құрамында атомдар, молекулалар не иондар белгілі бір тәртіппен кеңістікте орналасуы. Сондықтан кристалдық тордың түйіндерін атомдар, молекулалар не иондар құрайды. Мысалы ас тұзының түйіндерінде натрий және хлор иондары болады. Кристалдық тордың қалыптасуына байланысты, кристалдық торлар - иондық, атомдық, металдық және молекулалық деп төртке бөлінеді.



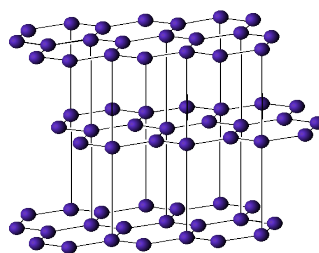
Иондық кристалдық тор заряды бар иондардан құралады. Оған ас тұзы иондық кристалдық тордың мысалы бола алады:



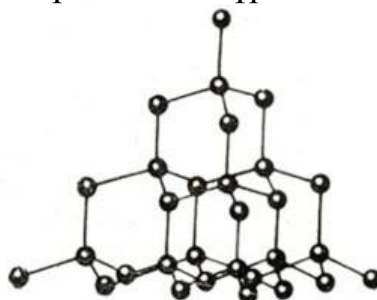
Себебі бұл зат, оң заряды бар натрий ионынан (Na^+) және теріс заряды бар хлор ионынан (Cl^-) құралған.

Металдық кристалдық тор дегеніміз метал атомдарынан құрылған кристалдық торлар. Оң зарядталған иондарды катиондар деп атайды. Бұндай кристалдық торлар металдарда (мыс, темір, алюминий, қалайы, қорғасын т.б.) және олардың қорытпаларында кездеседі.

Атомдық кристалдық тор кеңістікте белгілі бір тәртіппен орналасқан атомдардан құралған. Мысалы графит:

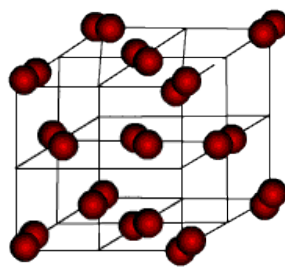


Графиттегі әрбір көміртегі атомы көршілес үш көміртегі атомымен қатты байланысқан қабатты құрайды. Қабаттар бір-бірімен әлсіз байланысқан. Сондықтан графит жұмсақ әрі сынғыш болады. Ал алмас осы көміртегі атомдарынан құралған, бірақ бұл заттың құрылысы басқа:



Алмаста көміртегі атомдары бір-бірімен берік байланысқан. Сондықтан бұл зат берік болады.

Молекулалық кристалдық тордың түйіндері молекулалардан құралған. Мысалы I_2 кристалдық торы мынандай:



Кесте -4 Тұздардың кристалдық тор типтері

Тордың типі	Құрылыс бірлігі	Бөлшектердің арасындағы байланыс типі	Балқу температурасы	Ерігіштігі
Атомдық	Бейтарап атомдар	Ковалентті	Жоғары	Ерімейтін
Молекулалық	Молекулалар	Әлсіз молекулааралық байланыстар	Төмен	Органикалық еріткіштер мен суда ериді
Иондық	Иондар	Иондық	Жоғары	Суда ерімтал келеді
Металдық	Металл атомдары мен катиондары	«Электрон» газы	Әр түрлі	Ерімейтін металдар

Химиялық технологияда тұз кристалдарының қатысуында көптеген үрдістер орын алады. Солардың ішінде, галургиялық технология үшін ең маңызды үрдіс еру үрдісі болып табылады. Осы үрдісті іске асыруда, әдетте, қалыптасқан тәртіп бойынша, негізінен температуралық факторға баса көңіл аударылады. Осы кезде тұздар кристалдарының кристалдық тор энергиясы шамасы бүгінге дейін галургиялық технологияда ескерілмей келеді. Бұл олқылықты орынсыз деп қарастырған дұрыс. Себебі, еру үрдісінің нәтижесіне біріншілей шешуші әсер ететін фактор тұз кристалдарының беріктігі екені даусыз. Ал осындай беріктіктің көрсеткіші кристалдық тор энергиясы. Сондықтан, еру үрдісінен бастама алатын галургиялық технологиялардың нәтижелілігін бағалауда тұз кристалдарының кристалдық тор энергиясы әсерін ескеру аса өзекті мәселе болып табылады. Бүгінде, тұз кристалдарының кристалдық тор энергия шамасын (КТЭ) анықтауға арналған көптеген ұсыныстар мен шешімдер бар. Олардың ішінде қолданбалық маңыздылығы жоғары, есептеу жолдары аса күрделі емес ұсыныстар ретінде М.Борнның, А.Капустинскийдің және Е.Ферсманнның ұсынған кристалдық тор энергия шамасын есептеу әдістерін келтіруге болады [25].

М.Борн әдісі бойынша кристалдық тор энергия шамасын (КТЭ) келесі формуламен есептеуге болады:

$$\Delta U = N_A \cdot A \frac{z_1 z_2 e_0^2}{4 \pi \epsilon_0 r^2} + \left(1 - \frac{1}{n}\right); \quad (1)$$

бұл жерде: N_A – Авогадро саны,
 A – Маделунга тұрақтысы;

z_1, z_2 анион мен катион валентілігі;
 e – электрон заряды, Кл
 ϵ_0 – вакуумдық диэлектрлі өткізгіштік, Ф/м
 r – зарядталған бөлшектер арасындағы арақашықтық, Å

Осы әдіс бойынша анықталған бірнеше тұздар топтарының кристалдық тор энергия шамалары (КТЭ) төменгі 5 - кестеде келтірілген.

Кесте – 5 Тұздар тобының М.Борн әдісімен есептелінген кристалдық тор энергиясы шамалары.

Тұздар	КТЭ, кДж/моль	Тұздар	КТЭ, кДж/моль
NaCl	762	CsCl	621
KCl	682	AgCl	748
LiCl	831	CuCl	776
RbCl	658		

Кристалдық тор энергия (КТЭ) шамасын есептеудің жаңа теңдеуін 1943 жылы А. Ф.Капустинский ұсынды:

$$U = 1070,9 \frac{m \cdot z_k \cdot z_a}{r_k + r_a}; \quad (2)$$

бұл жерде: z_k, z_a – ион зарядтары;
 r_k және r_a – катин мен анионның иондық радиусы, Å;
 m – кристалдың химиялық формуласындағы иондар саны;

Капустинский әдісі бойынша анықталған тұздар топтарының кристалдық тор энергия шамалары төмендегі 6 – кестеде келтірілген.

Кесте-6 Тұздар тобының А.Капустинский әдісімен есептелінген кристалдық тор энергия шамалары (КТЭ).

Тұздар	КТЭ, кДж/моль	Тұздар	КТЭ, кДж/моль
NaCl	759	NaF	929
KCl	679	KF	812
LiCl	828	LiF	1035
RbCl	656	RbF	779
CsCl	619	CsF	728
AgCl	745	AgF	908
CuCl	773	CuF	950

Кристалды тор энергия шамаларының (КТЭ) тұжырымдамасы шеңберінде нақты анизодесмикалықты сандық бағалау мәселесін немесе басқа сөзбен айтқанда, осындай қосылыстардың кешендік дәрежесін шешуге тырысуға

болады. Мұндай бағалаудың мүмкіндігі кешенді иондар үшін энергетикалық коэффициенттердің (Е.Ферсман, 1958) бар болуымен байланысты. Осы деректерді пайдалана отырып, кешенді минералдың U энергетикалық параметрлері және одан әрі оның H_M салыстырмалы қаттылығын есептей отырып және оны эксперименталдық салыстырмалы қаттылықпен салыстыра отырып, қарастырылып отырған қосылыстың (минералдың) кешенді сипатын бір мәнді растауға немесе жоққа шығаруға болады.

Иондық кристалдық тор энергия шамасын (КТЭ) бағалаудың карапайым әдісін Е.Ферсман ұсынды. Е.Ферсман тәсілі бойынша кристалдық тор энергия шамасы төмендегідей есептелінеді:

$$U = 1071,5 \cdot \sum \text{ЭК} ; \quad (3)$$

бұл жерде: ЭК – Ферсман энергетикалық коэффициенті;

$$\text{ЭК}_{\text{анион}} = \frac{W^2}{2R};$$

$$\text{ЭК}_{\text{катион}} = \frac{W^2}{2R}$$

бұл жерде: $\text{ЭК}_{\text{анион}}$ – анионның энергетикалық коэффициенті;

$\text{ЭК}_{\text{катион}}$ – катионның энергетикалық коэффициенті;

W – ион валенттілігі;

R – катион мен анион иондарының радиусы.

Е.Ферсман әдісі қолданысында анықталған мысалдық тұздар топтарының кристалдық тор энергия шамалары төмендегі 7 – кестеден көруге болады.

Кесте -7 Тұздар тобының Е.Ферсман әдісімен есептелінген кристалдық тор энергия шамалары (КТЭ).

Тұздар	КТЭ, кДж/моль	Тұздар	КТЭ, кДж/моль
LiCl	968	LiF	1089
NaCl	815	NaF	936
AgCl	790	AgF	910
KCl	689	KF	810
RbCl	659	RbF	780
CsCl	617	CsF	738

Келтірілген 5 – 7 кестелерінен көрінгендей, әр түрлі тәсілдермен анықталған тұздардың кристалдық тор энергиясы шамалары (КТЭ) аса үлкен айырмашылықта емес. Дегенмен, байқалған айырмашылықтар олардың ескерерлік кемшіліктері мен жетіспеушіліктері бар екендігіне куәландырады. Осыған байланысты, жоғарыда қарастырылған есептеу тәсілдеріне тән жалпы кемшіліктер қатарында төмендегідей мәселелерді келтіруге болады. М.Борн, А.Капустинский және Е.Ферсман ұсынған тендеулерінде тек ерітілген заттың

ионы мен еріткіштің арасындағы өзара әрекеттесуі ескерілді, сондықтан теңдеулер өте аз шоғырлы ерітінділерге ғана дұрыс болуы мүмкін. Әсіресе, бұл аз диэлектрлік өткізгішті еріткіштерге арналған шарт. Сондықтан бұл теңдеулерді жоғары шоғырлы ерітінділердің кристалдық тор энергиясы шамаларын есептеуде қолдану қателіктерге алып барады.

Сонымен, бүгінде тұздардың кристалдық тор энергиясы шамаларын есептеп табуға мүмкіндік беретін біршама шешімдер белгілі. Алайда, оларға тән, өзіндік, ескермеске болмайтын, кемшіліктер бар. Сондықтан, тұз кристалдарының кристалдық тор энергиясы шамасының шынайлығы жоғары мәндерін іздестіру өте өзекті мәселердің бірі болып табылады. Аталған мәселе орынды шешімін тапқан жағыдайда, тұздардың кристалдық тор энергиясы шамасының шынайы мәндері қолданысында галургиялық технология үшін маңыздылығы үлкен ұсыныстар жасауға, шешімдер қабылдауға мүмкіндік ашылар еді.

1.4 Судың құрылымы мен қасиеттері

Су адамзат үшін ең танымал зат. Судың қатысуынсыз қоршаған орта табиғатпен адамзаттың барлық тұрмыстық та, өндірістік те әрекеттерінде орын алмайтын үрдістер жоқ. Суды екі сутегі атомы мен оттегінің бір атомынан тұратын молекулалық құрамын 1783 жылы ағылшын физигі Генри Кевендиш анықтаған, ал 1785 жылы француз химиктері А.Лавуазе мен Ж.Мененің зерттеулері нәтижесінде судың сутегінің 2 массалық және оттегінің 16 массалық бөліктерінен тұратыны анықталды. Қазіргі кезде судың 36 изотоптық түрлері бар. Олар сутегінің 5 изотопынан және оттегінің 5 изотопынан құрала алады. Олардың ішінде табиғатта оттегі мен сутегінің 3 изотоптық түрлері жиі кездеседі. Олардан судың радиоактивті емес 18 изотоптық түрлері қалыптасқан [26,27].

Су зат алмасу мен ағзалар дамуына қатысатын негізгі орта. Адамзат өмірі мен мәдениетінің дамуы көне замандардан бері сумен тығыз байланысты. Ол қазір өнеркәсіпте, энергетикада, ауыл шаруашылығында, балық шаруашылығында, медицинада және т.б. толып жатқан салаларда кеңінен қолданылады.

Судың негізгі физика-химиялық қасиеттері де қазірде баршаға белгілі деуге болады. Оларды адамзат өз мақсатына қолдана білуді ерте кезден бастап игеріп алған. Қазіргі кезде судың игерілуіне байланысты оны сан алуан жіктерге бөлуге болады – ішімдік су, өндірістік су, тұзды су, тұщы су, жоғары омды су, медициналық су, дистилденген су, тірі су, өлі су және т.б. сулар түрінде. Осыған байланысты су өмір көзі, сусыз тіршілік жоқ, су жоқ жерде өмір жоқ деген нақыл сөздер орынды айтылады.

Алайда өткен уақыт аралығынан бүгінгі күнге дейін адамзаттың судың құрылымы мен қасиеттері туралы білгенінен білмегені көп. Оның қандай зат екені, оның қасиеттерінің қандай заңдылықтарға байланысты екені әлі күнге дейін толықтама белгілі емес. Судың құрылымы мен қасиеттері заңдылықтары туралы көптеген гипотезалар ұсынылып келеді. Осындай жұмыстармен көптеген атақты ғалымдар мен оқымыстылар айналысқан. Олардың ішінен

Д.Бернал, Р.Фаулер, Д.Попл, О.Самойлов, Ю.Гуриков, Е.Форслинд, Л.Полинг, А.Эйкен, Г.Немети, Х.Шираг, Х.Франк, Г.Зацепин және тағы басқа ғалымдарды ерекше айтуға болады.

Судың кейбір қасиеттерін алғашқы рет Д.Берналл және Р.Фаулердің моделі [28,29] негізінде түсіндіруге мүмкін болды. Бұл моделге сәйкес суда оның молекулалары бір-біріне тығыз жанаспайды. Судағы сутектік байланыстардың кеңістік бағытталуы салдарынан судың молекулалары молекула аралық қуыстарды түзіп, елеулі арақашықтарда ұсталады. Бұл судың шын тығыздығы $1,0 \text{ т/см}^3$ болып, су молекулаларының тығыз жанасуы кезінде тығыздығы $1,8 \text{ т/см}^3$ болатындығымен расталады. Сонымен бірге судың молекулалары кристал тәрізді реттілікті сақтайды. Мұндай реттелген аймақтар тұрақты құрылымдар болып табылмайды, өйткені олар үздіксіз ыдырайды, қайта орналасады және мономерлік молекулалардың үзілуі немесе қосылуы салдарынан өлшемдері ұлғайады.

Өзінің мәні бойынша физикалық болып табылатын судың құрылысы жөніндегі теориялардың бірін О.Самойлов ұсынды [30,31]. Берілген ілімге сәйкес судың өлшемі молекуланың тиімді диаметріне $2,94 \text{ \AA}$ және $2,84 \text{ \AA}$ сәйкесінше жақын болатын қуыстары бар ажурлық құрылысты болады. Бұл қуыстар судағы молекулалардың қозғалғыштығы салдарынан жарым-жартылай көршілестермен сутектік байланыстары жоқ жеке молекулалармен толтырылған. Сондықтан мұзды балқыту кезінде тығыздық жоғарылайды, ал координациялық сан артады, мұнда бұл молекулалар өздерінің көршілестерімен сутектік байланысты түзбейді. Температураның жоғарлауы кезінде қуыстар жеке су молекулаларымен толады. Осыған байланысты координациялық санның артуымен бір уақытта тығыздық та артады.

Я.Франкельдің [32] көзқарастарын пайдалана отырып, О.Самойлов су молекулаларының трансляциялық қозғалыс теориясын жасады. Ол өздігінен диффузиялану негізінен қуыстар бойынша жүзеге асады,- деп санайды. И.Франк және А.Квист [33] бойынша мұндай қуыстарға түскен су молекулалары “гидрофобты” бөлшекке айналады, яғни өздерінің көршілестерімен байланыспаған және белгілі бір шамада салыстырмалы бос болады.

А.Нортен, Д.Данфорд және П.Левидің дәл рентгендік зерттеулерінің нәтижелері [34,35] осындай бос молекулалар құрылыстық қуыстардың орталықтарында орналаспайтындығын және сондықтан да алты емес, тек үш ғана жақын көршілесі бар екендігін көрсетті. Орташа координациялық сан 4,4-4,5-ке тең және 200°C -қа дейін өзгермейді. Немети және Шираги орындаған есептеулер көрсеткендей 20°C кезінде молекулалық кластерлердің өлшемі бірнеше молекулалық диаметрлерден аспайды. Мұндай кластерлерге 55-60 молекула біріктірілген. Осы есептеулерге сәйкес сұйық суда молекулалардың 70%-ды кластерлерге байланысқан. Сонымен бірге кластердің ішінде орналасқан молекулалардың 23%-ы төрт сутектік байланысты түзеді, ал оның бетіндегі қалған молекулалар үшеуден (20%), екеуден (4%) және бір сутектік байланыстан (23%) түзеді. 0°C -та кластерлердің орташа құрамы 11,2

молекулаға тең екендігі және кез келген температурада кластердегі молекулалардың саны 60-тан аспайтындығы көрсетіледі.

Гуриков [36-38] жұмыстарында судың молекулалары бос қуыстардың орталығында орналасады деп санайды. Алайда ол қуыстарда орналасқан молекулалар мен құрылымдық каркасқа кіретін молекулалар арасында байланыстың бар екендігіне сенеді. Гуриковқа сәйкес су молекулаларының осы екі типі арасында елеулі өзгешілік жоқ және олар орындарымен оңай алмаса алады. Гуриков судағы құрылымдық қуыстар мұзға қарағанда күштірек созылған және сондықтан да су молекулаларының осы қуыстарда екі мүмкін жағдайлары (күйлері) болады, - деп санайды. Бір жағдайда, молекулалар орталықта орналасқан және каркаспен байланыс түзбейді (гидрофобты су), екінші жағдайда - олар қуыстың шетіне ығыстырылған және құрылымдық каркасқа кіретін молекулалармен байланысқан деп санайды.

Жоғарыда айтылған ұстанымдар мен ұсыныстардың арасындағы осы кезге көбінше мойын ұсынылып, шынайлыққа жақын ұсыныстар қатарына мынандай гипотезаларды жатқызуға болады.

Олардың арасында: құрылымдық ақаулар ілімі, Полинг және Марш жасаған су гидраты ілімі, ассоциация ілімі, “жылтылдайтын” кластерлер ілімі және жаңа ілімдер [39-41]. Келтірілген моделдердің арасынан шын көрініске жақын “жылтылдайтын” кластерлер ілімі болып табылады. Бұл ілімнің алғашқы негізін салушылардың бірі Холл [42] болды. Холл бойынша, суда уақыттың әрбір мезетінде мұз тәріздес және нығыздалған құрылымдарды табуға болады. Солардың біріншілері ретінде сутектік байланыстармен байланысқан су молекулаларынан тұратын үшөлшемді тетраэдрлік каркас түзіледі, ал екіншілері ретінде - мұз тәріздес құрылымдар арасындағы кеңістікті толтыратын және олармен тепе-теңдікте болатын бірден екіге дейін ассоциацияланан мономерлік су молекулаларынан тұратын қабаттар түзіледі. Бұл қабаттарда тек бағытталмаған өте әлсіз дипольдік және дисперстік күштер әрекет етеді. Мұндай жүйелер “кластерлер” деген атқа ие болады. Бүкіл осы жүйе Ван-дер-Ваальстік күштермен ұсталады. Олардың қасиеттерін түсіндіру үшін Франк пен Вен [28,43] мынадай болжам жасады. “Кластерлер” түріндегі құрылымдардың үлкен “меншікті беткейі” болады және олар көп санды молекулалардан тұрады. Байланысқан молекуланың бөлінбеген электрондар жұбының басқа молекуланың протоны жағына қарай ығысуы молекуланың полярлығын күшейтеді және екінші молекуламен байланыс құрудың потенциалды мүмкіндігін арттырады. Осылайша су молекулаларының кластерге бірігуі жүзеге асады. Мұнда судың байланысқан молекулалары елеулі дәрежеде мономерлілерге қарағанда сутектік байланыстарды түзуге қабілетті. Сонымен, бір сутектік байланыстың түзілуі жаңа байланыстардың пайда болу мүмкіндігін арттырады, яғни кластердің өсуіне жағдай жасайды. Керісінше, егер судың молекуласы сутектік байланысты үзіп кластерден шықса, онда бұл кластердің ыдырауын, яғни одан басқа молекулалардың және молекула топтарының үзілуін жеңілдетеді. Бұл екі құбылыс мұз тәрізді құрылымды

кластерлердің алма-кезек түзілуі мен бұзылуына алып келеді. Сондықтан судың анық көрінетін динамикалық құрылымы болады.

Девис пен Литовитцтың ұйғарымдары бойынша [44] судың көлемінде сутектік байланыстары жоқ молекулалар болмайды. Алайда олар су молекулаларынан алты бұрышты сақиналар түзіледі деп ұйғарады. Агеноның [45] болжамы бойынша суда сутектік байланыстардың ұжымдық жүйесі бар. Мұндай байланыстар жиынтықтық барлық молекулаларында электр зарядтар орталықтарының бір мезгілде ығысуы нәтижесінде пайда болады. Сонымен бірге судың бір молекуласы екіден артық емес ұжымдық сутектік байланыстардың түзілуіне қатыса алады. Сутектік байланыстар мен байланысқан молекулалық жиынтықтар тізбектер және сақиналар түріндегі әртүрлі формада болады және өлшемі тұрақсыз құрылымдар болып табылады. Олар үздіксіз ыдырайды және қайтадан құралады. Сонымен бірге берілген жүйедегі сутектік байланыстардың жалпы саны өзгеріссіз қалады. Курант [44] Франк пен Веннің кластерлік моделін есептеп келесі қорытындыға келді. Кластерлер мономерлік судың қабаттарымен бөлінген емес, өзара тікелей байланыста болады. Олардың тұжырымдауы бойынша Франк-Веннің моделін мұз тәріздес құрылым моделіне сутектік байланыстардың орналасуын шамалы өзгерту жолымен оңай түйістіруге болады. Боннер мен Вутси кәдімгі температуралық жағдайларда суда мономерлік молекулалардың үлесі температураның жоғарлауымен өседі деп есептейді. Ал Ю.Наберухин және С.Шуйский ұстанымдары [32] бойынша сутектік байланыстардың кеңістік торымен анықталған су құрылысының квазикристалдығы оның бүкіл көлемінде емес, тек су молекулаларының жеке кластерлері шегінде ғана байқалады. Олар өзара әлсіз байланыстармен бірігеді, бұл байланыстар кластерлердің өздерінің шегіндегі байланыстарға қарағанда елеулі жеңіл бұзылады және ыдырайды. Мұндай көзқарастың біртекті мұзтәріздес сұйық су жөніндегі көзқараспен жақындығы жақсы байқалады.

Судың құрылымы мен қасиеттері әлі күнге зерттелуде. Қазіргі кездегі жалпыға танымал көзқарастар тұрғысынан көлемдік сулы орта жеке су молекулаларының кешенді жиынтығынан тұратын ерекше оңашаланған молекулалық кинетикалық жүйе [46,47]. Бұл жүйеде молекула аралық байланыс көбінесе табиғаты диполь-дипольдық бағытталған күшпен жасалады. Аталған молекула аралық әрекеттесу өзіне тән ерекшеліктері мен айырықшаланады. Бұған мысалдар ретінде салыстырмалы жоғары байланыс энергия, оның кеңістіктегі бағыттылығы және т.б. жатады.

Қазіргі кезде су құрылымдарын зеттеуде елеулі мәнді нәтижелер алынды [48]. Олардың көп бөлігі белгілі шамада сұйық күйлі құрылымдардың құрылысы жайлы ілімдер негізінде қалыптасты. Көлемдік сулы орталардың қасиеттері, құрамы мен құрылымы туралы белгілі мәліметтерді жаңа өзіндік тұжырымдарда сараптау арқылы оларға тән өзгешіліктерді төмендегідей түсіндіруге мүмкіндік берді [49].

Көлемдік сулы орта жеке молекуладан және сулы кешендерінен тұратын қоспа. Көлемдік сулы кешендерде судың жеке молекулалары белгілі бір

координациялық сфераға кіреді, олар нақты өлшемді және сфера пішінді болады. Әрбір координациялық сферада белгілі бір санды жеке су молекулалары болады. Ескеретін жайт, координациялық сфераның реті жоғарлаған сайын оның құрамындағы жеке су молекулалары саны да артады. Бірдей координациялық саны бар су кешендері бірдей су молекуласы санынан және бірдей сыртқы үш өлшемді болады. Көлемдік ортада жеке су молекулаларымен қатар, су кешендері де өзара келісілген тепе-теңдік қалыпта бола алады және кеңістіктегі үш бағытта айнымалы, тербелмелі, ілгерілмелі қозғалыс жасай алады. Осыдан барып, көлемдік судың басты ерекшелігі - оның барлық қасиеттерінің изотропты өзгерісте болуы қалыптасады. Су кешендері өлшемі жеке-дара су молекулалары өлшемінен әлдеқайда үлкен. Сондықтан көлемдік сулы ортада жекеленген су кешендері арасында қуыстар пайда болады. Ол қуыстардың өлшемі жеке-дара молекулалардың өлшемінен артық және олар барлық көлемде біртекті-біртекті болады. Осындай қуыстарды су кешендерін құрайтын жеке-дара су молекулалары толтырады. Кеңістіктегі жылулық қозғалыстар су кешендерінің аралық бос көлемдік өлшемдерін динамикалық өзгертулерге ұшыратады. Сондықтан сулы молекулалық қуыс жеке-дара молекулалардың қайта орналасуы әсерінен әрқашан сандық-сапалық өзгеріске ұшырайды. Осыған орай, көлемдік сулы орта су молекуласының екі түрінен тұрады. Атап айтар болсақ:

- бірінші түрі жеке-дара су молекулаларынан, ферми-потенциалы әрбір шекті мәннен аз, координациялық сулық ферми-беттік құра алмайтын су молекуласы;

- екінші түрі, ферми-потенциалы өзінің шекті мәнінен жоғары, координациялық сулық ферми-бет құра алатын су молекуласы.

Осындай ерекшеліктерді негізге ала отырып, бірінші түрдегі жеке молекулаларды бос су молекулалары, ал екінші түрдегі координациялық сулық ферми-бет құра алатын молекулаларды байланысқан су молекулалары деп аталды. Осыдан көлемдік судың молекулярлы құрамы бос және байланысқан су молекулаларының жиынтығынан тұрады. Көлемдік судың құрамы және басқа да қасиеттері бос және байланысқан су молекулаларының жеке-қасиеттерінің қосынды көрсеткіштері болып табылады. Олардың температураға қатысты санды өзгерістері ерігіштіктің артуымен нәтижеленеді. Температура өскен сайын көлемдік судың байланысқан құрамдастарының тұтқырлығы кемиді. Тұтқырлық көрсеткіші өзгерісі байланысқан су тұтқырлығының температураға байланыстылығы сипатымен толық сәйкес өзгереді. Алайда осы кезде көлемдік судың бос көлемі нәтижелі әсер етеді. Бұндай өзгерістер орташа және жоғары температура аймақтарында жақсы байқалады.

Көлемдік бос су және байланысқан сулардан тұратын күрделі жүйеде температураның артуында бос су молекулалары үлесі артады, ал байланысқан су молекулаларының бұл көрсеткіштері төмендейді. Осы кезде көлемдік судың, бос су молекулаларының және судағы бос қуыстардың мөлдік көлемдері температура артқанда өсулік сипат көрсетеді, ал байланысқан судың мөлдік

көлемі бұл кезде температураның артуында айқын төмендейді [50]. Мұндай өзгерістерді 8 – кестедегі мәліметтерден көруге болады.

Кесте -8 Бос және байланысқан су молекулаларының саны

Температура, К	Молекулалардың жалпы саны, %	Бос молекулалар саны, %	Байланысқан молекулалар саны, %
274,95	100,00	23,46	76,54
283,80	100,00	40,39	59,61
299,80	100,00	55,20	44,80
322,96	100,00	47,90	52,10
353,26	100,00	78,50	21,50

Жоғарыда келтірілген мәліметтер негізінде судың нормалды және аномальды қасиеттеріне түсініктеме беруге болады. Су қату кезінде басқа қосылыстар секілді қысылмайды, ұлғаяды, қысымның артуымен оның қату температурасы жоғарылайды, меншікті жылусиымдылығы өте жоғары, диэлектрлі тұрақтысы жоғары болуына байланысты еріткіштік және диссоциациялануы жоғары болады.

Судың аномальді қасиеттері олардың молекулалық құрлысына тікелей байланысты. Су аномальді сұйықтықтар класына жататындығы ертеден мәлім. Оның қасиеттері қалыпты (нормалды) сұйықтықтардың қасиеттерінен елеулі ерекше болады. Судың осындай қасиеттерінің бірі суды балқыту кезінде және алынған суды әрі қарай қыздырған кезде 0°-ден 4°-қа дейінгі температураларда тығыздықтың артуы болып саналады. Бұдан басқа, сұйық судың жылусиымдылығы оның қатты аналогы мұздың жылусиымдылығынан екі есе көп, судың термиялық ұлғаю коэффициенті 0-45°С ара-қашықтықта қысымның жоғарылауымен артады (әдетте, қалыпты сұйықтықтар үшін бұл коэффициент қысыммен төмендейді); дәл сол ара-қашықтықта судың сығылуының жоғарылауымен кемиді; 0-25°С температуралық ара-қашықтықта судың тұтқырлығы қысымның артуымен төмендейді; қысымның жоғарлауы кезінде судың диэлектрлік өткізгіштігі мен өздігінен диффузия коэффициенті аномальді түрде болады.

Суыту кезінде су көлемі азаяды, қысылуы аз болады, сыну көрсеткіші артады, судағы дыбыс жылдамдығы және оның жылу өткізгіштігі азаяды, ал жылусиымдылығы артады. Судың жылу өткізгіштігінің температуралық тәуелділігі монотонды емес сипатқа ие, ал температура төмендеген кезде мұз үшін жылу өткізгіштігі сызықтық өседі. Судың жылу өткізгіштігінің қысымға тәуелділігі оның аз қысылуымен байланысты [51].

Судың үлкен жылу сиымдылығы (аммиак пен сутегіден жоғары) тірі ағзалардағы жылудың реттелуіне ықпал етеді. Табиғи суларды мынадай белгілер қарай ерітілген құрамдастардың температурасына, химиялық құрамына, орналасқан жеріне, мақсатты пайдаланылуына, айналым динамикасына, фазалық жағдайына, белгілі бір геосферада болуынан, сондай-ақ басқа да белгілері мен қасиеттеріне қарай жіктейді.

Қазіргі таңда судың зерттелу аймақтары өте көп болғанымен, оның құрылысы, құрылымы, аномальді қасиеттері түсіндіру мүмкіндігі толық анықталған жоқ. Егерде осы су құрылысы, құрылымы және т.б. қасиеттері толығымен анықталса, онда ағын суларды, өндірістік суларды тазалау мен пайдалану өте оңай болған болар еді.

Сонымен қорыта айтқанда галургиялық үрдістерде негізгі еріткіш ретінде қолданылған су өте мол қасиеттерге ие. Судың құрамы мен қасиеттерінің өзгерістері галургиялық үрдістердегі құрамдық, күйлік, құрылымдылық және физика-химиялық өзгерістерге әсер етуі күмәнсіз. Алайда осы күнге дейін галургиялық үрдістерді ұйымдастыруда, жүргізуде оның нәтижелерін қорытындылауда осы айтылған жағдайлар ескерусіз қалып келеді. Сондықтан галургиялық үрдістерді сипаттауда ондағы орын алатын барлық үрдістер мен құбылыстарға түсініктеме беруде судың ерекшеліктерін оның құрамы мен қасиеттері туралы қолжеткен заманауи тұжырымдарды қолдану, пайдалану ғылыми да, қолданбалық та маңызды өзекті мәселелер болып табылады.

1.5 Сулы-тұзды жүйелер туралы

Жеке тұздар мен олардың қоспаларының сумен әрекеттесуінде сулы-тұзды жүйелер түзіледі. Осындай әрекеттесу кезінде еру үрдісі орын алады. Осының нәтижесінде ерітінділер түзіледі. Ерітінді деп екі немесе бірнеше құрамдастардан тұратын гомогенді жүйелерді айтады. Әдетте ерітінділердің физика-химиялық қасиеттері өзгеріп отырады. Ерітінділерді жай физикалық деп те, химиялық қоспа деп те қарастыруға болады. Химиялық қосылыстардан негізгі өзгешілігі оның құрамының еритін зат көп еріткіштің мөлшерінің тәуелділігінде және еселік қатынас заңына тәуелсіздігінде. Бұл қалыпты жағдайда кездесетін құбылыс. Ерітіндінің химиялық қосылыстан тағы бір ерекшелігі олардағы химиялық байланыстар табиғаттарында. Егер химиялық қосылыстар негізінен ионды, ковалентті байланыстармен сипатталса, ерітіндідегі байланыс, газдарда кездесетін аса әлсіз Ван –дер–Ваальстік, ал кейбір жағдайларда қосымша сутектік байланыстармен түсіндіріледі[52].

Ерітінді жайлы ілім өз алдына жеке бөлім болып, жалпы ғылымдардан ерекшелене бастағаннан оны түсінудің екі көзқарасы қалыптаса бастайды. Олардың бірі - ерітінділердің физикалық, ал екіншісі - химиялық қасиеттеріне негізделген ілімдік қағидалар. Ерітінділердің физикалық қағидасы XIX ғасырдың екінші жартысында қалыптасты. Ол қағиданың негізін салушылар С.Аренниус пен Я.Вант - Гофф болды [53,54]. Бұл қағида бойынша еру үрдісі жай физикалық қосылыс ретінде, еритін заттардың ұсақ бөлшектерінің еріткіш көлемінде біркелкі таралады. Олай болса, бұл қағида еритін зат пен еріткіш араларында химиялық әрекеттесу болады деген пікірді теріске шығарады.

Жалпы физикалық ілім ерітінділердің қайнау, кату температураларының төмендеуі мен жоғарылауына, осмостық қысым сияқты қасиеттеріне сүйенді. Бұл шамалар ерітінділердің шоғырларына тәуелді де, ерітінділердің табиғатына тәуелсіз болады. Сондықтан да бұл қағида бойынша ерітінділерде еріген заттардың күйі газ күйіндегі ерітінділерге ұқсас болып келетін молекулалардың

бірінғай қоспасы сияқты. Д.Менделеев ерітінділердің химиялық теориясының негізін салушы. Д.Менделеевтің зерттеу жұмыстарының нәтижесі еріген зат пен еріткіш химиялық қосылысады деген жорамалды дәлелдеді. Ол қосылыстарды сольват (латынша *solvere* - еріту) деп, еріткіш су болса, гидрат деп атады. Еріген заттын сумен әрекеттесу үрдісін гидратация деп атады [55].

Кейінірек, бұл қағидаға И.Каблуков, Н.Курнаков [56] сияқты әйгілі ғалымдар елеулі үлес қосып, оның жана ұғымдарын енгізе отырып, оларды толығымен зерттеді. Олар еріткіш пен еритін зат молекулаларының арасындағы байланыс негізінен сутектік байланыс арқылы немесе ондағы қосылыстар құрамына енетін полюсті молекулалар араларындағы өзара электростатикалық әрекеттесу салдарынан болатынын анықтап берді. Сонымен ерітінділерде бір жағынан физика-механикалық үрдіс деп қарастырсақ, екінші жағынан олардың ерітінділерінде химиялық үрдістер жүреді.

Адам баласының тіршілік әрекетінде, өмірінде ерітінділердің маңызы аса зор. Химиялық үрдістермен байланысты өндіріс салаларының көпшілігінде ерітінді ұғымы пайдаланылады. Адамзат баласы мен жан –жануарлар және өсімдіктер әлемі ерітіндісіз өмір сүре алмайды.

Еріткіш - суда еріген заттардың жеке тұз немесе тұздар қоспасының ерігіштігі әрекеттесу уақыты мен температураға аса тәуелді [57]. Осыған байланысты әрекеттесу уақыты мен температураның артуында, әдетте, сулы-тұзды жүйелерде еріген зат шоғыры артады. Сондықтан әрекеттесу уақыты мен температура мәндеріне байланысты сулы-тұзды жүйелер қанықпаған, қаныққан, аса қаныққан түрлерде қалыптаса алады. Қаныққан және қанықпаған ерітінді деген түсініктен басқа іс-жүзінде тағы мынандай түсініктерді пайдаланылады: ішінде еріген зат көп болса қою ерітінді, еріген зат аз болса сұйық ерітінді, ал өте қою ерітінділерді шоғырланған ерітінді ретінде қарастыруға болады. Бірақ бұл түсініктердің ешқайсысы ерітіндінің шоғырын сандық мөлшермен көрсетпейді. Ерітіндінің шоғыры дегеніміз ерітіндінің белгілі бір салмақ мөлшерінде, не белгілі көлемінде еріген заттың мөлшері.

Ерітінділердің шоғырын белгілейтін әдістер:

1. Массалық үлеспен өлшенетін ерітінділер.
2. Мольдік үлеспен өлшенетін ерітінділер.
3. Нормалдықпен өлшенетін ерітінділер.

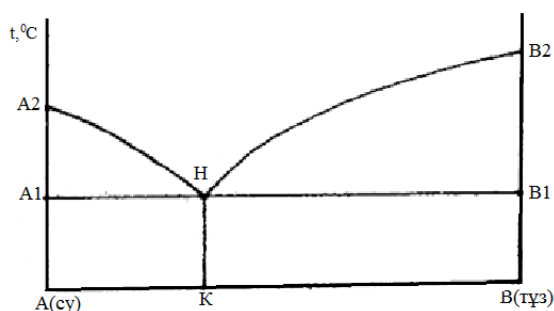
Аталған қалыптардағы сулы-тұзды жүйелердің құрамдық, күйлік, құрылымдылық және физика-химиялық қасиеттерінде біршама ұқсастықтармен айырмашылықтар болады. Осы кездегі орын алатын ұқсастықтар қатарына олардың құрамдары белгілі бір дәрежеде гидратацияланған тұздар мен бос және байланысқан еріткіш молекулаларынан тұратындығын жатқызуға болады. Алайда, қанықпаған, қаныққан және аса қаныққан сулы-тұзды жүйелерде күйлік, құрылымдық және физика-химиялық елеулі айырмашылықтар болады. Мұндағы құрылымдылық айырмашылықтар еріген заттардың шоғырлары айырмашылықтары негізінде орын алатын тұздардың гидратациялану дәрежелерінің айырмашылығы мен жүйелердегі бос және байланысқан еріткіш молекулалары сандары айырмашылығымен сипатталады. Осы кездерде сулы-

тұзды жүйелерде олардың физика-химиялық қасиеттерінің көрсеткіштік мәндері де өзгереді. Аталған сулы-тұзды жүйелерде олардағы құрамдық және температуралық өзгерістерге байланысты кейбір жағдайларда күйлік өзгерістер орын алады. Бұл кездерде әдетте сұйық күйде қалыптасқан тұзды жүйелерден бу күйіндегі және қатты күйдегі құрамдастар бөлінуі байқалады. Мұндағы булық күй толықтама еріткіш су молекулаларынан тұрады, ал қатты күй мұз түріндегі еріткіш немесе қайтадан қатты күйге айналған жеке тұз немесе тұздар қоспасы болып табылады.

1.5.1. Екі құрамдасты жүйелер сипаттамалары

Екі құрамдасты жүйені үш координаттық білікті кеңістіктегі дене ретінде көрсетуге болады. Әдетте сызуды оңайлату үшін осы үш көрсеткіштің біреуін тұрақты етіп алады. $P = \text{const}$ болғанда температура мен құрамдастың шоғыры арқылы берілген жазықтықтағы айна екі құрамдас жүйені бейнелейді. Ол ерігіштік күй диаграммасы деп аталады [58].

Егер екі құрамдас жүйеде еріген тұз (В) сусыз түрде кристалданатын болса аталған жүйенің ерігіштік айнасын төмендегідей көрсетуге болады (сурет 1).



Сурет - 1 Сусыз түрде кристалданатын тұздың ерігіштік күй диаграммасы

Мұнда ерігіштіктің температураға тәуелді екені көрсетілген.

A_2 – таза судың балқу температурасы;

B_2 – таза В тұзының балқу температурасы;

A, A_2 – сызығында – судың мөлшері 100 пайыз.

В B_2 – сызығында - В тұзының мөлшері 100 пайыз.

N – ерітіндінің мұзбен және В тұзымен бірге қанығу нүктесі.

K – эвтетикалық қоспа нүктесі.

A_2N – ерітіндінің мұзбен қанығу сызығы.

B_2N – ерітіндінің В тұзымен қанығу сызығы

Тұз В-ға суды немесе суға В тұзын қосқанда олардың балқу температуралары A_2N, B_2N – сызықтары арқылы төмендейді.

A_2NB_2 – қисық сызығынан жоғары жатқан аймақ қанықпаған ерітінді аймағы.

B_2NB_1 – алаңында қаныққан ерітінді В тұзының қатты күйімен тепе-теңдікте болады. Бұл алаң В тұзының кристалданатын алаңы деп аталады.

A_2NA_1 – мұздың кристалданатын алаңы.

A_1B_1BA – аймағы қатты күйлердегі В тұзымен және мұздан тұрады.

A_1B_1 – эфетикалық температура сызығы. Бұл сызықтың астында сұйық күй болмайды.

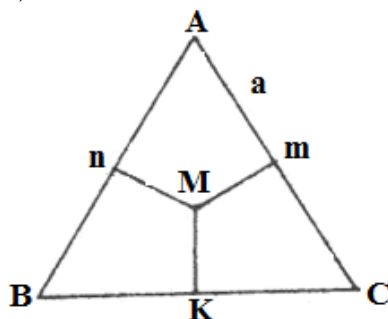
Аталған жүйеде қысым тұрақты болған жағдайда ($P=\text{const}$) оның еркіндік дәрежесі $E=K-K+1=3-K$ түрінде анықталады. A_2NB_2 аймағының жоғарғы жағында жүйе бір күйден тұратын болғандықтан оның еркіндік дәрежесі $E=3-1=2$ тең болады. AA_1B_1B аймағында $E=3-2=1$ тең болады. Егер жүйенің еркіндік дәрежесі бірге тең болса, бұл жүйеде оның қалпын өзгертпей бір ғана көрсеткішті өзгертуге болады. Егер екі көрсеткіш өзгертілсе, онда жүйеде тепе-теңдік қалып сақталмайды.

A_1B_1 түзу сызығында еркіндік дәрежесі болмайды. Себебі онда күйдің саны үшеу $E=3 - 3=0$. Егер осы жүйеде бір көрсеткішті өзгертсек (мысалға температураны жоғарлатсақ немесе төмендетсек) онда тепе-теңдік күйдегі заттардың біреуі жоғалады [59,60].

1.5.2 Үш құрамдасты жүйелер сипаттамалары

Үшқұрамдас жүйелер иондары біртекті екі тұздан және судан тұрады. Мысалы: $KCl - NaCl - H_2O$; $K_2SO_4 - MgSO_4 - H_2O$; $NaCl - Na_2SO_4 - H_2O$ т.б. Үшқұрамдас жүйелерде еркіндік дәрежесі 4-ке тең. Ол екі тұздың шоғыры, температура және бу қысымы. Үшқұрамдас жүйелердің айнасын сызу үшін 4 өлшемді сызба жасау керек. Оны жеңілдету үшін 4 тәуелсіздік көрсеткіштердің біреуін тұрақты етіп алады. Мысалы: бу қысымын тұрақты етсек ($P=\text{const}$), онда екі тұздың шоғыры мен температура ғана ерігіштік айналарын бейнелеуде қолданылады [61].

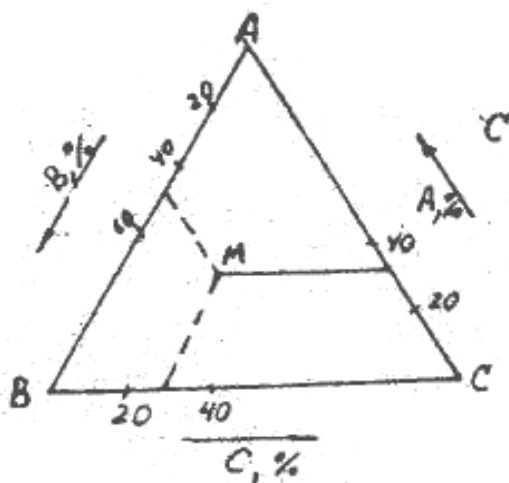
Үшқұрамдас жүйелердің құрамын тең қабырғалы үшбұрыш арқылы бейнелеу. Тең қабырғалы үшбұрыштың ABC төбелерінде жүйенің таза A, B және C құрамдастарының фигуративтік нүктелері жатады. Үшбұрыштың қабырғаларында екіқұрамдас жүйенің нүктелері жатады. Ал үшбұрыштың ішінде орналасқан нүктелерде – үшқұрамдас жүйенің нүктелері жатады. Бұл әдісті қолданғанда әдетте Гиббс немесе Розебом тәсілдерін пайдаланады. Гиббс әдісі бойынша үшбұрыштың биіктігін 100% -ға теңейді. Онда, үшбұрыш ішінде орналасқан кез-келген нүктеден қарсы қабырғаларға түсірілген перпендикулярлардың ұзындықтарының қосындысы үшбұрыштың биіктігіне тең. Сондықтан әр құрамдастың мөлшері перпендикулярлардың ұзындығы арқылы анықталады (сурет 2).



Сурет-2 Гиббс әдісі бойынша үшқұрамдас жүйелерді бейнелеу

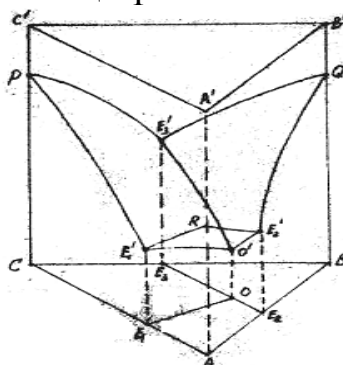
Розебом әдісі бойынша үшбұрыштың қабырғасының ұзындығын 100%-ға теңейді. Онда үшбұрыштың ішіндегі кез-келген нүктеден қарама-қарсы

кабырғаларға параллель жүргізілген сызықтардың ұзындығының қосындысы кабырғаның ұзындығымен тең (сурет 3).



Сурет -3 Розебом әдісі бойынша үшқұрамдас жүйелерді бейнелеу

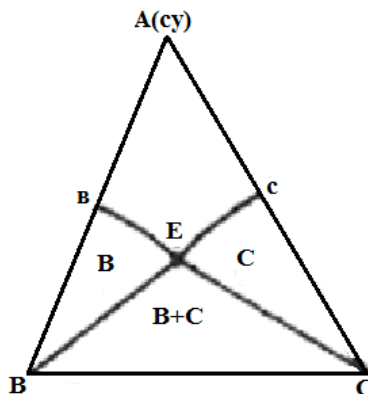
Үшқұрамдас жүйелердің политермиялық айналары. Оны құру үшін тең кабырғалы үшбұрыштың барлық бұрыштық нүктелерінен перпендикуляр жүргізіледі. Перпендикулярдың ұзындығы ерітіндінің қаныққан кезін белгілейтін нүктелерге тең етіп алынады. Сол қаныққан нүктелерді өз-ара қосқанда, үшбұрышты призманың ішінде орналасады. Осындай кеңістіктегі айна үшқұрамдасты жүйелердің политермиялық айнасы деп аталады. 4- суретте үшқұрамдастар жүйенің политермиялық айнасы және оның проекциясы келтірілген. Бұл айнада бу қысымы тұрақты ($P = \text{const}$) болады және призманың бүйірлік кабырғаларында екі құрамдас жүйелер айналары орналасады: CC^1AA^1 - А суымен С тұзының ерігіштік айнасы, AA^1B^1B - А суымен В тұзының ерігіштік айнасы, CC^1B^1B - С және В тұздарының ерігіштік айнасы. E^1, E_2 және E_3 —СА, АВ, СВ – екі құрамдас жүйелердің эвтетикалық нүктелері. O^1 нүктесі – үшқұрамдас жүйенің эвтетикалық нүктесі.



Сурет – 4 Үшқұрамдастар жүйенің политермиялық айнасы және оның проекциясы

Қанығу қисықтары $PE^1_1 O^1E_3$, $QE_2 O^1E_3$ және $RE_1 O^1E_3$ үстінде қанықпаған ерітінділердің аймақтары, ал олардың астында қаныққан ерітінділер мен қатты күйдегі тұздар орналасады.

Іс жүзінде политермиялық айналардың изотермиялық қималары қолданады. Үшқұрамдас жүйелердің политермиясын бір температурада оның табанына параллель жазықтықпен қиғанда ерігіштік қисық сызықтары жазықтықтағы үшбұрыштың ішінде орналасады. Осы жағдайдағы политермияның В және С тұздары сусыз түрде кристалданатын жағдайдағы қимасы 5- суретте келтірілген.



Сурет -5 Үшқұрамдас жүйелердің политермия қимасы

Суретте bE , cE мен BC тұздарының ерігіштік қисық сызықтары. b нүктесінде В тұзының, c нүктесінде С тұзының ерігіштіктері. ABE – қанықпаған ерітінді аймағы. BbE – В тұзының кристалданатын аймағы. Мұнда жүйенің нүктелері кристалданған В тұзымен қаныққан ерітіндінің қоспасынан тұрады. CcE – С тұзының кристалданатын аймағы. E нүктесінде ерітінді В және С тұздарымен қанығады мұндай ерітіндіден бір мезгілде екі тұз бірге кристалданады. E нүктесін эвтектикалық нүкте деп атайды. BEC – екі тұздың яғни В мен С тұздарының кристалданатын аймағы. Мұнда қатты В және С тұздары эвтектикалық ерітіндімен (E) тепе-теңдікте болады.

Қосарланған тұздардың жүйелері. Үшқұрамдас жүйелер құрамында, кристаллогидратты тұздардан басқа сусыз және гидратты қосарланған тұздар болуы мүмкін. Мұндай қосылыстар бір температура аралығында болады, ал температура өзгерісінде олар ыдырайды да жүйеде басқа тұздар пайда болады. Кей кездерде қосарланған тұздар барлық температура аралығында да тұрақты болады. Мысалы, тұрақтылық эвтектикалық температураларда.

Егер де қосарланған тұздар аз ғана мөлшердегі суда ерісе, онда олардың қаныққан ерітіндідегі қатынасы қатты күйдегі қосарланған тұздың қатынасымен бірдей болады. Мұндай тұздарды конгруэнттік ерігіштік ерітінділерге жатқызады. Осы қосарланған тұздан тұратын ерітіндіні буландырғанда тұнбаға қосарланған тұздар түседі [62].

Жоғардағы шарттар орындалмаған жағдайда қосарланған тұздарды инконгруэнттік ерітінділерге жатқызамыз. Мұндай ерітінділердегі тұздар құрамының массасы, қосарланған тұздар құрамының массасына сәйкес келмейді. Осындай қаныққан ерітінділерді буландырғанда қосарланған тұздар тұнбаланбайды, тек олардың құрамындағы бір тұз ғана кристалданады. Мысалы, қосарланған тұз – карналлитті ($KCl \cdot MgCl_2 \cdot 6H_2O$) аз мөлшердегі сумен

әрекеттестірсек, ерітіндіге магний хлоридіөтеді де, калий хлоридінің көп мөлшері қатты күйде ерімей қалады [63].

Жоғарыда сипатталған сулы-тұзды жүйелерде температура мен еріген заттардың шоғырларына байланысты орын алатын құрамдық, құрылымдық, күйлік және физика-химиялық өзгерістер ерекшеліктері негізінде өндірістік жағдайларға галургиялық атаулы технологиялар енгізілген. Олар негізінен көп құрамдас табиғи минералды шикізаттардан жекеленген қоспасыз бір немесе бірнеше құрамдастарын бөліп алу үшін жүргізіледі. Осы кезде бастапқы минералды қоспалар сумен әрекеттестіріліп, осы кезде ғылыми негізделген қажетті бір технологиялық тәртіптермен көрсеткіштерді сақтай отырып, бастамалық тұзды-сулы жүйелерге айналдырылады. Алынған бастамалық тұзды-сулы жүйе ары қарай әдетте температураның өзгерісінде мақсатты құрамдық, құрылымдық, күйлік және физика-химиялық өзгерістерге ұшыратылып, одан қажетті құрамдастары таза күйде бір сатылы немесе бірнеше сатылы бөлініп алынады. Осындай галургиялық технологиялардың негізінде салқындату немесе изотермиялық буландыру үрдістері қоланылады. Сонымен галургиялық технология үшін сулы-тұзды жүйелер сұйық күйдегі негіздік қоспалар болып табылады. Аталған технологияда бастамалық сулы-тұзды жүйелер дайындауда, олардан галургиялық жолмен мақсатты өнімдерді бөліп алуда жеке минералды тұздар мен олардың қоспаларының судағы белгілі бір температуралық жағдайларда алдын - ала жүргізілген арнаулы ғылыми ізденістер нәтижесінде құрастырылған ерігіштік айналары немесе ерігіштік диаграммалары деп аталатын графикалық мәліметтер қолданылады.

1.6 Сулы-тұзды жүйелер құрамдастарының элементтік бөлшектері туралы

Сулы-тұзды жүйелердің құрамдастары еритін заттар мен еріткіш- су болып табылады. Олардың элементтік бөлшектері, кез-келген молекулалық жүйедегідей, атомдар және иондардан тұрады. Аталған бөлшектердің құрылымы туралы қазіргі кезде жалпылама қалыптасқан заманауи ғылыми тұжырымдар бойынша, атомдар мен иондар ядродан және оны қоршай орналасқан электрондар қабаттарынан тұрады. Осы бөлшектердегі ядроның оң заряды оны қоршаған электрондардың теріс зарядтары қосындысына тең болған жағдайда бөлшек нәтижелік заряды нөлге тең болып, ол атом деп аталады[64].

XIX ғасырдың аяғы мен XX ғасырдың басында ашылған физика мен химияның ұлы жаңалықтары: катод сәулелерінің, электролиз құбылысының, радиоактивтіктің ашылуы атом құрылысының күрделі екенін және оның құрамына электрондар кіретінін анықтап берді. Атом электронейтрал бөлшек болғандықтан электрондардың теріс зарядтарын нейтралдап тұратын атом құрамына кіретін оң зарядтар болуға тиіс[65].

1911 жылы ағылшын ғалымы Э.Резерфорд [66] тәжірибе арқылы атом құрамында оң зарядты бөлшектер бар екенін дәлелдеді. Тәжірибеде көптеген атомдар арқылы өткен сәулелердің кейбіреулері бағытын өзгертеді. Осы

тәжірибе нәтижесінде Э.Резерфорд атомдар ілімін ұсынды. Бұл ілім бойынша атомның ортасында оң зарядталған ядро болады және оны электрондар айналып қозғалыста жүреді. Атомдардың ядроғағы оң зарядтарының саны, оны айналып жүрген электрондар зарядтарының санына тең болады. Кейінгі зерттеулер ядроғағы оң зарядтардың саны периодтық жүйедегі элементтің реттік номеріне тең екенін анықтады. Э.Резерфорд теориясындатөмендегідей кемшіліктер орын алды: электродинамика заңдарына сәйкес, ядроны айналып жүрген электрон үздіксіз энергия бөлудің нәтижесінде энергия қорын тауысып ядроға құлап түсер еді де, атом жойылар еді, бірақ атом жойылмайтын тұрақты жүйе; электрон орбита бойынша қозғалғанда атом энергиясы да үздіксіз азайып, атомның спектрі де үздіксіз болу керек еді, бірақ тәжірибе барлық атомдардың спектрлерінің сызықша тәріздес екендігін дәлелдеп отыр.

1913 жылы Дания ғалымы Нильс Бор, Э.Резерфордтың және М.Планктың сәуле шығарудың кванттық ілімдерін негізге ала отырып сутек атомы құрылысын ұсынды. Н.Бор электронның ядроға құламайтын себебі электрон ядроны айналғанда пайда болатын орталықтан тебетін күш электронның ядроға тартылу күшімен теңестіріліп тұрады деген пікірге келді. Қозған күйде электрон өте аз уақыт болады да квант түрінде энергия бөліп шығарып, қайтадан қалыпты күйге көшеді. Н.Бор электрон тек материалдық бөлшек, ол ядроны белгілі орбита бойынша айналып жүреді деп есептеді.

Осындай элементтік ядролық бөлшектің оң заряды шамасы мен ядроны қоршаған иондардың қосынды теріс зарядында нәтижелік сандық айырмашылық болған жағдайда элементтік бөлшек ион деп аталады. Осындай иондық бөлшектер олардағы нәтижелік зарядтық айырмашылықтың таңбасына қатысты оң және теріс зарядты иондар түрінде болады. Олар нәтижелік зарядтың сандық мөлшеріне байланысты бір немесе көп зарядты болып келеді. Сонымен қатар, жалпы алғанда, осындай иондар олардың құрамдарына енген атомдар сандарына байланысты бір атомдық – жай иондарға және бірнеше әртүрлі атомдардан құралған көп атомды – күрделі иондарға бөлінеді.

1.6.1 Атомдық бөлшектердің өлшемдері мен құрылымы

Атомдық элементтік бөлшектер саналуан физика-химиялық құбылыстар мен үрдістерде, олардың қолданысында іске асырылатын өндірістік технологияларда өндірілетін мақсаттық өнімдердің құрамына, сапасына, құрылымына, физика-химиялық қасиеттеріне және т.б. сипаттамалық көрсеткіштеріне маңызды әсер етеді. Осы кезде олардың өлшемдері, әдетте олардың радиусы деп қабылданған шама, шешуші рөл атқарады.

Бүгінде атомдар радиусы туралы біршама нәтижелерге қол жеткізілген. Олардың негізінде бірнеше, өзіндік ғылыми және физика-химиялық мәністері бойынша ерекшелініп, санды да сапалы айырмашылықтанатын әртүрлі есептік және эксперименталдық тәсілдер қолданыс тапқан. Осындай ізденістер нәтижесінде анықталған атомдардың радиустық өлшемдерінің бір-біріне санды сәйкес емес 30-ға жуық шамдары белгілі. Осыған орай, бүгінде атомдардың

белгілі радиустары бірнеше түрлі аталып, олар бір атом үшін бір-бірінен елеулі санды айырмашылықтанады.

Атом радиустары олардын құралған заттардағы атомаралық өзара әсерлесу күштерінің түрлеріне қарай: Ван-дер-Ваальстік, металдық, коваленттік, иондық, тиімді және орбиталдық болып ажыратылады.

Ван-дер-Ваальстік радиус - әртүрлі молекулаларға жататын атомдардың рұқсат етілген ең төменгі әсерлесуін сипаттайтын радиус. Бұл асыл газдар кристалдарындағы атомдардың тиімді өлшемдерін анықтау және молекулалардың конформациясын талдау үшін қолданылады.

Металлдық радиусы - координаталық саны 12-ге тең металдардың кристалдық құрылымындағы атомдар арасындағы қашықтықтың жартысына тең металл атомының радиусы.

Ковалентті радиус - көпатомды молекуладағы немесе кристалдағы полярлы емес ковалентті химиялық байланыспен байланысқан бірдей атомдар арасындағы атомаралық қашықтықтың жартысын айтады. Коваленттік радиус атомның өзгермейтін қасиеті емес, бірақ орбитальдардың өзгергіштігі мен байланыс тәртібіне тәуелді.

Атомның тиімді радиусы - бұл атомның қосылыстағы әсер ету радиусы. Ол рентгендік мәліметтерден, не ядроаралық қашықтықтан, не электронды тығыздықтың таралу картасынан, атом ортасындағы байланыс сызығы бойымен минималды электрон тығыздығына дейінгі қашықтықпен анықталады.

Атомның орбиталық радиусы— атомдағы электрон тығыздығының бірыңғай таралу қисығында ядродан соңғы максимумға дейінгі қашықтық ретінде анықталған теориялық есептелген радиус. Соңғы кезде орбитальды радиустар туралы көзқарастар кең ауқымды таралды. Атомдардың жеке орбиталдары бойынша кванттық механика әдістері мен есептелген радиалды электрондар тығыздығының негізгі максимумының радиусыда орбиталық радиус деп аталады. Химиялық байланыс түзілгенге дейінгі, еркін күйдегі атомның мөлшерін көрсететін сыртқы орбитадағы атом радиусын атомның орбитальды радиусы анықтайды.

Жоғарыда атап өткен атомдар радиустары атаулары, түрлемдері арасында шынайы радиус орбиталдық радиус болып табылады.

Бүгінде атомдардың радиустарын анықтау бойынша құнды ізденістер санаулы ғана ғалымдардың еңбектері болып табылады. Олардың қатарында Н.Белов, Г.Боки, Л.Полинг, Р.Шанон, Э.Мелвин-Хьюз, В.Гольдшмидт, Ч.Хаггинс, К.Ингольд, Д.Слэйтер, В.Брэгг, А.Ланде және т.б. бар.

Атомдар радиустары туралы оның бастамалық жүйесі Л.Полинг пен В.Гольдшмидт ізденістері нәтижелеріне негізделген [67].

Заттардың құрылымы негізінде алғашқы атом радиустары А.Ланде еңбектерінде [68] таза геометриялық әдіспен анықталды. Ол бірқатар атомдардың радиусын анықтамалық шамалар ретінде алып, ал қалған 82 элементтердің мәндерін салыстырмалы түрде анықтады.

Келесі қадамды Клаузиус-Мосотти теориясын және кристалдардағы атомаралық қашықтықты, сілтілік және сілтілі жер металдардың және оттегімен

(1,32Å) және күкірт (1,69Å) элементтерінің радиустарын пайдаланып, иондардың рефрактометриялық поляризациясын анықтаған Вазашерн жасады [69]. Ланде және Вазашерн кестелерінде орташа алғанда $\pm 0,05 \text{ \AA}$ -ге дейін өзгерістер бар.

1950 жылдардан бастап электрондардың минималды тығыздығымен шектелген аймақтар бойынша атомдардың радиустарын эксперименттік түрде анықтау жұмыстары жасалды.

Сонымен қатар атомдардың радиустарын анықтаудың басқа да белгілі әдістері бар, олардың қатарында: 1) атомдардың көлемін анықтауға негізделген волюметриялық[70,71]; 2) атомдардың соқтығысу сызықтығын анықтауға негізделген соқтығыстық[72]; 3) сынуды өлшеуге негізделген рефрактометриялық[73]; 4) сәйкес микробөлшектерде рентгендік сәулеленуді пайдаланып, дифракцияларын анықтауға негізделген рентгендік құрылымдылық[74,75] және т.б. көптеген әдістер қолданылуда.

Бүгінге дейінгі белгілі әдістер арасынан элементтік бөлшектердің орбиталдық радиусын анықтаудың ең ғылыми құндылығы жоғарғысы ретінде Нильс Бор әдісін келтіруге болады. Нильс Бор әдісі бойынша [76] атом радиусы әр-түрлі зарядты бөлшектердің тартылу Кулондық күшімен электрондардың ядроны айналу пайда болатын ортадан тепкіш күштің теңескен орталықтарында орналасады деген тұжырымына негізделген. Осы ережеге сүйене отырып және кванттық ережелерді қолдана отырып, Бор сутегі атомындағы электронның стационарлық орбиталды радиусын анықтай алды, ол кейіннен сутегі атомының радиусы ретінде қабылданды және қазіргі уақытта Бор радиусы деп аталады.

Өкінішке орай, бұл әдісте тартылу күші мен ортадан тепкіш күштен басқа күштер мен жекелеген атомдардың электрондық құрылысының әсерлері ескерілмеген. Сондықтан ол көпэлектронды атомдарға қатысты қолданыс таба алмады.

Қазіргі кезде атомдардың радиусын анықтау бойынша жүргізілген белгілі зерттеулердің мынандай жалпылама кемшіліктері бар: олар толығымен өлшеу техникалық құралдары - рефрактометрлер, ионизаторлар, спектрометрлер, радиометрлер, көлем өлшеуіштері, поляризаторлар және басқалар көмегімен анықталған атомдардың физикалық көрсеткіштеріне негізделген. Аталған құрылғылар тәжірибелік жағдайда, міндетті түрде белгілі бір дәрежеде, зерттеу нысандарын - атомдарды стационарлық күйден шығарады. Нәтижесінде, атомдардың өлшенетін радиустары олардың шынайы мәндерінен бұрмаланады, оларға қажетсіз ауытқулар енгізіледі. Мұндай кемшіліктерді Мелвин-Хьюз (М.Х), Гольдшмидт (Г), Полинг (П), Ингольд (Ин), Боки(Б) [77] әдістерімен анықталған атом радиустар мәндерін салыстыра отырып айқын байқауға болады. Осындай зерттеулердің нәтижелері 9-кестеде келтірілген.

Кесте - 9 Атом радиустарының салыстырмалық мәндері [78]

Элементтер	Атом радиусы $r_a \cdot 10$ нм				Элементтер	Атом радиусы $r_a \cdot 10$ нм			
	М.Х	Г	П	Б		М.Х	Г	П	Б
Ag	1,445	1,44	1,53	1,44	K	2,272	2,36	-	2,36
Al	1,432	1,43	1,26	1,43	La	1,870	1,86	-	1,87
As	1,248	1,22	1,18	1,48	Li	1,520	1,55	1,34	1,55
Au	1,442	1,44	1,50	1,44	Mg	1,599	1,30	-	1,30
B	0,795	0,91	0,89	0,91	Mn	1,366	1,30	-	1,30
Ba	2,174	2,17	-	2,21	Mo	1,363	1,36	1,40	1,39
Be	1,113	1,11	1,07	1,13	N	0,547	0,71	0,70	0,71
Bi	1,548	1,55	1,46	1,82	Na	1,858	1,88	1,54	1,89
Br	1,141	1,14	1,14	-	Ni	1,246	1,24	1,24	1,24
C	0,771	0,77	0,77	0,77	O	0,603	0,66	0,66	-
Ca	1,974	1,37	-	1,97	P	0,947	1,08	1,10	1,30
Cd	1,490	1,48	1,48	1,56	Pb	1,750	1,75	1,46	1,75
Cl	0,994	0,99	0,99	-	Pd	-	1,31	1,37	1,37
Co	1,253	1,25	1,25	1,25	Pt	1,388	1,38	1,38	1,38
Cr	1,249	1,25	1,25	1,27	Rb	2,475	2,43	-	2,48
Cs	2,655	2,62	-	2,68	S	1,02	1,04	1,04	-
Cu	1,278	1,27	1,35	1,28	Sb	1,45	1,44	1,36	1,61
F	0,709	0,64	0,64	-	Si	1,176	1,17	1,17	1,34
Fe	1,241	1,26	-	1,26	Sn	1,405	1,40	1,40	1,58
H	0,370	0,36	0,30	0,46	Sr	2,151	2,14	-	2,15
Hg	1,503	1,50	1,48	1,60	Ti	1,40	1,46	-	1,46
I	1,333	2,20	1,28	-	Zn	1,33	1,34	1,31	1,39

Кестеде келтірілген мәліметтер физика-химиялық мәні бойынша ерекшеленетін техникалық өлшеу құралдарының қолданысында жүргізілген зерттеулердің нәтижелері. Оларда, кестеден көрінгендей, атомдық радиустар мәндерінде ескерусіз қалдыруға болмайтын үлкен сандық айырмашылықтар бар және де кейбір жағдайларда әртүрлі химиялық элементер үшін олардың атомының радиустары бірдей мәнге ие. Сонымен қатар кестедегі нәтижелер периодтық жүйенің белгілі заңдылықтарына да бағынбайды. Бұл негізсіз болып табылады. Бүгінгі күні осы мәліметтерді қайта бағалаудың сенімді әдістерінің жоқтығына байланысты, олар, өкінішке орай, әлемдік практикада қолданбалық және ілімдік зерттеулерде негізгі анықтамалық ақпарат ретінде пайдаланылады. Бұл негізсіз, осындай жіберілген кемшіліктерді жою ғылымдық та, қолданбалық та аса мәнді іс-әрекет.

Атом құрлысы туралы көптеген тұжырымдамалар белгілі. Электрон бір тұрақты орбитадан екінші тұрақты орбитаға көшкенде атом квант түрінде энергия сіңіреді немесе бөліп шығарады. Электрон жақын орбитадан алыс орбитаға көшкенде атом квант түрінде энергия сіңіреді, ал электрон алыс орбитадан жақын орбитаға көшкенде атом энергия бөліп шығарады. Электрондар материалдық бөлшек ретінде толқындық қасиеттер көрсетеді. Оның материалдық бөлшек сияқты белгілі массасы болады, қысым туғызады, сонымен бірге электрондар қозғалғанда толқындық құбылыстар байқалады.

Толқындық қасиеттері бар электрон өте шапшаң қозғалып ядро төңірегіндегі кеңістіктің кез келген бөлігінде орын алады [79]. Сондықтан қазіргі көзқарас бойынша электрон ядро төңірегінде белгілі тығыздығы бар теріс зарядтардың электрон бұлтын түзеді. Электрон бұлтының мөлшерін, пішінін және кеңістіктегі орналасу бағытын көрсететін электронның күйін атомдық электрондық орбиталь дейді. Орбитальдар бір-бірінен өздерінің энергиялары, пішіндері және кеңістіктегі орналасу бағыттары арқылы ажыратылады және бұл жағдайлар электрон қасиеттерінің кванттық сипатын көрсетеді. Осы себепті электронның атомдағы күйін 4 кванттық сандардың мәндерісипаттайды. Олар: электрон энергиясын анықтайтын бас кванттық сан, атомның импульс моментін анықтайтын, орбиталық кванттық сан, ал орбиталық кванттық санның берілген оське түсірілген проекциясын анықтайтын магниттік кванттық сан және электронның ішкі спинін анықтайтын кванттық сан. Осы 4 кванттық сан мен В.Паул принципі атомдағы электрондардың барлық күйлерін сипаттайды. Атомдардың спектрлерін зерттей отырып, швейцария ғалымы В.Паул атомда төрт квант сандарының мәндері бірдей болатын екі электрон болмайды деген тұжырым ұсынынды [80].

В.Паул принципі бойынша атомдардың деңгейлері мен деңгейшелеріндегі электрондардың мүмкін болатын максималь сандарын есептеп шығаруға болатынын көрсетті. Оның принципі бойынша бір атомның ішінде барлық жағынан ұқсас екі электрон болуы мүмкін емес, яғни атомдағы 2 электронның 4 квант санының төртеуі де бірдей бола алмайды. Атомдағы әрбір электронның басқалардан гөрі ең кемінде бір квант саны өзгеше болуы керек. Мұнда үшінші электрон болуы мүмкін емес, егер болған жағдайда онда В.Паул принципін бұзып, үшінші электрон алғашқы екеуінің біреуіне ұқсап кетер еді. $n = 2$ болғанда біріне бірі ұқсамайтын 8 электрон бола алады. $n = 3$ болғанда 18, $n = 4$ болғанда 32 электрон бола алады. В.Паул принципі бойынша электрондардың таралуы 10 - кестеде келтірілген [81]

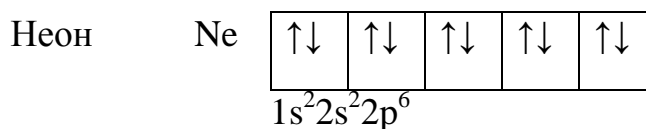
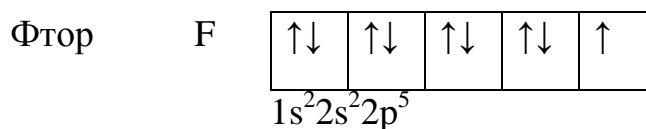
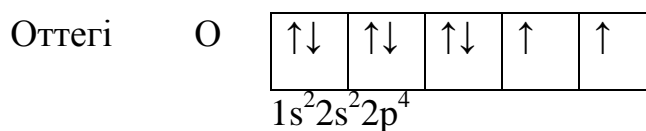
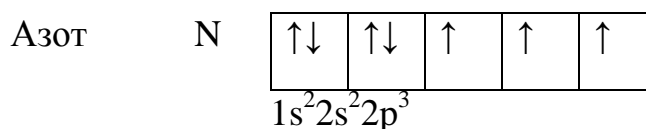
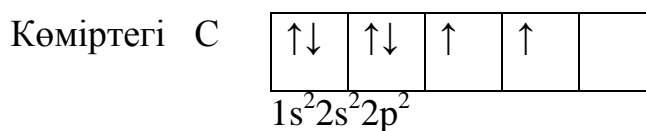
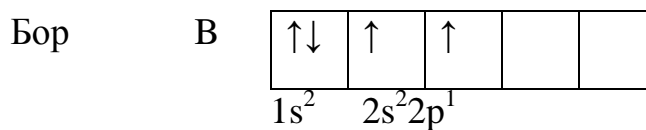
Кесте -10 Атомдарда электрондардың таралуы

n	l	m	m_s	Қосымша деңгейдегі электрон саны	Электрон жағдайы
1	2	3	4	5	6
2	0	0	$\pm 1/2$	2	s
		1	$\pm 1/2$		
	1	0	$\pm 1/2$	6	p
		-1	$\pm 1/2$		
3	0	0	$\pm 1/2$	2	s
		1	$\pm 1/2$		
		0	$\pm 1/2$		
	2	-1	$\pm 1/2$	6	p
		+2	$\pm 1/2$		
		+1	$\pm 1/2$		
		0	$\pm 1/2$		
		-1	$\pm 1/2$		
1	0	$\pm 1/2$	10	d	
	-1	$\pm 1/2$			
	-2	$\pm 1/2$			

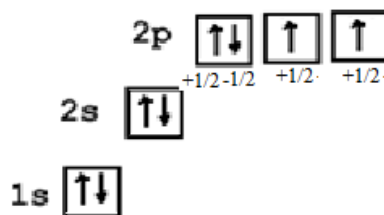
10 Кестенің жалғасы

1	2	3	4	5	6			
4	0	0	$\pm 1/2$	2	s			
		1	$\pm 1/2$					
	1	0	$\pm 1/2$	6		p		
		-1	$\pm 1/2$					
		2	+2				$\pm 1/2$	
			+1				$\pm 1/2$	
		2	0		$\pm 1/2$		10	d
			-1		$\pm 1/2$			
	-2		$\pm 1/2$					
	3		+3	$\pm 1/2$				
			+2	$\pm 1/2$				
	3		+1	$\pm 1/2$	14	f		
		0	$\pm 1/2$					
		-1	$\pm 1/2$					
-2		$\pm 1/2$						
-3		$\pm 1/2$						

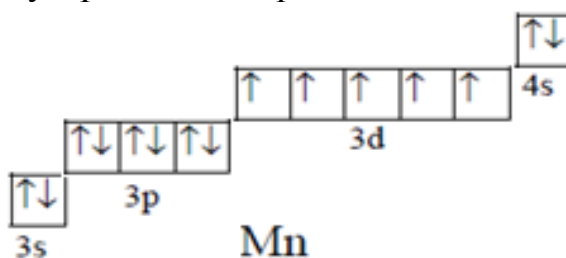
Бір квант қабатындағы бірдей орбиталдарды электрондармен толтыру үшін Ф.Хунда ережесі қолданылады. Ф.Хунда ережесі бойынша орбиталдар электрондармен толтырылғанда, ең бірінші электрондар жеке-жеке орналасады, содан кейін қосарланады [82].



Осы кезде атомдарда электрондардың таралуына байланысты бір ұяшықтағы екінші электронның спині бірінші электронның спиніне қарама-қарсы болады.



Төменде марганец элементінің атомдық электрондық құрылысы Ф.Хунда ережесіне сәйкес қалыптасу нұсқасы келтірілген.



Осы сияқты кез келген химиялық элементтер үшін олардың атомдық электрондық құрылысы Ф.Хунда ережесінің заңдылықтарын сақтай орналасады. Төменде атомдық электрондық құрылыстары бірқатар периодтар үшін келтірілген.

1-ші периодта элементтері үшін

Химиялық элементер	Электрондық құрылымы
H	$1S^1$
He	$1S^2$

2-ші период элементтері үшін

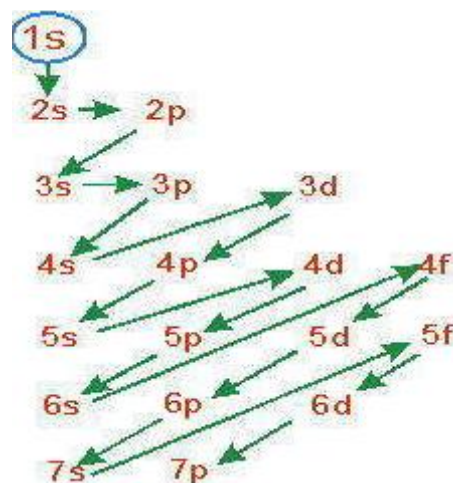
Химиялық элементер	Электрондық құрылымы
Li	$1S^2, 2S^1$
Be	$1S^2, 2S^2$
B	$1S^2, 2S^2, 2P^1$
C	$1S^2, 2S^2, 2P^2$
N	$1S^2, 2S^2, 2P^3$
O	$1S^2, 2S^2, 2P^4$
F	$1S^2, 2S^2, 2P^5$
Ne	$1S^2, 2S^2, 2P^6$

Белгілі болғандай, орбиталдық энергиялардың жоғарылауына сәйкес деңгейшелерде энергия шкаласы деп аталатын кезектестік түзіледі.

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s \approx 4f \approx 5d < 6p < 7s \approx 5f \approx 6d < 7p$$

Егер жақын деңгейшелердегі энергия өзара аз айырмашылықтанатын болса, онда деңгейшелерді толтыру тәртібі қиындайды да электрондар олардың

басқаларына ауысып жүреді. Осы кезде, электрондардың энергиясы өзгереді. Кезекті әр-бір деңгейшелерде электрон энергиялары алдыңғыларға карағанда жоғары, ал ядромен байланыс сәйкесінше аз. Белгілі бір энергетикалық деңгейлер аралықтарында s-тен - p-ға және p-дан d-деңгейшелеріне ауысқанда электрондардың энергия деңгейі жоғарылайды. Мұндай өзгерістерді төмендегі 7-суреттен айқын көруге болады.



Сурет -7 Элементтер электрондар энергиясының деңгейшелердегі өзгерісі

Д.И.Менделеевтың периодтық жүйесінің 5-ші периодтан бастап энергетикалық деңгейшелерді толтыру тәртіптері жоғарыда келтірілген үлгіге сәйкес орнықтырылады.

5-ші период элементтері үшін

Химиялық элементтер	Электрондық құрылымы
Rb	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 5S^1$
Sr	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 5S^2$
Y	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^1, 5S^2$
Zr	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^2, 5S^2$
Nb	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^4, 5S^1$
Mo	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^5, 5S^1$
Tc	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^5, 5S^2$
Ru	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^7, 5S^1$
Rh	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^8, 5S^1$
Pd	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}$
Ag	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^1$
Cd	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2$
In	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^1$
Sn	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^2$
Sb	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^3$
Te	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^4$
I	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^5$

Д.И.Менделеев ұсынған элементтердің периодтық жүйесі атомдардың құрылысымен тікелей байланысты. Атомдардың құрылысы элементтер

қасиеттерінің периодты өзгеруінің мәнін ашып береді. Период бойынша басынан соңына қарай электрондық қабат саны өзгермегендіктен, ядро зарядының артуына байланысты атом радиусы кішірейеді. Радиус шамасының өзгерісі кіші период элементтерінде айқын байқалады, себебі кезектегі электрон сыртқы энергетикалық деңгейге түседі. Ал, үлкен периодтың d-, f - элементтерінде - өзгеріс баяу жүреді, осыны d -, f-сығылу деп атайды. Топшаларда үстінен астына қарай атом радиустары артады. Негізгі топша элементтерінде (s,p-элементтері) радиус өзгерісі айқын байқалса, ал қосымша топшада әсіресе 5,6,7 период элементтері үшін атом радиустарындағы өзгерісі өте аз болады. Оның себебі энергетикалық деңгей саны артқанымен кезектегі электрон ішкі 4f, 5f – деңгейшелеріне түсуіне байланысты болады.

Атомдарда көп электрондардың болуы оның үзілуге тиісті электрондарына әр қилы әсер етеді. Осындай әсерлерде ең әуелі өзара ұқсас ядро зарядын экрандау (көлегейлеу) және электрондардың ядроға ену ұғымдарымен түсіндіруге болады. Бұдан бұрын да айтқанымыздай, экрандау деп аталатын әсерді электрондармен ядроның өзара тартылуын кемітетін электрон қабаттарының болуымен негіздеуге болады. Неғұрлым ядромен оған тартылуға тиісті электронның арасында электрон қабаттары көп болса, солғұрлым экрандау эффектісі күшті болады[83].

Квантты –механикалық көзқарастарға сәйкес электрондар атомның кезкелген нүктесінде болуы ықтимал. Сондықтан сыртқы қабаттардағы электрондар ішкері электрон қабаттарына еніп, бір мезгілде ядроға жуық маңда болуы ықтимал. Мұндай құбылыстарды электрондардың ядроға енуі деп атайды. Бұл құбылыстың нәтижесінде электрондардың ядромен байланысы нығайа түседі. Сондықтанда s электрондарының өтімділігі мықты болып, экрандау қасиеті де жоғары болады. Одан кейінгі өтімділігі мықты p электрондары, олардың экрандау қасиеті орташа. Өтімділігі де, экрандау қасиеттері де нашар ол d электрондары болып саналады. Өтімділігіне сай электрондардың энергетикалық деңгейшелері де $s \rightarrow p \rightarrow d \rightarrow f$ бағытында толысатыны белгілі.

Осы айтылған екі эффектімен қатар атомдардағы электрон байланысының беріктігіне бір қабатта орналасқан электрондардың өзара тебісуінің әсері де байқалады. Кейбір жағдайларда мұны да экрандауға жатқызады. Мұндай тебісу әсіресе бір орбитальдағы екі электронның спиндері бірдей болғанда күшейеді. Химиялық элементтердің атом радиустарының шынайы мәндерін есептеуде атомдар құрлысының осындай заңдылықтары толығымен ескерілуі керек.

1.6.2 Иондық бөлшектердің өлшемдері мен құрылымы

Иондық элементтік бөлшектерде саналуан физика-химиялық құбылыстар мен үрдістерде, олардың қолданысында іске асырылатын өндірістік технологияларда өндірілетін мақсаттық өнімдердің құрамына, сапасына, құрылымына, физика-химиялық қасиеттеріне және т.б. сипаттамалық көрсеткіштеріне маңызды әсер етеді. Осы кезде олардың өлшемдері, әдетте олардың радиусы деп қабылданған шама, шешуші рөл атқарады.

Бүгінде иондардың радиусы (өлшемдері) туралы біршама нәтижелерге қол жеткізілген. Олардың негізінде бірнеше, өзіндік ғылыми және физика-химиялық мәністері бойынша ерекшелініп, санды да сапалы айырмашылықтанатын әр-түрлі есептік және эксперименталдық тәсілдер қолданыс тапқан. Осындай ізденістер нәтижесінде анықталған иондардың радиустық өлшемдерінің бір-біріне санды сәйкес емес 30-ға жуық шамдары белгілі. Осыған орай, бүгінде иондардың белгілі радиустары бірнеше түрлі аталып, олар бір ион үшін бір-бірінен елеулі санды айырмашылықтанады.

Ион радиустары олардың құралған заттардағы ионаралық өзара әсерлесу күштерінің түрлеріне қарай: ван-дер-ваальстік, коваленттік, иондық, тиімді және орбиталдық болып ажыратылады.

Ван-дер-Ваальстік радиус - әртүрлі молекулаларға жататын иондардың рұқсат етілген ең төменгі әсерлесуін сипаттайтын радиус. Бұл асыл газдар кристалдарындағы иондардың тиімді өлшемдерін анықтау және молекулалардың конформациясын талдау үшін қолданылады.

Ковалентті радиус - көпатомды молекуладағы немесе кристаллдағы полярлы емес ковалентті химиялық байланыспен байланысқан бірдей иондар арасындағы ионаралық қашықтықтың жартысын айтады. Коваленттік радиус ионның өзгермейтін қасиеті емес, бірақ орбитальдардың өзгергіштігі мен байланыс тәртібіне тәуелді.

Иондық радиус - бұл иондар сфералық және олар бір-біріне тиіп тұрады деп есептегендегі кристаллдағы катион мен оған жақын анионның арасындағы ядролық қашықтықпен есептелінетін шама. Иондық радиустардың мәндері ионның координациялық санына және таңдалған өлшеу әдісіне байланысты.

Ионның тиімді радиусы - бұл ионның қосылыстағы әсер ету радиусы. Ол рентгендік мәліметтерден не ядроаралық қашықтықтан, не электронды тығыздықтың таралу картасынан, ион ортасындағы байланыс сызығы бойымен минималды электрон тығыздығына дейінгі қашықтықпен анықталады.

Ионның орбиталдық радиусы—иондардағы электрон тығыздығының бірыңғай таралу қисығында ядродан соңғы максимумға дейінгі қашықтық ретінде анықталған теориялық есептелген радиус. Соңғы кезде орбитальды радиустар туралы көзқарастар кең ауқымды таралды. Иондардың жеке орбиталдары бойынша кванттық механика әдістерімен есептелген радиалды электрондар тығыздығының негізгі максимумының өлшемі орбиталық радиус деп аталады. Химиялық байланыс түзілгенге дейінгі, еркін күйдегі ионның мөлшерін көрсететін сыртқы орбитадағы ионның өлшемін ионның орбитальды радиусы анықтайды.

Жоғарыда келтірілгендей иондардың радиустары атаулары, түрлемдері арасында шынайы нақты жоғары сенімді радиус орбитальдық радиус болып табылады.

Қазіргі таңда, иондардың қолданбалық мәнді өзіндік радиустарытөмендегі ғалымдардың еңбектері нәтижесінде анықталған. Олардың қатарында Гольдшмидт, Хаггинс, Ингольд, Слэйтер, Брэгг,Ланде, Белов, Боки, Полинг, Шанон, Мелвин-Хьюз, және т.б. бар.

Иондар радиустардың бастамалық жүйесі Полинг пен Гольдшмидт мәліметіне негізделген. Полинг зерттеулері Слэйтердің ядро зарядының экрандауынан және оттегі ионының радиусы $1,4 \cdot 10^{-8}$ см тең функциясынан бастау алды. Гольдшмидт зерттеулері K^+ және F^- иондардың поляризациясының жуық мәндеріне негізделген [67].

Заттардың құрылымы негізінде алғашқы ион радиустары Ланде еңбектерінде [68] таза геометриялық әдіспен анықталды. Ол бірқатар иондардың радиусын анықтамалық шамалар ретінде алып, қалған элементтердің радиустарын салыстыра отырып анықтаған. Ланде бойынша аниондардың орташа радиусы мынандай: F^- -1,31, Cl^- -1,78, Br^- -1,96, I^- -2,13, O^{2-} -1,31, S^{2-} -1,84, Se^{2-} -1,92, Te^{2-} -2,26 Å. Ең кіші катиондардың ең үлкен поляризациялық әсері болғандықтан (жоғары электрлік қабілеттілік), оларға иондық байланыстар сәйкес келеді деп ойлады. Бұл Ланде әдісінің әлсіз жері.

Клаузиус-Мосотти ілімін және кристалдардағы ионаралық қашықтықты, сілтілік және сілтілі жер металдардың және оттегімен ($1,32 \text{Å}$) және күкірт ($1,69 \text{Å}$) элементінің радиустарын негізгі ала отырып, иондардың рефрактометриялық поляризациясын анықтаған Вазашерн болды [69]. Вазашернның және Ланде кестелерін салыстырғанда орташа $\pm 0,05 \text{Å}$ -ге дейін айырмашылықтар байқалады.

1950 жылдарда иондардың радиустарын эксперименттік түрде анықтау жұмыстары көптеп жасалды. Эксперименттік анықталған радиустардың кристалдық, химиялық жолдармен анықталған мәндерден асып кетуін аниондар өлшемінің азаюына және оларды қоршайтын зарядтардың әсерінен катиондар өлшемдерінің ұлғаюына әсер ететін кристалл өрісінің әсерімен түсіндіруге болады. Осыған сәйкес катион аймағында электрон санының өсуін және сәйкесінше анион аймағында төмендеуін таза иондық типтес химиялық байланыс сипатының ауытқуын балама ретінде айтуға болады.

Иондардың радиустарын анықтаудың басқа да көптеген әдістері белгілі, олар:

- волюметриялық, иондардың көлемін анықтап, өлшеуге негізделген [70,71];
- соқтығыстық, иондардың жанасу бұрыштарын анықтауға негізделген [72];
- рефрактометриялық, рефракция өзгерістерін өлшеуге негізделген [73];
- рентгендік құрылымдылық, рентгендік сәулеленуді пайдаланып, дифракцияларын анықтауға негізделген [74];
- ионизационды, иондану потенциалын қолдануға негізделген;
- поляриметриялық, идеалды газ күйіндегі заттың поляризацияларын өлшеуге негізделген [75] және т.б.

Қазіргі таңда, белгілі әдістер арасынан элементтік бөлшектердің орбиталдық радиусын анықтаудың ең ғылыми құндылығы жоғарысы ретінде Нильс Бор ұсынған әдісті келтіруге болады. Ол әдіс электрондардың тартылу Кулон күшімен ортадан тепкіш күштердің теңескен орталықтарында орналасады деген тұжырымға негізделген. Осы тұжырымды негізінде кванттық ережелерді қолдана отырып, Н.Бор [76] сутегі атомындағы электронның стационарлық орбиталды радиусын анықтай алды. Өкінішке орай, бұл әдісте

жекелеген иондардың электрондық құрлысының әсерлері ескерілмеген. Сондықтан ол көп электронды иондарға қатысты қолданыс таба алмады.

Қазіргі таңда иондардың радиусын анықтау бойынша жүргізілген зерттеулердің көпшілігі рефрактометрлер, ионизаторлар, спектрометрлер, радиометрлер, көлем өлшеуіштері, поляризаторлар және басқа да өлшеу техникалық құралдар көмегімен анықталған иондардың физикалық көрсеткіштеріне тәуелді. Олар тәжірибелік жағдайда, міндетті түрде белгілі бір дәрежеде, зерттеу нысандарын иондарды стационарлық күйден шығарады. Нәтижесінде, иондардың өлшенетін радиустары мәндері бұрмаланып, қажетсіз ауытқулар енгізіледі. Мұндай ауытқуларды Мелвин-Хьюз (М.Х), Гольдшмидт (Г), Полинг-Хаггинс (ПХ), Ингольд (Ин), Боки (Б) әдістерімен анықталған ион радиустары мәндерін салыстыра отырып айқын байқауға болады. Бірқатар зерттеушілердің ион радиустары мәндері 11 – кестеде келтірілген [78].

Кесте -11 Ион радиустарының салыстырмалық мәндері

Элементтер	Ион заряды	Ион радиусы $r_i \cdot 10$, нм.					Элементтер	Ион заряды	Ион радиусы $r_i \cdot 10$, нм.				
		М.Х	Г	ПХ	Ин	Б			М.Х	Г	ПХ	Ин	Б
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Ag	+1	1,014	1,13	1,26	1,26	1,13	Cl	+7	-	-	-	0,49	0,26
Al	+3	0,55	0,57	0,50	0,72	0,57		-1	1,811	1,81	-	1,81	1,81
As	+5	-	0,46	-	0,71	0,47	Co	+3	0,65	0,63	-	-	0,64
	+3	-	0,58	-	-	0,69		+2	0,72	0,78	-	-	0,78
Au	+1	-	1,37	-	1,37	1,37	Cr	+6	-	0,52	-	0,81	0,35
B	+3	0,20	0,23	0,2	0,35	0,20		+3	0,65	0,63	-	-	0,64
Ba	+2	1,395	1,34	1,35	1,53	1,38		+2	-	-	-	-	0,83
Be	+2	0,314	0,35	0,31	0,44	0,34	Cs	+1	1,678	1,67	1,69	1,69	1,65
Bi	+5	-	0,74	-	0,98	0,74	Cu	+2	0,47	0,72	-	0,96	0,80
	+3	1,20	0,96	-	-	1,20		+1	-	0,96	-	-	0,98
Br	+7	-	-	-	0,62	0,39	F	+7	-	-	-	0,10	-
	-1	1,973	1,96	1,95	1,96	1,96		-1	1,294	1,36	1,36	1,36	1,33
C	+4	0,195	0,16	0,15	0,29	0,2	Fe	+3	0,67	0,64	-	-	0,07
Ca	+2	1,051	0,99	0,99	0,99	1,04		+2	0,80	0,71	-	-	0,80
H	-1	-	1,53	-	2,08	1,36	Cd	+2	0,99	0,97	-	1,14	0,99
Hg	+2	0,66	1,10	-	1,25	1,12	P	+5	0,66	0,3	-	0,56	0,35
I	+7	-	0,50	-	0,77	0,50	Pb	+4	0,70	0,84	-	0,84	0,86
	-1	2,228	2,20	2,16	2,16	2,20		+2	1,28	1,20	-	-	1,25
K	+1	1,341	1,33	1,33	1,33	1,33	Pd	+4	-	0,65	-	-	0,64
La	+3	1,14	1,14	1,15	1,39	1,04		+2	-	-	-	-	0,88
Li	+1	0,758	0,68	0,60	0,60	0,68	Pt	+4	0,55	0,65	-	-	0,64
Mg	+2	0,78	0,66	0,65	0,82	0,74		+2	-	0,80	-	-	-
Mn	+7	-	0,46	-	0,75	0,46	Rb	+1	1,488	1,47	1,48	1,48	1,49

11 Кестенің жалғасы

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
	+4	0,52	0,60	-	-	0,52	S	-2	1,786	1,81	1,84	2,19	1,82
	+2	0,83	0,80	-	-	0,91	Sb	+5	-	0,62	-	0,89	0,62
Mo	+6	-	0,62	-	0,93	0,65		+3	-	0,76	-	-	0,90
	+4	0,68	0,70	-	-	0,68	Si	+4	0,40	0,42	-	0,65	0,39
N	-3	-	1,48	-	-	1,48	Sn	+4	0,65	0,71	0,71	0,96	0,67
Na	+1	1,01	0,97	0,97	0,95	-	Sr	+2	1,175	1,12	1,13	1,32	1,20
Ni	+2	0,74	0,69	-	-	0,74	Ti	+4	0,60	0,68	-	0,96	0,64
O	+6	-	0,1	-	0,22	-	Zn	+2	0,566	0,74	-	0,88	0,8
	-2	-	1,40	-	1,76	1,36							

11- кестедегі мәліметтер өлшеу құралдарының негізінде жүргізілген зерттеулердің нәтижелері. Олардың зерттеулерінде иондық радиустар мәндерінде ескерусіз қалдыруға болмайтын үлкен сандық айырмашылықтар орын алады және әртүрлі химиялық элементер үшін ион радиустары бірдей мәнге ие. Мысалы Hg,P,Mg элементтері үшін Мелвин-Хьюз, Гольдшмидт зерттеулерінде (0,66). Сонымен қатар, кестедегі кейбір нәтижелер периодтық жүйенің белгілі заңдылықтарына да бағынбайды. Мысалы Боки зерттеулерінде Cr(0,35) – Mn(0,46), Мелвин-Хьюз зерттеулерінде Si(0,4)–P(0,66) және Cu(0,47) – Zn(0,56), Гольдшмидт зерттеулерінде Cu(0,72) - Zn (0,74) мәндері периодтық жүйедегі белгілі заңдылықтарға қарама-қайшы және негізсіз болып табылады.

Бүгінгі күні осы мәліметтерді қайта бағалаудың сенімді әдістерінің жоқтығына байланысты, олар, өкінішке орай, әлемдік практикада қолданбалық және ілімдік зерттеулерде негізгі анықтамалық мәліметтер ретінде пайдаланылады. Бұл негізсіз, осы себепті мұндай жұмыстарды жүргізу ғылымда аса мәнді іс-әрекет.

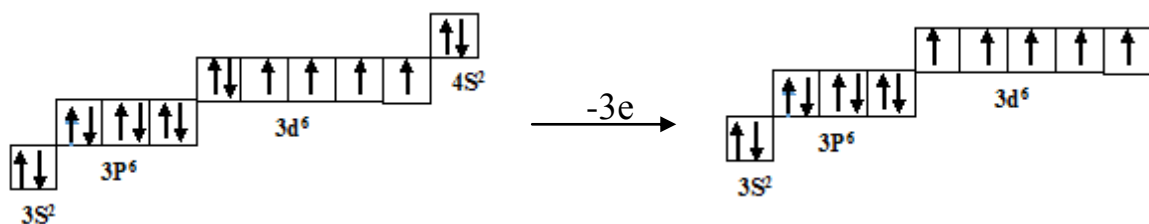
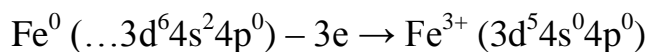
Сондықтан молекулалық жүйенің құрамдасы - иондардың радиустарын анықтау бойынша бүгінде қол жеткен жетістіктер ғылымда жүргізіліп отырған ілімдік те, қолданбалық та зерттеулерді қанағаттандырмайды. Осы бағытта жаңа шешімдер тауып, ұтымды ізденістер жүргізіп, иондардың шынайы нақты сенімді мәндерін анықтау аса өзекті мәселе болып отыр.

Осы себепті зарядталған элементтік бөлшектер арасында пайда болатын белгілі тартылу және тебу заңдылықтарын және ион құрылысының құрылымы туралы жалпылама мойындаған заманауи ғылыми мәліметтерді ескере отырып, элементтік бөлшектердің орбиталдық радиустарының шынайы мәндерін анықтау мақсатында тың ғылыми негізделген зерттеу жұмыстарын жүргізудің қажеттілігі жоғары.

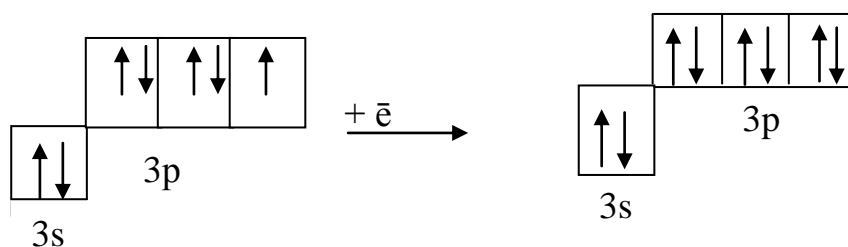
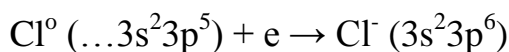
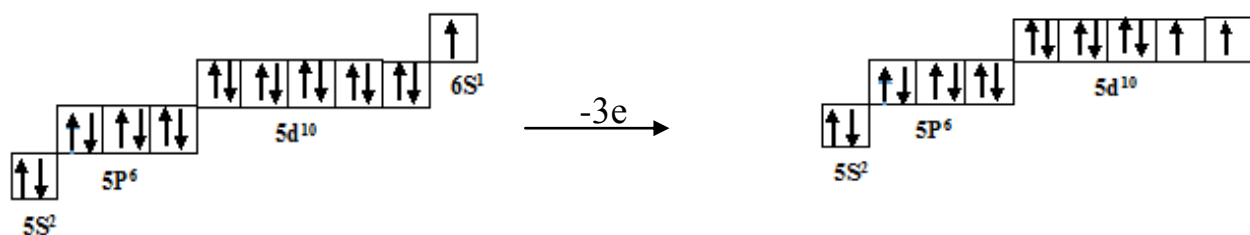
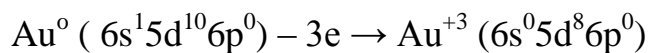
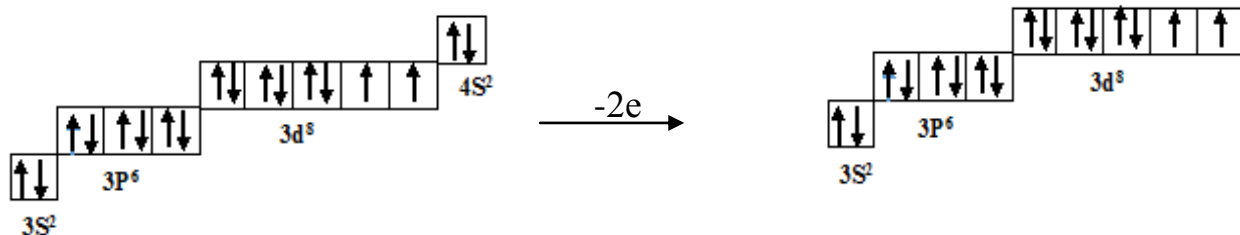
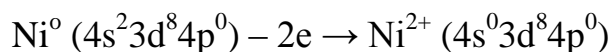
Иондар –химиялық байланысқан атомдар тобы электрондарын жоғалтып немесе сырттан электрондар қосып алғанда пайда болатын электрлік зарядталған бөлшектер. «Иондар» терминін 1834 ж. ағылшын физигі М.Фарадей (1791 – 1867) енгізген. Бөлшектерден электрондарды бөліп алу энергия шығынын қажет етеді, бұл энергия шығыны иондалу потенциалы деп

аталады, ал электрондар қосылғанда энергия бөлінеді. Иондар газдарда молекулалардың (атомдардың) энергиясы жоғары бөлшектермен соқтығысуы кезінде (фотоиондалу кезінде), иондауыш сәулелер әсерінен не күшті электр өрісінің әсерінен, ал ерітінділерде еріген заттың диссоциациялануынан пайда болады. Осы кезде, олардың электрондық құрылымдары белгілі заңдылықтарға сай өзгереді [79].

Fe^0 атомынан Fe^{3+} ионының пайда болғандағы электрондық өзгерістерді төмендегідей көрсетуге болады.



Сондай ақ, Ni^0 атомынан Ni^{2+} ионының пайда болғандағы электрондық өзгерістерді төмендегідей көрсетуге болады.



Атомдар тобы электрондарын жоғалтып немесе сырттан электрондар қосып алғанда пайда болатын иондардың электрондық құрылымдары келесідей өзгереді [80].

Химиялық элементтер	Ион заряды	Атомдардың электрондық құрылымы	Иондардың электрондық құрылымы
Сутегі	H ⁺¹	1S ¹	1S ⁰
Литий	Li ⁺¹	1S ² ,2S ¹	1S ² ,2S ⁰
Бериллий	Be ⁺²	1S ² ,2S ²	1S ² ,2S ⁰
Бор	B ⁺³	1S ² ,2S ² ,2P ¹	1S ² ,2S ⁰ ,2P ⁰
Көміртегі	C ⁺⁴	1S ² ,2S ² ,2P ²	1S ² ,2S ⁰ ,2P ⁰
Азот	N ⁺³	1S ² ,2S ² ,2P ³	1S ² ,2S ² ,2P ⁰
Азот	N ⁻³	1S ² ,2S ² ,2P ³	1S ² ,2S ² ,2P ⁶
Оттегі	O ⁺⁶	1S ² ,2S ² ,2P ⁴	1S ² ,2S ⁰ ,2P ⁰
Оттегі	O ⁻²	1S ² ,2S ² ,2P ⁴	1S ² ,2S ² ,2P ⁶
Фтор	F ⁻¹	1S ² ,2S ² ,2P ⁵	1S ² ,2S ² ,2P ⁶
Неон	Ne ⁺⁸	1S ² ,2S ² ,2P ⁶	1S ² ,2S ⁰ ,2P ⁰
Натрий	Na ⁺¹	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ¹	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ⁰
Магний	Mg ⁺²	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ²	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ⁰
Алюминий	Al ⁺³	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ¹	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ⁰ ,3P ⁰
Кремний	Si ⁺⁴	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ²	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ⁰ ,3P ⁰
Фосфор	P ⁺⁵	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ³	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ⁰ ,3P ⁰
Күкірт	S ⁺⁶	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁴	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ⁰ ,3P ⁰
Күкірта	S ⁻²	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁴	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁶
Хлор	Cl ⁺⁷	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁵	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ⁰ ,3P ⁰
Хлор	Cl ⁻¹	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁵	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁶
Аргон	Ar ⁺⁸	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁶	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ⁰ ,3P ⁰
Калий	K ⁺¹	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁶ ,4S ¹	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁶ ,4S ⁰
Кальций	Ca ⁺²	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁶ ,4S ²	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁶ ,4S ⁰
Титан	Ti ⁺⁴	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁶ ,3d ² ,4S ²	1S ² ,2S ² ,2P ⁶ ,3S ² ,3P ⁶ ,3d ⁰ ,4S ⁰

Бірінші тарау бойынша қорытынды

1. Галургиялық технология ғылыми таным мен бейорганикалық заттар өндірісінің өзіндік ерекшеленген саласы. Ол өнеркәсіптің көптеген салаларында кең және әртүрлі ғылыми іс-тәжірибелік қолданыстарға ие. Қазіргі таңда, оларда жүретін химиялық үрдістердің сипаттары ғылыми негізделмеген.

2. Галургиялық технологияда маңызды рөл атқаратын сулы- тұзды жүйелер. Олардың негізгі шикізаттық құрамдастары саналауан табиғи тұздар мен олардың қоспалары. Сондықтан табиғи тұздар, олардың қоспалары мен тұздар өндірісінің қалдықтарының табиғатта таралуы мен қордалануы туралы ізденістерді жасау қазіргі кездің өзекті мәселелерінің бірі.

3. Бүгінде сулы-тұзды жүйелердің негізі болып табылатын физика-химиялық қасиеттері зерттеуді қажет етеді. Бұл ретте сулы-тұзды жүйелерді толығымен сипаттауда ерітіндінің әрбір құрамдастарының қасиеттері ескерілуі қажет. Еріткіш-көлемді су екі түрлі– бос және байланысқан су молекулаларынан тұрады. Олардың сандық құрамы температураға байланысты. Температураның жоғарлауы көлемдік судағы бос молекулалардың артуына және байланысқан су молекулаларының санды кемуіне алып келеді.

4. Сулы-тұзды жүйелердің құрамдастары еріген заттар мен еріткіштерден тұрады. Олардың элементтік бөлшектері, кез-келген молекулалық жүйедегідей, атомдар мен иондардан тұрады. Олардың өлшемдері мен қасиеттері саналуан физика-химиялық құбылыстар мен үрдістерде, олардың негізінде іске асырылатын өндірістік технологияларда шешуші рөл атқарады. Сондықтан элементтік бөлшектердің орбиталдық өлшемдерінің шынайы мәндерін анықтау мақсатында жүргізілген зерттеу жұмыстарының қажеттілігі тым жоғары.

5. Сулы-тұзды жүйелерде байқалатын құбылыстармен үрдістерді физика-химиялық тұрғыдан сипаттауда, құрамдас еріген заттар мен еріткіштердің элементтік бөлшектерінің орбиталдық өлшемдерінің негізінде анықтауға болатын өлшемді мәндерді қолдану бойынша ғылыми деректер жоқ екені анықталды.

6. Қоршаған ортада қордаланған тұздар өндірісінің қалдықтарынан өнімдік таза тұздарды өндіру қазіргі уақыттың өзекті мәселесінің бірі болып отыр

2 ЗЕРТТЕУДІ ЖҮРГІЗУ ӘДІСІ МЕН ӘДІСТЕМЕСІ

Зерттеулер галургиялық үрдістердегі сулы-тұзды жүйелердің негізгі құрамдастары болып табылатын еритін және ерітіндіден бөлініп алынатын тұздар және еріткіш – суға қатысты жүргізілді.

Зерттеу нысандары ретінде Д.И.Менделеевтың периодтық жүйесіндегі элементтер атомдары мен олардың иондары, бос және байланысқан молекулалардан тұратын су қабылданды. Сонымен қатар, диссертациялық ізденістердің мақсаттарына сәйкес жүргізілген нақты есептік зерттеулерде мысалдық жүйелер ретінде NaCl -H₂O, KCl -H₂O, CsCl -H₂O, LiI - H₂O, NaI - H₂O, KI -H₂O, CsI -H₂O, NaBr -H₂O, KBr-H₂O, CsBr -H₂O, NaNO₃ -H₂O, RbNO₃ - H₂O, KNO₃ -H₂O, CoSO₄ -H₂O, NiSO₄ -H₂O, CuSO₄-H₂O сулы – тұзды жүйелері таңдалып алынып, олардың құрамдарына қатысты анықталған физика-химиялық көрсеткіштерінің белгілі мәндері пайдаланылды.

Д.И.Менделеевтың периодтық жүйесіндегі элементтер атомдары мен олардың иондарының электрондық құрылыстары, ондағы элементтік бөлшектердің арасындағы тартылыс, тебіліс, ортадан тепкіш күштер табиғаты мен элементтік бөлшектердің кванттық қасиеттері, атомдар мен иондар қасиеттерінің химиялық элементтердің периодтық жүйесі шеңберінде жалпылама мойындалған өзгеру заңдылықтары Паул принципі мен Хунда ережелерінің сипаттары туралы ғылыми негізделген заманауи мәліметтерді ескере отырып, ғылыми тәжірибеде алғаш рет, атомдар мен иондардың орбиталдық радиустарын, меншікті энергетикалық көрсеткіштерін және тұздардың кристалдық тор энергия шамаларын анықтаудың жаңа әдістемеліктері дайындалып, қолданысқа енгізілді.

Дайындалған жаңа әдістемеліктер қолданысында жүргізілген есептемелік зерттеулерде толықтама Excel бағдарламасы пайдаланылды. Бұл ретте алынған нәтижелерде жалпы қол жетімді анықтамалық мәліметтер - электрон заряды $e = 1,6021892 \cdot 10^{-19}$ Кл, вакуумдық диэлектрлік өткізгіштік $\epsilon_0 = 8,854187 \cdot 10^{-12}$ Ф/м, электрон массасы $m = 9,109534 \cdot 10^{-31}$ кг, жарық жылдамдығы $c = 2,997924 \cdot 10^8$ м/с, жұқа құрылымның тұрақтысы $\alpha = 1/137$, Авогадро саны $N_A = 6,022045 \cdot 10^{+23}$ моль⁻¹, протон радиусы $r = 0,8768$ Фм, сутегі ядросының радиусы $r = 0,000016$ Å қолданылды. Олардың дәйектілігі мен дәлдігі заманауи ғылыми жетістіктер болып табылатын жалпылама танымал ғалымдар мен ізденіскерлер Мелвин-Хьюздың, Гольдшмидттің, Ингольдтың, Вазашернның, Слэйтердің, Брэггтың, Ланденің, Беловтың, Менделеевтың, Кулонның, Бокидың, Шанонның, Капустинскийдің, Борнның, Ферсманның және Нобель сыйлығының химия бойынша лауреаттары Малликен Сандерсонның, Нильс Бордың және Лаинус Полингтың еңбектерінің нәтижелерімен жүйелі салыстырмалы түрде анықталды.

Сулы-тұзды жүйелердің физика-химиялық, құрамдық, күйлік және құрылымдылық қасиеттерінің өзгерістері заңдылықтары мысалдық NaCl-H₂O жүйесінің күй айнасы негізінде салқындату және буландыру үрдістеріне қатысты, бүгінде ғылыми ізденістер мен қолданбалық іс-тәжірибелерде

пайдалануда жалпылама қабылданған белгілі талдаулық әдістемеліктерді қолдана отырып тұжырымдалды. Бұл ретте алынған нәтижелер графикалық және математикалық әдістерді пайдалана отырып өрнектеліп, аналитикалық тәуелділіктер ретінде келтірілді.

Ғылыми-ілімдік химия саласында қазіргі кезде қол жеткен нәтижелер көрсеткендей, атомдар радиустары туралы шынайылығы жоғары, толықтама ғылыми дәйектелінген мәліметтер жоқ. Анықталған мәліметтер түрлі өлшеу құралдарының көмегімен, атомдар құрлысы туралы мойындалған заңдылықтарды, ондағы электрондардың орналасу жағдайлары ескерілмей, электрондардың козу күйінде алынған [84]. Біздердің жүргізілген зерттеу жұмысымызда белгілі зарядталған элементтік бөлшектер арасында пайда болатын бірін-бірі тарту және тебу заңдылықтары, ортадан тепкіш күш әсерлері және атомдардың құрылысы туралы жалпылама мойындаған заманауи ғылыми мәліметтер мен тұжырымдарды пайдаланынып алынған жаңа теңдіктер арқылы периодтық жүйенің химиялық элементтері үшін есептеулер жасалынды.

Зарядтары әртүрлі бөлшектердің тартылыс күші:

$$F_1 = q_1 \cdot q_2 / 4\pi\epsilon_0 R^2 = z \cdot n \cdot e^2 / 4\pi\epsilon_0 R^2; \quad (4)$$

Ортадан тепкіш күш: $F_2 = m \cdot v^2 / R; \quad (5)$

бұл жерде: q – бөлшектердің жалпы заряды, Кл

z – зарядтар саны,

e – электрон заряды, Кл

ϵ_0 – вакуумдық диэлектрлі өткізгіштік, Ф/м

R – зарядталған бөлшектер арасындағы арақашықтық, Å

m – электрон массасы, кг

n – атомдардағы протондар саны,

v – R радиусындағы орбита бойымен айналатын электрон жылдамдығы.

Электрон жылдамдығы төмендегі формуламен анықталады $v = \alpha \cdot Z \cdot c$.

бұл жерде: Z – протондар саны;

c – жарық жылдамдығы, м/с.

α – жұқа құрылымның тұрақтысы. Оның мәні 1/137 тең [85].

Белгілі анықталған заңдылықтарға сәйкес $F_1 = F_2$ күштердің арақатынасын ескере отырып, 4,5 теңдіктерді қорыта келе төмендегі есептемелік теңдіктерді алдынды:

$$\frac{zn e^2}{4\pi\epsilon_0 (R_{a\alpha} + X)^2} = \frac{K m v^2}{(R_{a\alpha} + X)}; \quad (6)$$

$$\frac{zn e^2}{4\pi\epsilon_0 (R_{a\alpha} - X)^2} = \frac{K m v^2}{(R_{a\alpha} - X)}; \quad (7)$$

бұл жерде: $R_{\text{аэа}}$ – алдыңғы элемент атомының радиусы;

K – химиялық элементтердің электрондық құрылымдары ерекшеліктерін ескеріп табылатын коэффициенті;

X – химиялық жүйелердегі өзінен кейінгі және алдыңғы тұратын элементтердің атом радиустарының сызықтық айырмашылықтарын көрсететін түзету коэффициенті.

Ары қарай, 6 теңдіктің екі жағында $(R_{\text{аэа}} + X)$ белгіге көбейте отырып, келесі түрдегі жаңа теңдік алынды:

$$\frac{z n e^2}{4 \pi \varepsilon_0 (R_{\text{аэа}} + X)} = K m \vartheta^2; \quad (8)$$

8– теңдікті қорыта отырып:

$$z n e^2 = K m \vartheta^2 4 \pi \varepsilon_0 R_{\text{аэа}} + K m \vartheta^2 4 \pi \varepsilon_0 X; \quad (9)$$

$$X = \frac{z n e^2 - K 4 \pi \varepsilon_0 m \vartheta^2 R_{\text{аэа}}}{K 4 \pi \varepsilon_0 m \vartheta^2}; \quad (10)$$

7 - теңдіктің екі жағында $(R_{\text{аэа}} - X)$ көбейту нәтижесі келесі түрдегі жаңа теңдікті алуға мүмкіндік береді.

$$\frac{z n e^2}{4 \pi \varepsilon_0 (R_{\text{аэа}} - X)} = K m \vartheta^2; \quad (11)$$

11 - теңдікті қорыта отырып келесі теңдіктерді алынды

$$z n e^2 = K m \vartheta^2 4 \pi \varepsilon_0 R_{\text{аэа}} - K m \vartheta^2 4 \pi \varepsilon_0 X; \quad (12)$$

$$X = \frac{K 4 \pi \varepsilon_0 m \vartheta^2 R_{\text{аэа}} - z n e^2}{K 4 \pi \varepsilon_0 m \vartheta^2}; \quad (13)$$

10 және 13 - теңдіктерінен X мәнін тапқанан кейін Д.И.Менделеевтың периодтық жүйесіндегі атом радиустары мәндерінің өзгеру заңдылықтарына сәйкес атомдар радиустары төмендегіше анықталады:

$$R_{\text{атом}} = R_{\text{аэа}} + X; \quad (14)$$

$$R_{\text{атом}} = R_{\text{аэа}} - X; \quad (15)$$

6,8,9,10,14 - теңдіктері келесі элементтердің атом радиустары алдыңғы элементтің атом радиусынан жоғары, яғни бір топарда орналасқан химиялық элементер үшін, ал 7,11,12,13,15 - теңдіктері келесі элементтердің атом радиустары алдыңғы элементтің атом радиусынан кем, яғни бір периодта орналасқан химиялық элементер үшін қолданыс табады.

3 ЭЛЕМЕНТТЕРДІҢ АТОМДАРЫ МЕН ИОНДАРЫ РАДИУСТАРЫН ЖӘНЕ ОЛАРДЫҢ МЕНШІКТІ ЭНЕРГЕТИКАЛЫҚ КӨРСЕТКІШТЕРІН ЕСЕПТЕУ НӘТИЖЕЛЕРІ

3.1 Элементтердің атомдары радиустарын есептеу нәтижелері

Химиялық элементтердің периодтық жүйесіндегі бірінші элемент сутегінің атом радиусы 6,10,14 - теңдіктер арқылы төмендегіше анықталады:

$$\frac{zn e^2}{4\pi \varepsilon_0 (R_{\text{ядро}} + X)^2} = \frac{Km \vartheta^2}{(R_{\text{ядро}} + X)}; \quad (16)$$

$$X = \frac{zn e^2 - K4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2 R_{\text{ядро}}}{K4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2}; \quad (17)$$

$$R_{\text{атом}} = R_{\text{ядро}} + X; \quad (18)$$

бұл жерде: $R_{\text{ядро}}$ – сутегі ядросының радиусы= 0,000016 Å[83].

Сутегі ядросының радиусы төмендегіше анықталды[86]:

$$R_{\text{ядро}} = 1,3 \sqrt[3]{A}; 10^{-13} \text{ см} \quad (19)$$

мұндағы: А-протондар мен нейтрондар санының қосындысы.

Осы жағдайда, есептелінген сутегінің атом радиусы мәні 0,53 Å тең болды. Бұл нәтиже жалпылама мойындалған Нильс Бордың [76] тапқан мәліметтерімен толықтама келіп тұр.

Периодтық жүйедегі элементтердің электрондық құрылымдары туралы белгілі мәліметтерді шығармашылық талдау негізінде периодтық жүйедегі барлық химиялық элементтердің К атомдық коэффициент мәндерінің өзгеру заңдылықтары табылып, оның барлық элементтері үшін сандық мәндері s,p,d,f энергетикалық деңгейшелерде атом электрондарының таралу заңдылықтарын ескере отырып, анықталды. Нәтижелері 12 – кестеде келтірілген.

Кесте – 12 Элементтер атомдарының атомдық коэффициенттері К мәндері.

Химиялық элементтер	Химиялық элементтердің электрондық структурасы	К коэффициентінің мәні
1	2	3
Сутегі	1S ¹	-
Гелий	1S ²	1
Литий	1S ² ,2S ¹	1,25
Бериллий	1S ² ,2S ²	2
Бор	1S ² ,2S ² ,2P ¹	3
Көміртегі	1S ² ,2S ² ,2P ²	4
Азот	1S ² ,2S ² ,2P ³	5
Оттегі	1S ² ,2S ² ,2P ⁴	6

12 Кестенің жалғасы

1	2	3
Фтор	$1S^2, 2S^2, 2P^5$	7
Неон	$1S^2, 2S^2, 2P^6$	8
Натрий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^1$	3,25
Магний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2$	4
Алюминий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^1$	5
Кремний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^2$	6
Фосфор	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^3$	7
Күкірт	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^4$	8
Хлор	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^5$	9
Аргон	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6$	10
Калий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 4S^1$	4,25
Кальций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 4S^2$	6
Скандий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^1, 4S^2$	7
Титан	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^2, 4S^2$	8
Ванадий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^3, 4S^2$	9
Хром	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^4, 4S^2$	10
Марганец	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^5, 4S^2$	11
Темір	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^6, 4S^2$	12
Кобальт	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^7, 4S^2$	13
Никель	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^8, 4S^2$	14
Мыс	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^1$	11,5
Мырыш	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2$	12
Галлий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^1$	13
Германий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^2$	14
Мышьяк	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^3$	15
Селен	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^4$	16
Бром	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^5$	17
Криптон	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6$	18
Рубидий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 5S^1$	8,25
Стронций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 5S^2$	9
Иттрий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^1, 5S^2$	10
Цирконий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^2, 5S^2$	11
Ниобий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^4, 5S^1$	12,5
Молибден	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^5, 5S^1$	13,5
Технеций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^5, 5S^2$	14
Рутений	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^7, 5S^1$	14,5
Родий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^8, 5S^1$	15,5
Палладий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}$	18
Күміс	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^1$	17,25
Кадмий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2$	18
Индий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^1$	19
Қалайы	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^2$	20
Сүрме	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^3$	21
Теллур	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^4$	22
Йод	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^5$	23
Ксенон	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6$	24
Цезий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6, 6S^1$	11,25

12 Кестенің жалғасы

1	2	3
Барий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	12
Лантан	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6, 5d^1, 6S^2$	13
Цери	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^2, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	14
Празеодим	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^3, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	15
Неодим	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^4, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	16
Прометий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^5, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	17
Самарий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^6, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	18
Европий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^7, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	19
Гадолиний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^7, 5S^2, 5P^6, 5d^1, 6S^2$	20
Тербий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^9, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	21
Диспрозий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{10}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	22
Гольмий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{11}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	23
Эрбий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{12}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	24
Тулий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{13}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	25
Иттербий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	26
Лютеций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^1, 6S^2$	27
Гафний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^2, 6S^2$	28
Тантал	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^3, 6S^2$	29
Вольфрам	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^4, 6S^2$	30
Рений	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^5, 6S^2$	31
Осмий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^6, 6S^2$	32
Иридий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^7, 6S^2$	33
Платина	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^9, 6S^1$	33,5
Алтын	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^1$	22,5
Сынап	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2$	23
Талий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^1$	24
Қорғасын	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^2$	25
Висмут	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^3$	26
Полоний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^4$	27
Астат	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^5$	28
Радон	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6$	29
Франций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 7S^1$	15,25
Радий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	16
Актиний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	17
Торий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 6d^2, 7S^2$	18
Протактиний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^2, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	19
Уран	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^3, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	20
Нептуний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^4, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	21
Плутоний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^6, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	22
Америций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^7, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	23
Кюрий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^7, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	24
Берклий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^9, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	25
Калифорний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{10}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	26
Эйнштейний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{11}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	27
Фермий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{12}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	28
Менделевий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{13}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	29
Нобелий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{14}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	30

7-15 - теңдіктерді қолдана отырып, периодтық жүйедегі 102 элементтің атом радиустары қайта есептелінді. Есептеу нәтижелері 13-кестеде келтірілген [87,88].

Кесте – 13 Элементтердің атом радиустары мәндері

№	Химиялық элементтер	Атом радиустарының жаңа мәндері, Å	Атом радиустары туралы белгілі мәндердің өзгеру аумақтары, Å (әдеби көздерден алынған)
1	2	3	4
1.	Сутегі	0,530	0,79 [74] ÷ 1,06 [75]
2.	Гелий	0,265	0,49 [74] ÷ 0,59 [75]
3.	Литий	1,279	1,34 ÷ 1,57 [78]
4.	Бериллий	1,066	1,07 ÷ 1,13 [78]
5.	Бор	0,888	0,79 ÷ 0,91 [78]
6.	Көміртегі	0,799	0,77 [78,89]
7.	Азот	0,746	0,54 ÷ 0,71 [78]
8.	Оттегі	0,711	0,6 ÷ 0,74 [78]
9.	Фтор	0,685	0,64 ÷ 0,7 [78]
10.	Неон	0,666	1,6 [74,78]
11.	Натрий	1,805	1,54 ÷ 1,89 [78]
12.	Магний	1,599	1,4 ÷ 1,60 [78]
13.	Алюминий	1,386	1,26 ÷ 1,43 [78]
14.	Кремний	1,244	1,17 ÷ 1,34 [78]
15.	Фосфор	1,142	0,947 ÷ 1,3 [78]
16.	Күкірт	1,057	1,02 ÷ 1,04 [78]
17.	Хлор	1,007	0,8 ÷ 0,99 [78]
18.	Аргон	0,959	1,92 [74]
19.	Калий	2,384	2,27 ÷ 2,36 [78]
20.	Кальций	1,777	1,37 ÷ 1,97 [78]
21.	Скандий	1,601	1,62 [74]
22.	Титан	1,466	1,44 ÷ 1,46 [74,78]
23.	Ванадий	1,362	1,31 [74]
24.	Хром	1,280	1,249 ÷ 1,27 [78]
25.	Марганец	1,212	1,30 ÷ 1,366 [78]
26.	Темір	1,155	1,24 ÷ 1,26 [78]
27.	Кобальт	1,107	1,25 [78]
28.	Никель	1,077	1,24 [78]
29.	Мыс	1,350	1,27 ÷ 1,35 [78]
30.	Мырыш	1,333	1,31 ÷ 1,39 [78]
31.	Галлий	1,265	1,39 [74]
32.	Германий	1,219	1,39 [74]
33.	Мышьяк	1,173	1,18 ÷ 1,48 [78]
34.	Селен	1,133	1,6 [74]
35.	Бром	1,098	1,14 ÷ 1,19 [78]
36.	Криптон	1,087	1,98 [74]
37.	Рубидий	2,391	2,43 ÷ 2,48 [78]
38.	Стронций	2,251	2,14 ÷ 2,15 [78]

13 Кестенің жалғасы

1	2	3	4
39.	Иттрий	2,079	1,81 [74,78]
40.	Цирконий	1,939	1,6 [74]
41.	Ниобий	1,749	1,45 [74]
42.	Молибден	1,659	1,36÷1,40 [78]
43.	Технеций	1,638	1,36 [78]
44.	Рутений	1,618	1,34 [78]
45.	Родий	1,548	1,37 [74]
46.	Палладий	1,363	1,31÷1,37 [78]
47.	Күміс	1,453	1,44-1,53 [78]
48.	Кадмий	1,422	1,48-1,56 [78]
49.	Индий	1,375	1,66 [74]
50.	Қалайы	1,343	1,4÷1,58 [78]
51.	Сурьма	1,30	1,36÷1,61 [78]
52.	Теллур	1,260	1,7 [74]
53.	Йод	1,229	1,28÷2,20 [78]
54.	Ксенон	1,199	2,18 [74]
55.	Цезий	2,607	2,62÷2,68 [78]
56.	Барий	2,488	2,17÷2,24[78]
57.	Лантан	2,338	1,86÷1,87[78]
58.	Церий	2,209	1,82 [74]
59.	Празеодим	2,097	1,82 [74]
60.	Неодим	1,999	1,82 [74]
61.	Прометий	1,913	-
62.	Самарий	1,837	1,80 [74]
63.	Европий	1,768	2,04 [74]
64.	Гадолиний	1,706	1,79 [74]
65.	Тербий	1,640	1,77 [74]
66.	Диспрозий	1,570	1,77 [74]
67.	Гольмий	1,553	1,76 [74]
68.	Эрбий	1,511	1,76 [74]
69.	Тулий	1,472	1,75 [74]
70.	Иттербий	1,435	1,93 [74]
71.	Лютеций	1,402	-
72.	Гафний	1,371	1,59 [74]
73.	Тантал	1,342	1,46 [74]
74.	Вольфрам	1,315	1,44 [74]
75.	Рений	1,290	1,37 [74]
76.	Осмий	1,268	1,36 [74]
77.	Иридий	1,230	1,36 [74]
78.	Платина	1,250	1,38÷1,39 [78]
79.	Алтын	1,872	1,44÷1,50 [78]
80.	Сынап	1,855	1,48÷1,60[78]
81.	Талий	1,799	1,71 [74]
82.	Қорғасын	1,750	1,46÷1,75 [77]
83.	Висмут	1,690	1,82 [74]
84.	Полоний	1,660	1,19 [74]
85.	Астат	1,620	-

13 Кестенің жалғасы

1	2	3	4
86.	Радон	1,581	1,34 [74]
87.	Франций	3,042	
88.	Радий	2,933	
89.	Актиний	2,792	
90.	Торий	2,666	1,8 [74]
91.	Протактиний	2,554	
92.	Уран	2,453	1,2 [74]
93.	Нептуний	2,361	
94.	Плутоний	2,278	
95.	Америции	2,30	
96.	Кюрий	2,133	
97.	Берклий	2,069	
98.	Калифорний	2,009	
99.	Эйнштейний	1,955	
100.	Фермий	1,904	
101.	Менделевий	1,860	
102.	Нобелий	1,813	

13 - кестеден көрініп тұрғандай, табылған элементтердің атом радиустары мәндері бұрынғы белгілі мәліметтер шеңберінде орналасқан.

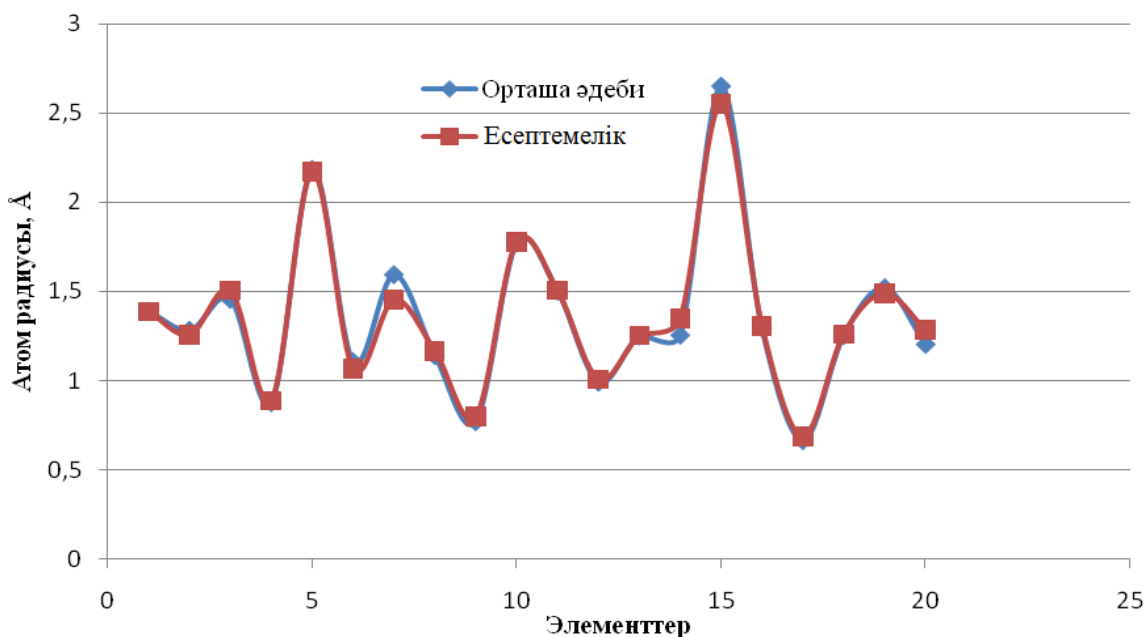
Жаңа есептемелік мәндердің шынайлығына көз жеткізу мақсатында белгілі әдеби мәліметтерден Мелвин-Хьюз (М.Х), Гольдшмидт (Г), Полинг (П), Боки (Б) секілді оқымыстылардың анықтаған атом радиустарының орташа мәндерімен салыстырмалы түрде алынды. Оның нәтижесі 14 – кесте мен 8-суретте келтірілген [90].

Кесте- 14 Кейбір химиялық элементтердің атомдар радиустары өлшемдерінің салыстырмалық нәтижелері

Элементтер	Атом радиусы, $r_a \cdot 10, \text{нм}$					
	М.Х	Г	П	Б	Орташа мәндер	Авторлық мәндер
1	2	3	4	5	6	7
Al	1,432	1,43	1,26	1,43	1,388	1,383
As	1,248	1,22	1,18	1,48	1,282	1,256
Au	1,442	1,44	1,5	1,44	1,455	1,503
B	0,795	0,91	0,89	0,91	0,876	0,888
Ba	2,174	2,17	-	2,21	2,184	2,171
Be	1,113	1,11	1,07	1,13	1,105	1,063
Bi	1,548	1,55	1,46	1,82	1,594	1,690
Br	1,141	1,14	1,14	-	1,140	1,166
C	0,771	0,77	0,77	0,777	0,770	0,799
Ca	1,974	1,37	-	1,97	1,771	1,777
Cd	1,49	1,48	1,48	1,56	1,502	1,505
Cl	0,994	0,99	0,99	-	0,991	1,007
Co	1,253	1,25	1,25	1,25	1,250	1,251

14 Кестенің жалғасы

1	2	3	4	5	6	7
Cr	1,249	1,25	1,25	1,27	1,254	1,280
Cs	2,655	2,62	-	2,68	2,651	2,665
Cu	1,278	1,27	1,35	1,28	1,294	1,350
F	0,709	0,64	0,64	-	0,663	0,684
Fe	1,241	1,26	-	1,26	1,253	1,259
Hg	1,503	1,5	1,48	1,6	1,520	1,488
I	1,333	2,2	1,28	-	1,203	1,283



Сурет -8 Атом радиустарының орташа және есептемелік мәндерінің өзгеріс заңдылықтары

14 - кесте мен 8 – суреттен көрінгендей, жаңа есептелінген нәтижелері бойынша белгілі әдеби мәліметтерге жақын және де соңғылардың периодтық жүйе шеңберінде өзгеру заңдылықтарын сақтайтын, бірақ өзіндік сандық нәтижелері бар мәндер алынды.

Сонымен қатар, олардың жоғары дәрежелі дәйектілігі мен шынайылығына көз жеткізу мақсатында, кез-келген элементтің атомдық радиустар мәндерін оның алдында немесе одан кейін орналасқан элементтердің белгілі мәндік көрсеткіштерін қолданып, атомдық радиустар мәндерінің периодтардағы өсетіндігіне не кемитіндігіне байланысты анықталды. Мысалы, кальцийдің атомдық радиусы мәнін есептеуде калий және скандий элементтерінің анықталған атом радиустары мәндері қолданылды. Осы кезде, атомдық радиустары мәндерінің (калийдің атомдық радиус мәнін қолданғанда) периодтардағы кемитіндігіне байланысты 13,15, ал керісінше олардың (скандийдің атомдық радиус мәнін қолданғанда) өсетіндігіне байланысты 10,14 формулаларды қолданып есептелінді.

Осындай есептеулер топтар бойынша да, кез-келген элементтің атомдық радиустар мәндерін оның үстінде немесе астында орналасқан элементтердің анықталған атомдық радиустары мәндерінің көрсеткіштерін қолданып, олардың топтардағы өсетіндігіне не кемитіндігіне байланысты анықталды. Мысалы үшін, кальцийдің атомдық радиусы мәнін есептеуде магний және стронций элементтерінің анықталған атом радиустары мәндері қолданылды. Осы кезде, атомдық радиустары мәндерінің (магнийдің атомдық радиус мәнін қолданғанда) топтардағы кемитіндігіне байланысты 13,15, ал керісінше олардың (стронцийдің атомдық радиус мәнін қолданғанда) өсетіндігіне байланысты 10,14 формулаларды қолданып есептелінді.

Осы кезде барлық төрт түрлі есептеулік жағдайларда да, қарастырып отырған элементтің атомдық радиустары мәндері бір-біріне толықтама сәйкес. Бұл нәтиже жүргізілген ізденістердің жаңалығы мен қатар жоғары ілімдік ғылыми құндылығы мен маңыздылығына дәлел бола алады.

Сонымен, жүргізілген зерттеулер нәтижелерін ғылыми химия саласында атомдардың радиустарының шынайылығы жоғары мәндерін есептік жолмен анықтауға болатын жаңа шешім деп қарастыруға болады. Жұмыста қолданылған әдістеме Д.И. Менделеевтың периодтық жүйесіндегі барлық элементтердің атомдық радиустарының мәндерін есептеп анықтауға мүмкіншілік береді.

Сонымен қатар, ұсынылған атомдардың орбиталдық радиустарын анықтаудың жаңа есептік тәсіліне ҚР ӨМ «Ұлттық зияткерлік меншік институты» РМК-ның 2020 жылдың 18 наурызындағы №8917 шешімімен мемлекеттік құқықтар тізілімінде авторлық құқықпен қорғалатын объектілік мәліметтер ретінде енгізіліп, куәліктендірілді, олардың негізінде Евразиялық патент одағына және ҚР интеллектуалды меншіктеу ұлттық институтына патенттік құжаттар дайындалып жіберілді (қосымша А,Б).

3.2 Элементтердің иондары радиустарын есептеу нәтижелері

Ғылыми-ілімдік химия саласында қазіргі кезде қол жеткен нәтижелер көрсеткендей, иондардың радиустары туралы шынайылығы жоғары, толықтама ғылыми дәйектелінген мәліметтер жоқ. Анықталған мәліметтер түрлі өлшеу құралдарының көмегімен, иондар құрлысы туралы мойындалған заңдылықтарды, ондағы электрондардың орналасу жағыдайлары ескерілмей, электрондардың козу күйінде алынған. Біздердің жүргізілген зерттеу жұмысымызда белгілі зарядталған элементтік бөлшектер арасында пайда болатын бірін-бірі тарту және тебу заңдылықтары, ортадан тепкіш күш әсерлері және иондардың құрылысы туралы жалпылама мойындаған заманауи ғылыми мәліметтер мен тұжырымдарды пайданалынып алынған жаңа теңдіктер арқылы периодтық жүйенің химиялық элементтері үшін есептеулер жасалынды.

$F_1 = F_2$ күштердің арақатынасын ескере отырып, 4,5 теңдіктерді қорыта келе ион радиустарын есептеудің жаңа есептемелік теңдіктері алынды:

$$\frac{K_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 (R_{\text{аэи}} + X)^2} = \frac{K_1 m \vartheta^2}{(R_{\text{аэи}} + X)}; \quad (20)$$

$$\frac{K_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 (R_{\text{аэи}} - X)^2} = \frac{K_1 m \vartheta^2}{(R_{\text{аэи}} - X)}; \quad (21)$$

бұл жерде: $R_{\text{аэи}}$ – алдыңғы элементтің ион радиусы;

Ары қарай, (20) теңдіктің екі жағында $(R_{\text{аэи}} + X)$ белгіге көбейте отырып, келесі түрдегі жаңа теңдік аламыз;

$$\frac{K_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 (R_{\text{аэи}} + X)} = K_1 m \vartheta^2; \quad (22)$$

(22) теңдікті қорытып келесі теңдіктерді аламыз.

$$K_2 e^2 = K_1 m \vartheta^2 4\pi \varepsilon_0 R_{\text{аэи}} + K_1 m \vartheta^2 4\pi \varepsilon_0 X; \quad (23)$$

$$X = \frac{K_2 e^2 - K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2 R_{\text{аэи}}}{K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2}; \quad (24)$$

(21) теңдіктің екі жағында $(R_{\text{аэи}} - X)$ көбейту нәтижесі келесі түрдегі жаңа теңдікті алуға мүмкіндік береді.

$$\frac{K_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 (R_{\text{аэи}} - X)} = K_1 m \vartheta^2; \quad (25)$$

(25) теңдікті қорытып келесі теңдіктерді аламыз.

$$K_2 e^2 = K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2 R_{\text{аэи}} - K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2 X; \quad (26)$$

$$X = \frac{K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2 R_{\text{аэи}} - K_2 e^2}{K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2}; \quad (27)$$

X мәнін тапқанан кейін иондар радиустары келесі түрде анықталады:

$$R_{\text{ион}} = R_{\text{аэи}} + X; \text{ немесе } R_{\text{К}} = R_{\text{К.а.э}} + X; R_{\text{А}} = R_{\text{А.а.э}} + X; \quad (28)$$

$$R_{\text{ион}} = R_{\text{аэи}} - X; \text{ немесе } R_{\text{К}} = R_{\text{К.а.э}} - X; R_{\text{А}} = R_{\text{А.а.э}} - X; \quad (29)$$

20-27 есептемелік теңдіктеріндегі, K_1 - химиялық элементтердің электрондық құрылымдары ерекшеліктерін ескеріп табылатын коэффициенті;

K_2 - (оң зарядталған иондар үшін) химиялық элементтер ионындағы протондар санының электрондар санына, ал (теріс зарядталған иондар үшін) химиялық элементтер ионындағы электрондар санының протондар санына ара қатысты анықталады; X – химиялық жүйелердегі периодтар бойынша өзінен

кейінгі және алдыңғы тұратын, ал топшалар бойынша өзінің үстінде және астында тұратын элементтердің ион радиустарының сызықтық айырмашылықтарын көрсететін түзету коэффициенті.

20, 22, 23, 24, 28 теңдіктері келесі элементтердің ион радиустары алдыңғы элементтің ион радиусынан көп болғандағы химиялық элементтер үшін қолданыс табады, ал 21, 25, 26, 27, 29 теңдіктері келесі элементтердің ион радиустары алдыңғы элементтің ион радиусынан кем болғандағы химиялық элементтер үшін қолданылады.

Химиялық элементтердің периодтық жүйесіндегі бірінші элемент сутегінің H және H⁺ иондары радиустары 20, 24, 28 және 21, 27, 29 теңдіктер негізінде төмендегіше анықталды:

$$\left. \begin{aligned} \frac{K_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 (R_{\text{атом H}} + X)^2} &= \frac{K_1 m \vartheta^2}{(R_{\text{атом H}} + X)}; \\ X &= \frac{K_1 e^2 - K_2 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2 R_{\text{атом H}}}{K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2}; \\ R_{\text{ион H}^-} &= R_{\text{атом H}} + X; \\ \frac{K_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 (R_{\text{атом H}} - X)^2} &= \frac{K_1 m \vartheta^2}{(R_{\text{атом H}} - X)}; \\ X &= \frac{K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2 R_{\text{атом H}} - K_2 e^2}{K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2}; \\ R_{\text{ион H}^+} &= R_{\text{атом H}} - X; \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{K_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 (R_{\text{атом H}} + X)^2} &= \frac{K_1 m \vartheta^2}{(R_{\text{атом H}} + X)}; \\ X &= \frac{K_1 e^2 - K_2 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2 R_{\text{атом H}}}{K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2}; \\ R_{\text{ион H}^-} &= R_{\text{атом H}} + X; \\ \frac{K_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 (R_{\text{атом H}} - X)^2} &= \frac{K_1 m \vartheta^2}{(R_{\text{атом H}} - X)}; \\ X &= \frac{K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2 R_{\text{атом H}} - K_2 e^2}{K_1 4\pi \varepsilon_0 m \vartheta^2}; \\ R_{\text{ион H}^+} &= R_{\text{атом H}} - X; \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

бұл жерде: $R_{\text{атом H}^-}$ сутегі атомының радиусы.

Периодтық жүйедегі элементтердің электрондық құрылымдары туралы белгілі мәліметтерді және элементтер иондарындағы электрондар мен протондар санын шығармашылық талдау негізінде периодтық жүйедегі барлық элементтері үшін K_1 және K_2 атомдық коэффициенттері мәндерінің өзгеру заңдылықтары табылып, сандық мәндері анықталды. Оның нәтижесі 15 – кестеде келтірілген.

Кесте-15 Элементтер иондарының K_1 , K_2 иондық коэффициенттер мәндері

Химиялық элементтер	Химиялық элементтердің электрондық құрылымы	K_1 мәні	K_2 мәні
1	2	3	4
Сутегі	1S ¹	-	-
Гелий	1S ²	1	2
Литий	1S ² , 2S ¹	1,25	1,5
Бериллий	1S ² , 2S ²	2	1,33
Бор	1S ² , 2S ² , 2P ¹	3	2,5
Көміртегі	1S ² , 2S ² , 2P ²	4	3
Азот	1S ² , 2S ² , 2P ³	5	1,75
Оттегі	1S ² , 2S ² , 2P ⁴	6	1,33

15 Кестенің жалғасы

1	2	3	4
Фтор	$1S^2, 2S^2, 2P^5$	7	1,125
Неон	$1S^2, 2S^2, 2P^6$	8	1,25
Натрий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^1$	3,25	1,1
Магний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2$	4	1,2
Алюминий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^1$	5	1,3
Кремний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^2$	6	1,4
Фосфор	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^3$	7	1,5
Күкірт	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^4$	8	1,6
Хлор	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^5$	9	1,7
Аргон	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6$	10	1,8
Калий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 4S^1$	4,25	1,05
Кальций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 4S^2$	6	1,11
Скандий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^1, 4S^2$	7	1,16
Титан	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^2, 4S^2$	8	1,22
Ванадий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^3, 4S^2$	9	1,28
Хром	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^4, 4S^2$	10	1,33
Марганец	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^5, 4S^2$	11	1,39
Темір	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^6, 4S^2$	12	1,13
Кобальт	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^7, 4S^2$	13	1,08
Никель	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^8, 4S^2$	14	1,07
Мыс	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^1$	11,5	1,035
Мырыш	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2$	12	1,071
Галлий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^1$	13	1,107
Германий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^2$	14	1,14
Мышьяк	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^3$	15	1,178
Селен	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^4$	16	1,096
Бром	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^5$	17	1,029
Криптон	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6$	18	1,028
Рубидий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 5S^1$	8,25	1,03
Стронций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 5S^2$	9	1,055
Иттрий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^1, 5S^2$	10	1,083
Цирконий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^2, 5S^2$	11	1,11
Ниобий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^4, 5S^1$	12,5	1,138
Молибден	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^5, 5S^1$	13,5	1,166
Технеций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^5, 5S^2$	14	1,194
Рутений	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^7, 5S^1$	14,5	1,222
Родий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^8, 5S^1$	15,5	1,125
Палладий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}$	18	0,77
Күміс	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^1$	17,25	1,022
Кадмий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2$	18	1,04
Индий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^1$	19	1,065
Қалайы	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^2$	20	1,087
Сүрме	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^3$	21	1,108
Теллур	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^4$	22	1,13
Йод	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^5$	23	1,152
Ксенон	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6$	24	1,174
Цезий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6, 6S^1$	11,25	1,02

15 Кестенің жалғасы

1	2	3	4
Барий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	12	1,037
Лантан	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6, 5d^1, 6S^2$	13	1,055
Церий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^2, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	14	1,054
Прозеодим	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^3, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	15	1,053
Неодим	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^4, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	16	1,052
Прометий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^5, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	17	1,051
Самарий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^6, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	18	1,05
Европий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^7, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	19	1,032
Гадолиний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^7, 5S^2, 5P^6, 5d^1, 6S^2$	20	1,049
Тербий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^9, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	21	1,048
Диспрозий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{10}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	22	1,015
Гольмий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{11}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	23	1,046
Эрбий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{12}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	24	1,046
Тулий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{13}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	25	1,045
Иттербий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	26	1,044
Лютеций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^1, 6S^2$	27	1,044
Гафний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^2, 6S^2$	28	1,058
Тантал	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^3, 6S^2$	29	1,073
Вольфрам	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^4, 6S^2$	30	1,088
Рений	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^5, 6S^2$	31	1,103
Осмий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^6, 6S^2$	32	1,117
Иридий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^7, 6S^2$	33	1,069
Платина	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^9, 6S^1$	33,5	1,054
Алтын	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^1$	22,5	1,012
Сынап	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2$	23	1,026
Талий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^1$	24	1,038
Қорғасын	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^2$	25	1,051
Висмут	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^3$	26	1,064
Полоний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^4$	27	1,051
Астат	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^5$	28	1,25
Радон	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6$	29	1,102
Франций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 7S^1$	15,25	1,01
Радий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	16	1,035
Актиний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	17	0,966
Торий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 6d^2, 7S^2$	18	1,017
Протактиний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^2, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	19	1,034
Уран	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^3, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	20	1,033
Нептуний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^4, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	21	1,033
Плутоний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^6, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	22	1,032
Америций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^7, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	23	1,031
Кюрий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^7, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	24	1,03
Берклий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^9, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	25	1,029
Калифорний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{10}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	26	1,028
Эйнштейний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{11}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	27	1,027
Фермий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{12}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	28	1,026
Менделевий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{13}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	29	1,025
Нобелий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{14}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	30	1,024

Қорытылып шығарылған 20-29 теңдіктерді қолдана отырып, периодтық жүйедегі элементтерінің ион радиустарының жаңа мәндері есептелінді. Есептеу нәтижелері 16 – кестеде келтірілген [91,92].

Кесте – 16 Элементтердің ион радиустары

№	Химиялық элементтер	Ион заряды	Ион радиустарының мәндері, Å	Ион радиустары туралы белгілі мәндердің өзгеру аумақтары, Å (әдеби көздерден алынған)
1.	Сутегі	H	1,422	1,36÷1,53[78]
	Сутегі	H ⁺	0,533	-
2.	Гелий	He ⁺	0,355	-
3.	Литий	Li ⁺	0,799	0,6÷0,75[78,89]
4.	Бериллий	Be ⁺²	0,712	0,31÷0,59[78,89]
5.	Бор	B ⁺³	0,666	0,15÷0,41[78,89]
6.	Көміртегі	C ⁺⁴	0,545	0,06÷0,3[78,89]
7.	Азот	N ⁺³	0,233	0,3[89]
8.	Оттегі	O ⁺⁶	0,142	0,1÷0,22[78]
9.	Фтор	F ⁻¹	1,279	1,14÷1,36[78,89,93]
10.	Неон	Ne ⁺⁸	0,095	-
11.	Натрий	Na ⁺¹	1,036	0,95÷1,53[78,89,93]
12.	Магний	Mg ⁺²	0,901	0,65÷1,1 [78,89,93]
13.	Алюминий	Al ⁺³	0,695	0,5÷0,72[78,94]
14.	Кремний	Si ⁺⁴	0,578	0,4÷1,36[78,94]
15.	Фосфор	P ⁺⁵	0,530	0,3÷0,66[78]
16.	Күкірт	S ⁺⁶	0,476	0,26÷0,43[89]
17.	Хлор	Cl ⁺⁷	0,435	0,22÷0,49[78,93]
	Хлор	Cl	1,797	1,67÷1,81[78,89,93]
18.	Аргон	Ar ⁺⁸	0,404	-
19.	Калий	K ⁺¹	1,369	1,33÷1,78[78,89,93]
20.	Кальций	Ca ⁺²	1,184	0,99÷1,48[78,8,94]
21.	Скандий	Sc ⁺³	0,959	0,88÷1,01[93]
22.	Титан	Ti ⁺⁴	0,830	0,56÷0,83[78,93]
23.	Ванадий	V ⁺⁵	0,730	0,49÷0,68[93]
24.	Хром	Cr ⁺⁶	0,656	0,41÷0,81[78,93]
25.	Марганец	Mn ⁺⁷	0,605	0,39÷0,75[78,93]
26.	Темір	Fe ⁺³	0,439	0,63÷0,92[78,93]
27.	Кобальт	Co ⁺⁶	0,380	0,35÷1,04[78,94]
28.	Никель	Ni ⁺²	0,343	0,69÷0,83[78,93]
29.	Мыс	Cu ⁺²	0,985	0,47÷0,98[78,93]
30.	Мырыш	Zn ⁺²	0,810	0,56÷1,10[78,93]
31.	Галлий	Ga ⁺³	0,699	0,6÷0,71[93]
32.	Германий	Ge ⁺⁴	0,612	0,53÷0,67[93]
33.	Мышьяк	As ⁺⁵	0,550	0,46÷0,72[78,93]
34.	Селен	Se ⁺³	0,359	1,15÷1,4[9]3
35.	Бром	Br ⁺⁷	0,383	0,39÷0,62[78,93]
	Бром	Br	1,847	1,82÷1,97[78,89,93]
36.	Криптон	Kr ⁺⁸	0,348	-
37.	Рубидий	Rb ⁺	1,483	1,47÷1,97[78,93]

16 Кестенің жалғасы

38.	Стронций	Sr ⁺²	1,223	1,32÷1,58[93]
39.	Иттрий	Y ⁺³	0,949	1,04[93]
40.	Цирконий	Zr ⁺⁴	0,789	0,73÷1,03[93]
41.	Ниобий	Nb ⁺⁵	0,679	0,62÷0,82[93]
42.	Молибден	Mo ⁺⁶	0,590	0,55÷0,93[78, 93]
43.	Технеций	Tc ⁺⁷	0,537	0,51÷0,7[93]
44.	Рутений	Ru ⁺⁸	0,489	0,5[93]
45.	Родий	Rh ⁺⁵	0,406	0,46[93]
46.	Палладий	Pd ⁺⁴	0,394	0,64÷0,65[89]
47.	Күміс	Ag ⁺	1,089	1,01÷1,26[78,93]
48.	Кадмий	Cd ⁺²	1,008	0,97÷1,24[78,93]
49.	Индий	In ⁺³	0,820	0,76÷1,06[93]
50.	Қалайы	Sn ⁺⁴	0,690	0,65÷0,96[78,93]
51.	Сүрме	Sb ⁺⁵	0,599	0,26÷0,89[78,93]
52.	Теллур	Te ⁺⁶	0,529	0,57÷1,18[93]
53.	Йод	I ⁺⁷	0,482	0,5÷0,77[78,93]
	Йод	I	2,091	2,06÷2,23[78,93]
54.	Ксенон	Xe ⁺⁸	0,441	0,54÷0,62[93]
55.	Цезий	Cs ⁺	1,675	1,65÷2,02[78,93]
56.	Барий	Ba ⁺²	1,382	1,34÷1,75[78,93]
57.	Лантан	La ⁺³	1,125	1,04÷1,51[78,93]
58.	Церий	Ce ⁺³	0,936	1,15÷1,48[94]
59.	Празеодим	Pr ⁺³	0,802	1,13÷1,31[94]
60.	Неодим	Nd ⁺³	0,701	1,12÷1,30[94]
61.	Прометий	Pm ⁺³	0,620	1,11÷1,28[94]
62.	Самарий	Sm ⁺³	0,559	1,09÷1,38[94]
63.	Европий	Eu ⁺³	0,501	1,03÷1,49[94]
64.	Гадолиний	Gd ⁺³	0,466	1,07÷1,24[94]
65.	Тербий	Tb ⁺³	0,429	1,06÷1,23[94]
66.	Диспрозий	Dy ⁺³	0,386	0,03÷1,33[94]
67.	Гольмий	Ho ⁺³	0,371	1,04÷1,26[94,94]
68.	Эрбий	Er ⁺³	0,348	1,03÷1,14[94]
69.	Тулий	Tm ⁺³	0,327	1,02÷1,19[94]
70.	Иттербий	Yb ⁺³	0,309	1,00[94]
71.	Лютеций	Lu ⁺³	0,293	1,00÷1,17[94]
72.	Гафний	Hf ⁺⁴	0,282	0,72÷0,97[94]
73.	Тантал	Ta ⁺⁵	0,272	0,78÷0,88[94]
74.	Вольфрам	W ⁺⁶	0,263	0,56÷0,74[94]
75.	Рений	Re ⁺⁷	0,255	0,52÷0,67[94]
76.	Осмий	Os ⁺⁸	0,248	0,53[94]
77.	Иридий	Ir ⁺⁵	0,228	0,71÷0,82[94]
78.	Платина	Pt ⁺⁴	0,216	0,55÷1,1[78,94]
79.	Алтын	Au ⁺	1,378	0,71÷1,51[78,94]
80.	Сынап	Hg ⁺²	1,112	0,66÷1,28[78,91]
81.	Талий	Tl ⁺³	0,929	0,89÷1,12[94]
82.	Қорғасын	Pb ⁺²	0,809	0,7÷0,86[78]
83.	Висмут	Bi ⁺⁵	0,756	0,74÷1,31[78,92]
84.	Полоний	Po ⁺⁶	0,628	0,61[92]

16 Кестенің жалғасы

1	2	3	4	5
85.	Астат	At ⁺⁷	0,670	0,76[92]
86.	Радон	Rn ⁺⁸	0,540	-
87.	Франций	Fr ⁺	1,669	1,94[93]
88.	Радий	Ra ⁺²	1,566	1,62÷1,84[93]
89.	Актиний	Ac ⁺³	1,177	0,126[93]
90.	Торий	Th ⁺³	1,077	1,08÷1,35[93]
91.	Протактиний	Pa ⁺³	0,979	0,92÷1,09[93]
92.	Уран	U ⁺³	0,801	0,59÷1,00[93]
93.	Нептуний	Np ⁺³	0,740	0,89[93]
94.	Плутоний	Pu ⁺³	0,675	1,14[93]
95.	Америци	Am ⁺³	0,630	0,99÷1,4 [93]
96.	Кюрий	Cm ⁺³	0,586	0,99÷1,1[93]
97.	Беркли	Bk ⁺³	0,548	0,9÷1,1[93]
98.	Калифорний	Cf ⁺³	0,516	0,96 [93]
99.	Эйнштейний	Es ⁺³	0,486	-
100.	Фермий	Fm ⁺³	0,460	-
101.	Менделевий	Md ⁺³	0,437	-
102.	Нобелий	No ⁺³	0,416	-

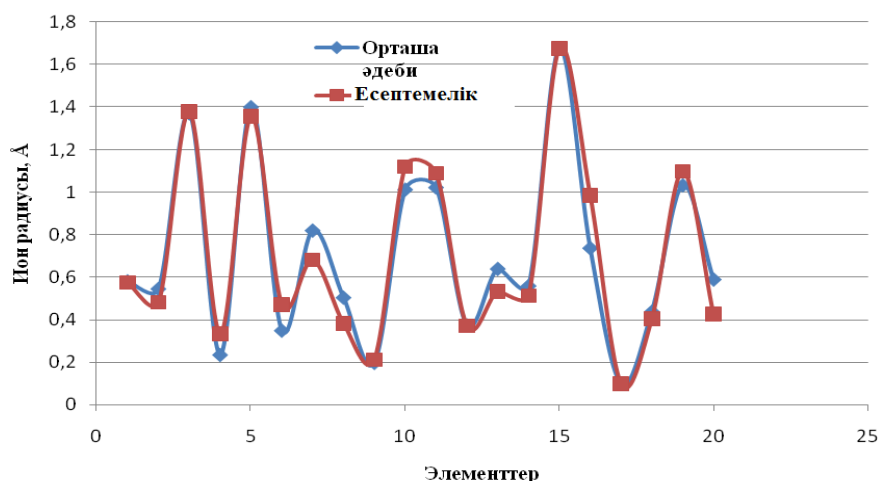
16 – кестеде көрініп тұрғандай табылған элементтердің ион радиустары мәндері бұрынғы белгілі мәліметтер шеңберінде орналасқан. Жаңа есептемелік мәндердің шынайлығына көз жеткізу мақсатында белгілі әдеби мәліметтерден Мелвин-Хьюз (М.Х), Гольдшмидт (Г), Полинг (П), Ингольд (Ин) және Боки (Б) секілді оқымыстылардың анықтаған ион радиустарының орташа мәндерімен салыстырылды. Оның нәтижесі 17 –кесте мен 9 – суретте келтірілген [95].

Кесте – 17 Кейбір химиялық элементтердің ион радиустары өлшемдерінің салыстырмалық нәтижелері

Элементтер	Ион заряды	Ион радиусы, r; 10, нм						
		М.Х	Г	П	Ин	Б	Орташа мәндері	Есептемелік мәндер
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Al	3	0,55	0,57	0,5	0,72	0,57	0,582	0,693
As	5	-	0,46	-	0,71	0,47	0,546	0,551
Au	1	-	1,37	-	1,37	1,37	1,37	1,377
Ba	2	1,395	1,34	1,35	1,53	1,38	1,399	1,382
Bi	5	-	0,74	-	0,98	0,74	0,82	0,756
Br	7	-	-	-	0,62	0,39	0,505	0,383
Ca	2	1,051	0,99	0,99	0,99	1,04	1,012	1,184
Cd	2	0,99	0,97	-	1,14	0,99	1,022	1,008
Cl	7	-	-	-	0,49	0,26	0,375	0,435
Co	6	0,35	0,34	-	-	0,33	0,34	0,38
Cr	6	-	0,52	-	0,81	0,35	0,56	0,656
Cs	1	1,678	1,67	1,69	1,69	1,65	1,675	1,675
Cu	2	0,47	0,72	-	0,96	0,8	0,737	0,985

17 Кестенің жалғасы

1	2	3	4	5	6	7	8	9
F	7	-	-	-	0,1	-	0,1	0,099
Fe	3	0,67	0,64	-	-	0,07	0,439	0,439
Hg	2	0,66	1,1	-	1,25	1,12	1,032	1,112
I	7	-	0,5	-	0,77	0,5	0,59	0,482



Сурет-9 Ион радиустарының орташа және есептемелік мәндері өзгерістері заңдылықтары

17 – кесте мен 9 – суреттен көріп отырғанымыздай, ион радиустарының жаңа мәндерін есептеу нәтижелері бойынша белгілі мәліметтерге жақын және де соңғылардың периодтық жүйе шеңберінде өзгеру заңдылықтарын сақтайтын, бірақ өзіндік сандық нәтижелері бар мәндер алынды.

Сонымен қатар, олардың жоғары дәрежелі дәйектілігі мен шынайылығына көз жеткізу мақсатында, кез-келген элементтің иондық радиустар мәндерін оның алдында немесе одан кейін орналасқан элементтердің белгілі мәндік көрсеткіштерін қолданып, иондық радиустар мәндерінің периодтардағы өсетіндігіне не кемитіндігіне байланысты анықталды. Мысалы, кальцийдің иондық радиусы мәнін есептеуде калий және скандий элементтерінің анықталған ион радиустары мәндері қолданылды. Осы кезде, иондық радиустары мәндерінің (калийдің иондық радиус мәнін қолданғанда) периодтардағы кемитіндігіне байланысты 27,29, ал керісінше олардың (скандийдің иондық радиус мәнін қолданғанда) өсетіндігіне байланысты 24,28 формулаларды қолданып есептелінді.

Осындай есептеулер топтар бойынша да, кез-келген элементтің иондық радиустар мәндерін оның үстінде немесе астында орналасқан элементтердің анықталған иондық радиустары мәндерінің көрсеткіштерін қолданып, олардың топтардағы өсетіндігіне не кемитіндігіне байланысты анықталды. Мысалы үшін, кальцийдің иондық радиусы мәнін есептеуде магний және стронций элементтерінің анықталған ион радиустары мәндері қолданылды. Осы кезде, иондық радиустары мәндерінің (магнийдің иондық радиус мәнін қолданғанда) топтардағы кемитіндігіне байланысты 27,29, ал керісінше олардың

(стронцийдің иондық радиус мәнін қолданғанда) өсетіндігіне байланысты 24,28 формулаларды қолданып есептелінді.

Осы кезде барлықтөрт түрлі есептеулік жағдайларда да, қарастырып отырған элементтің иондық радиустары мәндері бір-біріне толықтама сәйкес. Бұл нәтиже жүргізілген ізденістердің жаңалығы мен қатар жоғары ілімдік ғылыми құндылығы мен маңыздылығына дәлел бола алады.

Сонымен, жүргізілген зерттеулер нәтижелерін ғылыми химиясаласында иондардың радиустарының шынайылығы жоғары мәндерін есептік жолмен анықтауға болатын жаңа шешім деп қарастыруға болады. Жұмыста қолданылған әдістеме Д.И.Менделеевтың периодтық жүйесіндегі барлық элементтердің иондары радиустарының мәндерін есептеп анықтауға мүмкіншілік береді.

Сонымен қатар, ұсынылған иондардың орбиталдық радиустарын анықтаудың жаңа есептік тәсіліне ҚР ӨМ «Ұлттық зияткерлік меншік институты» РМК-ның 2020 жылдың 19 наурызындағы № 8944 шешімімен мемлекеттік құқықтар тізілімінде авторлық құқықпен қорғалатын объектілік мәліметтер ретінде енгізіліп, куәліктендірілді, олардың негізінде Евразиялық патент одағына және ҚР интеллектуалды меншіктеу ұлттық институтына патенттік құжаттар дайындалып жіберілді (қосымша А,Б).

3.3 Химиялық элементтердің меншікті энергетикалық көрсеткіштерін есептеу нәтижелері

Ілімдік зерттеулер негізінде анықталған ион радиустары мәндері негізінде ғылымға белгілі есетемелік жолдармен химиялық элементтер иондарының меншікті энергетикалық көрсеткіштері қайта есептелінді.

Зерттеу нысаны ретінде зарядтау көрсеткіштері әр-түрлі иондар таңдалып, алынды. Олар периодтық жүйедегі жекелеген топтар және периодтар шеңберінде орналасқан элементтер иондар.

G ион зарядының беттік тығыздығын есептеу келесідей теңдеу бойынша есептелінеді [96,97]:

$$G = \frac{Z_i \cdot e}{F}; \quad \text{немесе} \quad G_A = \frac{Z_A \cdot e}{F}; \quad G_K = \frac{Z_K \cdot e}{F}; \quad (32)$$

бұл жерде; Z_A, Z_K – анион мен катион зарядтар саны;

e – электрон заряды, $e = 1,6021892 \cdot 10^{-19}$ Кл;

F – ион бетінің ауданы, $F = 4\pi r_i^2, \text{ \AA}^2$.

r_i – ион радиусы, \AA .

Иондардың анықталған радиусы туралы мәліметтерді пайдаланып, әр ионның меншікті энергиясы төмендегідей есептелді [92]:

$$E = \frac{\pi G^2}{2\varepsilon_0} r^3; \quad \text{немесе} \quad E_K = \frac{\pi G_K^2}{2\varepsilon_0} r_K^3; \quad E_A = \frac{\pi G_A^2}{2\varepsilon_0} r_A^3; \quad (33)$$

бұл жерде; G_A, G_K – анион мен катион зарядының беттік тығыздығы Кл/ $\text{\AA}^2 \cdot 10^{-19}$

ϵ_0 – вакуумдық диэлектрикті өткізгіштік $8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м
 r_A, r_K – анион мен катион радиусы, Å

Ионның мольдік энергиясын есептеу үшін келесі теңдік пайдаланылды:

$$E^{\text{моль}} = E \cdot N_A; \text{ немесе } E_A^{\text{моль}} = E_A \cdot N_A; E_K^{\text{моль}} = E_K \cdot N_A; \quad (34)$$

бұл жерде; E_A, E_K – анион мен катион энергиясы;
 N_A – Авогадро саны, $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹

Әр ионның гидраттық санын есептеу үшін келесі теңдеу пайдаланылады:

$$n_S = \frac{G}{q} = \frac{Z_i \cdot e}{Fq} \quad (35)$$

бұл жерде: q - бір су молекуласына сәйкес келетін ион зарядының беттік меншікті тығыздығы, Кл/Å²;

Есептеу нәтижелері 18,19 – кестелерде келтірілген.

Кесте -18 Тұздар иондарының гидраттық санының зарядтың меншікті беттік тығыздығына тәуелділігі

Иондар атаулары	Ион радиусы, Å	Ион зарядының беттік тығыздығы, Кл/Å ² , 10 ⁹	Ион зарядының меншікті беттік тығыздығының орташаландырылған мәні, Кл/Å ² , 10 ⁹	Иондардың гидраттық саны
Li ⁺	0,799	0,2096	0,04257	4,9236
Na ⁺	1,036	0,1328	0,04257	3,1195
K ⁺	1,369	0,0721	0,04257	1,6936
Rb ⁺	1,483	0,0574	0,04257	1,3483
Cs ⁺	1,675	0,0468	0,04257	1,0993
Co ⁺²	0,72	0,4921	0,04257	11,5598
Ni ⁺²	0,343	0,4709	0,04257	11,0618
Mg ⁺²	0,901	0,4659	0,04257	10,9443
Mn ⁺²	0,605	0,3986	0,04257	9,3634
Fe ⁺³	0,439	0,3841	0,04257	9,0227
Zn ⁺²	0,810	0,3703	0,04257	8,6986
Cd ⁺²	1,008	0,2566	0,04257	6,0277
Cu ⁺²	1,01	0,2501	0,04257	5,8750
Ca ⁺²	1,184	0,2405	0,04257	5,6495
Sr ⁺²	1,223	0,1772	0,04257	4,1625
Pb ⁺²	0,89	0,1464	0,04257	3,4390
Ba ⁺²	1,382	0,1326	0,04257	3,1148
I ⁻¹	2,091	0,0263	0,04257	0,6178
Cl ⁻¹	1,797	0,0389	0,04257	0,9137
F ⁻¹	1,279	0,0721	0,04257	1,6936
Br ⁻¹	1,847	0,0332	0,04257	0,7798

Кесте -19 Иондардың меншікті энергетикалық көрсеткіштері

№	Элементтер атауы	Ион радиусы, $r_i(\text{Å})$	Ион зарядының саны	Ион зарядының беттік тығыздығы, G ($\text{Кл}/\text{Å}^2 \cdot 10^{19}$)	Ион энергиясы, E ($\text{кДж}/\text{ион}$) $\cdot 10^{22}$	Ионның мольдік энергиясы, $E^{\text{моль}}$ ($\text{кДж}/\text{моль}$)
1	2	3	4	5	6	7
1	Сутегі	1,445	1	0,0611	1,9982	12,0292
2	Литий	0,799	1	0,1998	3,6123	21,7462
3	Натрий	1,036	1	0,1188	2,7839	16,7596
4	Калий	1,369	1	0,0681	2,1108	12,7074
5	Мыс	0,985	1	0,1315	2,9316	17,6487
6	Рубидий	1,483	1	0,0580	1,9464	11,7174
7	Күміс	1,089	1	0,1075	2,6476	15,9387
8	Цезий	1,675	1	0,0454	1,7183	10,3444
9	Алтын	1,378	1	0,0672	2,0962	12,6194
10	Берилий	0,712	2	0,5032	16,2135	97,6054
11	Магний	0,901	2	0,3142	12,8098	77,1151
12	Кальций	1,184	2	0,1819	9,7426	58,6507
13	Мырыш	0,81	2	0,3888	14,2516	85,7946
14	Стронций	1,223	2	0,1705	9,4337	56,7911
15	Кадмий	1,008	2	0,2511	11,4559	68,9648
16	Барий	1,382	2	0,1335	8,3453	50,2388
17	Сынап	1,112	2	0,2063	10,3817	62,4979
18	Бор	0,666	3	0,8627	39,003	234,7984
19	Алюминий	0,693	3	0,7968	37,4847	225,6582
20	Скандий	0,959	3	0,4161	27,0899	163,0812
21	Галий	0,694	3	0,7945	37,4302	225,3300
22	Иттрий	0,954	3	0,4205	27,2353	163,9570
23	Индий	0,817	3	0,5733	31,7970	191,4180
24	Лантан	1,125	3	0,3023	23,0828	138,9590
25	Талий	0,935	3	0,4377	27,7807	167,2402
26	Көміртегі	0,533	4	1,7961	86,6560	521,6695
27	Кремний	0,578	4	1,5273	79,9704	481,4223
28	Титан	0,823	4	0,7533	56,1166	337,8222
29	Германий	0,612	4	1,3623	75,4668	454,3103
30	Цирконий	0,789	4	0,8196	58,5317	352,3609
31	Қалайы	0,69	4	1,0717	66,9345	402,9457
32	Гафний	0,282	4	6,4163	163,7846	985,9832
33	Қорғасын	0,809	4	0,7796	57,0881	343,6703
34	Азот	0,154	5	26,8938	468,6222	2821,1058
35	Фосфор	0,533	5	2,2451	135,3971	815,0905
36	Ванадий	0,73	5	1,1968	98,8480	595,0652
37	Мышьяк	0,551	5	2,1008	130,9726	788,4553
38	Ниобий	0,678	5	1,3875	106,4416	640,7785
39	Сурьма	0,599	5	1,7776	120,4772	725,2728

19 Кестенің жалғасы

1	2	3	4	5	6	7
40	Тантал	0,272	5	8,6209	265,3190	1597,2202
41	Висмут	0,756	5	1,1159	95,4492	574,6042
42	Оттегі	0,142	6	37,9575	731,8408	4405,6816
43	Күкірт	0,476	6	3,3780	218,3215	1314,2955
44	Хром	0,656	6	1,7785	158,4075	953,6129
45	Селен	0,359	6	5,9386	289,4729	1742,6267
46	Молибден	0,597	6	2,1474	174,0625	1047,8563
47	Теллур	0,533	6	2,6941	194,9689	1173,7130
48	Вольфрам	0,263	6	11,0653	395,1391	2378,7374
49	Полоний	0,628	6	1,9406	165,4655	996,1021
50	Фтор	0,099	7	91,1070	1428,78	8601,2574
51	Хлор	0,435	7	4,7189	325,1664	1957,5018
52	Марганец	0,605	7	2,4395	233,789	1407,41
53	Бром	0,383	7	6,0872	369,3073	2223,2297
54	Технеций	0,537	7	3,0965	263,4034	1585,6885
55	Иод	0,482	7	3,8435	293,4616	1766,6387
56	Рений	0,255	7	13,7322	554,6987	3339,2862
57	Астат	0,672	7	1,9773	210,4793	1267,0852
58	Гелий	0,035	8	833,0634	5278,574	31777,0161
59	Неон	0,095	8	113,0751	1944,738	11707,3243
60	Аргон	0,404	8	6,2524	457,2924	2752,9002
61	Никель	0,343	2	2,1685	33,6633	202,6534
62	Кобальт	0,38	6	5,3004	273,4793	1646,3453
63	Темір	0,439	3	1,9857	59,1803	356,2654
64	Криптон	0,348	8	8,4266	530,8831	3195,9160
65	Палладий	0,394	4	3,2869	117,2244	705,6909
66	Родий	0,406	3	2,3216	63,9895	385,2172
67	Рутений	0,489	8	4,2677	377,8076	2274,4019
68	Ксенон	0,441	8	5,2473	418,9324	2521,9729
69	Платина	0,216	4	10,9364	213,8289	1287,2499
70	Иридий	0,228	5	12,2694	316,5247	1905,4785
71	Осмий	0,248	8	16,5924	767,9498	4623,0576
72	Радон	0,538	8	3,5257	343,395	2067,2376

3.4 Кристалдық тор энергиясын есептеу нәтижелері

Жоғарыда, жұмыстың 1.3 бөлімде келтірілгендей, тұздардың кристалдық тор энергия шамаларын анықтаудың бірқатар әдістері белгілі. Олардың арасында, тұздардың кристалдық тор энергия шамаларының ғылыми қолданбалық мәнді есептік нәтижелерін, Борн, Капустинский және Ферсман [25] әдістерімен анықтауға болады. Олар бойынша анықталған тұздардың кристалдық тор энергия шамаларының есептік мәндерінде 5-15% аралығында айырмашылық бар екенін байқауға болады. Осы себепті, тұздардың кристалдық тор энергия шамаларын анықтаудың жаңа жолдарын қарастыру мәселесі туындауда. Осыған байланысты тұздардың кристалдық тор энергиясы

шамалары туралы белгілі есептік мәліметтерді саралап, талдай отырып, диссертациялық жұмыстың осы бөлімінде төмендегідей түрдегі жаңа есептік теңдік алынды.

$$U_n = (E_K^{\text{моль}} \cdot E_A^{\text{моль}})_n \cdot K_1 \cdot (K_2)_n^{n-1}; \quad (36)$$

мұндағы: n – қарастырылған тұздар тобы құрамындағы тұздар иондарының $(E_K^{\text{моль}} \cdot E_A^{\text{моль}})$ көбейтіндісі мәндерінің кему тәртібімен орналастырылған тұздар тізбегіндегі есептік тұздың реттік нөмірі;

$E_A^{\text{моль}}$ – есептік тұз анионының мольдік энергиясы, кДж/моль;

$E_K^{\text{моль}}$ – есептік тұз катионының мольдік энергиясы, кДж/моль;

K_1 – қарастырылған топ тұздары үшін тұрақты шама;

K_2 – есептік тұздардың өзіндік жеке тұрақтысы.

20 - кестеде әрбір топ тұздары құрамдастары үшін $E_K^{\text{моль}}, E_A^{\text{моль}}, K_1, K_2$ табылған мәндері, сондай-ақ авторлық жаңа әдіс бойынша олардың кристалдық тор энергия шамаларының есептік нәтижелері келтірілген.

Кесте - 20 Тұздар топтары үшін $E_K^{\text{моль}}, E_A^{\text{моль}}, K_1, K_2$ табылған мәндері және олардың кристалдық тор энергия шамалары

Тұз тобындағы тұздың реттік нөмірі	Тұздар	Катионының мольдік энергиясы, $E_K^{\text{моль}}$, кДж/моль	Анионының мольдік энергиясы, $E_A^{\text{моль}}$, кДж/моль	K_1	K_2	Тұздардың кристалдық тор энергиясы U , кДж/моль
1	2	3	4	5	6	7
Хлоридтер						
1	LiCl	21,74	9,43	4,01	1,0	822
2	NaCl	16,76	9,43	4,0	1,1	697
3	AgCl	15,93	9,43	4,0	1,2	729
4	KCl	12,71	9,43	4,0	1,3	639
5	RbCl	11,71	9,43	4,0	1,4	646
6	CsCl	10,34	9,43	4,0	1,6	629
Фторидтер						
1	LiF	21,74	13,59	3,5	1,0	1034
2	NaF	16,76	13,59	3,5	1,1	877
3	AgF	15,93	13,59	3,5	1,2	917
4	KF	12,71	13,59	3,5	1,3	804
5	RbF	11,71	13,59	3,5	1,4	813
6	CsF	10,34	13,59	3,5	1,6	792
Бромидтер						
1	LiBr	21,74	9,11	4,1	1,0	814
2	NaBr	16,76	9,11	4,1	1,1	690
3	AgBr	15,93	9,11	4,1	1,2	722
4	KBr	12,71	9,11	4,1	1,3	639

20 Кестенің жалғасы

1	2	3	4	5	6	7
5	RbBr	11,71	9,11	4,11	1,46	626
6	CsBr	10,34	9,11	4,11	1,58	612
Иодидтер						
1	LiI	21,74	13,59	2,52	1,00	745
2	NaI	16,76	13,59	2,52	1,10	631
3	AgI	15,93	13,59	2,52	1,21	660
4	KI	12,71	13,59	2,52	1,35	588
5	RbI	11,71	13,59	2,52	1,46	586
6	CsI	10,34	13,59	2,52	1,61	570
Хлоридтер						
1	ZnCl ₂	85,79	9,43	3,06	1,00	2475
2	MgCl ₂	77,11	9,43	3,06	1,07	2380
3	CdCl ₂	68,96	9,43	3,06	1,16	2308
4	CaCl ₂	58,65	9,43	3,06	1,24	2098
5	SrCl ₂	56,79	9,43	3,06	1,31	2146

20 – кестеден көріп отырғандай, жаңа есептік теңдеудің қолданысында анықталған тұздар тобының кристалдық тор энергия шамалары Капустинский және Ферсман әдістерімен анықталған мәндерге сәйкес реттікте, олар белгілі мәндер алшақтығы шеңберінен шықпайды. Оны 21 – кестедегі мәліметтерден көруге болады.

Кесте – 21 Тұздардың кристалдық тор энергия шамаларының салыстырмалы мәндері[73].

Тұздар	Кристалдық тор энергиясы шамалары, кДЖ/моль		
	Ферсман теңдеуі бойынша	Капустинский теңдеуі бойынша	Авторлық теңдеу бойынша
1	2	3	4
LiCl	969	842	822
NaCl	815	759	679
AgCl	790	746	728
KCl	689	680	639
RbCl	659	656	646
CsCl	618	620	630
LiF	1089	1035	1034
NaF	936	929	877
AgF	910	909	917
KF	810	812	804
RbF	780	779	813
CsF	738	729	792
LiBr	961	813	814

21 Кестенің жалғасы

1	2	3	4
NaBr	807	746	690
AgBr	782	732	722
KBr	681	669	642
RbBr	651	646	640
CsBr	610	611	612
LiI	927	745	745
NaI	733	688	631
AgI	748	676	660
KI	648	623	587
RbI	617	602	585
CsI	576	571	570
ZnCl ₂	3241	2479	2476
MgCl ₂	2974	2392	2380
CdCl ₂	2722	2301	2308
CaCl ₂	2406	2165	2099
SrCl ₂	2349	2137	2146
BaCl ₂	3929	2030	2029

Сонымен, тұздардың кристалдық тор энергия шамаларын анықтаудың жаңа авторлық есептік тәсілі дайындалды. Жаңа тәсіл бойынша анықталған тұздар кристалдық тор энергия шамалары мәндері ғылыми іс-тәжірибеде бүгінде қолданыста жүрген тәсілдермен – Борн, Капустинский және Ферсман теңдеулері қолданысында анықталған нәтижелерімен бірдей реттікте болып, белгілі алшақтық айырмашылығы шеңберінен шықпайды. Бұл дегеніміз, ұсынылған тұздардың кристалдық тор энергия шамаларын есептеудің авторлық тәсілінің жаңалығына және ғылыми құндылығына куәландырады. Аталған тұжырымның нақты дәлелі тұздардың кристалдық тор энергия шамасын анықтау тәсіліне ҚР ӘМ «Ұлттық зияткерлік меншік институты» РМК-ның 6 сәуір 2020 жылғы № 9147 шешімімен мемлекеттік құқықтар тізіліміне авторлық құқықпен қорғалатын объектілер мәліметтерін енгізіу туралы куәлігі болып табылады (қосымша А).

Үшінші тарау бойынша қорытынды

1. Атом мен ионның электрондық құрылыстарын, ондағы элементтік бөлшектердің арасындағы тартылыс, тебіліс, ортадан тепкіш күштерді, элементтік бөлшектердің кванттық қасиеттерін, атомдар мен иондардың қасиеттерінің химиялық элементтердің периодтық жүйесі шеңберінде заңды өзгеру заңдылықтарын, олардың өлшемдері жайлы белгілі мәліметтер мен қолданысқа енгізілген тәсілдер мен әдістер туралы тұжырымдар мен нәтижелерді ескере отырып, атомдар мен иондардың орбиталдық радиустарын анықтауға арналған жаңа тәсіл ұсынылды.

2. Атомдар мен иондардың орбиталдық радиустарының шынайылығы жоғары жаңа авторлық нәтижелері қазіргі кезге дейінгі ғылымда ұсынылған белгілі нәтижелерді салыстармалы терең және жан-жақты талдау арқылы нақты дәйектелініп, мемлекеттік құқықтар тізілімінде авторлық құқықпен қорғалатын объектілер мәліметтері ретінде енгізу туралы куәліктер алынды.

3. Анықталған тұздар иондарының орбиталдық радиустары қолданысында жеке иондық бөлшектердің меншікті энергетикалық көрсеткіштері мәндері есептелінді. Минералды тұздардың кристалдық тор энергия шамаларының галургиялық технология үшін аса құнды көрсеткіш екені ескеріле отырылып, кристалдық тор энергия шамаларын есептеудің жаңа тәсілі табылды.

4. Тұздардың кристалдық тор энергиясы шамалары ұсынылған тәсіл бойынша қайта есептелініп, олар әдеби белгілі мәліметтермен салыстармалы дәйектелініп, мемлекеттік құқықтар тізіліміне авторлық құқықпен қорғалатын объектілер мәліметтерін енгізіу туралы куәлігі алынды.

4 СУЛЫ-ТҰЗДЫ ЖҮЙЕЛЕРДІҢ ФИЗИКА - ХИМИЯЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІНІҢ ТҰЗДАРДЫҢ КРИСТАЛДЫҚ ТОР ЭНЕРГИЯ ШАМАЛАРЫНА ТӘУЕЛДІ ӨЗГЕРУ ЗАҢДЫЛЫҚТАРЫ

Химиялық технологияда қолданыста болатын ерітінділердің физика-химиялық қасиеттерінің өзгерістері оларды құрайтын заттар: еріген зат, еріткіш және де түзілетін жаңа заттардың қасиеттеріне тікелей байланысты болады.

Сулы-тұзды жүйелер еріген құрамдастардан және еріткіштерден тұрады. Олардан сулы ортада гидратталған бөлшектер құралады. Олар төменгі шоғырлы ерітінді құрамында бір-бірімен мүлдем байланыспайды деуге болады, ал керісінше жоғарлы шоғыры ерітінділердің құрамында олар өзара әсерлесе алады.

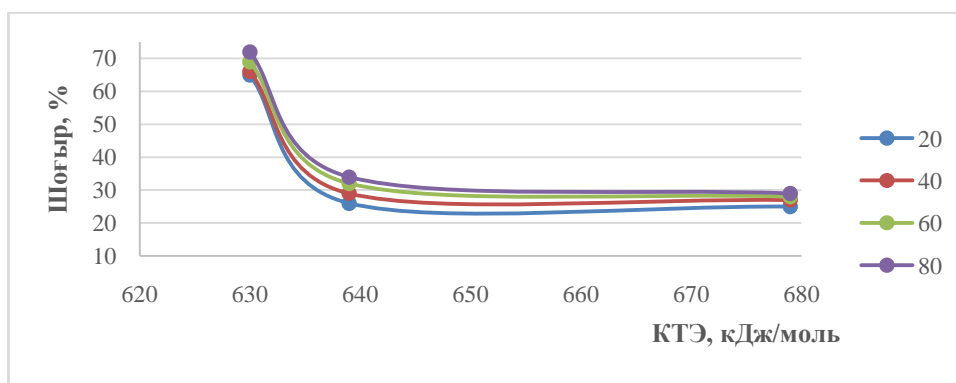
Қазіргі кезде сулы-тұзды жүйелер құрамдастары олардың физика-химиялық қасиеттеріне әсер етуі заңдылықтары ғылыми тұрғыда толығымен айқындалмады. Осындай зерттеулерге қатысты жасалған белгілі ойлар мен көзқарастар санды дәлелденбеген және бір-бірімен қарама –қайшылықтарда [98,99].

Бүгінгі күнге дейін бейорганикалық заттардың химиялық технологиясы саласында қол жеткізілген ғылыми, ғылыми-практикалық жетістіктер сулы – тұзды жүйелердің негізгі физика-химиялық қасиеттері –шоғырлық, тұтқырлық, тығыздық, жылу өткізгіштік және жылу сиымдылық өзгерістері заңдылықтарының толығымен зерттелмегенін айқындайды.

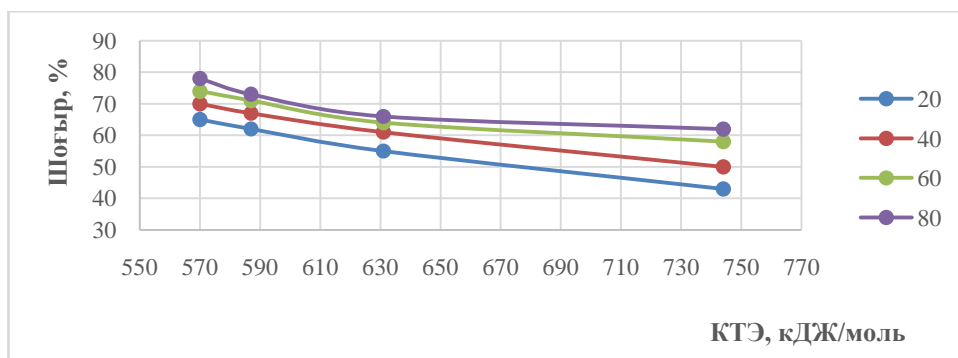
4.1 Сулы-тұзды жүйелердегі шоғырлық өзгерістері заңдылықтары

Ғылыми жұмыстың бұл бөлімінде сулы-тұзды жүйелер шоғырларының тұздардың кристаллдық тор энергия (КТЭ) шамасына қатысты зерттеу мақсаты қойылды.

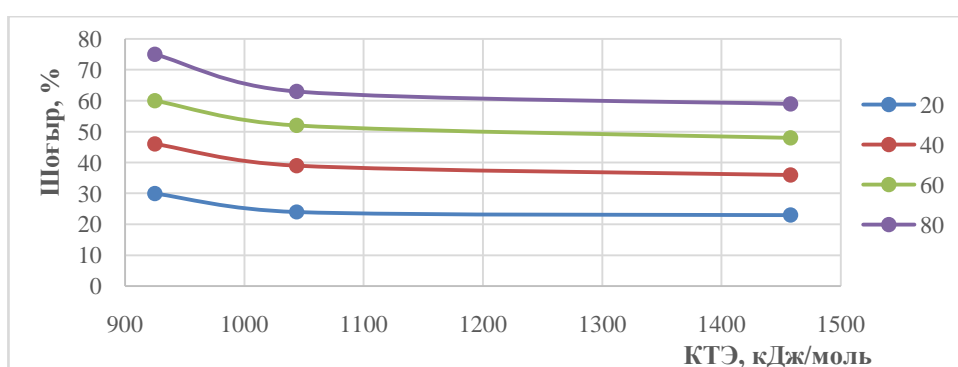
Бөлімде зерттеу нысандары ретінде– натрий, калий, цезий хлоридтерінің; натрий, калий, цезий, литий иодидтерінің; натрий, калий, рубидий нитраттарының; кобальт, никель, мыс, мырыш сульфаттарының; натрий, калий, цезий бромидтерінің сулы-тұзды жүйелері таңдалып, зерттеулер нәтижелері 10-14 – суреттерде келтірілді.



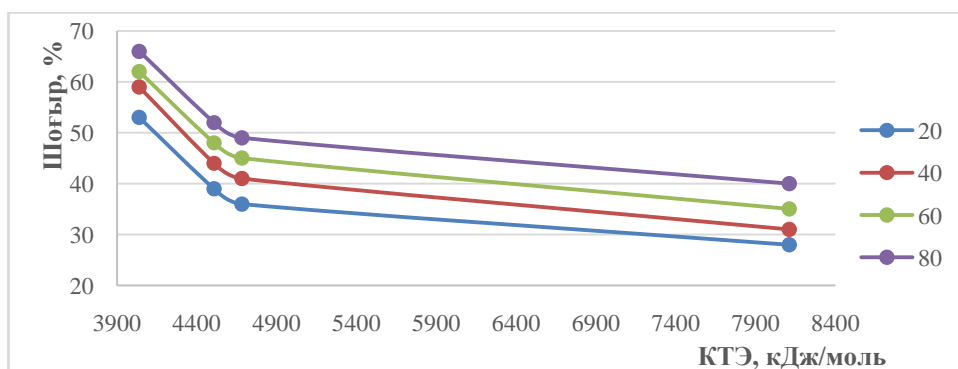
Сурет-10 Натрий, калий, цезий хлоридтері шоғырларының әр түрлі температурада КТЭ шамаларына тәуелділігі



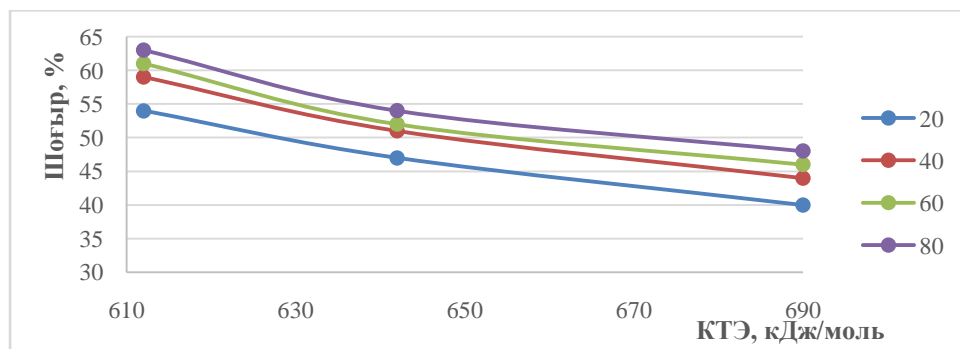
Сурет-11 Натрий, калий, цезий, литий иодиттері шоғырларының әр түрлі температурада КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет-12 Натрий, калий, рубидий нитраттары шоғырларының әр түрлі температурада КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет-13 Кобальт, никель, мыс, мырыш сульфаттары шоғырларының әр түрлі температурада КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет-14 Натрий, калий, цезий бромидтері шоғырларының әр түрлі температурада КТЭ шамаларына тәуелділігі

10 – 14 суреттерден көрінгендей:

1. NaCl -H₂O, KCl -H₂O, CsCl -H₂O сулы- тұзды жүйелердің шоғырлары (C, %) тұздардың КТЭ шамалары (U, кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{array}{l} (20^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 0,0879U^2 - 115,91U + 38191 \\ (40^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 0,0829U^2 - 109,29U + 36021 \\ (60^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 0,0819U^2 - 107,99U + 35613 \\ (80^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 0,0836U^2 - 110,33U + 36394 \end{array} \right\} \quad (37)$$

2. NaI -H₂O, KI -H₂O, CsI-H₂O, LiI-H₂O сулы- тұзды жүйелердің шоғырлары (C, %) тұздардың КТЭ шамалары (U, кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{array}{l} (20^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 0,0003U^2 - 0,5627U + 277,89 \\ (40^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 0,0003U^2 - 0,4926U + 257,11 \\ (60^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 0,0006U^2 - 0,9303U + 397,26 \\ (80^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 0,0009U^2 - 1,3052U + 520,99 \end{array} \right\} \quad (38)$$

3. NaNO₃-H₂O, KNO₃-H₂O, RbNO₃-H₂O сулы- тұзды жүйелердің шоғырлары (C, %) тұздардың КТЭ шамалары (U, кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{array}{l} (20^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 9\text{E-}05U^2 - 0,2278U + 163,61 \\ (40^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 1\text{E-}04U^2 - 0,2494U + 193,86 \\ (60^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 0,0001U^2 - 0,2799U + 226,48 \\ (80^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 0,0002U^2 - 0,4377U + 333,48 \end{array} \right\} \quad (39)$$

4. CuSO₄-H₂O, ZnSO₄-H₂O, CoSO₄-H₂O, NiSO₄-H₂O сулы- тұзды жүйелердің шоғырлары (C, %) тұздардың КТЭ шамалары (U, кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{array}{l} (20^{\circ}\text{C үшін}) \quad C = 6\text{E-}06U^2 - 0,08U + 276,74 \end{array} \right\}$$

$$\begin{array}{ll}
(40^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) & C = 6\text{E-}06\text{U}^2 - 0,0841\text{U} + 294,73 \\
(60^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) & C = 6\text{E-}06\text{U}^2 - 0,0788\text{U} + 283,09 \\
(80^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) & C = 6\text{E-}06\text{U}^2 - 0,0794\text{U} + 288,42
\end{array} \quad (40)$$

5. KBr-H₂O, NaBr-H₂O, CsBr-H₂O сулы- тұзды жүйелердің шоғырлары (C, %) тұздардың КТЭ шамалары (U, кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\begin{array}{ll}
(20^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) & C = 0,0011\text{U}^2 - 1,6401\text{U} + 637,56 \\
(40^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) & C = 0,0015\text{U}^2 - 2,2093\text{U} + 830,87 \\
(60^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) & C = 0,0022\text{U}^2 - 3,1135\text{U} + 1126,1 \\
(80^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) & C = 0,0022\text{U}^2 - 3,1135\text{U} + 1128,1
\end{array} \quad (41)$$

Жоғарыда келтірілген, нәтижелер бойынша төмендегідей қорытындылар жасауға болады:

а) Тұздардың КТЭ шамасының өсуімен сулы-тұзды жүйелердің шоғыры кемиді.

б) 37-41 формулалардан көрінгендей, қарастырылып отырған сулы-тұзды жүйелердің шоғырларының тұздардың КТЭ шамаларына тәуелділігі бірыңғай сипатты өзгеріп, оларға ортақ екі дәрежелі полиномиялық (42) тәуелділікпен сипатталады.

$$C = aU^2 - bU + c \quad (42)$$

мұндағы: U – тұздардың кристалдық тор энергиясы шамасы, кДж/моль

a, b, c – тұрақты сандар. Олардың тұздар топтары үшін аралық мәндері 22 – кестеде келтірілген.

Кесте-22 a, b, c тұрақты сандарының аралық мәндері

Тұздар	a	b	c
Хлоридтер	0,00819 – 0,0879	107,99 – 115,91	35613 – 38191
Иодидтер	0,0003 – 0,0009	0,4926 – 1,3052	257,4 – 529,99
Нитраттар	9E-0,5 – 0,0002	0,2278 – 0,4377	163,61 – 333,48
Сульфаттар	6E-0,6	0,0788 – 0,0841	276,74 – 294,73
Бромидтер	0,0011 – 0,0022	1,6401 – 3,1135	637,56 – 1128,1

с) 10 – 14 – суреттен көрінгендей, қарастырылған тұздар шоғырлары хлоридтер үшін CsCl>KCl>NaCl, иодидтер үшін LiI>KI>NaI>CsI, нитраттар үшін RbNO₃>KNO₃>NaNO₃, сульфаттар үшін CuSO₄>ZnSO₄>CoSO₄>NiSO₄, бромидтер үшін CsBr>NaBr>KBr реттілік бойынша орналасады. Аталған реттілік өзгерісі әр топ үшін қарастырылған тұздардың КТЭ шамалары өзгерісіне кері, яғни CsCl<KCl<NaCl, иодидтер үшін CsI<NaI<KI<LiI, нитраттар үшін RbNO₃<KNO₃<NaNO₃, сульфаттар үшін CuSO₄<ZnSO₄<CoSO₄<NiSO₄, бромидтер үшін CsBr<NaBr<KBr болады. Бұл дегеніміз тұздардың КТЭ шамасы өсуінде, шоғырлардың кемуі байқалады. Бұл тұжырым, хлоридтер

мысалында, 40⁰С температурада 23 – кестедегі мәліметтер бойынша нақтыланды.

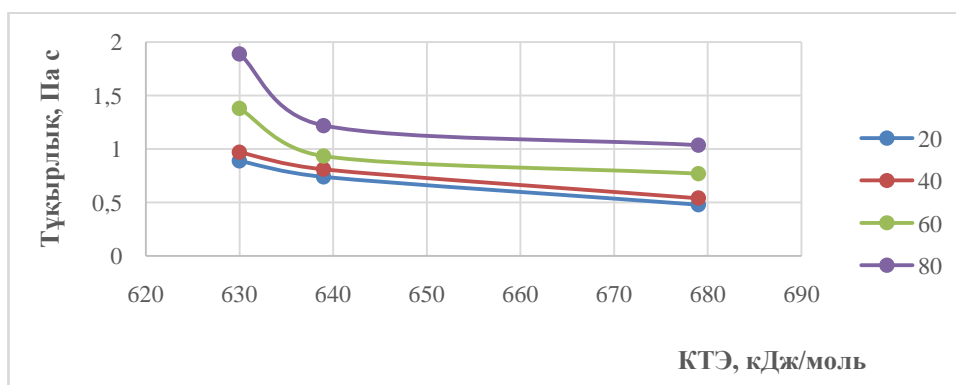
Кесте -23 Хлоридтер тұздарының КТЭ шамаларының шоғырға қатысты өзгеруі

№	Тұздар	Температура, °С	Шоғыры, С (%)	Кристалды тор энергия шамасы, U (кДж/моль)
1	CsCl	40	66	629
2	KCl	40	29	639
3	NaCl	40	27	697

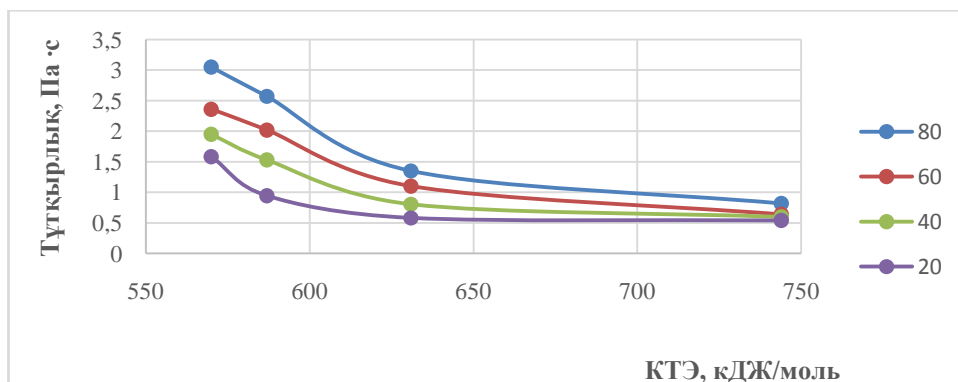
4.2 Сулы-тұзды жүйелердің тұтқырлық өзгерістері заңдылықтары

Ғылыми зерттеу жұмысының бұл бөлімінде сулы-тұзды жүйелердің тұтқырлық қасиеттері тұздардың КТЭ шамасына қатысты зерттеу мақсаты қойылды.

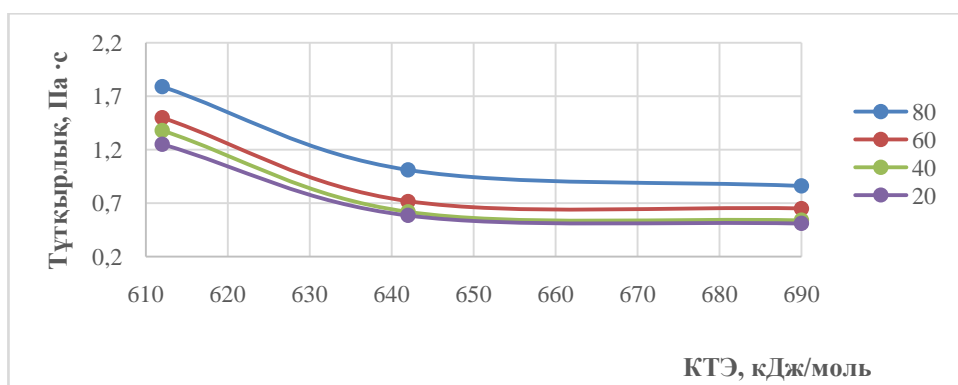
Бөлімде зерттеу нысандары ретінде қарастырылған 1-1, 1-2 типті сулы – тұзды жүйелердің тұтқырлық өзгерістері графикалық түрде өңделді. Зерттеулер NaCl -H₂O, KCl -H₂O, CsCl -H₂O, LiI - H₂O, NaI - H₂O, KI -H₂O, CsI -H₂O, NaBr - H₂O, KBr-H₂O, CsBr -H₂O, NaNO₃ -H₂O, RbNO₃ -H₂O, KNO₃ -H₂O, CoSO₄-H₂O, NiSO₄-H₂O, CuSO₄-H₂O жүйелерінде әр түрлі шоғырлы ерітінділерді қолданылып жүргізілді. Нәтижелері 15-19 суреттерде келтірілген. Анықталған заңдылықтардың графикалық нәтижелері компьютерлік бағдарламалар пайдаланылып полиномиялық байланыстар түрінде өрнектелді.



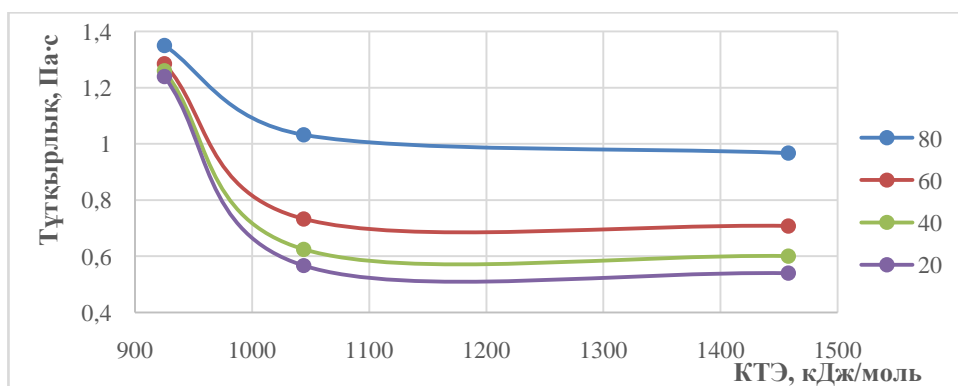
Сурет -15 Натрий, калий, цезий хлоридтері тұтқырлықтарының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



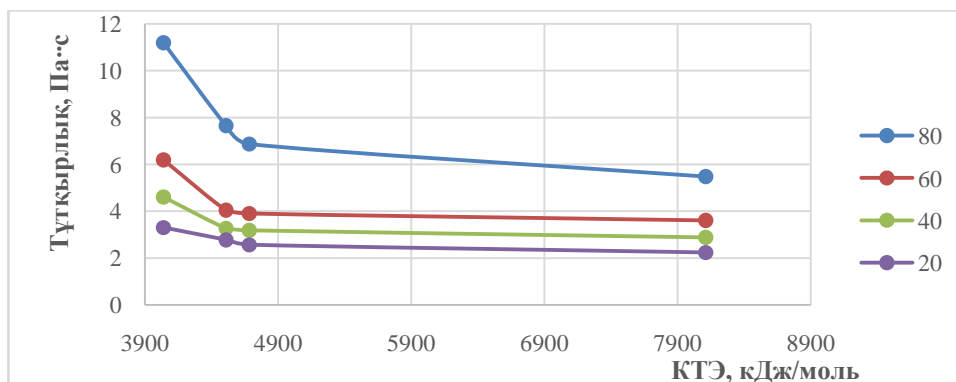
Сурет -16 Натрий, калий, цезий, литий иодидтері тұтқырлықтарының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет -17 Натрий, калий, цезий бромидтері тұтқырлықтарының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет -18 Натрий, калий, рубидий нитраттары тұтқырлықтарының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет -19 Кобальт, никель, мыс, мырыш сульфаттары тұтқырлықтарының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі

15-19 суреттердегі мәліметтер көрсеткендей:

1. NaCl -H₂O, KCl -H₂O, CsCl -H₂O сулы- тұзды жүйелердің тұтқырлығы (η , Па·с) тұздардың КТЭ шамалары (U ,кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \eta &= 0,0002U^2 - 0,28U + 94,916 && (20^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 0,0002U^2 - 0,3034U + 102,77 && (40^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 0,0009U^2 - 1,2268U + 406,05 && (60^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 0,0014U^2 - 1,8833U + 622,61 && (80^\circ\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

2. LiI - H₂O, NaI - H₂O, KI - H₂O, CsI - H₂O сулы- тұзды жүйелердің тұтқырлығы (η , Па·с) тұздардың КТЭ шамалары (U ,кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \eta &= 9\text{E-}05U^2 - 0,126U + 43,447 && (20^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 1\text{E-}04U^2 - 0,1353U + 47,507 && (40^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 1\text{E-}04U^2 - 0,1352U + 48,53 && (60^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 0,0001U^2 - 0,1884U + 67,133 && (80^\circ\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

3. NaBr -H₂O, KBr-H₂O, CsBr -H₂O сулы- тұзды жүйелердің тұтқырлығы(η , Па·с) тұздардың КТЭ шамалары (U ,кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \eta &= 0,0003U^2 - 0,3534U + 118,6 && (20^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 0,0003U^2 - 0,4058U + 136,1 && (40^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 0,0003U^2 - 0,4224U + 141,62 && (60^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 0,0003U^2 - 0,3938U + 132,93 && (80^\circ\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

4. NaNO₃-H₂O, RbNO₃-H₂O, KNO₃-H₂O сулы-тұзды жүйелердің тұтқырлығы (η , Па·с) тұздардың КТЭ шамалары (U ,кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \eta &= 1E-05U^2 - 0,0263U + 16,6 && (20^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 0,1E-05U^2 - 0,0248U + 15,759 && (40^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 9E-06U^2 - 0,0216U + 13,871 && (60^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 5E-06U^2 - 0,012U + 8,3791 && (80^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

5. $\text{CoSO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NiSO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{CuSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ сулы-тұзды жүйелердің тұтқырлығы (η , Па·с) тұздардың КТЭ шамалары (U , кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \eta &= 3E-07U^2 - 0,0033U + 12,613 && (20^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 6E-07U^2 - 0,0072U + 24,561 && (40^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 9E-07U^2 - 0,0117U + 38,632 && (60^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \eta &= 2E-06U^2 - 0,0207U + 68,924 && (80^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (47)$$

Жоғарыда келтірілген, нәтижелер бойынша төмендегідей қорытындылар жасауға болады:

- Тұздардың КТЭ шамасының жоғарылауымен сулы-тұзды жүйелердің тұтқырлығы төмендейді.
- 43-47 формулалардан көрінгендей, қарастырылып отырған сулы-тұзды жүйелердің тұтқырлығының тұздар КТЭ шамаларына тәуелділігі бірыңғай сипатты өзгеріп, оларға ортақ екі дәрежелі полиномиялық (48) тәуелділікпен сипатталады.

$$\eta = aU^2 - bU + c \quad (48)$$

мұндағы: U – тұздардың кристалдық тор энергиясы шамасы, кДж/моль

a, b, c – тұрақты сандар. Олардың тұздар топтары үшін аралық мәндері 24 – кестеде келтірілген.

Кесте -24 a, b, c тұрақты сандарының аралық мәндері

Тұздар	a	b	c
Хлоридтер	0,0002 – 0,0014	0,28 – 1,8833	91,916 – 622,61
Иодидтер	9E-05 – 0,0001	0,126 – 0,1884	43,447 – 67,133
Бромидтер	0,0003	0,3534 – 0,4224	118,6 – 141,62
Нитраттар	9E-06 – 1E-05	0,12 – 0,0263	8,3791 – 16,6
Сульфаттар	9E-07 – 2E-06	0,0033 – 0,0207	12,613 – 68,924

с) 15-19 суреттен көрінгендей, қарастырылған тұздар тұтқырлықтары хлоридтер үшін $\text{NaCl} < \text{KCl} < \text{CsCl}$, иодидтер үшін $\text{CsI} < \text{NaI} < \text{KI} < \text{LiI}$, бромидтер үшін $\text{NaBr} < \text{KBr} < \text{CsBr}$, нитраттар үшін $\text{NaNO}_3 < \text{KNO}_3 < \text{RbNO}_3$, сульфаттар үшін $\text{ZnSO}_4 < \text{CuSO}_4 < \text{NiSO}_4 < \text{CoSO}_4$ реттілік бойынша орналасады. Аталған реттілікөзгерісі әр топ үшін қарастырылған тұздардың КТЭ шамалары өзгерістеріне кері, яғни $\text{NaCl} > \text{KCl} > \text{CsCl}$, иодидтер үшін $\text{CsI} > \text{NaI} > \text{KI} > \text{LiI}$,

бромидтер үшін $\text{CsBr} < \text{KBr} < \text{NaBr}$, нитраттар үшін $\text{NaNO}_3 > \text{KNO}_3 > \text{RbNO}_3$, сульфаттар үшін $\text{ZnSO}_4 > \text{CuSO}_4 > \text{NiSO}_4 > \text{CoSO}_4$ болады. Бұл дегеніміз тұздардың КТЭ шамасының артуында, тұтқырлықтың кемуі байқалады. Бұл тұжырым, иодиттер мысалында, 40°C температурада төмендегі 25 – кесте мәліметтері бойынша нақтыланды.

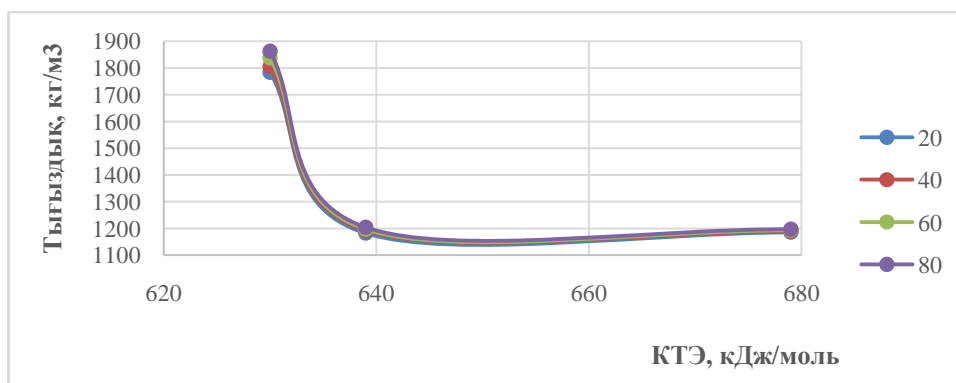
Кесте-25 Иодидтер тұздарының КТЭ шамаларының тұтқырлыққа қатысты өзгеруі

№	Тұздар	Температура, $^\circ\text{C}$	Тұтқырлық, (Па·с)	Кристалды тор энергия шамасы, U (кДж/моль)
1	LiI	40	2,36	570
2	NaI	40	2,219	587
3	KI	40	0,746	631
4	CsI	40	0,641	744

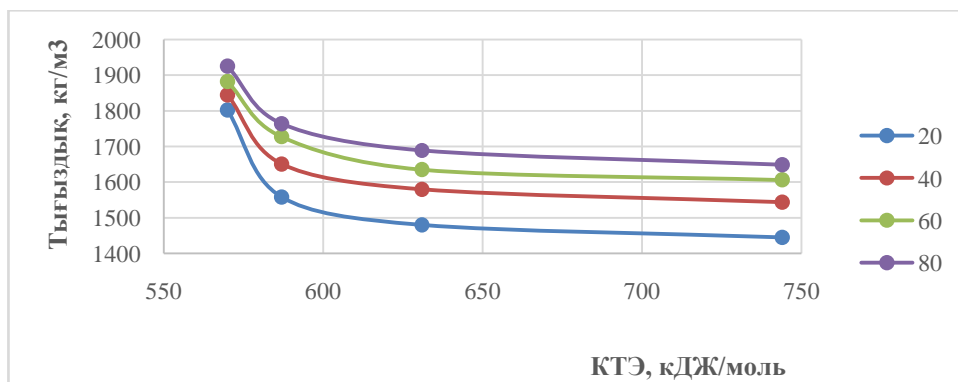
4.3 Сулы-тұзды жүйелердің тығыздық өзгерістері заңдылықтары

Диссертацияның бұл бөлімінде сулы-тұзды жүйелердің тығыздығы тұздардың КТЭ шамасына қатысты зерттеу мақсаты қойылған.

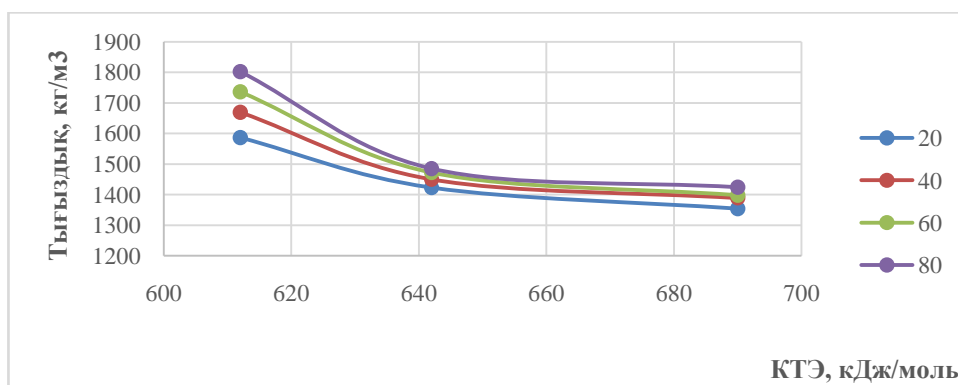
Зерттеу нысандары ретінде қарастырылған 1-1, 1-2 типті сулы –тұзды жүйелердің тығыздық өзгерістері графикалық түрде өңделді. Зерттеулер $\text{NaCl} - \text{H}_2\text{O}$, $\text{KCl} - \text{H}_2\text{O}$, $\text{CsCl} - \text{H}_2\text{O}$, $\text{LiI} - \text{H}_2\text{O}$, $\text{NaI} - \text{H}_2\text{O}$, $\text{KI} - \text{H}_2\text{O}$, $\text{CsI} - \text{H}_2\text{O}$, $\text{NaBr} - \text{H}_2\text{O}$, $\text{KBr} - \text{H}_2\text{O}$, $\text{CsBr} - \text{H}_2\text{O}$, $\text{NaNO}_3 - \text{H}_2\text{O}$, $\text{RbNO}_3 - \text{H}_2\text{O}$, $\text{KNO}_3 - \text{H}_2\text{O}$, $\text{CoSO}_4 - \text{H}_2\text{O}$, $\text{NiSO}_4 - \text{H}_2\text{O}$, $\text{ZnSO}_4 - \text{H}_2\text{O}$, $\text{CuSO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ жүйелерін қолданылып жүргізілді.



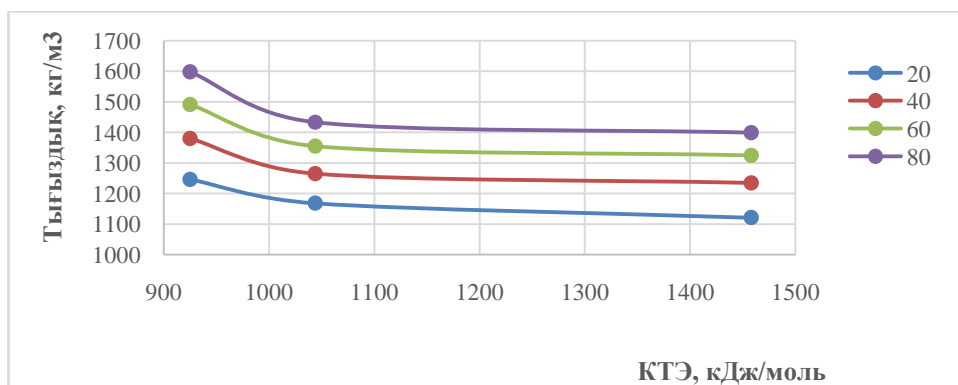
Сурет – 20 Натрий, калий, цезий хлоридтері тығыздықтарының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



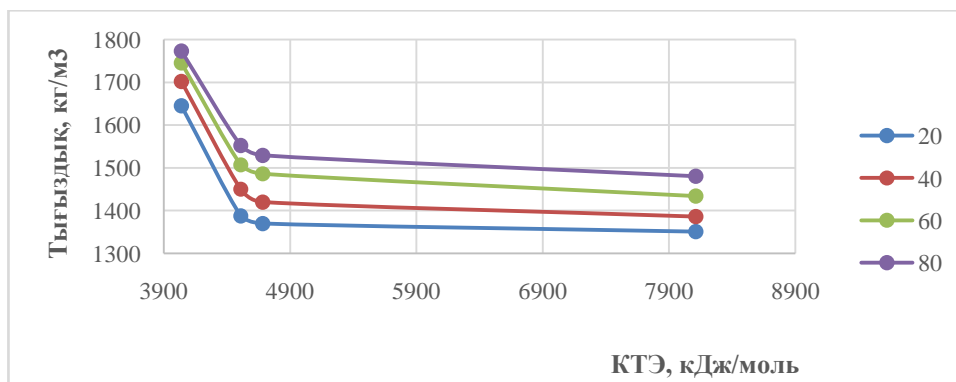
Сурет – 21 Натрий, калий, цезий, литий иодидтері тығыздықтарының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет – 22 Натрий, калий, цезий бромидтері тығыздықтарының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет – 23 Натрий, калий, рубидий нитраттары тығыздықтарының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет – 24 Кобальт, никель, мыс, мырыш сульфаттары тығыздықтарының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі

20 – 24 – суреттерге байланысты:

1. NaCl -H₂O, KCl -H₂O, CsCl -H₂O сулы-тұзды жүйелердің тығыздығы (ρ , кг/м³) тұздардың КТЭ шамалары (U ,кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \rho &= 1,3666U^2 - 1801,1U + 594080 \quad (20^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 1,3885U^2 - 1830,1U + 603680 \quad (40^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 1,4492U^2 - 1910,2U + 630044 \quad (60^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 1,4908U^2 - 1965U + 648128 \quad (80^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (49)$$

2. LiI - H₂O, NaI -H₂O, KI-H₂O, CsI-H₂O сулы-тұзды жүйелердің тығыздығы (ρ , кг/м³) тұздардың КТЭ шамалары (U ,кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \rho &= 0,0283U^2 - 38,886U + 14722 \quad (20^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,0229U^2 - 31,597U + 12364 \quad (40^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,0217U^2 - 29,864U + 11840 \quad (60^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,02U^2 - 27,714U + 11179 \quad (80^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (50)$$

3. NaBr -H₂O, KBr-H₂O, CsBr -H₂O сулы-тұзды жүйелердің тығыздығы (ρ , кг/м³) тұздардың КТЭ шамалары (U ,кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \rho &= 0,0517U^2 - 70,243U + 25228 \quad (20^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,0773U^2 - 104,23U + 36507 \quad (40^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,0931U^2 - 125,49U + 43683 \quad (60^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,1192U^2 - 160,02U + 55094 \quad (80^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (51)$$

4. NaNO₃-H₂O, RbNO₃-H₂O, KNO₃-H₂O сулы-тұзды жүйелердің тығыздығы (ρ , кг/м³) тұздардың КТЭ шамалары (U ,кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \rho &= 0,001U^2 - 2,6575U + 2834,2 & (20^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,0017U^2 - 4,2687U + 3893,5 & (40^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,002U^2 - 5,0971U + 4487,5 & (60^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,0024U^2 - 6,2054U + 5244 & (80^\circ\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (52)$$

5. $\text{CoSO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{ZnSO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NiSO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{CuSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ сулы-тұзды жүйелердің тығыздығы (ρ , кг/м^3) тұздардың КТЭ шамалары (U , кДж/моль) жоғарылауымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \rho &= 0,0001U^2 - 1,4187U + 5558 & (20^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,0001U^2 - 1,4245U + 5639,7 & (40^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,0001U^2 - 1,3077U + 5365,5 & (60^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ \rho &= 0,0004U^2 - 1,226U + 5168,4 & (80^\circ\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (53)$$

Жоғарыда келтірілген, нәтижелер бойынша төмендегідей қорытындылар жасауға болады:

- Тұздардың КТЭ шамаларының жоғарылауымен сулы-тұзды жүйелердің тығыздығы кемиді.
- 49-53 формулаларынан көрінгендей, қарастырылып отырған сулы-тұзды жүйелердің тығыздықтың тұздар КТЭ шамаларына тәуелділігі бірыңғай сипатты өзгеріп, оларға ортақ екі дәрежелі полиномиялық (54) тәуелділікпен сипатталады.

$$\rho = aU^2 - bU + c \quad (54)$$

мұндағы: U – тұздардың кристалдық тор энергиясы шамасы, кДж/моль

a, b, c – тұрақты сандар. Олардың тұздар топтары үшін аралық мәндері 26 – кестеде келтірілген.

Кесте – 26 a, b, c тұрақты сандарының аралық мәндері

Тұздар	a	b	c
Хлоридтер	1,3666 – 1,4908	1801,1 – 1965	594080 – 648182
Иодидтер	0,02 – 0,0283	27,714 – 38,886	11179 – 14722
Бромидтер	0,0517 – 0,1192	70,243 – 160,02	25228 – 55094
Нитраттар	0,001 – 0,0024	2,6575 – 6,2054	2834,2 – 5244
Сульфаттар	0,0001 – 0,0004	1,226 – 1,4245	5168 – 5639,7

с) 20-24 – суреттерінен көрінгендей, хлоридтер үшін $\text{CsCl} > \text{KCl} > \text{NaCl}$, иодидтер үшін $\text{CsI} > \text{KI} > \text{NaI} > \text{LiI}$, бромидтер үшін $\text{CsBr} > \text{KBr} > \text{NaBr}$, нитраттар үшін $\text{RbNO}_3 > \text{KNO}_3 > \text{NaNO}_3$, сульфаттар үшін $\text{CuSO}_4 > \text{ZnSO}_4 > \text{CoSO}_4 > \text{NiSO}_4$ тығыздық мәндері ретгілік бойынша орналасады. Аталған ретгілік өзгерісі әр топ үшін қарастырылған тұздардың КТЭ шамасы ретілігіне кері, яғни $\text{CsCl} < \text{KCl} < \text{NaCl}$, иодидтер үшін $\text{CsI} < \text{KI} < \text{NaI} < \text{LiI}$, бромидтер үшін $\text{CsBr} < \text{KBr} < \text{NaBr}$, нитраттар үшін $\text{RbNO}_3 < \text{KNO}_3 < \text{NaNO}_3$, сульфаттар үшін $\text{CuSO}_4 < \text{ZnSO}_4 < \text{CoSO}_4 < \text{NiSO}_4$

болады. Бұл дегеніміз тұздардың КТЭ шамаларының өсуінде, тығыздықтың кемуі байқалады. Бұл тұжырым, бромидтер мысалында, 40⁰С температурада төмендегі 27 – кестедегі мәліметтер бойынша нақтыланды.

Кесте – 27 Бромидтер тұздарының КТЭ шамаларының тығыздыққа қатысты өзгеруі

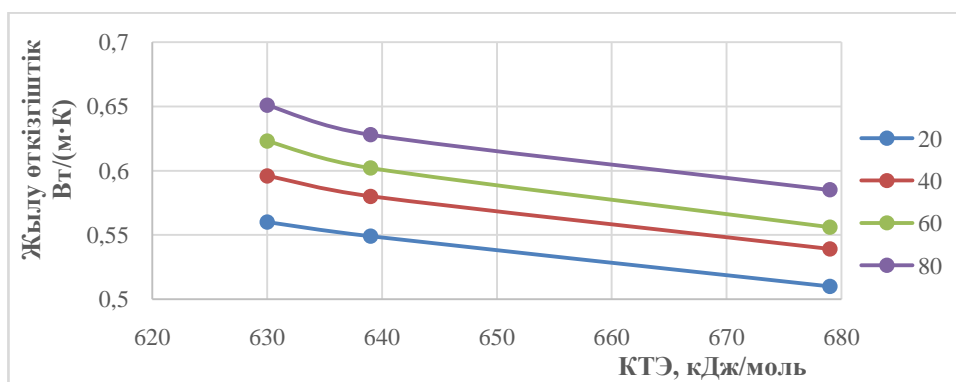
№	Тұздар	Температура, °С	Тығыздық, (кг/м ³)	Кристалды тор энергия шамасы, U (Дж/моль)
1	CsBr	40	1699	612
2	KBr	40	1450	642
3	NaBr	40	1389	690

4.4 Сулы-тұзды жүйелердің жылу өткізгіштікөзгерістері заңдылықтары

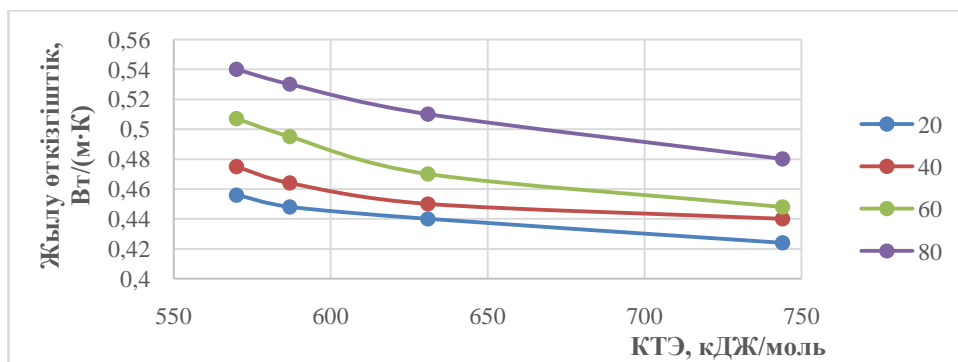
Зерттеу жұмысының бұл бөлімінде сулы-тұзды жүйелердің жылу өткізгіштіктің тұздардың КТЭ шамасына қатысты зерттеу мақсатты қойылды.

Сулы–тұзды жүйелердің жылу өткізгіштік қасиеттері графикалық түрде өңделіп сараланды. Зерттеулер NaCl -H₂O, KCl -H₂O, CsCl -H₂O, LiI - H₂O, NaI - H₂O, KI -H₂O, CsI -H₂O, NaBr -H₂O, KBr-H₂O, CsBr -H₂O, NaNO₃ -H₂O, RbNO₃ - H₂O, KNO₃ -H₂O, CoSO₄-H₂O, NiSO₄-H₂O, ZnSO₄-H₂O, CuSO₄-H₂O жүйелерінде әр түрлі шоғырлы ерітінділерді пайдаланып жүргізілді.

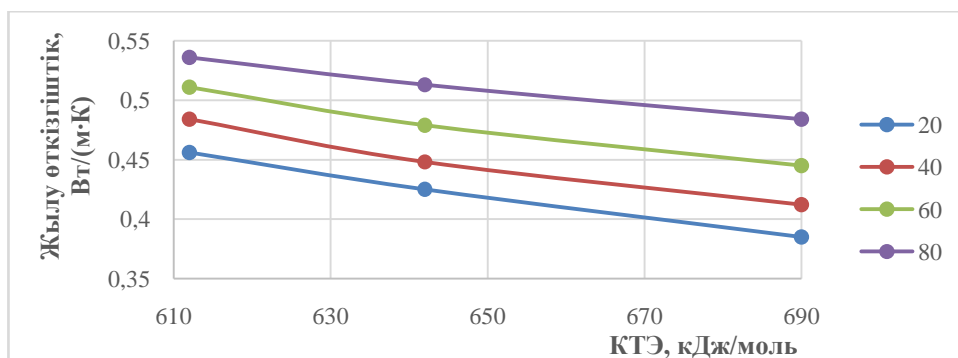
Қарастырлығын сулы-тұзды жүйелердегі жылу өткізгіштік тұздардың КТЭ шамасына қатысты полиномиалдық аналитикалық байланыстар түрінде өрнектелді.



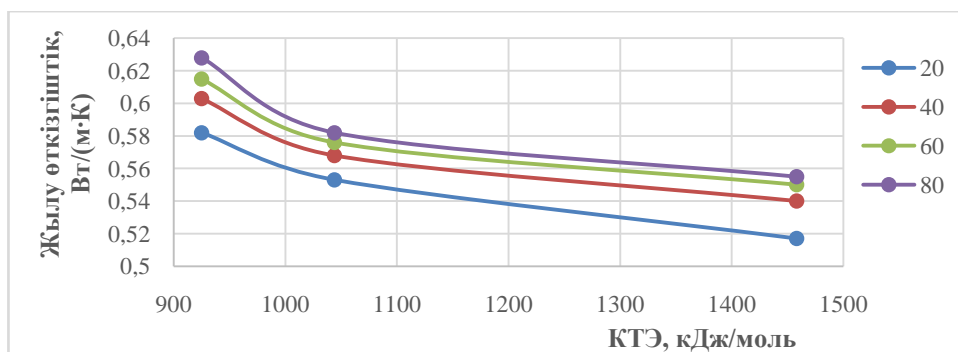
Сурет – 25 Натрий, калий, цезий хлоридтері жылу өткізгіштігінің әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



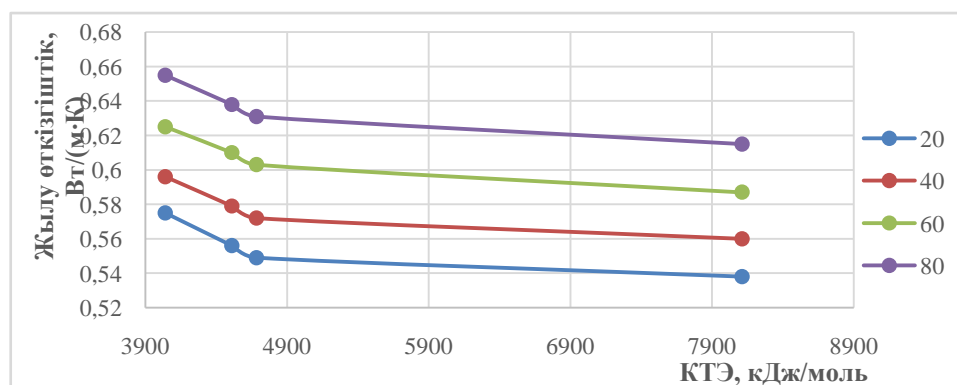
Сурет – 26 Натрий, калий, цезий, литий иодидтері жылу өткізгіштігінің әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет – 27 Натрий, калий, цезий бромидтері жылу өткізгіштігінің әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет –28 Натрий, калий, рубидий нитраттары жылу өткізгіштігінің әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет – 29 Кобальт, никель, мыс, мырыш сульфаттары жылу өткізгіштігінің әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі

25-29 – суреттерден көретініміз:

1. NaCl -H₂O, KCl -H₂O, CsCl -H₂O сулы-тұзды жүйелердің жылу өткізгіштігі (λ, Вт/м·К) тұздардың КТЭ шамаларының (U,кДж/моль) артуымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned}
 \lambda &= 5E-06U^2 - 0,0076U + 3,3611 \quad (20^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\
 \lambda &= 2E-05U^2 - 0,0213U + 7,9006 \quad (40^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\
 \lambda &= 2E-05U^2 - 0,033U + 11,815 \quad (60^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\
 \lambda &= 3E-05U^2 - 0,0409U + 14,425 \quad (80^{\circ}\text{C} \text{ үшін})
 \end{aligned} \right\} \quad (54)$$

2. LiI-H₂O, NaI-H₂O, KI-H₂O, CsI-H₂O сулы-тұзды жүйелердің жылу өткізгіштігі (λ, Вт/м·К) тұздардың КТЭ шамаларының (U,кДж/моль) артуымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned}
 \lambda &= 7E-07U^2 - 0,0011U + 0,8468 \quad (20^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\
 \lambda &= 2E-06U^2 - 0,0026U + 1,3657 \quad (40^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\
 \lambda &= 2E-06U^2 - 0,0034U + 1,7043 \quad (60^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\
 \lambda &= 1E-06U^2 - 0,0021U + 1,2863 \quad (80^{\circ}\text{C} \text{ үшін})
 \end{aligned} \right\} \quad (55)$$

3. NaBr -H₂O, KBr-H₂O, CsBr -H₂O сулы-тұзды жүйелердің жылу өткізгіштігі (λ, Вт/м·К) тұздардың КТЭ шамаларының (U,кДж/моль) артуымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned}
 \lambda &= 3E-06U^2 - 0,0042U + 2,0958 \quad (20^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\
 \lambda &= 6E-06U^2 - 0,0084U + 3,4852 \quad (40^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\
 \lambda &= 5E-06U^2 - 0,0068U + 2,9688 \quad (60^{\circ}\text{C} \text{ үшін}) \\
 \lambda &= 2E-06U^2 - 0,0034U + 1,8237 \quad (80^{\circ}\text{C} \text{ үшін})
 \end{aligned} \right\} \quad (56)$$

4. NaNO₃-H₂O, RbNO₃-H₂O, KNO₃-H₂O сулы-тұзды жүйелердің жылу өткізгіштігі (λ, Вт/м·К) тұздардың КТЭ шамаларының(U,кДж/моль) артуымен

кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \lambda &= 3E-07U^2 - 0,0008U + 1,0914 && (20^{\circ}\text{C үшін}) \\ \lambda &= 4E-07U^2 - 0,0011U + 1,2854 && (40^{\circ}\text{C үшін}) \\ \lambda &= 5E-07U^2 - 0,0013U + 1,3982 && (60^{\circ}\text{C үшін}) \\ \lambda &= 6E-07U^2 - 0,0016U + 1,5678 && (80^{\circ}\text{C үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (57)$$

5. $\text{CoSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{NiSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{ZnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{CuSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ сулы-тұзды жүйелердің жылу өткізгіштігі (λ , Вт/м·К) тұздардың КТЭ шамаларының (U , кДж/моль) артуымен кемиді және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} \lambda &= 9E-09U^2 - 0,0001U + 0,9072 && (20^{\circ}\text{C үшін}) \\ \lambda &= 8E-09U^2 - 0,0001U + 0,8976 && (40^{\circ}\text{C үшін}) \\ \lambda &= 7E-09U^2 - 9E-05U + 0,892 && (60^{\circ}\text{C үшін}) \\ \lambda &= 8E-09U^2 - 0,0001U + 0,9513 && (80^{\circ}\text{C үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (58)$$

Жоғарыда келтірілген, нәтижелер бойынша төмендегідей қорытындылар жасауға болады:

а) Тұздардың КТЭ шамасының жоғарылауымен сулы-тұзды жүйелердің жылу өткізгіштігі кемиді.

б) 54-58 формулаларынан көрінгендей, қарастырылып отырған сулы-тұзды жүйелердің жылу өткізгіштігі тұздардың КТЭ шамаларына тәуелділігі бірыңғай сипатты өзгеріп, оларға ортақ екі дәрежелі полиномиялық (59) тәуелділікпен сипатталады.

$$\lambda = aU^2 - bU + c \quad (59)$$

мұндағы: U – тұздардың кристалдық тор энергиясы шамасы, кДж/моль

a, b, c – тұрақты сандар. Олардың тұздар топтары үшін аралық мәндері 28 - кестеде келтірілген.

Кесте – 28 a, b, c тұрақты сандарының аралық мәндері

Тұздар	a	b	c
Хлоридтер	5E-06 – 2E-05	0,0076 – 0,0409	3,3611 – 1,425
Иодиттер	7E-07 – 1E-06	0,0011 – 0,0034	0,8468 – 1,7043
Бромидтер	6E-06 – 2E-06	0,0034 – 0,0068	1,8237 – 3,4852
Нитраттар	6E-07 – 3E-07	0,0008 - 0,0016	1,0914 – 1,5678
Сульфаттар	9E-09 – 7E-09	9E-05 – 0,0001	0,892 - 0,9513

с) 25 – 29 суреттерден көрінгендей, хлоридтер үшін $\text{CsCl} > \text{KCl} > \text{NaCl}$, иодидтер үшін $\text{CsI} > \text{KI} > \text{NaI} > \text{LiI}$, бромидтер үшін $\text{CsBr} > \text{KBr} > \text{NaBr}$, нитраттар үшін $\text{RbNO}_3 > \text{KNO}_3 > \text{NaNO}_3$, сульфаттар үшін $\text{CuSO}_4 > \text{ZnSO}_4 > \text{CoSO}_4 > \text{NiSO}_4$ жылу өткізгіштік мәндері реттілік бойынша орналасады. Аталған реттілік өзгерісі әр топ үшін қарастырылған тұздардың КТЭ шамасы ретілігіне кері, яғни $\text{CsCl} < \text{KCl} < \text{NaCl}$, иодидтер үшін $\text{CsI} < \text{KI} < \text{NaI} < \text{LiI}$, бромидтер үшін

CsBr<KBr<NaBr, нитраттар үшін RbNO₃<KNO₃<NaNO₃, сульфаттар үшін CuSO₄<ZnSO₄<CoSO₄<NiSO₄ болады. Бұл дегеніміз тұздардың КТЭ шамаларының өсуінде, жылу өткізгіштіктің кемуі байқалады. Бұл тұжырым, нитраттар мысалында, 40⁰С температурада 29 – кестедегі мәліметтер бойынша нақтыланды.

Кесте – 29 Нитраттар тұздарының КТЭ шамаларының жылу өткізгіштікке қатысты өзгеруі

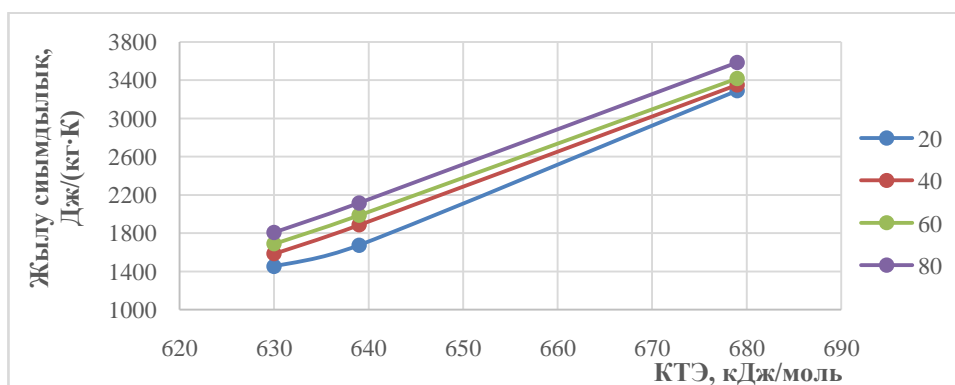
№	Тұздар	Температура, °С	Жылу өткізгіштік, (Вт/(м·К))	Кристалды тор энергия шамасы, U (кДж/моль)
1	RbNO ₃	40	0,603	925
2	KNO ₃	40	0,568	1044
3	NaNO ₃	40	0,54	1457

4.5 Сулы-тұзды жүйелердің жылу сиымдылық өзгерістері заңдылықтары

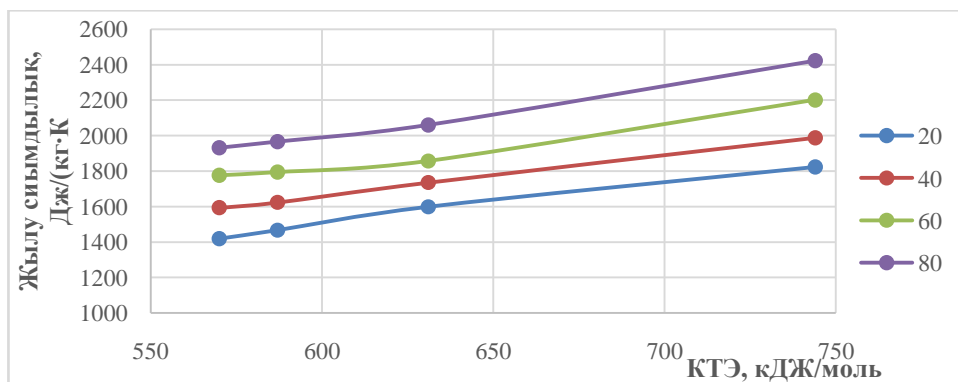
Бұл бөлімінде сулы-тұзды жүйелердің жылу сиымдылықтарының тұздардың КТЭ шамасына қатысты зерттеу мақсатты қойылды.

Зеттелген сулы-тұзды жүйелердің жылу сиымдылық қасиеттер өзгерістері графикалық түрде өңделіп сараланды. Зерттеулер NaCl - H₂O, KCl - H₂O, CsCl - H₂O, LiI - H₂O, NaI - H₂O, KI -H₂O, CsI -H₂O, NaBr -H₂O, KBr-H₂O, CsBr -H₂O, NaNO₃ -H₂O, RbNO₃ -H₂O, KNO₃ -H₂O, CoSO₄ -H₂O, ZnSO₄-H₂O, NiSO₄-H₂O, CuSO₄-H₂O жүйелерінде әр түрлі шоғырлы ерітінділерді пайдаланып жүргізілді.

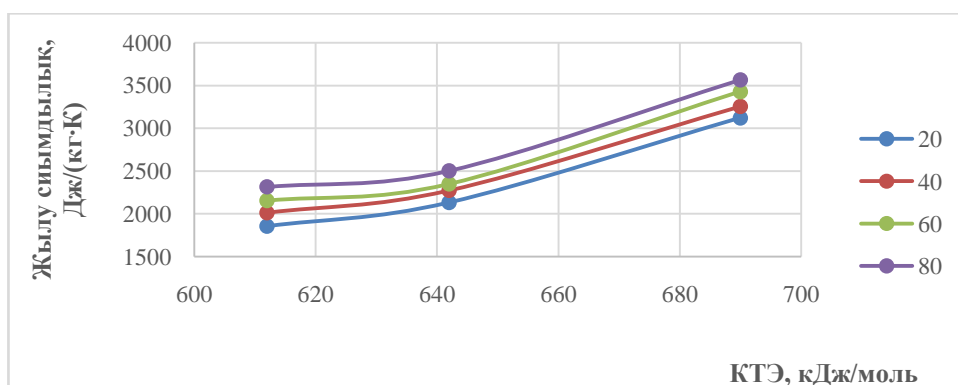
Қарастырлығын сулы-тұзды жүйелердің жылу сиымдылығы тұздардың КТЭ шамасына қатысты полиномиялық аналитикалық байланыстар түрінде өрнектелді.



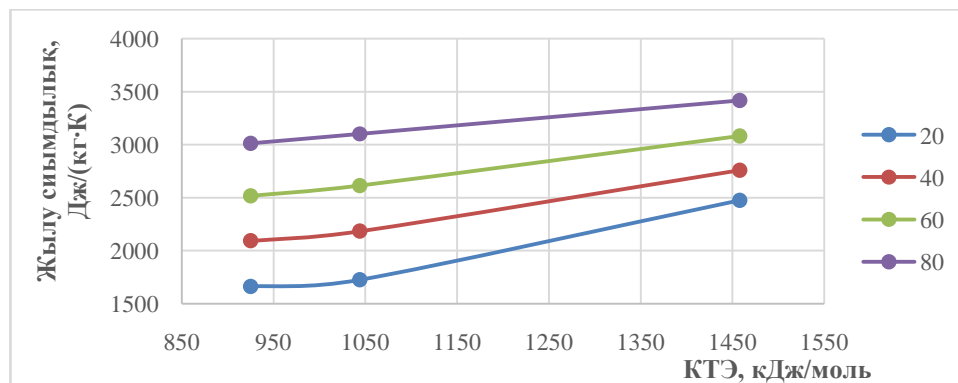
Сурет – 30 Натрий, калий, цезий хлоридтері жылу сиымдылығының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



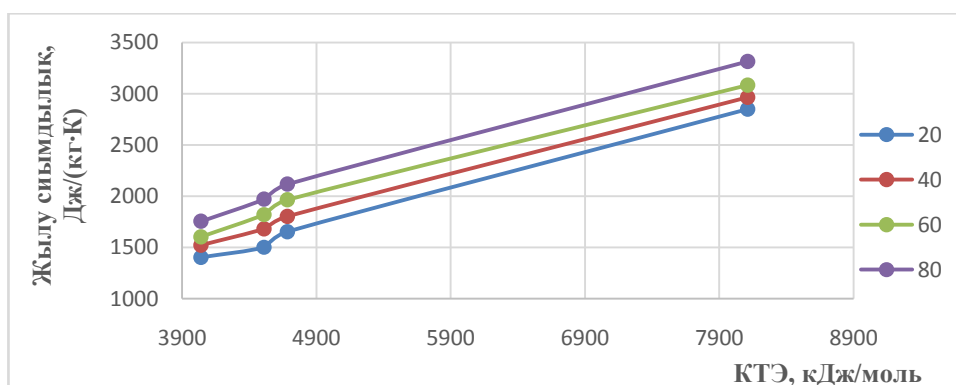
Сурет – 31 Натрий, калий, цезий, литий иодидтері жылу сиымдылығының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет – 32 Натрий, калий, цезий бромидтері жылу сиымдылығының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет – 33 Натрий, калий, рубидий нитраттары жылу сиымдылығының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі



Сурет – 34 Кобальт, никель, мыс, мырыш сульфаттары жылу сымдылығының әр түрлі температураларда КТЭ шамаларына тәуелділігі

30 – 34 суреттерден төмендегіше талдаулар жасауға болады:

1. NaCl-H₂O, KCl-H₂O, CsCl-H₂O сулы-тұзды жүйелердің жылу сымдылықтары (C_p, Дж/кг·К) тұздардың КТЭ шамалары (U, кДж/моль) жоғарылауымен артады және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} C_p &= 0,3201U^2 - 381,5U + 11476 && (20^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 0,0649U^2 - 48,925U + 6645,5 && (40^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 0,0516U^2 - 32,242U + 1526,5 && (60^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 0,0488U^2 - 27,606U + 172,75 && (80^\circ\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (59)$$

2. NaI - H₂O, KI -H₂O, CsI -H₂O сулы-тұзды жүйелердің жылу сымдылықтары (C_p, Дж/кг·К) тұздардың КТЭ шамалары (U, кДж/моль) жоғарылауымен артады және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} C_p &= 0,0055U^2 - 9,6074U + 2264,7 && (20^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 0,0005U^2 - 2,9934U + 55,302 && (40^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 0,0099U^2 - 10,595U + 4593 && (60^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 0,0063U^2 - 5,481U + 3004,7 && (80^\circ\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (60)$$

3. NaBr-H₂O, KBr-H₂O, CsBr-H₂O сулы-тұзды жүйелердің жылу сымдылықтары (C_p, Дж/кг·К) тұздардың КТЭ шамалары (U, кДж/моль) жоғарылауымен артады және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} C_p &= 0,1458U^2 - 173,57U + 53483 && (20^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 0,1512U^2 - 180,91U + 56107 && (40^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 0,2053U^2 - 250,97U + 78857 && (60^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 0,203U^2 - 248,35U + 78257 && (80^\circ\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (61)$$

4. NaNO₃-H₂O, RbNO₃-H₂O, KNO₃-H₂O сулы-тұзды жүйелердің жылу сымдылықтары (C_p, Дж/кг·К) тұздардың КТЭ шамалары (U, кДж/моль) жоғарылауымен артады және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} C_p &= 0,0024U^2 - 4,1983U + 3493 && (20^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 0,0012U^2 - 1,5501U + 2520,9 && (40^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 0,0006U^2 - 0,3497U + 2334,3 && (60^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 3E-05U^2 - 0,6911U + 2348,1 && (80^\circ\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (62)$$

5. $\text{CoSO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{ZnSO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NiSO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{CuSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ сулы-тұзды жүйелердің жылу сиымдылықтары (C_p , Дж/кг·К) тұздардың КТЭ шамалры (U , кДж/моль) жоғарылауымен артады және осы кезде үрдісті келесі түрдегі полиномиялық тәуелділікпен сипаттауға болады:

$$\left. \begin{aligned} C_p &= 3E-06U^2 + 0,3193U + 48,507 && (20^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 2E-05U^2 + 0,5616U - 480,01 && (40^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 5E-05U^2 + 0,9717U - 1515,5 && (60^\circ\text{C} \text{ үшін}) \\ C_p &= 4E-05U^2 + 0,9254U - 1266 && (80^\circ\text{C} \text{ үшін}) \end{aligned} \right\} \quad (63)$$

Жоғарыда келтірілген, нәтижелер бойынша төмендегідей қорытындылар жасауға болады:

- Тұздардың КТЭ шамасының жоғарылауымен сулы-тұзды жүйелердің жылу сиымдылығы артады.
- 59-63 формулаларынан көрінгендей, қарастырылып отырған сулы-тұзды жүйелердің жылу сиымдылығы тұздардың КТЭ шамаларына тәуелділігі бірыңғай сипатты өзгеріп, оларға ортақ екі дәрежелі полиномиялық (64) тәуелділікпен сипатталады.

$$C_p = aU^2 - bU + c \quad (64)$$

мұндағы: U – тұздардың кристалдық тор энергиясы шамасы, кДж/моль

a, b, c – тұрақты сандар. Олардың тұздар топтары үшін аралық мәндері 30 - кестедекелтірілген.

Кесте – 30 a, b, c тұрақты сандарының аралық мәндері

Тұздар	a	b	c
Хлоридтер	0,0188 – 0,3201	27,606 – 381,5	172,75 – 11476
Иодидтер	0,0005 -0,0099	2,9434 – 10,595	55,302 - 4593
Бромидтер	0,1458 – 0,2053	177,57 – 250,97	53483 – 78857
Нитраттар	3E-05 – 0,0024	0,3497 – 4,1983	2334,3 - 3493
Сульфаттар	5E-05 – 2E-05	0,3198 – 0,9717	48,007 – 1515,5

с) 30-34 – суреттерден көрінгендей, хлоридтер үшін $\text{CsCl} < \text{KCl} < \text{NaCl}$, иодидтер үшін $\text{CsI} < \text{KI} < \text{NaI} < \text{LiI}$, бромидтер үшін $\text{CsBr} < \text{KBr} < \text{NaBr}$, нитраттар үшін $\text{RbNO}_3 < \text{KNO}_3 < \text{NaNO}_3$, сульфаттар үшін $\text{CuSO}_4 < \text{ZnSO}_4 < \text{CoSO}_4 < \text{NiSO}_4$ жылусиымдылықмәндері реттілік бойынша орналасады. Аталған реттілік өзгерісі әр топ үшін қарастырылған тұздардың КТЭ шамасы ретілігімен бірдей, яғни $\text{CsCl} < \text{KCl} < \text{NaCl}$, иодидтер үшін $\text{CsI} < \text{KI} < \text{NaI} < \text{LiI}$, бромидтер үшін

CsBr<KBr<NaBr, нитраттар үшін $RbNO_3 < KNO_3 < NaNO_3$, сульфаттар үшін $CuSO_4 < ZnSO_4 < CoSO_4 < NiSO_4$ болады. Бұл дегеніміз тұздардың КТЭ шамаларының өсуінде, жылу сиымдылықтың артуы байқалады. Бұл тұжырым, сульфаттар мысалында, 40⁰С температурада 31 – кестедегі мәліметтер бойынша нақтыланды.

Кесте – 31 Сульфаттар тұздарының КТЭ шамаларының жылу сиымдылыққа қатысты өзгеруі

№	Тұздар	Температура, °С	Жылу сиымдылық, (Дж/(кг·К))	Кристалды тор энергия шамасы, U (кДж/моль)
1	CuSO ₄	40	1386	4039
2	ZnSO ₄	40	1520	4509
3	CoSO ₄	40	1560	4683
4	NiSO ₄	40	1702	8111

Төртінші тарау бойынша қорытынды

1. Сулы-тұзды жүйелердің тұтқырлық, тығыздық, жылу өткізгіштік, жылу сиымдылық қасиеттерінің өзгеру сипаттары еріген заттардың шоғырларына, және тұздардың КТЭ шамаларына қатысты анықталды.

2. Тұздардың КТЭ шамалары жоғары болғанда, тұздардың гидратталған мөлшерлері аз болып, осыған байланысты ерітіндінің шоғыры, тұтқырлығы, тығыздығы және жылу өткізгіштігі төмендеп, ал жылу сиымдылығы артады [100,101].

3. Гидратталған тұз көрсеткіштеріне тұздың КТЭ шамалары айтарлықтай әсер етеді және олар өз кезегінде олардың барлық физика-химиялық соның ішінде тұтқырлық, тығыздық, жылу өткізгіштік, жылу сиымдылық қасиеттерінің өзгерістерне алып келеді және оларды полиномиялық тәуелділіктермен өрнектеуге болады.

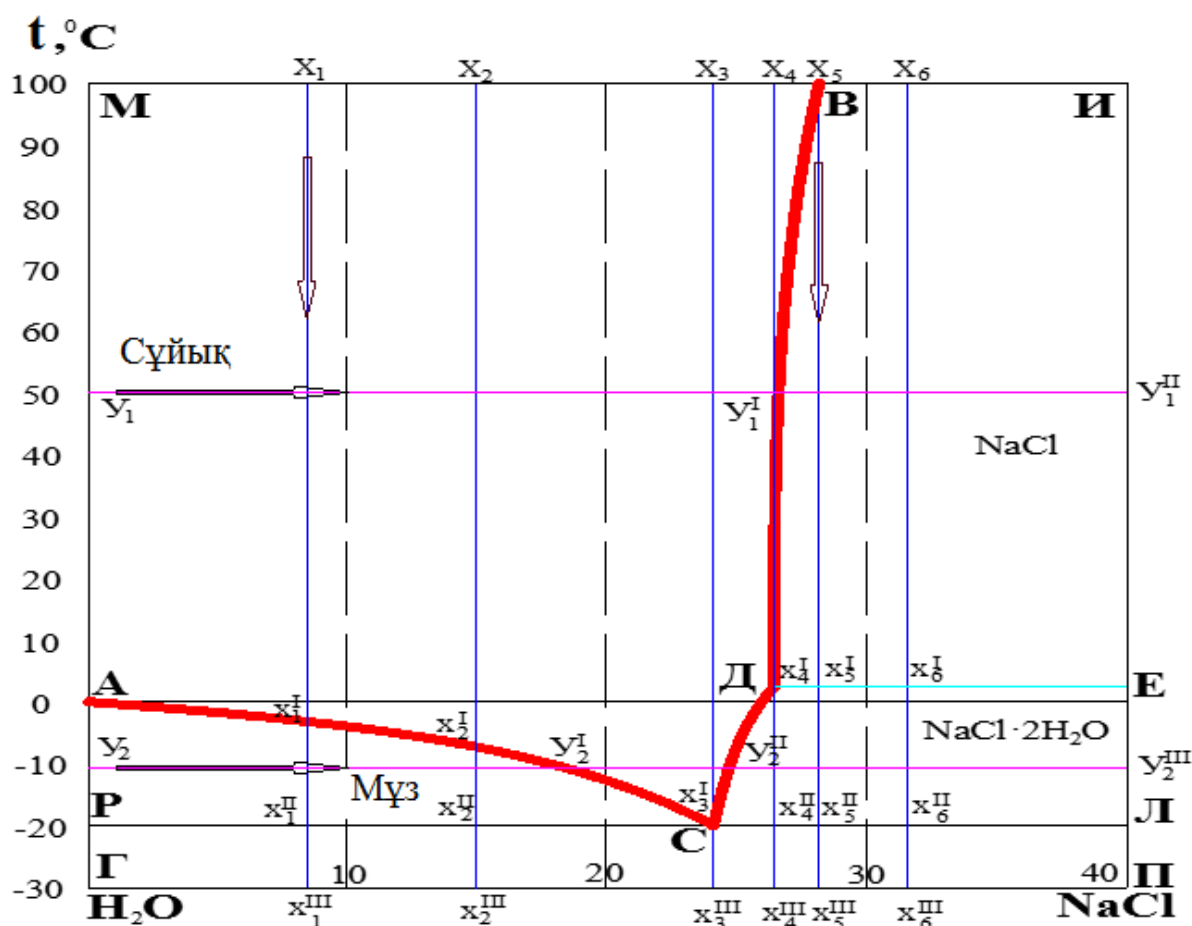
5 СУЛЫ-ТҰЗДЫ ЖҮЙЕЛЕРДІҢ ҚҰРАМДЫҚ, КҮЙЛІК, ҚҰРЫЛЫМДЫЛЫҚ ӨЗГЕРІСТЕРІ ЗАҢДЫЛЫҚТАРЫН ЗЕРТТЕУ

5.1 Сулы-тұзды жүйелердің құрамдық өзгерістері заңдылықтары

Галургиялық технологиялар негізінде әр түрлі сулы-тұзды жүйелер қолданылады. Оларды буландыру немесе салқындату жолдарымен өңдеу кезінде аталған жүйелерде көптеген құрамдық өзгерістер орын алады. Қазіргі таңда сулы-тұзды жүйелердің құрамдық өзгерістерін зерттеуге негізгі болып табылатын оқулықтар мен оқу құралдарында осы мәселе орынсыз ескерусіз қалдырылып келеді.

Жұмыстың бұл бөлімінде сулы-тұзды жүйелердегі құрамдық өзгерістерді зерттеу нәтижелері $\text{NaCl-H}_2\text{O}$ жүйесіне қатысты келтірілген [102]. Мұнда мақсатты зерттеулік нәтижелерге жету үшін қарастырлып отырған екі құрамдас жүйедегі еріткіш-судың және еріген зат - NaCl қазіргі кезде белгілі құрамдық өзгерістері туралы жалпылама мойындалған ғылыми мәліметтер пайдаланылды [103,104].

Мақсатты зерттеулерді жүргізу негізінде $\text{NaCl-H}_2\text{O}$ жүйесінің белгілі ерігіштік күй айнасы пайдаланылып, бастамалық фигуративтік нүктелер - $X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6, Y_1, Y_2$ ерігінді аймақтарында орналастырылды (сурет 35).



Сурет – 35 $\text{NaCl-H}_2\text{O}$ жүйесінің күй айнасы

Күй айнасы қимасын қанығу сызықтары бірнеше аймақтарға бөледі. Мұнда АСДВМ қанықпанған ерітінділер аймағы. АС-СД-ДВ қисықтары, сәйкесінше, ерітіндінің мұз өзектерімен, $\text{NaCl}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ кристаллогидратымен, NaCl тұзымен қанығу қисықтары. ГМ осінде температура, ГП осінде тұз шоғырының мәндері келтірілген. АСР мұздың кристалданатын алаңы. ДСЛ алаңында NaCl тұзының екі сулы кристаллогидраттары тұнбаланылады. ГРСК алаңында қатты мұз және NaCl кристалдары қоспасы жатады. СКЛП алаңында қатты күйдегі NaCl тұзы және $\text{NaCl}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ кристаллогидраттары қоспасы орналасады.

Қарастырып отырған жүйедегі құрамдық өзгерістерін сипаттау үшін күй айнасы 100°C температурада еріген тұз осіне параллель горизонталь түзумен шектелінді. Осы горизонталь түзудің бойынан ерітіндідегі тұздың әртүрлі шоғырларына сәйкес келетін $X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6$ және ГМ вертикалының бойында әртүрлі температураға сәйкес келетін Y_1, Y_2 бастамалық фигуративтік нүктелер белгіленді. $X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6$ нүктелерінен еріген тұз шоғыры осі ГП дейін вертикальдар, ал Y_1, Y_2 нүктелерінен ПИ дейін горизонтальдар жүргізілді. Олардың бойынан ГП осі бағытында қанығу қисығы АС-мен, горизонталь РЛ, еріген тұз шоғыры осі ГП-мен қиылыстарында $X_1^I, X_2^I, X_3^I, X_4^I, X_5^I, X_6^I$; $X_1^{II}, X_2^{II}, X_3^{II}, X_4^{II}, X_5^{II}, X_6^{II}$; $X_1^{III}, X_2^{III}, X_4^{III}, X_5^{III}, X_6^{III}$ нүктелері, ал Y_1, Y_2 жүргізілген горизонтальдың АС, СД, ДВ қанығу қисықтарымен қиылыстарында $Y_1^I, Y_1^{II}, Y_2^I, Y_2^{II}, Y_2^{III}$ нүктелері белгіленді.

Зерттеу нысаны болып отырған күй диаграммасы қимасын қолданып $\text{NaCl}\text{-H}_2\text{O}$ жүйесіндегі құрамдық өзгерістері $X_1 \rightarrow X_1^{III}$; $X_3 \rightarrow X_3^{II}$; $X_4 \rightarrow X_4^{III}$; $X_5^I \rightarrow X_5^{III}$; вертикальдары мен $Y_1 \rightarrow Y_1^{II}$, $Y_2 \rightarrow Y_2^{III}$ горизонталь бойында талданды. Осы кезде $X_1 \rightarrow X_1^{III}$ вертикалы бойында $X_1 \rightarrow X_1^I$; $X_1^I \rightarrow X_1^{II}$, $X_1^{II} \rightarrow X_1^{III}$; $X_3 \rightarrow X_3^{II}$ вертикалы бойында $X_3 \rightarrow X_3^I$; $X_3^I \rightarrow X_3^{II}$; $X_4 \rightarrow X_4^{III}$ вертикалы бойында $X_4 \rightarrow X_4^I$; $X_4^I \rightarrow X_4^{II}$, $X_4^{II} \rightarrow X_4^{III}$; $X_5^I - X_5^{III}$ вертикалы бойында $X_5 \rightarrow X_5^I$, $X_5^I \rightarrow X_5^{II}$, $X_5^{II} \rightarrow X_5^{III}$; $Y_1 \rightarrow Y_1^{II}$ горизонталь бойында $Y_1 \rightarrow Y_1^I$, $Y_1^I \rightarrow Y_1^{II}$; $Y_2 \rightarrow Y_2^{III}$ горизонталь бойында $Y_2 \rightarrow Y_2^I$, $Y_2^I \rightarrow Y_2^{II}$, $Y_2^{II} \rightarrow Y_2^{III}$ кесінділік аралықтары жеке-жеке қарастырылды.

Зерттеулік сипаттамалар жасауда, оларды сандық есептеулермен дәйектеуде судың, сулы-тұзды жүйелердің құрамдық қасиеттері туралы заманауи ғылыми жетістіктер ескерілді. Зерттеу нәтижелері төмендегі 32 – 38 кестелерде келтірілді.

Кесте – 32 $\text{NaCl}\text{-H}_2\text{O}$ жүйінің құрамдық өзгерістерін талдау нәтижелері

Талдау бағыттары	Жүйедегі құрамдық өзгерістер сипаттамалары
1	2
$X_1 \rightarrow X_1^{III}$ вертикалы бойында	
$X_1 \rightarrow X_1^I$	$X_1 \rightarrow X_1^I$ кесіндісі АСДВМ қанықпанған ерітінділер аймағында жатыр. Бұл алаңда жүйе құрамдастары бос және өзара байланысқан судан және еріп гидратацияланған тұздан тұрады. $X_1 \rightarrow X_1^I$ кесіндісі бойында жүйедегі еріген тұз шоғыры тұрақты шама. $X_1 \rightarrow X_1^I$ аралығында РС қанығу қисығы бағытында жүйенің құрамы сапалық өзгеріске ұшырамайды.

32 Кестенің жалғасы

$X_1 \rightarrow X_1^I$	Алайда мұнда сандық өзгерістер орын алады. Бос су саны азаяды. Олар өзара байланысқан су құрамына енеді. Өзара байланысқан сулар құрамы санды артады. Гидратталған тұз құрамы сандық өзгерістерге ұшырамайды. Олардың құрамындағы біріншілей гидраттану сулар сандары өзгермейді. $X_1 \rightarrow X_1^I$ кесіндісі бойындағы фигуративтік нүкте X_1^I нүктесіне жақындағанда жүйеде өзара байланысқан су молекулаларынан тұратын қатты күйдегі мұз өзектер пайда бола бастайды. Фигуративтік нүкте X_1^I нүктесіне жеткенде жүйе мұз өзектерімен қаныққан, ал еріген тұзбен қанықпаған күйе болады. Жүйеде бос су қалмайды. Яғни, қарастырылып отырған жүйе құрамы X_1^I нүктесінде мұз өзектерімен қаныққан, өзара байланысқан су және гидратталған тұз қоспасынан тұрады.
$X_1^I \rightarrow X_1^{II}$	$X_1^I \rightarrow X_1^{II}$ кесіндісі АСР мұздың кристалданатын аймағында жатыр. Бұл алаңда мұз өзектерімен қаныққан ерітінді мен осы ерітіндіден қатты күйе тұнбаланған мұз кристалдары болады. Мұнда жүйе құрамы мұз өзектерінен, өзара байланысқан судан және гидратацияланған тұздан тұрады. Жүйе тұзбен қанықпаған. $X_1^I \rightarrow X_1^{II}$ аралығында РС осі бағытында жүйенің құрамы сапалық өзгеріске ұшырамайды. Алайда, мұз өзектерімен қаныққан ерітіндіден мұз кристалдары тұнбаға түседі, санды артады. Нәтижесінде ерітіндіде еріген тұз шоғыры өзгеріске ұшырап - артады. $X_1^I \rightarrow X_1^{II}$ бойымен жүйенің фигуративтік нүктесі РС осі бағытында жылжығанда жүйенің тұздық құрамы АС қанығу қисығы бойымен $X_1^I \rightarrow C$ нүктесі бағытында қозғалады. Жүйеде өзара байланысқан сулар құрамы азаяды. Гидратталған тұз құрамы саны сандық өзгеріске ұшырамайды. $X_1^I \rightarrow X_1^{II}$ кесіндісі бойындағы фигуративтік нүкте X_1^{II} нүктесіне жақындағанда жүйеде өзара байланысқан су молекулаларынан тұратын қатты күйдегі мұз өзектері толықтама кристалдана бастайды. Фигуративтік нүкте X_1^{II} нүктесіне жеткенде жүйедегі мұз өзектері толығымен кристалданады. Нәтижесінде қарастырылып отырған жүйе X_1^{II} нүктесінде қатты күйдегі тұнбаланған мұз кристалдарынан, NaCl кристалдары өзектерінен және өзара байланысқан судан тұратын эвтектикалық құрамды жүйеден тұрады.
$X_1^{II} \rightarrow X_1^{III}$	$X_1^{II} \rightarrow X_1^{III}$ кесіндісі ГРСК қатты мұз және NaCl кристалдары аймағында жатады. Осы аралықта оның құрамы тұнбаланған қатты күйдегі мұздан және NaCl кристалдарынан тұрады. Жүйенің фигуративтік нүктесі $X_1^{II} \rightarrow X_1^{III}$ бағытында қозғалғанда жүйеде құрам өзгермейді. Жүйе толығымен қатты күйе болады. Оның тек температурасы төмендейді.
Жоғарыда сапалық сипатталған зерттеу нәтижелері судың және сулы- тұзды жүйелердің қасиеттерімен қатар құрамын анықтауда қол жеткен соңғы ғылыми жетістіктерді қолданып санды дәйектелді (29 - кесте, 34 - сурет) [105].	
$X_2 \rightarrow X_2^{III}$ вертикалы бойында	
$X_2 \rightarrow X_2^{III}$ вертикалының бойында жүйедегі құрам өзгерістері $X_1 \rightarrow X_1^{III}$ вертикалы бойындағы құрам өзгерістері сипатын қайталайды. Мұнда тек бастамалық фигуративтік нүкте ерітіндінің артықтау шоғырымен сипатталады. Нәтижесінде $X_2 \rightarrow X_2^{III}$ вертикалының бойындағы құрам өзгерістері сандық есептеулері өзге мәнге ие болады (30 - кесте).	
$X_3 \rightarrow X_3^I$ вертикалы бойында	
$X_3 \rightarrow X_3^I$ кесіндісі АСДВМ қанықпаған ерітінді аймағында жатыр. Бұл алаңда жүйе құрамдастары болып бос және өзара байланысқан судан және еріп гидратацияланған тұздан тұрады. $X_3 \rightarrow X_3^I$ кесіндісі бойында жүйедегі еріген тұз шоғыры тұрақты шама. $X_3 \rightarrow X_3^I$ аралығында РС түзу бағытында жүйенің құрамы сапалық өзгеріске ұшырамайды. Алайда, мұнда сандық өзгерістер орын алады. Бос су саны азаяды. Олар өзара байланысқан су құрамына енеді.	

32 Кестенің жалғасы

1	2
$X_3 \rightarrow X_3^I$	Өзара байланысқан сулар санды артады. Гидратталған тұздар да сандық өзгерістерге ұшырамайды. Олардың құрамындағы біріншілей гидраттану сулары сандары өзгермейді. $X_3 \rightarrow X_3^I$ кесіндісі бойындағы фигуративтік нүкте X_3^I нүктесіне жақындағанда жүйеде өзара байланысқан су молекулаларынан тұратын қатты күйдегі мұз өзектері және гидраттық су молекулаларынан ажыраған тұз молекулалары пайда бола бастайды. Фигуративтік X_3^I нүктесінде жүйенің эвтектикалық құрамы тұзыбен де және мұз өзектерімен де қанығады.
$X_3^I \rightarrow X_3^{II}$	$X_3^I \rightarrow X_3^{II}$ кесіндісі ГРСК қатты күй аймағында жатады. Жүйенің фигуративтік нүктесі $X_3^I \rightarrow X_3^{II}$ бағытында қозғалғанда жүйеде құрам өзгермейді. Аралықта құрам эвтектикалық құрамды тұнбаланған қатты күйдегі мұздан және тұнбаға түскен тұздан тұрады. Мұнда тек эвтектикалық қатты қоспаның температурасы төмендейді.
Жоғарыда келтірілген $X_3 \rightarrow X_3^{II}$ вертикалыбойындағы құрам өзгерістері сипаттамалары санды дәйектелді (31 - кесте).	
$X_4 \rightarrow X_4^{III}$ вертикалы бойында	
$X_4 \rightarrow X_4^I$	$X_4 \rightarrow X_4^I$ кесіндісі АСДВМ қанықпанған ерітінді аймағында жатыр. Бұл алаңда жүйе құрамы бос және өзара байланысқан су молекулаларынан және гидратацияланған тұздан тұрады. $X_4 \rightarrow X_4^I$ кесіндісі бойында жүйедегі еріген тұз шоғыры тұрақты шама.
	$X_4 \rightarrow X_4^I$ аралығында ДЕ қанығу қисығы бағытында жүйенің құрамы сапалық өзгеріске ұшырамайды. Алайда, мұнда сандық өзгерістер орын алады. Бос су молекулалар саны азаяды. Олар өзара байланысқан су молекулаларының құрамына енеді. Өзара байланысқан су молекулаларының құрамы санды артады. Гидратталған тұз құрамы сандық өзгерістерге ұшырамайды. Олардың құрамындағы біріншілей гидраттану сулары сандары өзгермейді. $X_4 \rightarrow X_4^I$ кесіндісі бойындағы фигуративтік нүкте Д немесе X_4^I нүктесіне жеткенде жүйе тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттарымен қанығады. Жүйедегі бос су молекулалары толығымен өзара байланысқан су молекулаларының құрамына енеді. Нәтижесінде қарастырып отырған жүйе құрамы X_4^I нүктесінде тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттарының өзектерінен және өзара байланысқан су молекулаларынан тұрады.
$X_4^I \rightarrow X_4^{II}$	$X_4^I \rightarrow X_4^{II}$ кесіндісі ДСЛЕ тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттары тұнбаланатын алаңында жатыр. Бұл алаңда тұнбаға түскен тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттары және тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттарымен қаныққан ерітінді қоспасы жатады. Жүйенің фигуративтік нүктесі $X_4^I \rightarrow X_4^{II}$ бағытында жылжығанда, тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттарының тұнбаға түсу нәтижесінде, қаныққан ерітінді шоғыры төмендейді де, оның нүктесі ДС қисығы бойымен Д нүктесінен С нүктесі бағытында қозғалады. $X_4^I \rightarrow X_4^{II}$ аралығында жүйеде құрам өзгермейді. Қарастырылып отырған жүйе нүктесі X_4^{II} нүктесіне жеткенде тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттарымен қаныққан жүйе С нүктесіне жетеді. Нәтижесінде, эвтектикалық құрамды жүйе тұздан (NaCl) және өзара байланысқан су молекулаларынан тұратын қаныққан ерітіндіден және тұнбаланған ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттарынан тұрады.
$X_4^{II} \rightarrow X_4^{III}$	$X_4^{II} \rightarrow X_4^{III}$ кесіндісі қатты күйдегі мұздан, тұздан (NaCl) және тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттары қоспасынан тұратын СКЛП аймағында орналасқан. Жүйенің фигуративтік нүктесі $X_4^{II} \rightarrow X_4^{III}$ бағытында қозғалғанда жүйеде құрам өзгермейді. Мұнда аталған қатты қоспаның тек температурасы төмендейді.
Жоғарыда келтірілген $X_4 \rightarrow X_4^{III}$ вертикалыбойындағы құрам өзгерістері сипаттамалары санды дәйектелінді (32 - кесте).	

32 Кестенің жалғасы

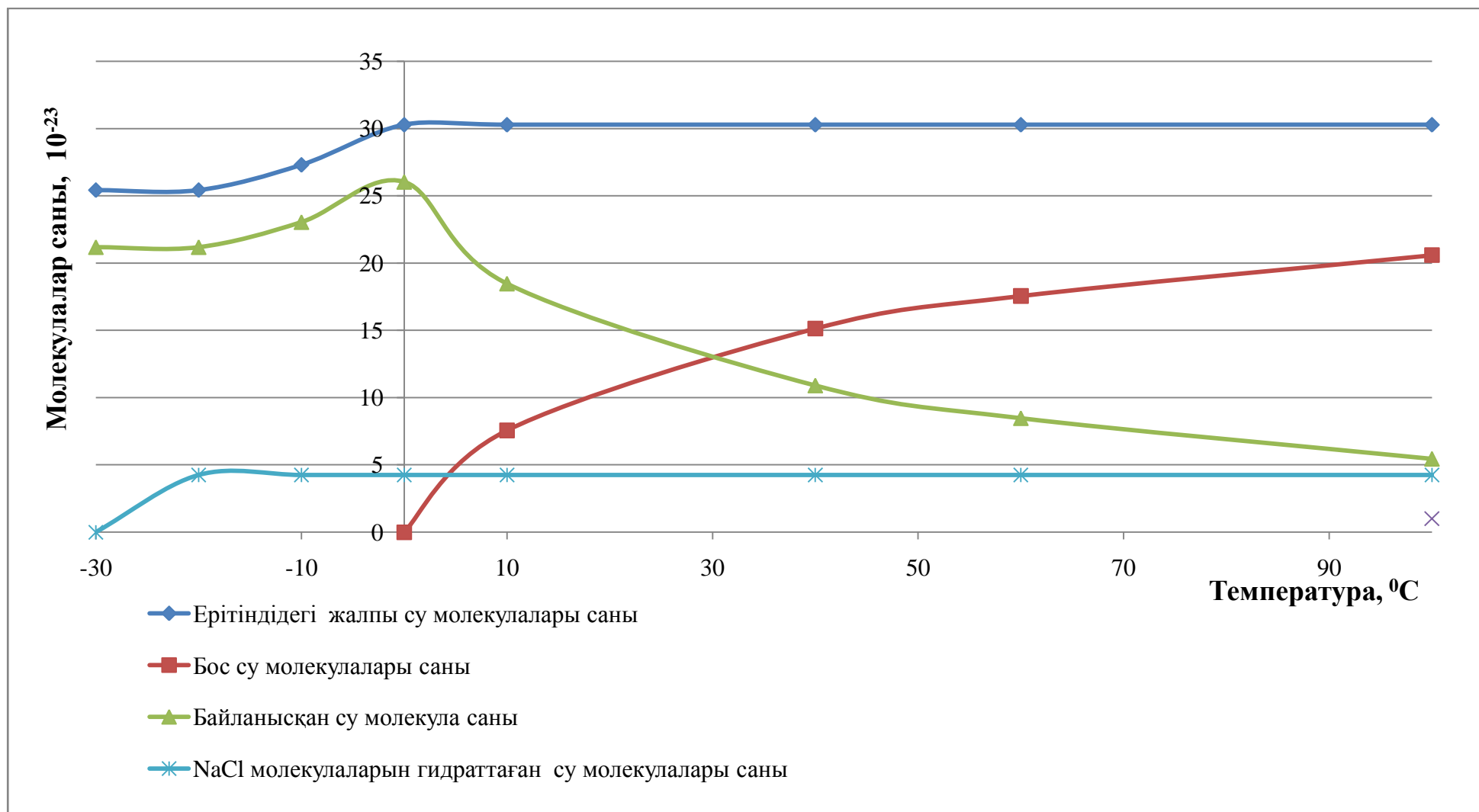
1	2
$X_5 \rightarrow X_5^{III}$ вертикалы бойында	
$X_5 \rightarrow X_5^I$	<p>$X_5 \rightarrow X_5^I$ кесіндісі ДВИЕ тұз (NaCl) кристалданатын алаңында жатыр. Бұл алаңда жүйе құрамы бос және өзара байланысқан с молекулаларынан, гидратацияланған тұздан және тұнбаға түскен тұздан (NaCl) тұрады. X_5 нүктесінде ерітінді NaCl тұзымен қаныққан. Жүйенің фигуративтік нүктесі X_5 нүктесінен X_5^I нүктесі бағытында жылжығанда қаныққан ерітіндіден NaCl тұнбаға түседі. Нәтижесінде қаныққан ерітінді шоғыры азаяды оның нүктесі ВД қанығу сызығы бойымен Д нүктесі бағытында қозғалып отырады. Ал тұнбаға түскен тұздың (NaCl) нүктесі ИП осінің бойында орналасып, И нүктесінен Е нүктесі бағытында қозғалып отырады. Жүйенің фигуративтік нүктесі X_5 нүктесінен X_5^I нүктесіне жеткенге дейін жүйенің құрамы төмендегідей өзгереді. Бос су молекулалар саны азаяды. Олар өзара байланысқан су молекулаларының құрамына енеді. Өзара байланысқан су молекулалар санды артады. Қаныққан ерітіндідегі тұздың (NaCl) тұнбалауына байланысты шоғыр кемиді. $X_5 \rightarrow X_5^I$ кесіндісі бойындағы фигуративтік нүкте X_5^I нүктесіне жақындағанда жүйеде тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристалогидраттарының өзектері пайда бола бастайды. Фигуративтік нүкте X_5^I нүктесіне жеткенде жүйе тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристалогидраттарымен қанығады. Осы кезде тұнбаға түскен тұздың (NaCl) нүктесі Е нүктесінде орналасады, ал тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристалогидраттарымен қаныққан ерітінді нүктесі Д нүктесінде орналасады.</p>
$X_5^I \rightarrow X_5^{II}$	<p>$X_5^I \rightarrow X_5^{II}$ кесіндісі ДСЛЕ тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристаллогидраттары алаңында жатыр. Бұл алаңда тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристалогидраттары өзектерімен қаныққан өзара байланысқан су молекулалары, тұнбаға түскен тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристалогидраттары жатады. Жүйе тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристалогидраттарының өзектерімен қаныққан. Тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристалогидраттарының өзектерімен қаныққан ерітіндіден тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристалогидраттарының тұнбаға түсу нәтижесінде, еріген тұз шоғыры өзгеріске ұшырап - азаяды. $X_5^I \rightarrow X_5^{II}$ аралығында жүйеде құрам өзгермейді. Бос су молекулалары жүйеден жоғалады. Ал өзара байланысқан су молекулалары гидратталған тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристалогидраттарынан босаған су молекулалары есебінен санды өзгерістерге ұшырап, арттады. Нәтижесінде қарастырылып отырған жүйеде фигуративтік нүкте $X_5^I \rightarrow X_5^{II}$ нүктесіне жеткенде тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристалогидраттары толығымен тұнбаға түседі. Оның нүктесі Л нүктесінде орналасады. Осы кезде қаныққан ерітінді нүктесі С эвтектикалық нүктеге жетеді.</p>
$X_5^{II} \rightarrow X_5^{III}$	<p>$X_5^{II} \rightarrow X_5^{III}$ кесіндісі СКЛП қатты күйдегі тұз (NaCl) және тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристаллогидраттары қоспасы аймағында жатады. Мұнда құрам тұздан (NaCl), тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристалогидраттынан және мұздан тұрады. Жүйенің фигуративтік нүктесі $X_5^{II} \rightarrow X_5^{III}$ бағытында қозғалғанда жүйеде құрам өзгермейді. Мұнда аталған қатты қоспаның тек температурасы төмендейді.</p>
<p>Жоғарыда сапалық сипатталған зерттеу нәтижелері судың және сулы- тұзды жүйелердің қасиеттерімен құрамын анықтауда қол жеткен соңғы ғылыми жетістіктерді қолданып санды дәйектелді (33 - кесте, 35 - сурет) [106].</p>	
$X_6 \rightarrow X_6^{III}$ вертикалы бойында	
<p>$X_6 \rightarrow X_6^{III}$ вертикалының бойында жүйедегі құрам өзгерістері $X_5 \rightarrow X_5^{III}$ вертикалы бойындағы құрам өзгерістері сипатын қайталайды. Мұнда тек бастамалық фигуративтік нүкте ерітіндінің артық шоғырымен сипатталады. Нәтижесінде $X_6 \rightarrow X_6^{III}$ вертикалының бойындағы құрам өзгерістері сандық есептеулері өзге мәнге ие болады (кесте 34).</p>	

32 Кестенің жалғасы

1	2
$Y_1 \rightarrow Y_1^{\text{II}}$ горизонталы бойында	
$Y_1 \rightarrow Y_1^{\text{I}}$	<p>$Y_1 \rightarrow Y_1^{\text{I}}$ кесіндісі АСДВМ қанықпанған ерітінділер аймағында жатыр. Бұл алаңда жүйе құрамдастары бос және өзара байланысқан судан және еріп гидратталған тұздан тұрады. $Y_1 \rightarrow Y_1^{\text{I}}$ кесіндісі бойында жүйедегі температура тұрақты шама. $Y_1 \rightarrow Y_1^{\text{I}}$ аралығында ДВ қанығу қисығы бағытында жүйенің құрамы сапалық өзгеріске ұшырайды. Ерітіндіден судың булануына байланысты жүйедегі бос және байланысқан су саны азаяды. Гидратталған тұз құрамы сандық өзгерістерге ұшырайды. $Y_1 \rightarrow Y_1^{\text{I}}$ кесіндісі ДВ қанығу қисығы бағытында Y_1^{I} нүктесіне жақындағанда жүйеде тұз (NaCl) өзектері пайда бола бастайды. Y_1^{I} нүктесіне жеткенде жүйе тұзбен (NaCl) қаныққан күйде болады. Жүйеде бос және байланысқан су саны азаяды. Яғни, қарастырылып отырған жүйе құрамы Y_1^{I} нүктесінде тұзбен (NaCl) қаныққан және бос, байланысқан су қоспасынан тұрады.</p>
$Y_1^{\text{I}} \rightarrow Y_1^{\text{II}}$	<p>$Y_1^{\text{I}} \rightarrow Y_1^{\text{II}}$ кесіндісі ДВИЕ тұз (NaCl) кристалданатын алаңында жатыр. Бұл алаңда жүйе құрамы бос және өзара байланысқан су молекулаларынан, гидратацияланған тұздан және тұнбаға түскен тұздан (NaCl) тұрады. Y_1^{I} нүктесінде ерітінді NaCl тұзымен қаныққан. Жүйенің фигуративтік нүктесі Y_1^{I} нүктесінен Y_1^{II} нүктесі бағытында жылжығанда қаныққан ерітіндіден су буланып, тұз (NaCl) тұнбаға түседі. Нәтижесінде қаныққан ерітінді шоғыры арттады. Ерітінді құрамы сандық өзгеріске ұшырайды (35 - кесте, 36 - сурет).</p>
$Y_2 \rightarrow Y_2^{\text{III}}$ горизонталы бойында	
$Y_2 \rightarrow Y_2^{\text{I}}$	<p>$Y_2 \rightarrow Y_2^{\text{I}}$ кесіндісі АСР мұздың кристалданатын аймағында жатыр. Бұл алаңда мұз өзектерімен қаныққан ерітінді мен осы ерітіндіден қатты күйде тұнбаланған мұз кристалдары болады. Мұнда жүйе құрамы мұз өзектерінен, өзара байланысқан тұрады. Жүйе тұзбен қанықпаған. $Y_2 \rightarrow Y_2^{\text{I}}$ аралығында РС осі бағытында жүйенің құрамы сапалық өзгеріске ұшырайды. Мұз өзектерімен қаныққан ерітіндіден су буланып, мұз кристалдары тұнбаға түседі. Нәтижесінде ерітіндіде еріген тұз шоғыры өзгеріске ұшырап – артады</p>
$Y_2^{\text{I}} \rightarrow Y_2^{\text{II}}$	<p>$Y_2^{\text{I}} \rightarrow Y_2^{\text{II}}$ кесіндісі АСДВМ қанықпанған ерітінді аймағында жатыр. Бұл алаңда жүйе құрамдастары болып өзара байланысқан судан және еріп гидратталған тұздан тұрады. $Y_2^{\text{I}} \rightarrow Y_2^{\text{II}}$ кесіндісі бойында жүйедегі температура тұрақты шама. $Y_2^{\text{I}} \rightarrow Y_2^{\text{II}}$ аралығында жүйенің құрамы сапалық өзгеріске ұшырайды. Өзара байланысқан су ары қарай еріп гидратталған тұздар құрамына құрамына еніп, олардың саны кемиді. Гидратталған тұздар да сандық өзгерістерге ұшырайды. Олардың құрамындағы біріншілей гидраттану сулары сандары артады. $Y_2^{\text{I}} \rightarrow Y_2^{\text{II}}$ кесіндісі Y_2^{II} нүктесіне жақындағанда жүйе байланысқан су молекулаларынан, гидратталған тұздан (NaCl) және (NaCl·2H₂O) кристалогидраттарының өзектерінен тұрады. Y_2^{II} нүктесінде жүйе (NaCl·2H₂O) кристалогидраттарымен қаныққан ерітінді</p>
$Y_2^{\text{II}} \rightarrow Y_2^{\text{III}}$	<p>$Y_2^{\text{II}} \rightarrow Y_2^{\text{III}}$ кесіндісі ДСЛЕ тұз (NaCl·2H₂O) кристаллогидраттары тұнбаланатын алаңында жатыр. Бұл алаңда тұз (NaCl·2H₂O) кристалогидраттары өзектерімен қаныққан өзара байланысқан су молекулалары, тұнбаға түскен тұз (NaCl·2H₂O) кристалогидраттары жатады. Жүйе тұз (NaCl·2H₂O) кристалогидраттарының өзектерімен қаныққан. Тұз (NaCl·2H₂O) кристалогидраттарының өзектерімен қаныққан ерітіндіден тұз (NaCl·2H₂O) кристалогидраттарының тұнбаға түсу нәтижесінде, еріген тұз шоғыры өзгеріске ұшырап – көбейеді. (36 – кесте, 37 - сурет).</p>

Кесте – 33 $X_1 \rightarrow X_1^{\text{III}}$ вертикалы бойындағы есептік нәтижелер

№	Температура, °С	Ерітіндідегі NaCl шоғыры, %	Ерітіндідегі H ₂ O, мөлшері, %	Ерітіндідегі NaCl моль саны, моль	Ерітіндідегі H ₂ O моль саны	Ерітіндідегі NaCl молекулалар саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі H ₂ O молекулаларының жалпы саны, 10 ⁻²³	Өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Бос су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі NaCl молекулаларын гидраттаған су молекулалары саны, Ерітіндідегі қалған бос су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Тұнбаға түскен су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Гидратталған NaCl молекулалары құрамынан шыққан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Тұнбалаған NaCl молекулалары саны, 10 ⁻²³	
Қанықпаған ерітінді аймағында															
1	100	9,5	90,5	0,162	5,027	0,977	30,277	5,449	24,827	4,253	20,573	5,449	0	0	0
	60	9,5	90,5	0,162	5,027	0,977	30,277	8,477	21,799	4,253	17,545	8,477	0	0	0
	40	9,5	90,5	0,162	5,027	0,977	30,277	10,899	19,377	4,253	15,123	10,899	0	0	0
	10	9,5	90,5	0,162	5,027	0,977	30,277	18,469	11,808	4,253	7,5541	18,469	0	0	0
	Қанығу қисығы бойында														
	0	9,5	90,5	0,162	5,027	0,977	30,277	26,038	4,238	4,253	0	26,038	0	0	0
Тұнбаға түскен мұз және қаныққан ерітінді аймағында															
2	-10	9,5	81,6	0,162	4,533	0,977	27,299	27,299	0	4,253	0	23,045	2,98	0	0
	-20	9,5	76	0,162	4,222	0,977	25,426	25,426	0	4,253	0	21,180	4,85	0	0
Тұнбаға түскен мұз және эвтектикалық құрамды қатты тұнба қоспасы аймағында															
3	-30	9,5	76	0,162	4,222	0,977	25,426	25,426	0	0	0	21,180	4,85	4,246	0,977



Сурет – 36 Сулы-тұзды жүйеде $X_1 \rightarrow X_1^{\text{III}}$ вертикалы бойындағы сулы-тұзды жүйеде орын алатын құрамдық өзгерістер сипаты

Кесте – 34 $X_2 \rightarrow X_2^{III}$ вертикалы бойындағы есептік нәтижелер

№	Температура, °C	Ерітіндідегі NaCl шоғыры, %	Ерітіндідегі H ₂ O, мөлшері, %	Ерітіндідегі NaCl моль саны, моль	Ерітіндідегі H ₂ O моль саны	Ерітіндідегі NaCl молекулалар саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі H ₂ O молекулаларының жалпы саны, 10 ⁻²³	Өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Бос сумолекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі NaCl молекулаларын гидраттаған су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі қалған бос сумолекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Тұнбаға түскен су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Гидратталған NaCl молекулалары құрамынан шыққан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Тұнбаланған NaCl молекулалары саны, 10 ⁻²³
Қанықпаған ерітінді аймағында															
1	100	15	85	0,256	4,722	1,544	28,437	5,118	23,32	6,716	16,61 1	5,118	0	0	0
	60	15	85	0,256	4,722	1,544	28,437	7,9624	20,47	6,716	13,76	7,962	0	0	0
	40	15	85	0,256	4,722	1,544	28,437	10,237	18,20	6,716	11,48	10,237	0	0	0
	10	15	85	0,256	4,722	1,544	28,437	17,346	11,09	6,716	4,373	17,346	0	0	0
	0	15	85	0,256	4,722	1,544	28,437	4,456	3,981	6,716	0	21,720	0	0	0
Қанығу қисығы бойында															
	-5	15	85	0,256	4,722	1,544	28,437	27,868	0,568	6,716	0	21,720	0	0	0
Тұнбаға түскен мұз және қаныққан ерітінді аймағында															
2	-10	15	81,6	0,256	4,533	1,544	27,299	27,299	0	6,716	0	20,583	1,14	0	0
	-20	15	76	0,256	4,222	1,544	25,426	25,426	0	6,716	0	18,710	3,01	0	0
Тұнбаға түскен мұз және эвтектикалық құрамды қатты тұнба қоспасы аймағында															
3	-30	15	76	0,256	4,222	1,544	25,426	25,426	0	0	0	18,71	3,01	6,716	1,544

Кесте – 35 $X_3 \rightarrow X_3^{II}$ вертикалы бойындағы есептік нәтижелер

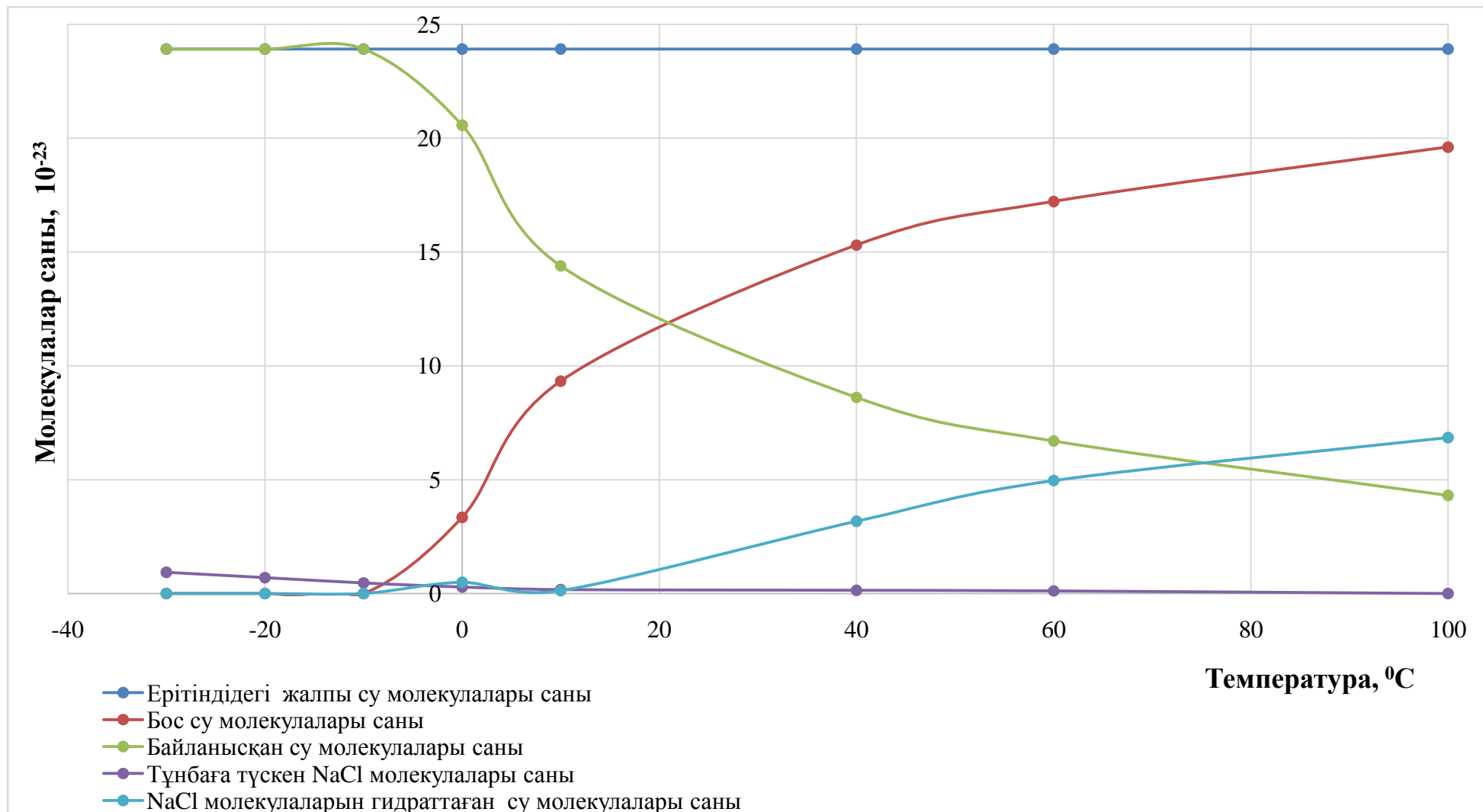
№	Температура, °С	Ерітіндідегі NaCl шоғыры, %	Ерітіндідегі H ₂ O, мөлшері, %	Ерітіндідегі NaCl моль саны, моль	Ерітіндідегі H ₂ O моль саны	Ерітіндідегі NaCl молекулалар саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі H ₂ O молекулаларының жалпы саны, 10 ⁻²³	Өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Бос су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі NaCl молекулаларын гидраттаған су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі қалған бос су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Тұнбаға түскен су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Гидратталған NaCl молекулалары құрамынан шыққан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Тұнбаланған NaCl молекулалары саны, 10 ⁻²³
Қанықпаған ерітінді аймағында															
1	100	24	76	0,41	4,22	2,470	25,426	4,576	20,849	10,746	10,102	4,576	0	0	0
	60	24	76	0,41	4,22	2,470	2,470	7,119	18,307	10,746	7,559	7,119	0	0	0
	40	24	76	0,41	4,22	2,470	2,470	9,153	16,272	10,746	5,525	9,153	0	0	0
	10	24	76	0,41	4,22	2,470	2,470	15,510	9,916	1,746	0	14,68	0	0	0
	0	24	76	0,40	4,22	2,470	2,470	21,866	3,559	10,746	0	14,68	0	0	0
Эвтектикалық нүктеде															
2	-20	24	76	0,41	4,22	2,470	25,426	25,426	0	10,746	0	14,68	0	0	0
	Тұнбаға түскен мұз және эвтектикалық құрамды қатты тұнба қоспасы аймағында														
	-30	24	76	0,41	4,22	2,470	25,426	25,426	0	10,746	0	14,68	0	10,747	2,47

Кесте – 36 $X_4 \rightarrow X_4^{III}$ вертикалы бойындағы есептік нәтижелер

№	Температура, °C	Ерітіндідегі NaCl шоғыры, %	Ерітіндідегі H ₂ O, мөлшері, %	Ерітіндідегі NaCl моль саны, моль	Ерітіндідегі H ₂ O моль саны	Ерітіндідегі NaCl молекулалар саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі H ₂ O молекулаларының жалпы саны, 10 ⁻²³	Өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Бос су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі NaCl молекулаларын гидраттаған су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі қалған бос су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Тұнбаға түскен су молекулалары саны,	Гидратталған NaCl молекулалары құрамынан шыққан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Тұнбаланған NaCl молекулалары саны, 10 ⁻²³
Қанықпаған ерітінді аймағында															
1	100	26	74	0,444	4,111	2,676	24,757	4,456	20,301	11,642	8,658	4,456	0	0	0
	60	26	74	0,444	4,111	2,676	24,757	6,932	17,825	11,642	6,182	6,932	0	0	0
	40	26	74	0,444	4,111	2,676	24,757	8,912	15,844	11,642	4,202	8,912	0	0	0
	10	26	74	0,444	4,111	2,676	24,757	15,101	9,655	11,642	0	13,115	0	0	0
	0	25,72	74	0,439	4,111	2,647	24,757	21,291	3,466	11,517	0	13,302	0	0,062	0,031
2	-10	24,6	74	0,420	4,111	2,532	24,757	24,757	0	11,015	0	13,516	0	0,226	0,113
	Тұнбаға түскен тұз және қаныққан ерітінді аймағында														
	-20	24	74	0,410	4,111	2,470	24,757	24,757	0	10,746	0	13,887		0,124	0,062
3	Тұнбаға түскен мұз және эвтектикалық құрамды қатты тұнба қоспасы аймағында														
	-30	24	74	0,410	4,111	2,470	24,757	24,757	0	0	0	13,887		10,870	2,47

Кесте – 37 $X_5 \rightarrow X_5^{III}$ вертикалы бойындағы есептік нәтижелер

№	Температура, °С	Ерітіндідегі NaCl шоғыры, %	Ерітіндідегі H ₂ O, мөлшері, %	Ерітіндідегі NaCl моль саны, моль	Ерітіндідегі H ₂ O моль саны	Ерітіндідегі NaCl молекулалар саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі H ₂ O молекулаларының жалпы саны, 10 ⁻²³	Өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Бос су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі NaCl молекулаларымен гидратацияланған судың молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі қалған бос су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Тұнбаланған NaCl молекулалары құрамынан шыққан су молекулалары саны	Тұнбаланған NaCl молекулалары саны, 10 ⁻²³
Қаныққан ерітінді аймағы														
1	100	28,5	71,5	0,487	3,972	2,933	23,920	4,305	19,615	12,761	6,853	4,305	0	0
	60	27,38	71,5	0,468	3,972	2,818	23,920	6,697	17,223	12,259	4,962	6,697	0,502	0,115
	40	27,1	71,5	0,463	3,972	2,789	23,920	8,611	15,309	12,134	3,174	8,611	0,125	0,029
	10	26,82	71,5	0,458	3,972	2,760	23,920	14,591	9,3291	12,009	0,125	12,036	0,125	0,029
	0	25,72	71,5	0,439	3,972	2,647	23,920	20,571	3,3489	11,517	0,492	12,896	0,492	0,113
2	-10	25,14	71,5	0,429	3,972	2,587	23,920	23,920	0	5,17	0	18,63	0	0,72
	Тұнбаға түскен тұз және қаныққан ерітінді аймағы													
	-20	24	71,5	0,410	3,972	2,47	23,920	23,920	0	4,94	0	18,75	0	0,351
3	Тұнбаға түскен тұз және эвтектикалық құрамды қатты қоспасы аймағы													
	-30	24	71,5	0,410	3,972	2,47	23,920	23,920	0	4,94	0	18,75	0	0,349



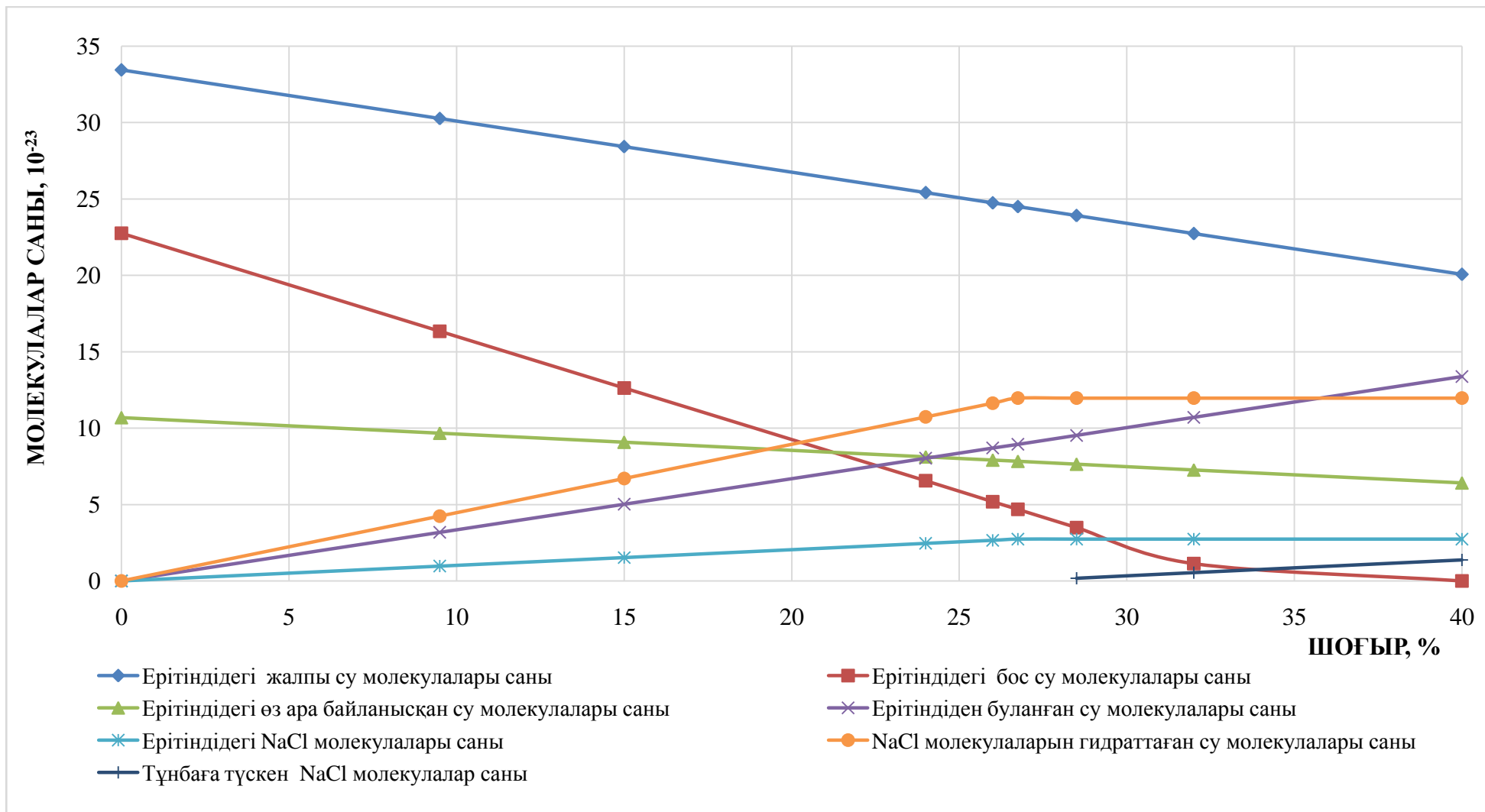
Сурет – 37 Сулы-тұзды жүйеде $X_5 \rightarrow X_5^{\text{III}}$ вертикалы бойындағы орын алатын құрамдық өзгерістер сипаты

Кесте – 38 $X_6 \rightarrow X_6^{III}$ вертикалы бойындағы есептік нәтижелер

№	Температура, °С	Ерітіндідегі NaCl шоғыры, %	Ерітіндідегі H ₂ O, мөлшері, %	Ерітіндідегі NaCl моль саны, моль	Ерітіндідегі H ₂ O моль саны	Ерітіндідегі NaCl молекулалар саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі H ₂ O молекулаларының жалпы саны, 10 ⁻²³	Өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Бос су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі NaCl молекулаларын гидраттаған су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі қалған бос су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Ерітіндідегі өзара байланысқан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Тұнбаға түскен су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Гидратталған NaCl молекулалары құрамынан шыққан су молекулалары саны, 10 ⁻²³	Тұнбаланған NaCl молекулалары саны, 10 ⁻²³
Қаныққан ерітінді аймағы															
1	100	28,5	68	0,487	3,777	2,933	22,749	4,0949	18,654	12,761	5,892	4,094	0	0	0,36
	60	27,38	68	0,468	3,777	2,818	22,749	6,369	16,379	12,259	4,119	6,369	0	0	0,115
	40	27,1	68	0,463	3,777	2,789	22,749	8,189	14,559	12,134	2,424	8,189	0	0	0,029
	10	26,82	68	0,458	3,777	2,760	22749	13,877	8,872	12,011	0	10,740	0	0	0,029
	0	25,72	68	0,439	3,777	2,647	22,749	19,569	3,184	11,517	0	11,174	0	0,058	0,029
2	-10	25,14	68	0,429	3,777	2,587	22,749	22,749	0	11,256	0	10,205	0	0,288	0,144
	Тұнбаға түскен тұз және қаныққан ерітінді аймағы														
	-20	24	68	0,410	3,777	2,470	22,749	22,749		10,746	0	11,193		0,81	0,117
3	Тұнбаға түскен тұз және эвтектикалық құрамды қатты қоспасы аймағы														
	-30	24	68	0,410	3,777	2,470	22,749	22,749	0	0	0	11,193		11,556	2,47

Кесте – 39 $У_1 \rightarrow У_1^{\text{II}}$ горизонталы бойындағы есептік нәтижелер

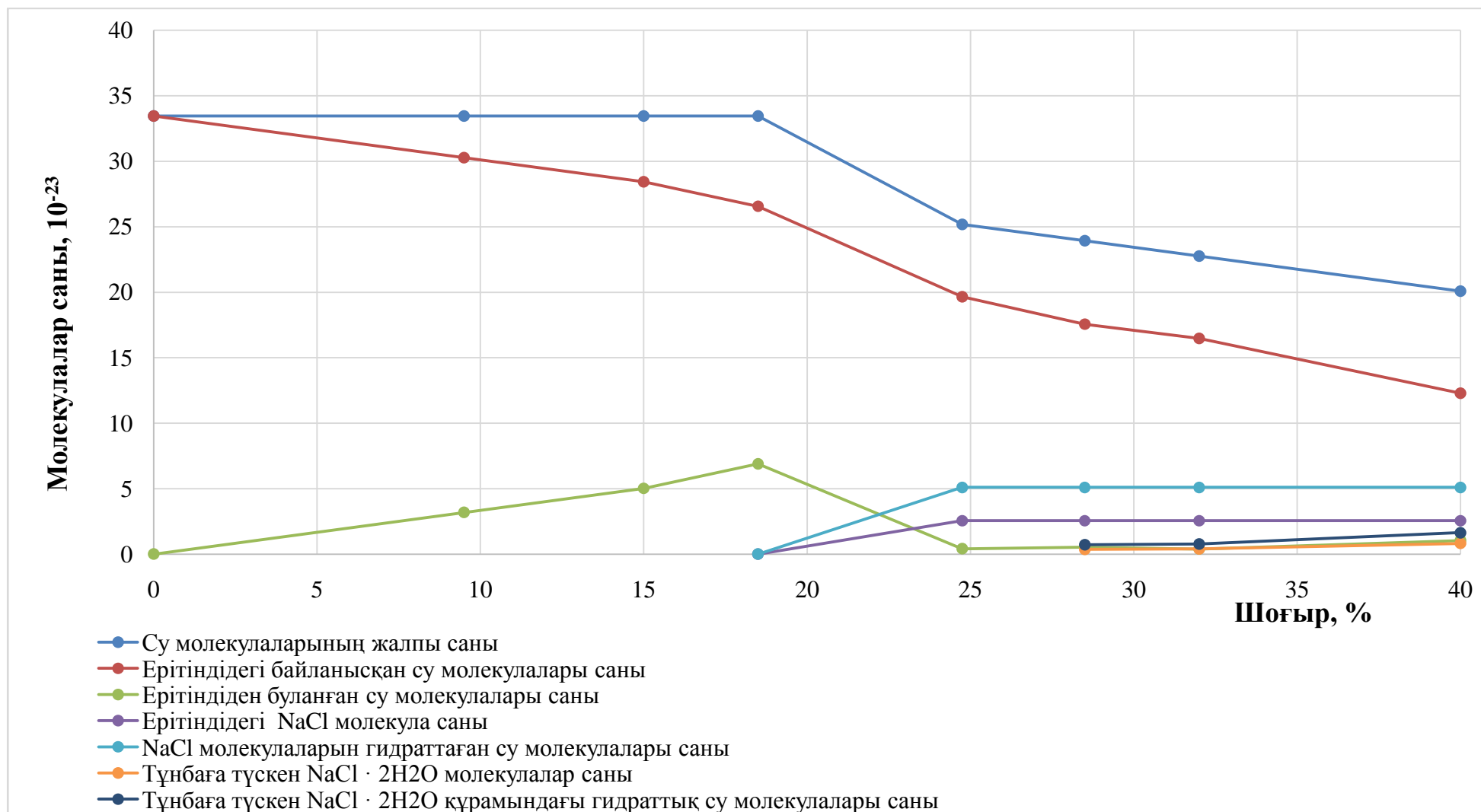
Шоғыр, %	Ерітіндідегі жалпы су молекулалары саны, 10^{-23}	Ерітіндідегі бос су молекулалары саны, 10^{-23}	Ерітіндідегі өз ара байланысқан су молекулалары саны, 10^{-23}	Ерітіндіден буланған су молекулалары саны, 10^{-23}	Ерітіндідегі NaCl молекулалары саны, 10^{-23}	NaCl молекулаларын гидраттаған су молекулалары саны, 10^{-23}	Тұнбаға түскен NaCl молекулалар саны, 10^{-23}
0	33,45	22,75	10,7	0	0	0	0
9,5	30,27	16,34	9,68	3,18	0,97	4,246	0
15	28,43	12,63	9,09	5,02	1,53	6,707	0
24	25,42	6,56	8,13	8,03	2,46	10,74	0
26	24,75	5,19	7,92	8,70	2,66	11,64	0
26,75	24,51	4,69	7,84	8,94	2,74	11,97	0
28,5	23,92	3,50	7,65	9,53	2,74	11,97	0,18
32	22,74	1,14	7,27	10,71	2,74	11,97	0,55
40	20,07	0,009	6,423	13,38	2,74	11,97	1,38



Сурет – 38 Сулы-тұзды жүйеде $U_1 \rightarrow U_1^{\text{II}}$ горизонталы бойындағы орын алатын құрамдық өзгерістер сипаты

Кесте – 40 $Y_2 \rightarrow Y_2^{III}$ горизонталы бойындағы есептік нәтижелер

Шоғыр, %	Су молекулаларының жалпы саны, 10^{-23}	Ерітіндідегі байланысқан су молекулалары саны, 10^{-23}	Ерітіндіден буланған су молекулалары саны, 10^{-23}	Ерітіндідегі NaCl молекула саны, 10^{-23}	NaCl молекулаларын гидраттаған су молекулалары саны, 10^{-23}	Тұнбаға түскен NaCl 2H ₂ O молекулалар саны, 10^{-23}	Тұнбаға түскен NaCl 2H ₂ O құрамындағы гидраттық су молекулалары саны, 10^{-23}
0	33,45	33,45	0				
9,5	33,45	30,27	3,18				
15	33,45	28,43	5,02				
18,5	33,45	26,56	6,89	0	0		
24,75	25,17	19,66	0,41	2,55	5,1		
28,5	23,92	17,56	0,54	2,55	5,1	0,36	0,72
32	22,75	16,48	0,39	2,55	5,1	0,39	0,78
40	20,07	12,29	1,04	2,55	5,1	0,82	1,64



Сурет – 39 Сулы-тұзды жүйеде $У_2 \rightarrow У_2^{III}$ горизонталы бойындағы орын алатын құрамдық өзгерістер сипаты

5.2 Сулы-тұзды жүйелердің күйлік, құрылымдылық өзгерістері заңдылықтары

Зерттеудің бұл бөлімінде сулы-тұзды жүйелердегі күйлік және құрылымдылық өзгерістері $\text{NaCl} - \text{H}_2\text{O}$ жүйесіне қатысты жүргізілген зерттеу нәтижелері келтірілген. Мұнда мақсатты зерттеулік нәтижелерге жету үшін қарастырылып отырған екі құрамдас жүйедегі еріткіш-судың және еріген зат – тұз (NaCl) қазіргі кезде белгілі күйлік, құрылымдылық өзгерістері туралы жалпылама мойындалған ғылыми мәліметтер пайдаланылды [107,108].

Мақсатты зерттеулерді жүргізуде мысал ретінде $\text{NaCl-H}_2\text{O}$ жүйесінің белгілі ерігіштік күй айнасы пайдаланылды (33 - сурет).

Зерттеу нысаны болып отырған жүйедегі күйлік, құрылымдылық өзгерістер $X_1 \rightarrow X_1^{\text{III}}$; $X_3 \rightarrow X_3^{\text{II}}$; $X_5 \rightarrow X_5^{\text{III}}$ вертикалдары мен $Y_1 \rightarrow Y_1^{\text{II}}$; $Y_2 \rightarrow Y_2^{\text{III}}$ горизонталдары бойында талданды. Осы кезде $X_1 \rightarrow X_1^{\text{III}}$ бойында $X_1 \rightarrow X_1^{\text{I}}$; $X_1^{\text{I}} \rightarrow X_1^{\text{II}}$, $X_1^{\text{II}} \rightarrow X_1^{\text{III}}$; $X_3 \rightarrow X_3^{\text{II}}$ вертикалы бойында $X_3 \rightarrow X_3^{\text{I}}$; $X_3^{\text{I}} \rightarrow X_3^{\text{II}}$; $X_5 \rightarrow X_5^{\text{III}}$ вертикалы бойында $X_5 \rightarrow X_5^{\text{I}}$, $X_5^{\text{I}} \rightarrow X_5^{\text{II}}$, $X_5^{\text{II}} \rightarrow X_5^{\text{III}}$; $Y_1 \rightarrow Y_1^{\text{II}}$ горизонталы бойында $Y_1 \rightarrow Y_1^{\text{I}}$, $Y_1^{\text{I}} \rightarrow Y_1^{\text{II}}$; $Y_2 \rightarrow Y_2^{\text{III}}$ горизонталы бойында $Y_2 \rightarrow Y_2^{\text{I}}$, $Y_2^{\text{I}} \rightarrow Y_2^{\text{II}}$, $Y_2^{\text{II}} \rightarrow Y_2^{\text{III}}$ кесінділік аралықтары жеке-жеке қарастырылды. Зерттеулік сипаттама нәтижелері төмендегі 41 – кестеде келтірілген.

Кесте – 41 $\text{NaCl-H}_2\text{O}$ жүйесіндегі күйлік, құрылымдылық өзгерістерін талдау нәтижелері

Талдау бағыттары	Жүйенің күйлік, құрылымдылық құрамы
1	2
$X_1 \rightarrow X_1^{\text{III}}$ вертикалы бойында	
$X_1 \rightarrow X_1^{\text{I}}$	$X_1 \rightarrow X_1^{\text{I}}$ кесіндісі АСДВМ қанықпанған ерітінділер аймағында жатыр. $X_1 \rightarrow X_1^{\text{I}}$ кесіндісі бойында жүйедегі еріген тұз шоғыры тұрақты шама. $X_1 \rightarrow X_1^{\text{I}}$ аралығында ГП осі бағытында жүйенің күйлік те, құрылымдылық та өзгеріске ұшырамайды. Аралықтың барлық нүктелерінде жүйе сұйық күйде. Жүйенің температурасы $X_1 \rightarrow X_1^{\text{I}}$ аралығында төмендейді. Аралықта жүйе нүктесі X_1^{I} жеткенде күй сұйық жүйеден қанықпаған ерітіндіден мұз өзектерімен қаныққан ерітіндіге айналады, күйсұйықкүйінде сақталады.
$X_1^{\text{I}} \rightarrow X_1^{\text{II}}$	$X_1^{\text{I}} \rightarrow X_1^{\text{II}}$ кесіндісі АСР мұздың кристалданатын аймағында жатыр. Бұл алаңда мұз өзектерімен қаныққан сұйық күйдегі ерітінді мен осы ерітіндіден қатты күйде тұнбаланған мұз кристалдары жатады. Аралықтың X_1^{I} нүктесінен төмен жатқан барлық нүктелерінде жүйе екі фазалық қалыпта – мұз өзектерімен қаныққан, гидратталған тұздармен қанықпаған сұйық күй және қатты күйде тұнбаланған мұз кристалдары. Жүйенің температурасы $X_1^{\text{I}} \rightarrow X_1^{\text{II}}$ аралығында төмендейді. $X_1^{\text{I}} \rightarrow X_1^{\text{II}}$ аралығында жүйе нүктесі X_1^{II} жеткенде жүйеде сұйық күй жоғалып, жүйе тек қана мұз кристалдарынан тұратын қатты күйге айналады. Осы аралықта жүйе құрылымдылық өзгеріске ұшырамайды
$X_1^{\text{II}} \rightarrow X_1^{\text{III}}$	$X_1^{\text{II}} \rightarrow X_1^{\text{III}}$ кесіндісі ГРСК қатты мұз кристалдары аймағында жатады. Аралықта жүйе тек қана тұнбаланған қатты күйдегі мұздан тұрады. Жүйенің фигуративтік нүктесі $X_1^{\text{II}} \rightarrow X_1^{\text{III}}$ бағытында қозғалғанда жүйе күйлік те, құрылымдылық та өзгеріске ұшырамайды. Жүйе қатты күйде болады. Оның тек температурасы төмендейді.

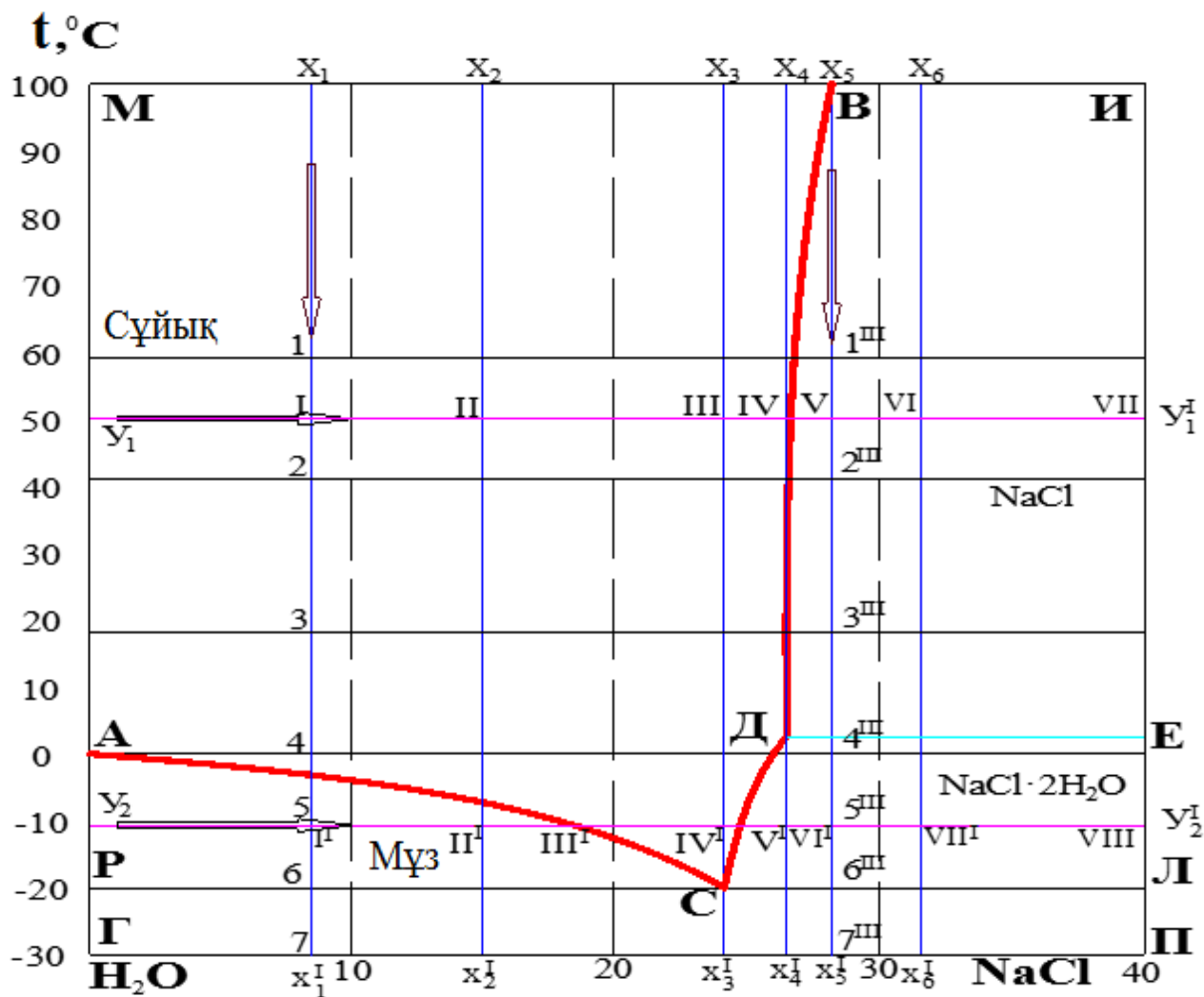
41 Кестенің жалғасы

1	2
$X_2 \rightarrow X_2^{\text{III}}$ вертикалы бойында	
$X_2 \rightarrow X_2^{\text{III}}$ вертикалының бойында жүйедегі күйлік, құрылымдылық өзгерістері $X_1 \rightarrow X_1^{\text{III}}$ вертикалы бойындағы күйлік, құрылымдылық өзгерістерін қайталайды. Мұнда тек ерітіндінің шоғырлық мәндерінде айырмашылықтар болады.	
$X_3 \rightarrow X_3^{\text{II}}$ вертикалы бойында	
$X_3 \rightarrow X_3^{\text{I}}$	$X_3 \rightarrow X_3^{\text{I}}$ кесіндісі АСДВМ қанықпанған ерітінді аймағында жатыр. Бұл аянда барлық нүктелерінде жүйе сұйық күйде. Жүйенің температурасы $X_3 \rightarrow X_3^{\text{I}}$ аралығында төмендейді. Аралықта жүйе нүктесі X_3^{I} жеткенде сұйық күйлік жүйе қанықпаған ерітіндіден мұз өзектерімен және тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттарымен қаныққан ерітіндіге айналады, жүйе сұйық күйінде сақталады. Аралықта жүйе күйлік, құрылымдылық өзгерістерге ұшырамайды.
$X_3^{\text{I}} \rightarrow X_3^{\text{II}}$	$X_3^{\text{I}} \rightarrow X_3^{\text{II}}$ кесіндісі ГРСК қатты күй аймағында жатады. Мұнда күйде, құрылымда тек бір ғана қатты күйден тұрады. Ол қатты күйдегі мұздан және $\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ кристаллогидраттарынан тұратын эвтектикалық қоспа. Мұнда қатты фазадағы аталған қоспаның температурасы $X_3^{\text{I}} \rightarrow X_3^{\text{II}}$ аралығында төмендейді.
$X_4 \rightarrow X_4^{\text{III}}$ вертикалы бойында	
$X_4 \rightarrow X_4^{\text{I}}$	$X_4 \rightarrow X_4^{\text{I}}$ кесіндісі АСДВМ қанықпанған ерітінді аймағында жатыр. Бұл аянда барлық нүктелерінде жүйе сұйық күйде. Жүйенің температурасы $X_4 \rightarrow X_4^{\text{I}}$ аралығында төмендейді, жүйеде тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттарының өзектері пайда болады. $X_4 \rightarrow X_4^{\text{I}}$ кесіндісі бойындағы фигуративтік нүкте Д немесе X_4^{I} нүктесіне жеткенде сұйық күй түріндегі жүйе тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттарымен қанығады. Жүйе әліде сұйық күйлік күйде болады.
$X_4^{\text{I}} \rightarrow X_4^{\text{II}}$	$X_4^{\text{I}} \rightarrow X_4^{\text{II}}$ кесіндісі тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттарымен қаныққан ерітіндіден және одан тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттары тұнбаланатын ДСЛЕ алаңында жатыр. $X_4^{\text{I}} \rightarrow X_4^{\text{II}}$ кесіндісі бойымен жүйенің фигуративтік нүктесі X_4^{II} нүктесі бағытында жылжығанда тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттарымен қаныққан сұйық күйлік құрылымы ДС қисығының бойымен С нүктесі бағытында, ал қатты күйлік фаза – тұнбаға түскен тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттары нүктесі ЕІ вертикалының бойымен Е нүктесі бағытында қозғалады. Фигуративтік нүкте X_4^{II} нүктесіне жеткенде қатты күй нүктесі Л нүктесіне жетеді, қаныққан ерітінді нүктесі С нүктесіне жетеді. Жүйе екі күйлік күйде болады. Жүйенің құрылымы қатты және сұйық күйге тән қасиет көрсетеді.
$X_4^{\text{II}} \rightarrow X_4^{\text{III}}$	$X_4^{\text{II}} \rightarrow X_4^{\text{III}}$ кесіндісі СКПІ қатты күйдегі тұз (NaCl) және тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристаллогидраттары қоспасы аймағында жатады. Мұнда күйде және құрылымда қатты күйде болады. Осы кезде қатты күйдегі аталған қоспаның температурасы $X_4^{\text{II}} \rightarrow X_4^{\text{III}}$ аралығында төмендейді.
$X_5 \rightarrow X_5^{\text{III}}$ вертикалы бойында	
$X_5 \rightarrow X_5^{\text{I}}$	$X_5 \rightarrow X_5^{\text{I}}$ кесіндісі тұзыбен қаныққан ерітіндіден тұздың (NaCl) кристалданатын ДВИЕ алаңында жатыр. Аралықтың барлық нүктелерінде жүйе тұзбен (NaCl) қаныққан сұйық күйден және тұнбаға түскен тұз (NaCl) кристаллдарынан тұрады. Жүйенің температурасы $X_5 \rightarrow X_5^{\text{I}}$ аралығында төмендейді. Алайда, фигуративтік нүкте $X_5 \rightarrow X_5^{\text{I}}$ вертикалы бойымен X_5^{I} нүктесі бағытында жылжып, X_5^{I} нүктесіне жақындағанда онда тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристалогидраттары өзектері пайда бола бастайды. Жүйенің фигуративтік нүктесі X_5^{I} жеткенде сұйық күй тұз ($\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) кристалогидраттары өзектерімен қанығады. Жүйе сұйық күйде болады. Жүйе құрылымы сұйық күйге тән қасиет көрсетеді.

41 Кестенің жалғасы

1	2
$X_5^{II} \rightarrow X_5^{III}$	$X_5^{II} \rightarrow X_5^{III}$ кесіндісі СКПІ қатты күйдегі тұзбен (NaCl) және тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристаллогидраттары қоспасы аймағында жатады. Аймақтағы жүйеде қатты күйлікті, құрылымдылықты қасиеттер орны алады. Мұнда қатты күйдегі қоспаның температурасы $X_4^{II} \rightarrow X_4^{III}$ аралығында төмендейді.
$X_6 \rightarrow X_6^{III}$ вертикалы бойында	
$X_6 \rightarrow X_6^{III}$ вертикалының бойында жүйедегі күйлік, құрылымдық өзгерістері $X_5 \rightarrow X_5^{III}$ вертикалы бойындағы күйлік, құрылымдық өзгерістерін қайталайды. Мұнда тек ерітіндінің шоғырлық мәндерінде айырмашылықтар болады.	
$Y_1 \rightarrow Y_1^{II}$ горизонталы бойында	
$Y_1 \rightarrow Y_1^I$	$Y_1 \rightarrow Y_1^I$ кесіндісі АСДВМ қанықпаған ерітінділер аймағында жатыр. $Y_1 \rightarrow Y_1^I$ кесіндісі бойында жүйедегі еріген тұз шоғыры өзгереді. $Y_1 \rightarrow Y_1^I$ аралығында ГІ осі бағытында жүйенің күйлік те, құрылымдылық та өзгеріске ұшырамайды. Аралықтың барлық нүктелерінде жүйе сұйық күйде. Жүйенің температурасы тұрақты шама. $Y_1 \rightarrow Y_1^I$ аралығында жүйе нүктесі Y_1^I жеткенде күй сұйық жүйеден қанықпаған ерітіндіден тұз (NaCl) өзектерімен қаныққан ерітіндіге айналады, күй сұйық күйінде сақталады.
$Y_1^I \rightarrow Y_1^{II}$	$Y_1^I \rightarrow Y_1^{II}$ кесіндісі тұзбен қаныққан ерітіндіден тұздың (NaCl) кристалданатын ДВИЕ алаңында жатыр. Аралықтың барлық нүктелерінде жүйе тұзбен (NaCl) қаныққан сұйық күйден және тұнбаға түскен тұз (NaCl) кристалдарынан тұрады. Жүйенің температурасы $Y_1^I \rightarrow Y_1^{II}$ аралығында тұрақты шама. $Y_1^I \rightarrow Y_1^{II}$ кесіндісі бойымен Y_1^{II} нүктесі бағытында жылжып, Y_1^{II} нүктесіне жақындағанда онда тұнбалаған тұз (NaCl) артып, байланысқан су буланып, сұйық күй қоюланады. Жүйе құрылымы қатты күйге тән қасиет көрсетеді.
$Y_2 \rightarrow Y_2^{III}$ горизонталы бойында	
$Y_2 \rightarrow Y_2^I$	$Y_2 \rightarrow Y_2^I$ кесіндісі АСР мұздың кристалданатын аймағында жатыр. Бұл алаңда мұз өзектерімен қаныққан сұйық күйдегі ерітінді мен осы ерітіндіден қатты күйде тұнбаланған мұз кристалдары жатады. Аралықтың $Y_2 \rightarrow Y_2^I$ кесіндісі бойында жүйе үш фазалық қалыпта – мұз өзектерімен қаныққан сұйық күй, қатты күйде тұнбаланған мұз кристалдары және буланған су булары. Осы аралықта жүйе құрылымдылық өзгеріске ұшырамайды.
$Y_2^I \rightarrow Y_2^{II}$	$Y_2^I \rightarrow Y_2^{II}$ кесіндісі АСДВМ қанықпаған ерітінді аймағында жатыр. Бұл алаңда барлық нүктелерінде жүйе сұйық күйде. Жүйенің температурасы тұрақты, ал шоғыры $Y_2^I \rightarrow Y_2^{II}$ кесіндісі бойында артады. $Y_2^I \rightarrow Y_2^{II}$ аралықта жүйе Y_2^{II} нүктесіне жеткенде сұйық күйлік жүйе тұзбен (NaCl) қанықпаған ерітіндіден және тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристаллогидраттары өзектерінен тұрып, сұйық күйінде сақталады. Аралықта жүйе күйлік, құрылымдылық өзгерістерге ұшырамайды.
$Y_2^{II} \rightarrow Y_2^{III}$	$Y_2^{II} \rightarrow Y_2^{III}$ кесіндісі тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристаллогидраттарымен қаныққан ерітіндіден және одан тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристаллогидраттары тұнбаланатын ДСЛЕ алаңында жатыр. $Y_2^{II} \rightarrow Y_2^{III}$ кесіндісі бойымен жүйенің фигуративтік нүктесі Y_2^{III} нүктесі бағытында жылжығанда тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристаллогидраттарымен қаныққан сұйық күйі ДС қисығының бағытында, ал қатты күй – тұнбаға түскен тұз ($NaCl \cdot 2H_2O$) кристаллогидраттары нүктесі Y_2^{III} нүктесіне жетеді. Жүйе екі күйлік жағдайда болып, сұйық және қатты құрылымдылық қасиет көрсетеді.

Галургиялық технологиядағы негізгі нәтижелік үрдіс ерітіндіден тұздарды тұнбалау. Осы кезде ерітіндіден тұнбаланатын алғашқы тұздар өзектерінің ерітінді шоғыры күй айнасының қанығу қисығы бойына жеткенде қалыптасатыны белгілі. Алайда, осы нәтиже еріген тұз молекулаларының ерітіндіде өзара қандай шекті қашықтыққа жақындағанында байқалады деген орынды сұраққа бүгінде жауап берілмеген. Диссертациялық ізденіс кезінде аталған өзекті мәселеге көңіл бөлініп, жауап табылды. Мақсатты зерттеулерді жүргізу негізінде NaCl-H₂O жүйесінің белгілі ерігіштік күй айнасы мысалында арнайы есептеулер жүргізілді(40 - сурет).



Сурет – 40 NaCl-H₂O жүйесінің күй айнасы

Зерттеу нысаны болып отырған күй диаграммасы қимасын қолданып NaCl-H₂O жүйесінде $X_1 \rightarrow X_1^I; X_2 \rightarrow X_2^I; X_3 \rightarrow X_3^I; X_5^I - X_5^I$ вертикалдары бойында салқындату, ал $Y_1 \rightarrow Y_1^I; Y_2 \rightarrow Y_2^I$ горизонталь бойында буландыру үрдістері талданды. Осы кезде $X_1 \rightarrow X_1^I$ вертикалы бойында 1,2,3,4,5,6,7; $X_2 \rightarrow X_2^I$ вертикалы бойында 1^I,2^I,3^I,4^I,5^I,6^I,7^I; $X_3 \rightarrow X_3^I$ вертикалы бойында 1^{II},2^{II},3^{II},4^{II},5^{II},6^{II},7^{II}; $X_5^I - X_5^I$ вертикалы бойында 1^{III},2^{III},3^{III},4^{III},5^{III},6^{III},7^{III}; $Y_1 \rightarrow Y_1^I$ горизонталы бойында I, II, III, IV, V, VI, VII; $Y_2 \rightarrow Y_2^I$ горизонталы бойында I^I, II^I,

III^I, IV^I, V^I, VI^I, VII^I, VIII^I нүктелеріндегі өзгерістер сандық есептелінді. Алынған нәтижелері 42 – 47 - кестелер мен 41 – 46 суреттерде келтірілген.

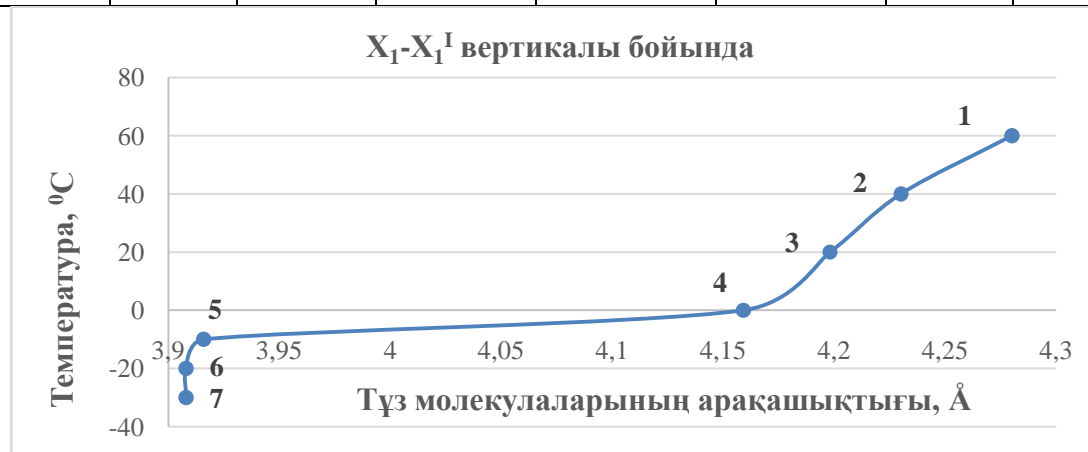
41 – 46 суреттерден көрінгендей, тұз молекулаларының арақашықтығы қанығу қисықтарына жетерде, қанығу қисықтарының бойында және қанығу қисықтарынан өткенде сандық өзгерістерге ұшырайды.

$X_1 \rightarrow X_1^I$ вертикалы бойында салқындату үрдісі орын алады. Вертикаль бойымен AC қанығу қисығы бағытында температура -10°C –да ерітіндідегі тұз молекулаларының арақашықтығы $3,91683 \text{ \AA}$ тең, ал -20°C –да C нүктесіне жақындағанда ол $3,90860 \text{ \AA}$ құрап, алғашқы тұз өзектері пайда бола бастайды. C нүктесінде тұз өзектері толық пайда болып, одан соң тұнбалана бастайды. Осындай өзгерістер $X_2 \rightarrow X_2^I$; $X_3 \rightarrow X_3^I$; $X_5 \rightarrow X_5^I$ вертикалдары бойында да қанығу қисықтарына қатысты орын алады.

$Y_1 \rightarrow Y_1^I$ горизонталь бойында буландыру үрдістері орын алады. Температура тұрақты 50°C . Горизонталь бойымен DV қанығу қисығына жақындағанда ерітіндідегі тұз молекулаларының арақашықтығы $1,03987 \text{ \AA}$ тең, ал V нүктеде ол $0,98266 \text{ \AA}$ құрап, алғашқы тұз өзектері пайда болып, тұнбалана бастайды. Ары қарай осы арақашықтық сақталып, жүйеден тұз тұнбаланады. Осындай өзгерістер $Y_2 \rightarrow Y_2^I$ горизонталь бойында да қанығу қисықтарына қатысты орын алады.

Кесте – 42 X_1 - X_1^I вертикалы бойындағы фигуративтік нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы. NaCl - H₂O жүйесі

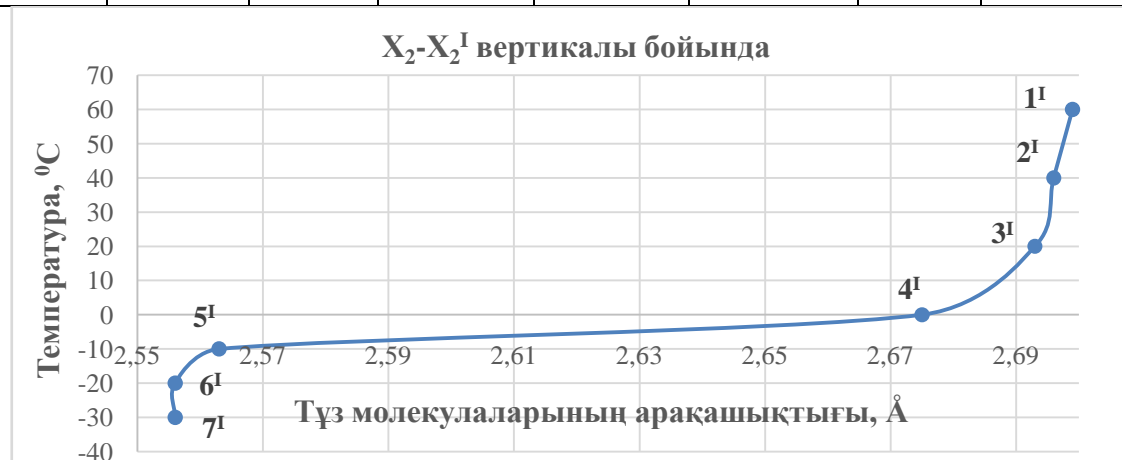
Фигуративтік нүктелер	Температура, °C	Пайыз, %	Тұздың моль саны	Ерітінді тығыздығы, г/см ³	1 см ³ ерітіндідегі тұз массасы	1 см ³ ерітіндідегі тұз моль саны	1 см ³ ерітіндідегі тұз молекулалары саны, 10 ⁻²¹	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары саны, 10 ⁻⁷	Бір тұз массасының өлшемі, Å	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары алатын аралық, 10 ⁻⁷ , Å	1 см қашықтықтағы бос қалған аралық, 10 ⁻⁸ , Å	Фигуративтік нүктелердегі ерітіндідегі тұз молекулаларының арақашықтығы, Å
1	60	9,5	0,1623	1,039	0,0987	0,00168	1,01607	1,00533	5,666	5,69620	0,43037	4,28097
2	40	9,5	0,1623	1,055	0,1002	0,00171	1,03172	1,01046	5,666	5,72529	0,42747	4,23043
3	20	9,5	0,1623	1,071	0,1017	0,00173	1,04737	1,01554	5,666	5,75409	0,42459	4,18090
4	0	9,5	0,1623	1,078	0,1024	0,00175	1,05421	1,01775	5,666	5,76660	0,42333	4,15954
5	-10	9,5	0,1623	1,162	0,1103	0,00188	1,13636	1,04353	5,666	5,91265	0,40873	3,91683
6	-20	9,5	0,1623	1,165	0,1106	0,00189	1,13929	1,04442	5,666	5,91773	0,40822	3,90860
7	-30	9,5	0,1623	1,165	0,1106	0,00189	1,13929	1,04442	5,666	5,91773	0,40822	3,90860



Сурет – 41 NaCl-H₂O жүйесін салқындату кезінде фигуратив нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы өзгерісі

Кесте – 43 $X_2-X_2^I$ вертикалы бойындағы фигуративтік нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы. $NaCl - H_2O$ жүйесі

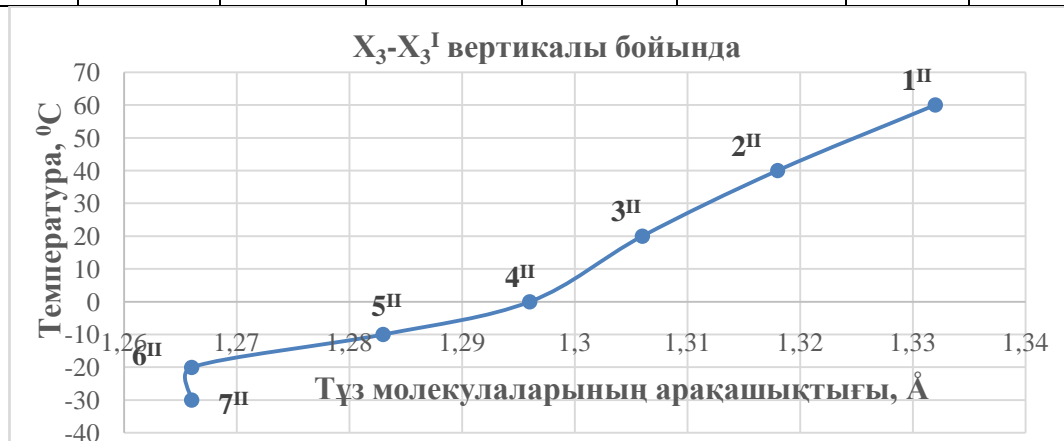
Фигуративтік нүктелер	Температура, °C	Пайыз, %	Тұздың моль саны	Ерітінді тығыздығы, г/см ³	1см ³ ерітіндідегі тұз массасы	1см ³ ерітіндідегі тұз моль саны	1см ³ ерітіндідегі тұз молекулалары саны, 10 ⁻²¹	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары саны, 10 ⁻⁷	Бір тұз массасының өлшемі, Å	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары алатын аралық, 10 ⁻⁷ , Å	1 см қашықтықтағы бос қалған аралық, 10 ⁻⁸ , Å	Фигуративтік нүктелердегі ерітіндідегі тұз молекулаларының арақашықтығы, Å
1 ^I	60	15	0,25641	1,1063	0,1659	0,002836	1,70825	1,19541	5,666	6,77320	0,32267	2,69932
2 ^I	40	15	0,25641	1,1074	0,1661	0,002839	1,70995	1,19580	5,666	6,77544	0,32245	2,69654
3 ^I	20	15	0,25641	1,1085	0,1662	0,002842	1,71165	1,19620	5,666	6,77768	0,32223	2,69378
4 ^I	0	15	0,25641	1,1160	0,1674	0,002861	1,72323	1,19889	5,666	6,79293	0,32070	2,67501
5 ^I	-10	15	0,25641	1,1620	0,1743	0,002979	1,79426	1,21514	5,666	6,88501	0,31149	2,56346
6 ^I	-20	15	0,25641	1,1650	0,1747	0,002987	1,79889	1,21619	5,666	6,89093	0,31090	2,55639
7 ^I	-30	15	0,25641	1,1650	0,1747	0,002987	1,79889	1,21619	5,666	6,89093	0,31090	2,55639



Сурет – 42 $NaCl-H_2O$ жүйесін салқындату кезінде фигуратив нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы өзгерісі

Кесте – 44 X_3 - X_3^I вертикалы бойындағы фигуративтік нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы.
 $NaCl - H_2O$ жүйесі

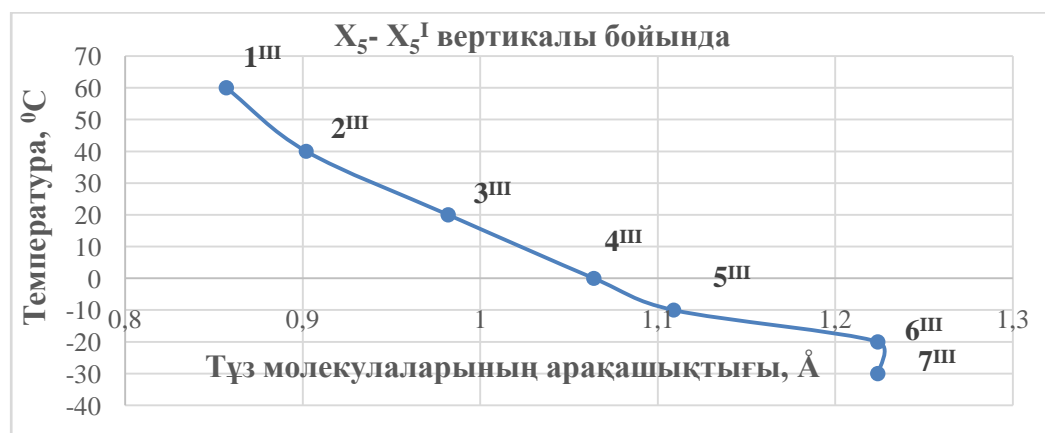
Фигуративтік нүктелер	Температура, °C	Пайыз, %	Тұздың моль саны	Ерітінді тығыздығы, г/см ³	1см ³ ерітіндідегі тұз массасы	1см ³ ерітіндідегі тұз моль саны	1см ³ ерітіндідегі тұз молекулалары саны, 10 ⁻²¹	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары саны, 10 ⁻⁷	Бір тұз массасының өлшемі, Å	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары алатын аралық, 10 ⁻⁷ , Å	1 см қашықтықтағы бос қалған аралық, 10 ⁻⁸ , Å	Фигуративтік нүктелердегі ерітіндідегі тұз молекулаларының арақашықтығы, Å
1 ^{II}	60	24	0,41025	1,181	0,28344	0,00484	2,91775	1,42894	5,666	8,09641	0,19035	1,33215
2 ^{II}	40	24	0,41025	1,191	0,28584	0,00488	2,94246	1,43296	5,666	8,11920	0,18807	1,31251
3 ^{II}	20	24	0,41025	1,194	0,28656	0,00489	2,94987	1,43417	5,666	8,12601	0,18739	1,30666
4 ^{II}	0	24	0,41025	1,199	0,28776	0,00491	2,96222	1,43617	5,666	8,13734	0,18626	1,29695
5 ^{II}	-10	24	0,41025	1,206	0,28944	0,00494	2,97952	1,43896	5,666	8,15315	0,18468	1,28346
6 ^{II}	-20	24	0,41025	1,215	0,29160	0,00498	3,00175	1,44253	5,666	8,17338	0,18266	1,26625
7 ^{II}	-30	24	0,41025	1,215	0,29160	0,00498	3,00175	1,44253	5,666	8,17338	0,18266	1,26625



Сурет – 43 $NaCl-H_2O$ жүйесін салқындату кезінде фигуратив нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы өзгерісі

Кесте – 45 X_5 - X_5^I вертикалы бойындағы фигуративтік нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы. $\text{NaCl} - \text{H}_2\text{O}$ жүйесі

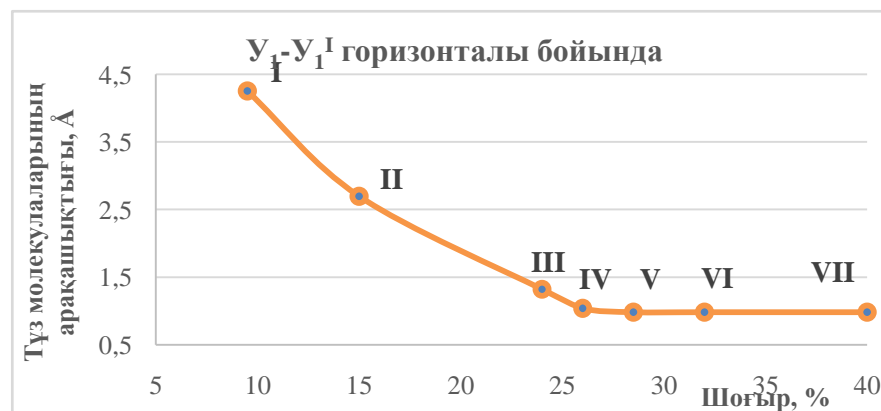
Фигуративтік нүктелер	Температура, °C	Пайыз, %	Тұздың моль саны	Ерітінді тығыздығы, г/см ³	1 см ³ ерітіндідегі тұз массасы	1 см ³ ерітіндідегі тұз моль саны	1 см ³ ерітіндідегі тұз молекулалары саны, 10 ⁻²¹	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары саны, 10 ⁻⁷	Бір тұз массасының өлшемі, Å	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары алатын аралық, 10 ⁻⁷ , Å	1 см қашықтықтағы бос қалған аралық, 10 ⁻⁸ , Å	Фигуративтік нүктелердегі ерітіндідегі тұз молекулаларының арақашықтығы, Å
1 ^{III}	60	27,38	0,46803	1,278	0,34991	0,00598	3,60207	1,53291	5,666	8,68548	0,13145	0,85752
2 ^{III}	40	27,10	0,46324	1,265	0,34281	0,00586	3,52896	1,52247	5,666	8,62632	0,13736	0,90226
3 ^{III}	20	26,40	0,45128	1,252	0,33052	0,00565	3,40248	1,50406	5,666	8,52201	0,14779	0,98266
4 ^{III}	0	25,72	0,43965	1,239	0,31867	0,00544	3,28042	1,48585	5,666	8,41886	0,15811	1,06412
5 ^{III}	-10	25,10	0,42905	1,244	0,31224	0,00533	3,21426	1,47579	5,666	8,36188	0,16381	1,10998
6 ^{III}	-20	24,00	0,41025	1,237	0,29688	0,00507	3,05611	1,45118	5,666	8,22241	0,17775	1,22491
7 ^{III}	-30	24,00	0,41025	1,237	0,29688	0,00507	3,05611	1,45118	5,666	8,22241	0,17775	1,22491



Сурет – 44 $\text{NaCl} - \text{H}_2\text{O}$ жүйесін салқындату кезінде фигуратив нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы өзгерісі

Кесте – 46 Y_1 - Y_1^I горизонталы бойындағы фигуративтік нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы. NaCl - H₂O жүйесі

Фигуративтік нүктелер	Температура, °C	Пайыз, %	Тұздың моль саны	Ерітінді тығыздығы, г/см ³	1см ³ ерітіндідегі тұз массасы	1см ³ ерітіндідегі тұз моль саны	1см ³ ерітіндідегі тұз молекулалары саны, 10 ⁻²¹	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары саны, 10 ⁻⁷	Бір тұз массасының өлшемі, Å	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары алатын аралық, 10 ⁻⁷ , Å	1 см қашықтықтағы бос қалған аралық, 10 ⁻⁸ , Å	Фигуративтік нүктелердегі ерітіндідегі тұз молекулаларының арақашықтығы, Å
I	50	9,5	0,16239	1,0470	0,09946	0,00170	1,02390	1,00790	5,666	5,71078	0,42892	4,25557
II		15,0	0,25641	1,1068	0,16602	0,00283	1,70902	1,19559	5,666	6,77422	0,32257	2,69806
III		24,0	0,41025	1,1860	0,28464	0,00486	2,93011	1,43096	5,666	8,10782	0,18921	1,32230
VI		26,0	0,44444	1,2390	0,32214	0,00550	3,31613	1,49122	5,666	8,44930	0,15507	1,03987
V		28,5	0,45128	1,2520	0,33052	0,00565	3,40248	1,50406	5,666	8,52201	0,14779	0,98266
VI		32	0,45128	1,2520	0,33052	0,00565	3,40248	1,50406	5,666	8,52201	0,14779	0,98266
VII		40	0,45128	1,2520	0,33052	0,00565	3,40248	1,50406	5,666	8,52201	0,14779	0,98266



Сурет – 45 NaCl-H₂O жүйесін буландыру кезінде фигуратив нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы өзгерісі

Кесте – 47 $У_2-У_2^I$ горизонталы бойындағы фигуративтік нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы. NaCl - H₂O жүйесі

Фигуративтік нүктелер	Температура, °С	Пайыз, %	Тұздың моль саны	Ерітінді тығыздығы, г/см ³	1см ³ ерітіндідегі тұз массасы	1см ³ ерітіндідегі тұз моль саны	1см ³ ерітіндідегі тұз молекулалары саны, 10 ⁻²¹	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары саны, 10 ⁻⁷	Бір тұз массасының өлшемі, Å	1 см қашықтықтағы тұз молекулалары алатын аралық, 10 ⁻⁷ , Å	1 см қашықтықтағы бос қалған аралық, 10 ⁻⁸ , Å	Фигуративтік нүктелердегі ерітіндідегі тұз молекулаларының арақашықтығы, Å
I ^I	-10	18,50	0,31623	1,190	0,22015	0,00376	2,26624	1,31351	5,666	7,44238	0,25576	1,94715
II ^I		18,50	0,31623	1,190	0,22015	0,00376	2,26624	1,31351	5,666	7,44238	0,25576	1,94715
III ^I		18,50	0,31623	1,190	0,22015	0,00376	2,26624	1,31351	5,666	7,44238	0,25576	1,94715
VI ^I		24,00	0,41025	1,238	0,29712	0,00507	3,05858	1,45157	5,666	8,22463	0,17753	1,22306
V ^I		24,75	0,42307	1,243	0,30764	0,00525	3,16690	1,46851	5,666	8,32060	0,16793	1,14360
VI ^I		24,75	0,42307	1,243	0,30764	0,00525	3,16690	1,46851	5,666	8,32060	0,16793	1,14360
VII ^I		24,75	0,42307	1,243	0,30764	0,00525	3,16690	1,46851	5,666	8,32060	0,16793	1,14360
VIII ^I		24,75	0,42307	1,243	0,30764	0,00525	3,16690	1,46851	5,666	8,32060	0,16793	1,14360



Сурет – 46 NaCl-H₂O жүйесін буландыру кезінде фигуратив нүктелерде ерітінділердегі тұз молекулаларының арақашықтығы өзгерісі.

Бесінші тарау бойынша қорытынды

Жоғарыда келтірілген нәтижелерге сүйене отырып, сулы-тұзды жүйелерде байқалатын құрамдық, күйлік және құрылымдылық өзгерістер туралы төмендегідей тұжырымдар жасауға болады:

1. Кез келген сулы - тұзды жүйелерде температура мен еріген тұздардың шоғырларының сол жүйелерге тән мәндерінің мүмкінді өзгеру шектерінде әр түрлі құрамдық, күйлік және құрылымдылық өзгерістер орын алады.

2. Құрамдық, күйлік және құрылымдылық өзгерістерді сулы-тұзды жүйелердің күй айналары қолданысында айқын анықтауға болады. Олар кез-келген талданатын сулы - тұзды жүйелер үшін еріген тұздардың қанықпаған ерітінді, қаныққан ерітінді және тек қатты күйлерінен тұратын алаңдарында орын алады және аталған алаңдардың біреуінен екіншісіне өткенде сандық және сапалық өзгерістерге ұшырайды, Аталған өзгерістер күй айналарындағы қанығу қисықтарына жетерде, қанығу қисықтары бойында және қанығу қисықтарынан кейін орын алады.

3. Сулы – тұзды жүйелердегі құрамдық, күйлік және құрылымдылық өзгерістерге қанығу қисықтары және эвтектикалық нүктелер айрықша әсер етеді. Аталған қисықтар мен нүктелер алдында, олардың бойында және олардан өткен соң орын алатын өзгерістер сулы–тұзды жүйелердің екі құрамдасына да – еріткіш суға және еріген тұздарға да қатысты орын алады.

4. Кез келген сулы– тұзды жүйелердегі құрамдық, күйлік және құрылымдылық өзгерістерді, тұздардың ерігіштік күй айналарын пайдаланып, су және сулы– тұзды қоспалардың қасиеттері, құрамы, күйін және құрылымы туралы заманауи ғылыми жетістіктерде қол жеткен заңдылықтар мен тұжырымдар негізінде ғылыми сипаттап, санды дәйектеуге болады.

6 ЗЕРТТЕУ НӘТИЖЕЛЕРІНІҢ ГАЛУРГИЯЛЫҚ ТЕХНОЛОГИЯДАҒЫ ҚОЛДАНБАЛЫҚ МАҢЫЗДЫЛЫҒЫ

Зерттеу нәтижелері көрсеткендей, галургиялық технологиялардың нәтижелілігі олардың бастапқы негіздік құрамдастары болып табылатын минералды тұздар мен еріткіш-судың құрылымдылық, құрамдық және физика-химиялық қасиеттеріне тікелей тәуелді болып табылды. Осы кезде тұздар құрамдарындағы атомдар мен иондардың орбиталдық радиустары арқылы мүмкінді дәрежеде шынайы да, нақты да санды анықталына алатын иондардың меншікті энергетикалық көрсеткіштері шешуші рөл атқаратыны анықталды.

Диссертациялық жұмыста, ғылыми тәжірибеде алғаш рет, атомдар мен иондардың орбиталдық радиустарын есептеудің жаңа тәсілі ұсынылды. Тәсіл негізінде ілімдік химияда әлемдік деңгейде мойындалып, жеткілікті дәрежеде ғылыми негізделген заманауи жетістіктер ескерілді. Олардың қатарында, негіздік мысалдар ретінде, жалпылама белгілі танымал ғалымдар Менделеев, Кулон, Белов, Боки, Шанон, Первит, Мелвин-Хьюз, Гольдшмидт, Слэйтер, Ингольд, Брэгг, Ланде мен химия саласындағы Нобель сыйлығының лауреаттары Бор, Полинг, Сандерсон және т.б. XIX және XX ғасырлардағы озық ойлы жаңашылдар мен өнертапқыштардың атом мен ионның электрондық құрылыстары, ондағы элементтік бөлшектердің арасындағы тартылыс, тебіліс, ортадан тепкіш күштер туралы, элементтік бөлшектердің кванттық қасиеттері туралы, атомдар мен иондардың қасиеттерінің химиялық элементтердің периодтық жүйесі шеңберінде заңды өзгеру заңдылықтары сипаттары туралы, атомдар мен иондардың радиустары өлшемдері туралы белгілі мәліметтермен оларды анықтаудың негіздерінде ұсынылып, қолданысқа енгізілген тәсілдер мен әдістер туралы тұжырымдар мен нәтижелерді келтіруге болады.

Диссертациялық жұмыста атомдар мен иондардың орбиталдық радиустарын есептеу үшін ұсынылған жаңа тәсіл ғылымда элементтік бөлшектердің қасиеттері мен өлшемдері туралы тың көзқарастар қалыптастырып, олардың орбиталдық радиустары өлшемдері туралы дәйектілігі жоғары нәтижелер алуға мүмкіндік берді. Атомдар мен иондардың орбиталдық радиустарының шынайылығы жоғары жаңа авторлық нәтижелері қазіргі кезге дейінгі ғылымда ұсынылған белгілі нәтижелерді салыстармалы терең және жан-жақты талдау арқылы нақты дәйектелінді. Нәтижесінде ұсынылған атомдар мен иондардың орбиталдық радиустарын анықтаудың жаңа есептік тәсілдеріне ҚР ӘМ «Ұлттық зияткерлік меншік институты» РМК-ның 2020 жылдың 18 және 19 наурызындағы №№ 8917, 8944 шешімдерімен мемлекеттік құқықтар тізілімінде авторлық құқықпен қорғалатын объектілер мәліметтері ретінде енгізу туралы куәліктері берілді (қосымша А).

Ұсынылған жаңашылдығы мен ілімдік құндылығы күмәнсіз жаңа тәсіл бойынша анықталған иондардың орбиталдық радиустары туралы есептік нәтижелер негізінде олардың меншікті энергетикалық көрсеткіштері анықталды. Олардың қатарында ионның меншікті зарядын, гидраттық

сандарын, ион зарядының беттік тығыздығын, ион энергиясын, ионның мольдік энергиясын, тұздардың кристалдық тор энергиясын келтіруге болады. Қазіргі кезге дейін бұлардың көпшілігі туралы ашық ғылыми мәліметтер көздерінде келтірілген сенімділігі күмәнсіз мағлұматтар жоқтың қасы.

Ғылыми мәліметтер көздерінде атомдар мен иондардан тұратын минералды тұздардың кристалдық тор энергиясы шамалары туралы біршама мәліметтер бүгінде жалпылама белгілі. Олардың қатарында, ғылыми қолданбалығы жоғары маңыздылары ретінде Борн, Капустиский, Ферсман және т.б. ғалымдардың тәсілдерін келтіруге болады. Алайда аталған тәсілдер бойынша анықталған минералды тұздардың кристалдық тор энергия шамалары туралы белгілі мәліметтерді салыстырмалы талдау нәтижелері олардың өзара және бір-бірінен елеулі алшақтықта екендігін көрсетті. Сондықтан, минералды тұздардың кристалдық тор энергиясы шамаларының галургиялық технология үшін аса құнды көрсеткіш екені ескеріле отырылып, дайындалған жұмыста минералды тұздардың кристалдық тор энергиясы шамаларын есептеудің жаңа тәсілі ұсынылды. Оның ғылыми құндылығы мен дәйектілігі салыстармалы түрде сенімді дәлелденді. Ұсынылған авторлық тәсіл бойынша анықталған минералды тұздардың кристалдық тор энергиясы шамалары әдеби белгілі мәліметтермен бірдей реттікті өлшемдік шамаларда болып табылды. Олардың өзара сандық айырмашылықтарының тұздардың кристалдық тор энергия шамаларының мүмкінді белгілі алшақтықтық шектерінен аспайтыны айқындалды. Осы себепті минералды тұздардың кристалдық тор энергия шамасын есептеуге мүмкіндік беретін жаңа авторлық тәсілге ҚР ӘМ «Ұлттық зияткерлік меншік институты» РМК-ның 6 сәуір 2020 жылғы № 9147 шешімімен мемлекеттік құқықтар тізіліміне авторлық құқықпен қорғалатын объектілер мәліметтерін енгізіу туралы куәлігі берілді (қосымша А).

Жұмыстың келесі сатысында минералды тұздардың кристалдық тор энергия шамасының сулы-тұзды қоспалардың негізгі физика-химиялық қасиеттері өзгерісіне әсерлері зерттелді. Зерттеу нәтижелері галургиялық үрдістердің негізі болып табылатын сулы-тұзды жүйелердің барлық физика-химиялық қасиеттері өзгерісіне минералды тұздардың кристалдық тор энергия шамасы шешуші әсер ететінін көрсетті. Ол дегеніміз сулы-тұзды жүйелердегі минералды тұздардың кристалдық тор энергия шамасының белгілі мәндері бойынша галургиялық үрдістердің негізгі сатыларының – еріту, буландыру, салқындату, ерітіндіден тұндыру және т.б. физика-химиялық өзгерістердің технологиялық тәртіптерін алдын-ала айқындауға, реттеуге, тиімді шарттарын қабылдай алуға болатынына куәландырады. Диссертациялық жұмыстың 3.4 - бөлімінде келтірілген зерттеулік нәтижелерден көрінгендей, зерттеу нысандары ретінде қарастырылған тұздар топтамалары шеңберінде олардың кристалдық тор энергия шамаларын иодиттерден хлоридтерге, бромидтерге, нитраттарға, одан әрі сульфаттарға қатысты қарастырғанда олардың кристалдық тор энергия шамаларының сегіз есе шамасында өсіп сәйкесінше судағы ерігіштіктерінің мәні екі еседей кемиді. Осыдан галургиялық технология үшін іс-тәжірибелік қолданбалық аса маңызды төмендегідей тұжырымдар жасауға болады:

- кез-келген тұздар қоспасынан оның қажетті түрін немесе түрлерін галургиялық тәсіл қолданысында бөліп алуға олардың кристалдық торлары энергиялары шамалары негізгі бастапқы айғақтық мәлімет болып табылады;
- бастапқы галургиялық сулы-тұзды қоспаларда ерітілетін табиғи тұз қоспалары құрамы белгілі кезде олардың кристалдық торлары энергияларының есептік мәндік шамалары арқылы үрдістегі нәтижелік өнімдер шығымын, түрлемдерін, үрдіс сатылары мен технологиялық тәртіптерін алдын ала айқындауға болады;
- аталған новаторлық ұсыныстарды іс-тәжірибеге ендіру белгілі галургиялық технологияларды оңтайлауға, тиімділеуге, жетілдіруге мүмкіндік береді, сонымен қатар осы кезде іс-тәжірибеде бүгінге дейін қолданыс таппаған жаңа галургиялық технологияларды ендіруге мүмкіндіктер ашады.

Жүргізілген зерттеулер нәтижелері бойынша, олардың галургиялық технологиялардағы қолданбалық маңыздылығы туралы жоғарыда келтірілген тұжырымдарға нақты мысал ретінде сильвинит өндірісінің галитті қалдығынан ас тұзын галургиялық әдіспен өндірудің технологиясын келтіруге болады.

Жұмыстың 1.2 бөлімінде көрсетілгендей, галитті қалдық құрамын NaCl – 95,19%, KCl – 2,57%, MgCl₂ – 0,15%, CaCl₂ – 0,2%, CaSO₄ – 0,42%, ерімейтін қалдықтар – 1,47% құрайды. Осыдан көрінгендей, галитті қалдықтар галургиялық тәсілмен натрий хлоридін өндіру үшін аса тиімді шикізат көзі болып табылады. Оның құрамын негізінен натрий хлориді құрайды, ал басқа хлоридтер мен кальций сульфаты мөлшерлері салыстырмалы өте аз.

Ұсынылатын технологиялық шешімді негіздеу мақсатында галитті қалдық құрамдастарының кристалдық тор энергия шамалары анықталды (48 - кесте).

Кесте – 48 Галитті қалдық құрамдастардың кристалдық тор энергия шамалары

Тұздар	Кристалдық тор энергия шамасы U, кДж/моль
KCl	639
NaCl	679
CaCl ₂	2099
MgCl ₂	2380
CaSO ₄	2749

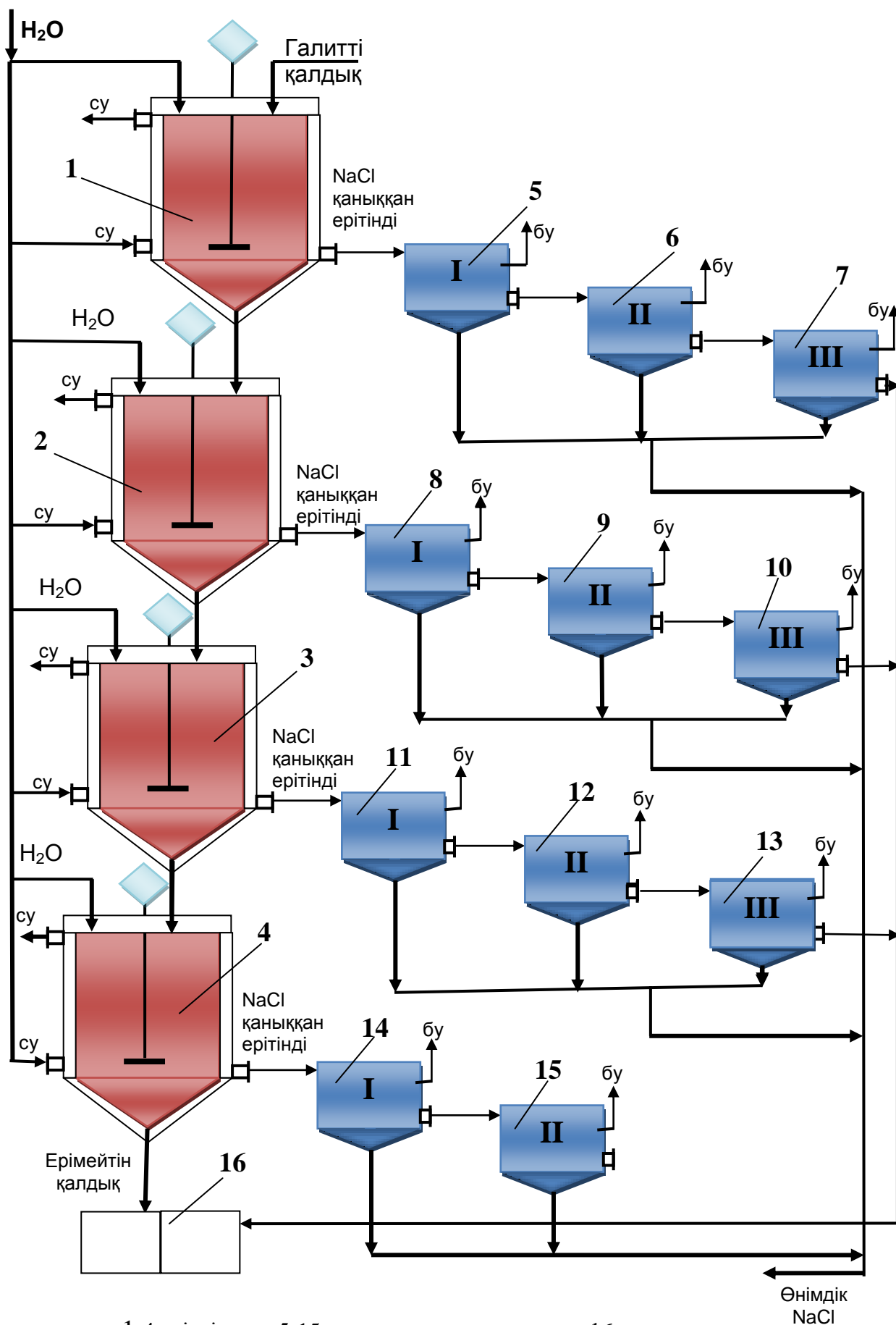
48 - кестеден көрінгендей, галитті қалдықтың құрамындағы ең көп мөлшерлі натрий хлоридінің кристалдық тор энергия шамасы NaCl, CaCl₂, MgCl₂, CaSO₄ тұздары қатарында өзгелерден үш-бес еседей аз. Осы себепті, CaCl₂, MgCl₂, CaSO₄ тұздарының суда ерігіштігі NaCl тұзына қарағанда елеулі төмен [109]. Ал натрий хлориді тұзымен кристалдық тор энергия шамасы мен судағы ерігіштігі шамалас калий хлоридінің галитті қалдық құрамындағы мөлшері натрий хлориді мөлшерінен ескермеуге болатын шамада аз.

Жоғарыда келтірілген салыстырмалық мәліметтер негізінде галитті қалдықтардан өнімдік натрий хлоридін таза ажыратып алуға болады деген

қорытынды жасауға болады. Аталған себептерге байланысты, галитті қалдықтарын жоғары температуралы сумен шаймалағанда ерітіндіге натрий хлориді өтеді. Осы үрдісті толыққанды жүргізу нәтижесінде натрий хлориді тұзының қаныққан ерітіндісі алынады. Белгілі болғандай, температурасы 100°C қаныққан ерітіндіде натрий хлориді тұзының мөлшері 28,15% құрайды. Сондықтан, 1000 кг галитті қалдықтардың құрамындағы натрий хлоридін толықтама натрий хлоридінің қаныққан ерітіндісіне айландыру үшін оны 4 рет ыстық сумен шаймалау қажет. Себебі осы кезде әр үш қаныққан 1000 кг ерітіндінің құрамына 281,5 кг натрий хлориді өтеді. Ал төртінші қаныққан ерітіндінің құрамына 107,4 кг натрий хлориді өтеді де, ол ерітіндінің массасы 382,4 кг құрайды. Осылайша алынған массалары белгілі натрий хлоридінің қаныққан ерітінділерінің біріншісі құрамына натрий хлоридінен өзге KCl – 25,7 кг, MgCl_2 – 1,5кг, CaCl_2 – 2,0 кг, CaSO_4 – 2,1 кг, екіншісі құрамына - 2,1кг CaSO_4 өтеді, ал үшіншісі мен төртіншісі құрамында таза натрий хлориді болады.

Әр ыстық сумен галитті қалдықтарды шаймалау арқылы алынған натрий хлоридімен қаныққан ерітінділер ары қарай вакуум кристаллизаторларда үш сатылы өңделеді. Нәтижелерінде вакуум кристаллизаторлардың әр сатысында таза өнімдік натрий хлориді және аз мөлшерде қалдықты қаныққан ерітінді алынады. Қалдықты қаныққан ерітінді құрамын галитті қалдықтар құрамындағы тұздар KCl , MgCl_2 , CaCl_2 , CaSO_4 және қалдықты натрий хлориді құрайды. Өнімдік натрий хлориді жинақталып, кептіріледі. Қалдықты қаныққан ерітінді және галитті қалдықтарды төрт рет ыстық сумен шаймалаудан кейінгі қалдық түрінде бөлінетін ерімейтін қоспалар арнайы құм жинақтағышқа жіберіледі де, табиғи жағдайда сусыздандырылады.

Жоғарыда келтірілген жалпы сипаттама негізінде галитті қалдықтардан натрий хлоридін галургиялық тәсілмен өндірудің технологиялық үлгісін төмендегідей келтіруге, сипаттауға болады.



1-4 еріткіштер, 5-15 вакуум кристаллизаторлар, 16- құм жинағы
 Сурет – 47 Галитті қалдықтардан натрий хлоридін өндірудің технологиялық үлгісі

Шикізат (галитті қалдық) (1) еріткішке беріледі. Еріткішке 100⁰С температураға ысытылған су беріледі. Еріткіштер араластырғыштармен жабдықталған. Еріткіште бір қалыпты температура сақталады. Натрий хлоридымен қаныққан ерітінділер (5) вакуум - кристаллизаторға беріледі. Құрамында ерімеген тұздары бар (1) еріткіштен шыққан тұнба (2) еріткішке келіп түседі. Онда ол ысытылған сумен ертіліп, натрий хлориді тұзымен қаныққан ерітінді (8) вакуум - кристаллизаторға жіберіледі. Ерімеген тұздары бар (2) еріткіштен шыққан тұнба (3) еріткішке келеді. Мұнда, олар сумен шаймаланып, натрий хлориді тұзымен қаныққан ерітінді алынады. Қаныққан ерітінді (11) вакуум - кристаллизаторға айдалады. Ал (3) еріткіштегі тұнбалаған тұнбаны (4) еріткішке жібереді. Онда ол сумен ертіліп, қаныққан ерітінді түрінде (14) вакуум - кристаллизаторға жіберіледі. (4) еріткіштен шыққан ерімейтін қалдықтар (16) құм жинағыштарға түседі.

(5) вакуум - кристаллизаторына келіп түскен натрий хлоридімен қаныққан ерітінді 3 сатылы өңделеді. (5) вакуум - кристаллизатордың I сатысында ерітіндінің шоғыры 28,15%-дан 32%-ға дейін жоғарылайды. Артық су буланып, тұздың белгілі массасы тұнбалады. Қалған ерітінді (6) вакуум кристаллизатордың II сатысына беріледі. Бұл жерде ерітінді шоғыры 32%-дан 40%-ға дейін өзгереді. Тұздың белгілі массасы тұнбаға түсіп, су буланады. Ерітіндінің қалған бөлігі (7) вакуум - кристаллизатордың III сатысына келеді. Мұнда ерітінді шоғыры 40%-дан 55%-ға дейін арттырылады. Таза тұз тұнбаланып, артық су буланады. Қалған құрамында қалдық тұздары бар қоймалжың (16) құм жинағышқа жіберіледі. Технологиялық үлгінің басқа да тізбектерінде 8-15 вакуум - кристаллизаторларында да осындай нәтижелер орын алады. Вакуум - кристаллизаторлардың бірінші сатысында 480 мм.сын. бағ. ең ақырғы сатыда 749 мм.сын.бағ. қысымдық болады. (5-15) вакуум - кристаллизаторларынан тұнбалаған өнімдік натрий хлориді тұзы жинақталып, кептіріледі. (7,10,13) вакуум - кристаллизаторларынан шыққан қалдықты қаныққан ерітінді және галитті қалдықтарды төрт рет ыстық сумен шаймалаудан кейінгі қалдық түрінде бөлінетін ерімейтін қоспалар арнайы (16) құм жинақтағышта жинақталады да, табиғи жағдайда сусыздандырылады.

Жоғарыда келтірілген технологиялық үлгінің материалдық баланс есептемелері жасалынды. Материалдық баланс 1000 кг (галитті қалдық) шикізатқа есептелінді. Онда 25,7 кг - KCl, 951,9кг - NaCl, 1,5кг - MgCl₂, 2,0кг - CaCl₂, 4,2 кг - CaSO₄, 14,7 кг ерімейтін қалдықтар бар.

1-еріту бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері – 49 - кестеде келтірілген.

Кесте - 49. 1 еріту бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1	2	3	4
1.Галит қалдығы	1000	1.Ерітінді	1000
Оның ішінде:		Оның ішінде:	
натрий хлориді NaCl –	951,9	натрий хлориді NaCl –	281,5
калий хлориді KCl –1	25,7	калий хлориді KCl –	25,7

49 Кестенің жалғасы

1	2	3	4
магний хлориді $MgCl_2$ – кальций хлориді $CaCl_2$ – кальций сульфаты $CaSO_4$ – Ерімейтін қалдықтар	1,5 2,0 4,2 14,7	магний хлориді $MgCl_2$ – кальций хлориді $CaCl_2$ – кальций сульфаты $CaSO_4$ – Су	1,5 2,0 2,1 687,2
2.Су	687,2	2.Тұнба Оның ішінде: натрий хлориді $NaCl$ – кальций сульфаты $CaSO_4$ – Ерімейтін қалдықтар	687,2 670,4 2,1 14,7
Барлығы	1687,2	Барлығы	1687,2

2-еріту бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 50 – кестеде келтірілген.

Кесте - 50. 2 еріту бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1.Тұнба Оның ішінде: натрий хлориді $NaCl$ – кальций сульфаты $CaSO_4$ – Ерімейтін қалдықтар	687,2 670,4 2,1 14,7	1.Ерітінді Оның ішінде: натрий хлориді $NaCl$ – кальций сульфаты $CaSO_4$ – Су -	1000 281,5 2,1 716,4
2.Су	716,4	2.Тұнба Оның ішінде: натрий хлориді $NaCl$ – Ерімейтін қалдықтар	403,6 388,9 14,7
Барлығы	1403,6	Барлығы	1403,6

3-еріту бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 51 – кестеде келтірілген.

Кесте - 51. 3 еріту бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1.Тұнба Оның ішінде: натрий хлориді $NaCl$ – Ерімейтін қалдықтар	403,6 388,9 14,7	1.Ерітінді Оның ішінде: натрий хлориді $NaCl$ – Су -	1000 281,5 718,5
2.Су	718,5	2.Тұнба Оның ішінде: натрий хлориді $NaCl$ – Ерімейтін қалдықтар	122,1 107,4 14,7
Барлығы	1122,1	Барлығы	1122,1

4-еріту бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 52 – кестеде келтірілген.

Кесте - 52. 4 еріту бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1.Тұнба	122,1	1.Ерітінді	382,4
Оның ішінде:		Оның ішінде:	
натрий хлориді NaCl –	107,4	натрий хлориді NaCl –	107,4
Ерімейтін қалдықтар	14,7	Су -	275
2.Су	275	2.Ерімейтін қалдықтар	14,7
Барлығы	397,1	Барлығы	397,1

Вакуум - кристаллизатордың I сатысы бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 53 – кестеде келтірілген.

Кесте - 53. Вакуум - кристаллизатордың I сатысы бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1. Ерітінді	1000	1.Ерітінді	876
Оның ішінде:		Оның ішінде:	
натрий хлориді NaCl –	281,5	калий хлориді KCl –	25,7
калий хлориді KCl –	25,7	магний хлориді MgCl ₂ –	1,5
магний хлориді MgCl ₂ –	1,5	кальций хлориді CaCl ₂ –	2,0
кальций хлориді CaCl ₂ –	2,0	кальций сульфаты CaSO ₄ –	2,1
кальций сульфаты CaSO ₄ –	2,1	су H ₂ O –	602
су H ₂ O –	687,2	натрий хлориді NaCl –	242,7
		2.Тұнбаға түскен NaCl	38,8
		3.Буланған H ₂ O	85,2
Барлығы	1000	Барлығы	1000

Вакуум - кристаллизатордың II сатысы бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 54 – кестеде келтірілген.

Кесте - 54. Вакуум - кристаллизатордың II сатысы бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1	2	3	4
1.Ерітінді	876	Ерітінді	620,3
Оның ішінде:		Оның ішінде:	
калий хлориді KCl –	25,7	калий хлориді KCl –	25,7
магний хлориді MgCl ₂ –	1,5	магний хлориді MgCl ₂ –	1,5

54 Кестенің жалғасы

1	2	3	4
кальций хлориді CaCl_2 –	2,0	кальций хлориді CaCl_2 –	2,0
кальций сульфаты CaSO_4 –	2,1	кальций сульфаты CaSO_4 –	2,1
су H_2O –	602	су H_2O –	426,3
натрий хлориді NaCl –	242,7	натрий хлориді NaCl –	162,7
		Тұнбаға түскен NaCl	80
		Буланған H_2O	175,7
Барлығы	876	Барлығы	876

Вакуум - кристаллизатордың III сатысы бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 55 – кестеде келтірілген.

Кесте – 55 Ввакуум - кристаллизатордың III сатысы бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1.Ерітінді	620,3	1.Ерітінді	77,3
Оның ішінде:		Оның ішінде:	
калий хлориді KCl –	25,7	калий хлориді KCl –	25,7
магний хлориді MgCl_2 –	1,5	магний хлориді MgCl_2 –	1,5
кальций хлориді CaCl_2 –	2,0	кальций хлориді CaCl_2 –	2,0
кальций сульфаты CaSO_4 –	2,1	кальций сульфаты CaSO_4 –	2,1
су H_2O –	426,3	су H_2O –	33,3
натрий хлориді NaCl –	162,7	натрий хлориді NaCl –	12,7
		2.Тұнбаға түскен NaCl	150
		3.Буланған H_2O	393
Барлығы	620,3	Барлығы	620,3

2 тізбектегі вакуум кристаллизатордың I сатысы бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 56 – кестеде келтірілген.

Кесте - 56 Вакуум - кристаллизатордың I сатысы бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1.Ерітінді	1000	1.Ерітінді	863,2
Оның ішінде:		Оның ішінде:	
натрий хлориді NaCl –	281,5	кальций сульфаты CaSO_4 –	2,1
кальций сульфаты CaSO_4 –	2,1	су H_2O –	618,4
су H_2O –	716,4	натрий хлориді NaCl –	242,7
		2.Тұнбаға түскен NaCl	38,8
		3.Буланған H_2O	98
Барлығы	1000	Барлығы	1000

2 тізбектегі вакуум кристаллизатордың II сатысы бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 57 – кестеде келтірілген.

Кесте - 57 Вакуум - кристаллизатордың II сатысы бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1.Ерітінді	863,2	1.Ерітінді	580,8
Оның ішінде:		Оның ішінде:	
натрий хлориді NaCl –	242,7	кальций сульфаты CaSO ₄ –	2,1
кальций сульфаты CaSO ₄ –	2,1	су H ₂ O –	416
су H ₂ O –	618,4	натрий хлориді NaCl –	162,7
		2. Тұнбаға түскен NaCl	80
		3. Буланған H ₂ O	202,4
Барлығы	863,2	Барлығы	863,2

2 тізбектегі вакуум кристаллизатордың III сатысы бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 58 – кестеде келтірілген.

Кесте - 58 Вакуум - кристаллизатордың III сатысы бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1.Ерітінді	580,8	1.Ерітінді	52,16
Оның ішінде:		Оның ішінде:	
натрий хлориді NaCl –	162,7	кальций сульфаты CaSO ₄ –	2,1
кальций сульфаты CaSO ₄ –	2,1	су H ₂ O –	37,36
су H ₂ O –	416	натрий хлориді NaCl –	12,7
		2. Тұнбаға түскен NaCl	150
		3. Буланған H ₂ O	378,64
Барлығы	580,8	Барлығы	580,8

3 тізбектегі вакуум кристаллизатордың I сатысы бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 59 – кестеде келтірілген.

Кесте - 59 Вакуум - кристаллизатордың I сатысы бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1.Ерітінді	1000	1.Ерітінді	862,17
Оның ішінде:		Оның ішінде:	
натрий хлориді NaCl –	281,5	су H ₂ O –	619,47
су H ₂ O –	718,5	натрий хлориді NaCl –	242,7
		2. Тұнбаға түскен NaCl	38,8
		3. Буланған H ₂ O	99,03
Барлығы	1000	Барлығы	1000

3 тізбектегі вакуум - кристаллизатордың II сатысы бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 60 – кестеде келтірілген.

Кесте - 60 Вакуум - кристаллизатордың II сатысы бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1.Ерітінді Оның ішінде: натрий хлориді NaCl – су H ₂ O–	862,17	1.Ерітінді	577,98
	242,7	Оның ішінде: су H ₂ O–	415,28
	619,47	натрий хлориді NaCl –	162,7
		2.Тұнбаға түскен NaCl	80
		3.Буланған H ₂ O	204,19
Барлығы	862,17	Барлығы	862,17

3 тізбектегі вакуум кристаллизатордың III сатысы бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 61 – кестеде келтірілген.

Кесте - 61 Вакуум – кристаллизатордың III сатысы бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1	2	3	4
1. Ерітінді Оның ішінде: натрий хлориді NaCl – су H ₂ O–	577,98	1.Ерітінді	45,1
	162,7	Оның ішінде: су H ₂ O–	32,4
	5,28	натрий хлориді NaCl –	12,7
		2.Тұнбаға түскен NaCl	150
		3.Буланған H ₂ O	382,88
Барлығы	577,98	Барлығы	577,98

4 тізбектегі вакуум - кристаллизатордың I сатысы бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 62 – кестеде келтірілген.

Кесте - 62 Вакуум - кристаллизатордың I сатысы бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1. Ерітінді Оның ішінде: натрий хлориді NaCl – су H ₂ O–	382,4	1.Ерітінді	244,25
	107,4	Оның ішінде: су H ₂ O–	175,65
	275	натрий хлориді NaCl –	68,6
		2.Тұнбаға түскен NaCl	38,8
		3.Буланған H ₂ O	99,35
Барлығы	382,4	Барлығы	382,4

4 тізбектегі вакуум - кристаллизатордың II сатысы бөлімінің материалдық баланс есептеулерінің нәтижелері 63 – кестеде келтірілген.

Кесте - 63 Вакуум - кристаллизатордың II сатысы бөлімінің материалдық балансы

Кіріс		Шығыс	
Зат атаулары	кг	Зат атаулары	кг
1.Ерітінді	244,25	1.Тұнбаға түскен NaCl	68,6
Оның ішінде:		2.Буланған H ₂ O	175,65
натрий хлориді NaCl –	68,6		
су H ₂ O–	175,65		
Барлығы	244,25	Барлығы	244,25

Сонымен, қорыта келгенде, дайындалған технологиялық үлгі бойынша құрамында 951,9 кг натрий хлориді бар 1000 кг қаныққан ерітіндіден галургиялық тәсілмен 913,8 кг NaCl бөлініп алынады. Осы кезде қалдық түрінде 14,7 кг ерімейтін қоспалар, 174,56 кг қаныққан қалдық ерітінді бөлінеді. Соңғысының құрамында 103,06 кг су, 71,5 кг қалдықты тұздар қоспасы бар. Аталған қалдықтар жинақталатын құм жинағышта, қалдықты қаныққан ерітінді құрамындағы судың табиғи жағдайда буланып кететінін ескергенде, жалпы қатты қалдықтар мөлшері 86,2 кг құрайды. Ол дегеніміз бастапқы 1000 кг галитті қалдықтың 8,62%-ы. Бұдан шығар қорытынды: ұсынылған технологияны қолданысқа енгізу нәтижесінде қазіргі кезде қоршаған ортада қордаланып жатқан галитті қалдықтардың әр бір 1 тоннасынан 91,38% көлемде немесе 913,8 кг таза өнімдік натрий хлоридін өндіруге болады (64 - кесте).

Кесте – 64 Галитті қалдықтарды өңдеу нәтижелерінің көрсеткіштері

Зат атауы	кг	%
1.Шикізат (галитті қалдық)	1000	100
Оның ішінде:		
натрий хлориді NaCl –	951,9	95,19
калий хлориді KCl –	25,7	2,57
магний хлориді MgCl ₂ –	1,5	0,15
кальций хлориді CaCl ₂ –	2,0	0,2
кальций сульфаты CaSO ₄ –	4,2	0,42
ерімейтін қалдықтар –	14,7	1,47
Өңдеу нәтижесі:		
өнімдік натрий хлориді NaCl –	913,8	82,84
қаныққан қалдықты ерітінді,	174,56	15,82
оның ішінде:		
тұздар қоспасы	71,5	6,48
су	103,06	9,34
ерімейтін қалдықтар –	14,7	1,33

Сонымен, ұсынылған технологияны қолданысқа ендіру нәтижесінде қоршаған ортаға тасталынатын тұзды галитті қалдықтар мөлшерін (1 тонна қалдыққа қатысты есептегенде) $100 - (86,2 \cdot 100/1000) = 91,38$ % төмендейді.

Жалпылама қорыта келе, сильвинит өндірісінің галитті қалдығынан натрий хлоридін галургиялық әдіспен өндірудің технологиялық үлгісі ұсынылып, сипатталды. Технологиялық тізбектердің материалдық балансы есептемелері жасалынды.

Сонымен қатар, диссертациялық жұмыстың 5.1 және 5.2 – бөлімдерінде мақсаттық ізденістер жоспарына сәйкес белгілі галургиялық үрдістер кезінде орын алатын құрамдық, күйлік, құрылымдылық өзгерістерге заманауи ғылыми жетістіктер негіздерінде бірнеше жалпылама белгілі сулы-тұзды жүйелердің күй айналары қолданысында жаңа сандық және сапалық сипаттамалар келтірілді. Олардың нәтижелері қазіргі кезде галургиялық технологияның ілімі мен технологиясын сипаттауда қолданыс таппаған жаңа ғылыми және қолданбалық құнды мәліметтер болып табылады. Жұмыста келтірілген жаңа сипаттамалық нәтижелер бейорганикалық заттар технологиясы саласының бакалаврлары, магистранттары, PhD докторанттары мен салалық өндірістердің, ғылыми –зерттеу кәсіпорындарының мамандары үшін жаңашылдығы мен іліми құндылығы жоғары заманауи жетістіктеріне толық сәйкес мәліметтер болып табылады. Осы себепті, жұмыстың осы бөлімінде алынған нәтижелердің бөліктері 5 оқу үрдісіне ендіру актілері түрлерінде 5B072000-Бейорганикалық заттардың химиялық технологиясы мамандығы бакалаврларының оқу бағдарламасына «Галургиялық үрдістердің ілімі мен технологиясы» пәні бойынша дәрістік және іс-тәжірибелік сабақтар ретінде енгізілді (қосымша В).

ҚОРЫТЫНДЫ

Диссертациялық зерттеулер нәтижелері бойынша қысқаша қорытындылар:

1. Атом мен ионның электрондық құрылыстары, ондағы элементтік бөлшектердің арасындағы тартылыс, тебіліс, ортадан тепкіш күштер табиғаты мен элементтік бөлшектердің кванттық қасиеттері, атомдар мен иондар қасиеттерінің химиялық элементтердің периодтық жүйесі шеңберінде жалпылама мойындалған өзгеру заңдылықтары сипаттары туралы ғылыми негізделген мәліметтерді ескере отырып, ғылыми тәжірибеде алғаш рет, атомдар мен иондардың орбиталдық радиустарын есептеудің жаңа тәсілдері ұсынылды;

2. Ұсынылған тәсілдерге ҚР ӘМ «Ұлттық зияткерлік меншік институты» РМҚ-ның 2020 жылдың 18 және 19 наурызындағы №№ 8917, 8944 шешімдерімен мемлекеттік құқықтар тізілімінде авторлық құқықпен қорғалатын объектілер мәліметтері ретінде енгізу туралы куәліктері алынды;

3. Иондардың анықталған орбитальдық радиустары нәтижелер негізінде олардың меншікті энергетикалық көрсеткіштері мәндері анықталды;

4. Минералды тұздардың кристалдық тор энергиясы шамаларының галургиялық технология үшін аса құнды көрсеткіш екені ескеріле отырылып, дайындалған жұмыста минералды тұздардың кристалдық тор энергиясы шамаларын есептеудің жаңа тәсілі ұсынылып, мәндері анықталды. Жаңа авторлық тәсілге ҚР ӘМ «Ұлттық зияткерлік меншік институты» РМҚ-ның 6 сәуір 2020 жылғы № 9147 шешімімен мемлекеттік құқықтар тізіліміне авторлық құқықпен қорғалатын объектілер мәліметтерін енгізу туралы куәлігі алынды;

5. Тұздардың кристалдық тор энергиясы шамасының сулы-тұзды жүйелердегі физика-химиялық өзгерістер заңдылықтарына әсерлері анықталды. Олар графикалық түрде өңделіп, аналитикалық теңдеулер түрінде өрнектелді;

6. $\text{NaCl-H}_2\text{O}$ жүйесінің күй айнасы негізінде сулы-тұзды жүйелердің құрамдық, күйлік, құрылымдылық қасиеттері ғылыми негізде санды және сапалы сипатталды;

7. Зерттеу нәтижелері негізінде галургиялық технологияда ілімдік және қолданбалық маңызды тұжырымдар жасалды:

– кез-келген тұздар қоспасынан оның қажетті түрлерін галургиялық тәсіл қолданысында бөліп алуда тұздар құрамдастарының меншікті энергетикалық көрсеткіштері мен олардың кристалдық тор энергиясы шамалары негізгі бастапқы мәлімет болып табылады;

– тұз құрамдастарының мольдік энергиясы негізінде олардың кристалдық тор энергиясы шамасын анықталды;

– табиғи тұз қоспалары құрамы белгілі кезде олардың кристалдық тор энергиясының есептік мәндік шамалары арқылы үрдістегі нәтижелік өнім түрлемдерін, үрдіс сатылары мен технологиялық тәртіптерін алдын ала айқындауға болады;

– мысалдық $\text{NaCl-H}_2\text{O}$ сулы-тұзды жүйесінің күй айнасы қолданысында анықталған жаңа сипаттамалық нәтижелер өзге де галургиялық жүйелер

қолданысы кезінде орын алатын құрамдық, күйлік, құрылымдылық өзгерістерді санды және сапалы талдауға мүмкіндік береді;

– диссертациялық ізденістер нәтижелерін іс-тәжірибеге ендіру белгілі галургиялық технологияларды оңтайлауға, тиімділеуге мүмкіндік береді, сонымен қатар олар галургиялық технология үрдісінің ілімін жетілдіруге және бүгінде іс-тәжірибеде қолданыс таппаған жаңа галургиялық технологияларды қолданысқа ендіруге мүмкіндіктер ашады.

8. Сильвинит өндірісінің галитті қалдықтарынан ас тұзын өндірудің технологиясы дайындалып, ұсынылды, оның режимдік және 1 тонна шикізатқа қатысты шығымдық көрсеткіштері анықталды. Дайындалған технологияны қолданысқа ендіру қоршаған ортаға тасталынатын галитті қалдықтар мөлшерін 91,38% төмендетеді.

ПАЙДАЛАНЫЛҒАН ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ

- 1 Аносов В. Краткая введение в физико-химический анализ // Изд. АН. 1959. -253с.
- 2 Древинг В., Калашников Я. Правила фаз. // Учебник. Изд МГУ, 1964. - 158с.
- 3 Бестереков У., Болысбек А.А., Назарбек У.Б. Химия и технолоия производства технических солей // Учебное пособие - Издательства «Әлем», Шымкент. 2015.-192с.
- 4 Здановский А. Справочник по растворимости солевых систем. 1953. Т.1. - 650 с.
- 5 Соколова И.Д., Галургия. Теория и практика // –Л: Химия, 1983. – 368 с.
- 6 Кашкаров О. Графический расчеты солевых систем //– Л: Химия, 1960.- 380с.
- 7 Здановский А. Б.Галургия. — Л.: Химия. Ленингр. 1972. - 528 с.
- 8 Понизовский Л.М. Соляные ресурсы Крыма. Изд. Кырм, 1965. -163 с.
- 9 Буйневич Д.В., Лепешков И.Н. Проблемы комплексного исползования соляных богатств Кара-Богаз-Гола. Ашхабад. 1960.- 480с.
- 10 Воробьёв И.Е. "Поиск ископаемых на Северо-Западном Кавказе. Краснодарский край и республика Адыгея". 2014. -320 с.
- 11 Физико-химические свойства галургических растворов и солей. Хлориды калия и магния // Под ред. Букши Ю.В., Шестакова Н.Е. Справочник. - СПб: Химия, -1997. - 512с.
- 12 Стефанцова О.Г., Ахунова А.Б., Рупчева В.А., Пойлов В.З. Исследование стадии получения кислого сульфата калия в технологии производства сульфатных калийных удобрений // вестник ПНИПУ. 2014. С.89-91
- 13 Матковський О. Алуніт у геологічних утвореннях України // Мінералогічний збірник. 2014.-245с.
- 14 Коноплев А.В., Ибламинов Р.Г., Копылов И.С. Инженерно-геологические условия жилинского калийного месторождения (Казахстан) // Современные проблемы науки и образования. – 2014. – № 5. – 175 с.
- 15 М.Д. Диаров, К.Т. Тухфатов, Г.С. Утарбаев. Калийные соли Казахстана – Алматы: Наука, 1983. – 216 с.
- 16 Т.Н. Жұмағалиев, Б.М. Куандықов Кристаллография и минералогия. – Алматы: Атамұра, 1990. – 351с
- 17 В.В.Добровольский. Минералогия, динамическая геология, петрография. — Москва: ВЛАДОС, 2001.- 468с.
- 18 T.J.Brown, L.E.Netherington и др. Производство соли // Производство полезных ископаемых в мире. 2007. -320 с.
- 19 Бестереков У., Болысбек А.А. Галургиялық үрдістер технологиясы. Оқулық. Әлем баспасы. Алматы, 2015.- 189 б.
- 20 Производство сульфата натрия из рассолов озера Кучук / Под ред. ФроловскогоЕ.Е. СПб.: Изд-во СпбГУ, 2001. – 444с.

- 21 Шихеева Л.В., Зырянов В.В. Сульфат натрия. Свойства и производство. Л.: Химия, 1978. – 240с.
- 22 Бачурин В.А., Бабоско А.Ю. Эколого-геохимическая характеристика отходов калийного производства // горный журнал.-2008-№10.-С,88-91
- 23 Н.А.Лысухо, Д.М.Ерошина Отходы производства потребления и влияния на природную среду – Минск 2011.-245с
- 24 Состояние природной среды Казахстана: эколог. бюлл. 2011 г. / Под ред. В. Ф.Логинова. – 2012, - 100с.
- 25 Бацанов С.С. Структурная химия. Факты и зависимости - М.: 2000, -292 с.
- 26 Зацепин Г.Н. Физические свойства и структура воды,-М: МГУ, 1987.-171с.
- 27 Антонченко В.Я., Давыдов А.С. Основы физики воды.-Киев: Наукова думка, 1991.-280с.
- 28 Берналь Дж.Д. Структура жидкости.-В.кн. Рост кристаллов.-М.: Наука, 1965.-Т5.- С. 121-153.
- 29 Берналь Дж.Д. Фаулер Р. Структура воды и ионных растворов // Успехи . физ. наук. -1964.-№5.- С.4-27.
- 30 Самойлов О.Я., Носова Т.А. Структурные особенности воды //Журнал структур. химии. -1966-Т 7,№1. –С.8-14.
- 31 Летников Ф.А., Кашества Т.В., Миндес А.Ш. Активированная вода.- Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1976.-134с.
- 32 Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. - Ленинград: Наука, 1975. – 592 с.
- 33 Frank H.S., Quist A.S. Paulings model and the Thermodynamic properties of water. // J. Chem. Phys. - 1961. - Vol. 34, №2. - P. 601-611.
- 34 Летников Ф.А., Минцис А.Ш., Киселев А.Б. К вопросу о метастабильном состоянии воды. В кн. Физическая активация водных систем и биологических объектов. - Л.: АФИ, - 1979. - С. 125-134.
- 35 Narten A.N., Levy H.A. Liquid Water: molecular correlation functions from X-ray diffraction // J.Chem.Phys. - 1972. - Vol. 55, №3. - P. 2263-2269.
- 36 Гуриков Ю.В. О механизме самодиффузии в воде // Журн. структур.химии. – 1964. Т.5, №2. - С. 188-192.
- 37 Гуриков Ю.В. Структура и термодинамические свойства воды. 1. Применение модели Самойлова к расчету свободной энергии воды // Журн. структур.химии. - 1965. Т. 6, № 6. - С. 817 – 823.
- 38 Гуриков Ю.В. О молекулярных моделях воды // Исследования в области поверхностных сил. - М., Наука, 1967. - С. 114 – 116.
- 39 Marchi R.P., Eyring H. Application of significant structure theory to water // J Phys. Chem. - 1964. - Vol. 68, №2. - P. 221-228.
- 40 Pauling I., March R.E. The Struchure of chlorine hydrate // Proc. Nat. Acad.Sci.- 1952.-V.38, -P.112-118.
- 41 Гуриков Ю.В. Строение льдоподобного каркаса в воде. 1. Растянутый каркас // Журн. структур.химии. – 1968. Т. 9, № 4. - С. 599 – 606.
- 42 Самойлов О.Я. Координационное число в структуре некоторых жидкостей // Журн.физ. химии. - 1946. - Т.20, В12. - С. 1411-1414.

- 43 Неволина Н.А., Самойлов О.Я., Сейфер А.Л. Зависимость ближней гидратации катионов Na^+ , K^+ , NH_4^+ от давлений // Журнал структурной химии. – 1969. - Т.10, №2. - С. 203-207.
- 44 Юхневич Г.В. Инфракрасная спектроскопия воды. - М.: Наука, 1973. – 245 с.
- 45 Самойлов О.Я. Структура водных растворов электролитов и гидратация ионов. - М.: АН СССР, 1957. – 182 с.
- 46 Бестереков У.Б., Болысбек А.А., Евдокимова Е.Г., Ермеков С.Р., Камбарова Г.А. Квантово-волновое представления о структуре и свойствах водных систем // Международный научно-практический конференция «Индустриально-инновационное развитие – основа устойчивой экономики Казахстана», - Шымкент, 2006. Т.3 – С. 487-489.
- 47 Бестереков У.Б., Евдокимова Е.Г. Структура водной среды в свете квантово-волновое представлений. / Международный научно-практический конференция «М.Ауэзов –Гений нового времени» - Шымкент, 2007.– С. 93-96.
- 48 Евдокимова Е.Г. О структуре фазовых рзновидности воды //Вестник Национальной академии наук РК, №6, 2008. – С. 125-131.
- 49 Бестереков У.Б., Болысбек А.А. Көлемдік сулық ортаның аномальды тығыздығы мен айнымалы қалпының себеп салдарлары негізі туралы пікір // Наука и образование Южного Казахстана. -2005. №7.-С.20-23.
- 50 Болысбек А.А. Сулы қоспаларды мембраналық үрдістермен ажырату: Монография.-Шымкент: М.Әуезов атындағы ОҚМУ, 2018.-104б.
- 51 Третьяков Ю.М. Структура воды и теплофизические параметры. – Ижевск: Научно-издательский центр «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. – 114 с.
- 52 Менделеев Д.И. Растворы. – Л.: Изд-во АН СССР, 1959. - 1164 с.
- 53 Угай Я.А. Общая и неорганическая химия.- М.: Высшая школа, 1997.-527 с.
- 54 Шапошник В.А. Кинетическая теория водных растворов электролитов // Вестник ВГУ. -2003. -№2. - С. 81-85.
- 55 Мищенко К.П., Полторацкий Г.М. Термодинамика и строение водных и неводных растворов электролитов. – Л.: Химия, 1976. – 320 с.
- 56 Самойлов О.Я. Структура водных растворов электролитов и гидратация ионов. – М.: Изд. АН СССР, 1957. – 182 с.
- 57 Валяшко, В.М. Фазовые равновесия и свойства гидротермальных систем / – М.: Наука, 1990. – 270 с.
- 58 Бошков, Л.З. Об описании фазовых диаграмм двухкомпонентных растворов с замкнутой областью расслаивания на основе одно жидкостной модели уравнения состояния / Докл. АН СССР. – 1987. – Т. 294. – N. 4. – С.901-905.
- 59 Стромберг А.Г. Физическая химия / А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко. - М.: Высш. шк., 2003. - 527 с.
- 60 Расулов С.М., Расулов А. Р. Особые точки на фазовой диаграмме бинарной смеси n-гексан вода // 14 Между нар. конф. по хим- термодинамике: Тез. докл. - Изд-во НИИХ СПбГУ. - 2002. - С. 302-303.

- 61 Камилов И.К. Фазовые переходы и критические явления в конденсированных средах. Махачкала: Изд. Дагестанского центра РАН, 2002. –669с.
- 62 Грошева Л.П. Графические расчеты по фазовым диаграммам солевых систем: Учебное пособие / Новгородский государственный университет. 2006. – 280 с.
- 63 Дмитриевский Б.А. Графические расчеты по фазовым диаграммам солевых систем. - Л.: ЛТИ, 1982. – 180 с.
- 64 Түгелбаева Л.М. , Рысқалиева Р.Г. Жалпы химия./Оқу құралы. 2015.- 152 б.
- 65 Н. Глинка. Общая химия. / Учебное пособие. 2015.- 732с.
- 66 Нараев В.Н., Пахомова Т.Б., Александрова Е.А. Общая химия. Учебное пособие. 2017-167с
- 67 Pauling L. The nature of the Chemical Bonds. – London, 1960. – 450 p.
- 68 A.Lande, Z.Physik, L. Pauling: Selected Scientific Papers, 1920. Т.11, - 195 p.
- 69 J.A.Wasastjerna, Comm.Fenn., 1923. № 37, - 208 p.
- 70 Регель А.Р., Глазов В.М. Периодический закон и физические свойства электронных расплавов. - М.: Наука, 1978.- 280 с.
- 71 Берд Г. Молекулярная газовая динамика. – М.: Мир, 1981.- 170 с.
- 72 Иоффе Б.В. Рефрактометрические методы химии. - Л.: Химия, 1983. - 98 с.
- 73 Уэллс А. Структурная неорганическая химия.- М.: 2000. – 285 с.
- 74 Патент RU № 2273058. Способ оценки радиусов атомов химического элемента в различном энергетическом состоянии / М.Б. Родченко, Б.Л. Александров; опубл. 27.03.2006, Бюл. № 9. - 19с.
- 75 Патент RU № 2287153. Способ измерения энергии межатомных и межмолекулярных взаимодействий и координационного числа атомов и молекулярных веществ / А.А.Потапов; опубл.10.07.2009, Бюл. № 19. - 13с.
- 76 Bohr N. On the Constitution of Atomsand Molecules // Philos. Mag. – 1913. – Series 6 / - P.50.
- 77 Сережкин В.Н., Пушкин Д.В. Кристаллохимические радиусы и координационные числа атомов / Учебная пособия. Самара. Изд-во «Самарский университет», 2004. – 52с.
- 78 Краткий справочник физико-химических величин / Под редакцией А.А. Равделя. -Л.: Химия,1983. -232с.
- 79 Павлов Н.Н. Общая и неорганическая химия. -Минск: Дрофа, 2002. – 350 с.
- 80 Чупахин А.П. Общая химия / Учебная пособия, - Новосибирск. 2003. – 168с.
- 81 Соколовсой Е.М., Вовченко Г.Д. Общая химия / Учебная пособия, Издательства. Московского университета. – М.: 1975. – 699с.
- 82 Карапентьянц М.Х., Даркин С.И. Общая и неорганическая химия / Учебник.: 2015. – 592с.
- 83 Бірімжанов Б.А., Нұмаханбетов Н.Н. Жалпы химия. Алматы.1991. - 640 б.
- 84 Метрология и радиоизмерения: учебник / И.В. Лютиков, А.Н. Фомин, В.А. Леусенко, под общ. ред. Д.С. Викторова. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2016. – 508 с.

- 85 Яворский Б. М., Детлаф А. А., Лебедев А. К. Справочник по физике для инженеров и студентов вузов. — М., Оникс, 2007. - 940с.
- 86 Наумов А. И. Физика атомного ядра и элементарных частиц. — М., Просвещение, 1984. – 364 с.
- 87 Besterekov U., Ermekov S.R., Nazarbekova S. P., Bolysbek A. A., Kambarova G. A., Zhuldusbaeva S. E., Petropavlovskiy I. A. The newest information about atom radiuses of chemical elements // EurAsian Journal of BioSciences 14, - Turkey, 2020. – P. 851-855.
- 88 Бестереков У., Петропавловский И.А., Ермеков С.Р. Новейшие сведения о радиусах атомов химических элементов // М.О. Әуезовтің «Әуезов оқулары-17: Қазақстанның үшінші жаңғыруы - жаңа концепциялар және заманауи шешімдер» халықаралық ғылыми-тәжірибелік конференция. - Шымкент.: 2019. - 59-65 б.
- 89 Физические величины. Справочник / Под редакцией Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. – М.: Энергоатомиздат, 1991. -1232с.
- 90 U. Besterekov U., Ermekov S.R., Petropavlovskiy I.A. Values and change laws of atoms and ions radius // Вестник КарГУ, Серия "Химия" 2019. - №1, С. 66-70
- 91 Бестереков У., Ермеков С.Р., Петропавловский И.А. Новые сведения о радиусах ионов химических элементов // Научно-практический журнал «Аллея Науки» Москва. 2019. - №2 (29). С. 357-364
- 92 Ермеков С.Р., Бестереков У. Атомдар мен иондардың радиустары мәндері және олардың өзгеру заңдылықтары туралы // АТУ хабаршысы, 2019. - №2 (123), 80-84б.
- 93 К. Дей, Д. Селбин Теоретическая неорганическая химия. - М.:Издательства Химия, 1976. -568с
- 94 Дж.Хьюи Неорганическая химия. - М.: Химия, 1987. -696с.
- 95 Бестереков У., Ермеков С.Р., Нуртанова Д. Иондардың жекелей сипаттамалары және олардың меншікті энергетикалық көрсеткіштерін есептеу нәтижелері туралы // Әуезов оқулары-15: Қазақстанның үшінші жаңғыруы - жаңа концепциялар және заманауи шешімдер» халықаралық ғылыми-тәжірибелік конференция. - Шымкент.: 2017. - 77-81 б.
- 96 Бестереков У., Ермеков С.Р., Нуртанова Д. Бір және екі оң зарядты иондардың радиустары мен меншікті энергетикалық көрсеткіштері өзгерісі заңдылықтары туралы // М. Әуезов атындағы ОҚМУ ғылыми еңбектері Шымкент. 2018. - №4 (45). 30-34 б.
- 97 Бестереков У., Ермеков С.Р. Сулы-тұзды жүйелер құрамдастарының меншіктік қасиеттік ерекшеліктері туралы // «Заманауи ғылым және білімнің өзекті мәселелері мен инновация тенденциялары» халықаралық ғылыми тәжірибелік конференция. - Түркістан.: 2017. - 165-169 б.
- 98 Бестереков У., Ермеков С.Р. О влиянии концентрации и зарядовых показателей ионных компоненты растворов на теплоемкость и теплопроводность водно-электролитных смесей // «ҚР тәуелсіздігіне 25 жыл толуына байланысты және жаһандану жағдайындағы қазіргі білім

- беру» жаратылыстану, техникалық ғылымдар бойынша студенттердің, магистранттардың, докторанттардың 20-шы ғылыми конференциясы. - Шымкент.: 2017. - 177-180 б.
- 99 Бестереков У., Ермеков С.Р., О влиянии концентрации и зарядовых показателей ионных компоненты растворов на вязкостные и плотностные характеристики водно-электролитных смесей // «ҚР тәуелсіздігіне 25 жыл толуына байланысты және жаһандану жағдайындағы қазіргі білім беру» жаратылыстану, техникалық ғылымдар бойынша студенттердің, магистранттардың, докторанттардың 20-шы ғылыми конференциясының еңбектері Шымкент. 2017. 180-182 б.
- 100 Бестереков У., Ермеков С.Р., Мурадова М. Сулы-тұзды жүйелердің негізгі физика-химиялық қасиеттері өзгерістері заңдылықтары туралы // М. Әуезов атындағы ОҚМУ ғылыми еңбектері Шымкент. 2018. - №4 (45). 27-30 б.
- 101 Бестереков У., Ермеков С.Р. Сулы-тұзды жүйелердегі физика-химиялық өзгерістер сипаттамалары // «Conduct of modern science-2018» халықаралық ғылыми-практикалық конференция. – Шеффилд.: 2018. -11-13 б.
- 102 Ермеков С.Р., Бестереков У. Сулы -тұзды жүйелердің химиялық құрам өзгерістері. Бастамалық фигуративтік нүктелер қанықпаған ерітінді аймағында // ҚазҰТЗУ хабаршысы, 2018. - №6 (130). 441-447 б.
- 103 Ермеков С.Р., Бестереков У. Қаныққан ерітінді аймағында сулы-тұзды жүйелердің химиялық құрам өзгерістері // ҚазҰТЗУ хабаршысы, 2018. - №6 (130). 476-481б.
- 104 Ермеков С.Р., Бестереков У. Сулы-тұзды жүйелердегі еріткіш құрамындағы температуралық сандық өзгерістер // ПМУ хабаршысы, 2018. - №3. 9-20 б.
- 105 Ермеков С.Р., Бестереков У. Сулы-тұзды қаныққан ерітінді құрамдастары құрамының сандық температуралық өзгерістері // ШҚМТУ хабаршысы, 2019. - №1, 88-92 б.
- 106 Сулы-тұзды жүйелердегі еріткіш құрамындағы температуралық сандық өзгерістер // ШҚМТУ хабаршысы, 2019. - №2, 104-11 б.
- 107 Бестереков У., Ермеков С.Р. Екі құрамды сулы-тұзды жүйелердегі фазалық құрам өзгерістері NaCl-H₂O мысалында // «Тенденция и перспективы развития науки и образования в условиях глобализации» халықаралық ғылыми-практикалық конференция. - Переяслав-Хмельницкий.: 2018. - 616 – 619 б.
- 108 Бестереков У., Ермеков С.Р. Сулы-тұзды жүйелердегі құрылымдылық өзгерістер сипаттамалары // «Wyksztalcenie I nauka bez granic-2018» халықаралық ғылыми-практикалық конференция. - Польша.: 2018. - 18-20 б.
- 109 Справочник экспериментальных данных по растворимости солевых систем. Под редакцией В.В.Вязовой, АД.Пельша. -Л.: Химия,1961.Т3, - 2223с.

ҚОСЫМША А
Авторлық куәліктер



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ



РЕСПУБЛИКА КАЗАХСТАН

АВТОРЛЫҚ ҚҰҚЫҚПЕН ҚОРҒАЛАТЫН ОБЪЕКТІЛЕРГЕ ҚҰҚЫҚТАРДЫҢ
МЕМЛЕКЕТТІК ТІЗІЛІМГЕ МӘЛІМЕТТЕРДІ ЕНГІЗУ ТУРАЛЫ

КҮӨЛІК

2020 жылғы «19» наурыз № 8944

Автордың (тізгініс) жөні, аты, өсетіні аты (егер ол және басқа құқықтарымен қорғалған жағдайда көрсетілсе):

БРАЕКОВ САТ РАХИМБАУЛЫ БЕСТЕРЕКОВ ҮЙ ТЕСБЕК

Авторлық құқық объектісі: **ғылымға құлағы**

Объектінің аты: **Хищшылық элементерлі повелер рәсімдерімен аяқталу әдісі**

Объектінің жасалған күні: **15.01.2020**



Құжат түпнұсқасының тіпті қолдануына қатысты өкілетті орган «Авторлық құқық» Бөлімінің тіркелушісі болып /Аты/ тіркелгендігі куәлендіріледі.

Подлинность документа удостоверена подписью на сайте «Авторское право» /Аты/ /Copyright.kz/

Подписано ЭЦП

Куантыров Е.С.

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ



РЕСПУБЛИКА КАЗАХСТАН

АВТОРЛЫҚ ҚҰҚЫҚПЕН ҚОРҒАЛАТЫН ОБЪЕКТІЛЕРГЕ ҚҰҚЫҚТАРДЫҢ
МЕМЛЕКЕТТІК ТІЗІЛІМГЕ МӘЛІМЕТТЕРДІ ЕНГІЗУ ТУРАЛЫ

КҮӨЛІК

2020 жылғы «6» сәуір № 9147

Авторлық (тарихи) жазба, атау, өсиеттік атау (егер ол және басқа құқықтарға қарағанда қорғалса):

ЕРМЕКОВ САЯТ РАХИМБАЙҰЛЫ БЕСТЕРЕКОВ ҮЙ ТЕСБЕК

Авторлық құқық объектісі: **ғылым тұжырымы**

Объектінің атауы: **Метод определения энергии кристаллической решетки соли**

Объектінің жаңалық күні: **31.03.2020**



Құжат түпнұсқасының тіпіншілігіне қарағанда келісіміне келіп, «Ақпараттық құқық» бағамына енгізіліп отырғандықтан, <http://www.kazpatent.kz>
Подлинность документа электронной подписью не является гарантией и не является «Авторское право» <http://www.kazpatent.kz>

Подписано ЭЦП

Куантыров Е.С.

ҚОСЫМША Б

Оң нәтиже туралы хабарлама

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ӘДІЛЕТ МИНИСТРЛІГІНІҢ
"ҰЛТТЫҚ ЗИЯТКЕРЛІК МЕНШІК
ИНСТИТУТЫ"
ШАРУАШЫЛЫҚ ЖҮРГІЗУ
ҚҰҚЫҒЫНДАҒЫ РЕСПУБЛИКАЛЫҚ
МЕМЛЕКЕТТІК КӘСПОРНЫ



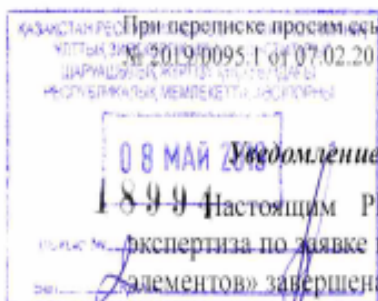
РЕСПУБЛИКАНСКОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
ПРЕДПРИЯТИЕ НА ПРАВЕ
ХОЗЯЙСТВЕННОГО ВЕДЕНИЯ
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИНСТИТУТ
ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ»
МИНИСТЕРСТВА ЮСТИЦИИ
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

Қорғалмын тас жылы, 3Б ғимараты, Астана қ. Қазақстан Республикасы, 010000
тел.: +7 (7172) 62-15-15, +7 (7172) 62-15-04
<http://www.kazpatent.kz>, e-mail: kazpatent@kazpatent.kz

шоссе Қорғалмын, здание 3Б, г. Астана, Республика Казахстан, 010000
тел.: +7 (7172) 62-15-15, +7 (7172) 62-15-04
<http://www.kazpatent.kz>, e-mail: kazpatent@kazpatent.kz

Хат алмасу кезінде 07.02.2019
№ 2019/0095.1 өтініміне сілтеме беруді сұраймыз

Саипов Абдилла Абибуллаевич
пр. Тауке хана, 5, г. Шымкент, 160012
ippv.rm.sksu@gmail.com



Уведомление о положительном результате формальной экспертизы
Настоящим РГП «НИИС» уведомляет заявителя о том, что формальная экспертиза по заявке на изобретение «Способ определения радиусов атомов химических элементов» завершена.

- (21) 2019/0095.1
(22) 07.02.2019
(71) Республиканское государственное предприятие на праве хозяйственного ведения "Южно-Казахстанский государственный университет имени М.Ауэзова" Министерства образования и науки Республики Казахстан (KZ)
(72) Бестерек Уйлесбек (KZ); Ермеков Саят Рахимбайұлы (KZ); Болысбек Айдарбек Әлібекұлы (KZ); Жұлдызбаева Салима Есболғановна (KZ); Қамбарова Ғалия Әмзекқызы (KZ)

Согласно пункту 7 статьи 22 Патентного закона Республики Казахстан (далее - Закон) экспертиза заявки по существу производится при условии предоставления в экспертную организацию документа, подтверждающего оплату экспертизы заявки по существу в течение трех месяцев с даты направления данного уведомления.

При неоплате экспертизы по существу в указанный срок заявка считается отозванной.

В соответствии с пунктом 13 статьи 22 Закона сроки, пропущенные заявителем, могут быть восстановлены экспертной организацией при представлении документа об оплате восстановления пропущенного срока. Ходатайство о восстановлении срока может быть подано заявителем не позднее двенадцати месяцев со дня истечения пропущенного срока.

Начальник управления

Эксперт

Д. Алимжанова

О. Жұбанов

КАЗАХСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ӘДІЛЕТ МИНИСТРЛІГІНІҢ
"ҰЛТТЫҚ ЗИЯТКЕРЛІК МЕНШІК
ИНСТИТУТЫ"
ШАРУАШЫЛЫҚ ЖҰРТТЗУ
КУҚЫҒЫНДАҒЫ РЕСПУБЛИКАЛЫҚ
МЕМЛЕКЕТТІК КӘСІПОРНЫ



РЕСПУБЛИКАНСКОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
ПРЕДПРИЯТИЕ НА ПРАВЕ
ХОЗЯЙСТВЕННОГО ВЕДЕНИЯ
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИНСТИТУТ
ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ»
МИНИСТЕРСТВА ЮСТИЦИИ
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

Қорғалмын тас жезы, 3Б ымырағы, Астана қ. Қазақстан Республикасы, 010000
тел.: +7 (7172) 62-15-15, +7 (7172) 62-15-04
<http://www.kazpatent.kz>, e-mail: kazpatent@kazpatent.kz

шоссе Қорғалмын, жаны 3Б, г. Астана, Республика Казахстан, 010000
тел.: +7 (7172) 62-15-15, +7 (7172) 62-15-04
<http://www.kazpatent.kz>, e-mail: kazpatent@kazpatent.kz

Хағ алмасу кезінде 07.02.2019
№ 2019/0096.1 өтініміне сілтеме беруді сұраймыз

Саипов Абдилла Абибуллаевич
пр. Тауке хана, 5, г. Шымкент, 160012
ippv.rm.skusu@gmail.com

КАЗАХСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ЗИЯТКЕРЛІК МЕНШІК
ИНСТИТУТЫ
ШАРУАШЫЛЫҚ ЖҰРТТЗУ
РЕСПУБЛИКАЛЫҚ МЕМЛЕКЕТТІК КӘСІПОРНЫ

При перепишке просим ссылаться на заявку
№ 2019/0096.1 от 07.02.2019

08 МАЙ 2019

18993

Исход. №
Ведом. №

Уведомление о положительном результате формальной экспертизы

Настоящим РГП «НИИС» уведомляет заявителя о том, что формальная экспертиза по заявке на изобретение «Способ определения радиусов ионов химических элементов» завершена.

- (21) 2019/0096.1
- (22) 07.02.2019
- (71) Республиканское государственное предприятие на праве хозяйственного ведения "Южно-Казахстанский государственный университет имени М.Ауэзова" Министерства образования и науки Республики Казахстан (KZ)
- (72) Бестереков Уйлесбек (KZ); Ермеков Саят Рахимбайұлы (KZ); Болысбек Айдарбек Әлібекұлы (KZ); Жұлдызбаева Салима Есболгановна (KZ); Қамбарова Ғалия Әмзекызы (KZ)

Согласно пункту 7 статьи 22 Патентного закона Республики Казахстан (далее - Закон) экспертиза заявки по существу производится при условии предоставления в экспертную организацию документа, подтверждающего оплату экспертизы заявки по существу в течение трех месяцев с даты направления данного уведомления.

При неоплате экспертизы по существу в указанный срок заявка считается отозванной.

В соответствии с пунктом 13 статьи 22 Закона сроки, пропущенные заявителем, могут быть восстановлены экспертной организацией при представлении документа об оплате восстановления пропущенного срока. Ходатайство о восстановлении срока может быть подано заявителем не позднее двенадцати месяцев со дня истечения пропущенного срока.

Начальник управления

Эксперт

Д. Алимжанова

О. Жұбанов



ЕВРАЗИЙСКАЯ ПАТЕНТНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ (ЕАПО)
Eurasian Patent Organization

ЕВРАЗИЙСКОЕ ПАТЕНТНОЕ ВЕДОМСТВО (ЕАПВ)
Eurasian Patent Office

М. Черкасский пер., 2, Москва, 109012, Россия
M. Cherkassky per. 2, Moscow, 109012, Russia

Факс (Fax): +7(495) 621-2423, E-mail: info@eapo.org

На № от **12/03/2019**
Номер заявки: **201900136/26**

РГП на ПХВ "ЮКГУ им. М. Ауэзова"
Республика Казахстан, 160012, Южно-
Казахстанская область, г. Шымкент, пр.
Тауке хана, 5

Дата отправки **30 АВГ 2019**

г-ну **М.И. Сатаеву**

УВЕДОМЛЕНИЕ

о положительном результате формальной экспертизы

1. Настоящим ЕАПВ уведомляет заявителя о том, что формальная экспертиза по евразийской заявке **№201900136** завершена.

Формальная экспертиза проведена в отношении изобретения (изобретений) указанного (указанных) в **1-1** пункте (пунктах) формулы изобретения, представленной заявителем для рассмотрения в ЕАПВ

и дополнительных материалов, представленных в ходе проведения формальной экспертизы.

В соответствии с правилами 49(2) и (3) Патентной инструкции к Евразийской патентной конвенции (далее – Инструкция) заявитель, по его инициативе, вправе дополнять, уточнять или исправлять материалы этой евразийской заявки до завершения технической подготовки публикации евразийского патента при условии уплаты установленной дополнительной пошлины в размере, определенном в пункте 6(2) Положения о пошлинах Евразийской патентной организации (далее ЕАПО). Что касается описания и формулы изобретения, чертежей, если они содержатся в материалах заявки, то допускается их дополнение, уточнение или исправление до даты вынесения по этой евразийской заявке решения об отказе в выдаче евразийского патента или решения о его выдаче. При этом включение в формулу изобретения дополнительных пунктов формулы изобретения должно сопровождаться наряду с уплатой указанной выше пошлины, уплатой установленной дополнительной пошлины за каждый зависимый или независимый пункт, включаемый в формулу изобретения в размере, определенном в пункте 6(5) Положения о пошлинах ЕАПО.

В случае если заявитель не воспользуется процедурой, предусмотренной правилом 49(2) и (3) Инструкции, экспертиза заявки по существу будет проведена в отношении материалов евразийской заявки, по которым была проведена формальная экспертиза.

2. Изобретение, заявленное в _____ пункте (пунктах) формулы относится к неохраноспособным объектам, указанным в правиле 3(3) и (4) Инструкции, в связи с чем оно является изъятым заявителем из формулы изобретения.

3. В ходе проведения формальной экспертизы осуществлена проверка порядка испрашивания приоритета, предусмотренного правилом 36 Инструкции. Правомочность испрашивания приоритета изобретения согласно правилу 6 Инструкции будет установлена при проведении экспертизы евразийской заявки по существу.

4. В связи с тем, что пошлина за подачу евразийской заявки уплачена в размере, превышающем установленный на _____, эта сумма может быть возвращена, либо зачтена в счет уплаты других пошлин.

5. Ходатайство заявителя о проведении экспертизы заявки по существу поступило в ЕАПВ **29/03/2019**. Результаты рассмотрения этого ходатайства будут сообщены дополнительно.

6. Отчет о патентном поиске по этой евразийской заявке будет направлен заявителю после проведения патентного поиска. Дата публикации этого отчета будет сообщена заявителю дополнительно.

В соответствии со статьей 15(4) Евразийской патентной конвенции евразийская заявка публикуется ЕАПВ вместе с отчетом о патентном поиске незамедлительно по истечении восемнадцати месяцев с даты ее подачи или, если испрашен приоритет, с даты приоритета. При отсутствии отчета о поиске на дату завершения технической подготовки к публикации евразийской заявки его публикация производится отдельно, незамедлительно по получении отчета о поиске.

(Пояснения экспертизы смотри на обороте)

Заместитель начальника
отдела формальной экспертизы

Handwritten signature

Handwritten signature

Н.У. Тагаева
тел.: +7(495)411-61-60*224

(137)



ЕВРАЗИЙСКАЯ ПАТЕНТНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ (ЕАПО)

Eurasian Patent Organization

ЕВРАЗИЙСКОЕ ПАТЕНТНОЕ ВЕДОМСТВО (ЕАПВ)

Eurasian Patent Office

М. Черкасский пер., 2, Москва, 109012, Россия
M. Cherkassky per. 2, Moscow, 109012, Russia

Факс (Fax): +7(495) 621-2423, E-mail: info@eapo.org

На № от **12/03/2019**
Номер заявки: **201900137/26**

РГП на ПХВ "ЮКГУ им. М. Ауэзова"
Республика Казахстан, 160012, Южно-Казахстанская область, г. Шымкент, пр. Тауке хана, 5

Дата отправки **30 АВГ 2019**

г-ну М.И. Сатаеву

УВЕДОМЛЕНИЕ

о положительном результате формальной экспертизы

1. Настоящим ЕАПВ уведомляет заявителя о том, что формальная экспертиза по евразийской заявке **№201900137** завершена.

Формальная экспертиза проведена в отношении изобретения (изобретений) указанного (указанных) в **1-1** пункте (пунктах) формулы изобретения, представленной заявителем для рассмотрения в ЕАПВ

и дополнительных материалов, представленных в ходе проведения формальной экспертизы.

В соответствии с правилами 49(2) и (3) Патентной инструкции к Евразийской патентной конвенции (далее – Инструкция) заявитель, по его инициативе, вправе дополнять, уточнять или исправлять материалы этой евразийской заявки до завершения технической подготовки публикации евразийского патента при условии уплаты установленной дополнительной пошлины в размере, определенном в пункте 6(2) Положения о пошлинах Евразийской патентной организации (далее ЕАПО). Что касается описания и формулы изобретения, чертежей, если они содержатся в материалах заявки, то допускается их дополнение, уточнение или исправление до даты вынесения по этой евразийской заявке решения об отказе в выдаче евразийского патента или решения о его выдаче. При этом включение в формулу изобретения дополнительных пунктов формулы изобретения должно сопровождаться наряду с уплатой указанной выше пошлины, уплатой установленной дополнительной пошлины за каждый зависимый или независимый пункт, включаемый в формулу изобретения в размере, определенном в пункте 6(5) Положения о пошлинах ЕАПО.

В случае если заявитель не воспользуется процедурой, предусмотренной правилом 49(2) и (3) Инструкции, экспертиза заявки по существу будет проведена в отношении материалов евразийской заявки, по которым была проведена формальная экспертиза.

2. Изобретение, заявленное в _____ пункте (пунктах) формулы относится к неохраноспособным объектам, указанным в правиле 3(3) и (4) Инструкции, в связи с чем оно является изъятым заявителем из формулы изобретения.

3. В ходе проведения формальной экспертизы осуществлена проверка порядка испрашивания приоритета, предусмотренного правилом 36 Инструкции. Правомочность испрашивания приоритета изобретения согласно правилу 6 Инструкции будет установлена при проведении экспертизы евразийской заявки по существу.

4. В связи с тем, что пошлина за подачу евразийской заявки уплачена в размере, превышающем установленный на _____, эта сумма может быть возвращена, либо зачтена в счет уплаты других пошлин.

5. Ходатайство заявителя о проведении экспертизы заявки по существу поступило в ЕАПВ **29/03/2019**. Результаты рассмотрения этого ходатайства будут сообщены дополнительно.

6. Отчет о патентном поиске по этой евразийской заявке будет направлен заявителю после проведения патентного поиска. Дата публикации этого отчета будет сообщена заявителю дополнительно.

В соответствии со статьей 15(4) Евразийской патентной конвенции евразийская заявка публикуется ЕАПВ вместе с отчетом о патентном поиске незамедлительно по истечении восемнадцати месяцев с даты ее подачи или, если испрашен приоритет, с даты приоритета. При отсутствии отчета о поиске на дату завершения технической подготовки к публикации евразийской заявки его публикация производится отдельно, незамедлительно по получении отчета о поиске.

(Пояснения экспертизы смотри на обороте)

Заместитель начальника
отдела формальной экспертизы

Н.У. Тагаева
тел.: +7(495)411-61-60*224

(137)



Согласовано:

Проректор по НР и И
Сулейменов У.

(подпись)

«...» 2019 г.



Ф. 07-14

Утверждено
Проректор по У и УМР
Байболов К.С.

(подпись)

«...» 2019 г.

АКТ № 563

10.10.2019

внедрения результатов НИР Б-16-02-03 «Исследования по разработке новых технологий получения комплексных удобрений на основе отходов фосфорного производства и угледобычи, **установлению зависимости физико-химических свойств водно-солевых смесей от удельных энергетических показателей ионов**» в учебный процесс

Настоящий акт составлен по итогам НИР, выполненной на кафедре «Химическая технология неорганических веществ» в 2018-2019 уч. году.

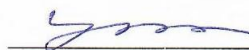
Настоящим актом подтверждается, что результаты НИР, выполненные коллективом авторов: д.т.н., профессором У. Бестерековым, PhD докторантом С.Р. Ермаковым, ст. преподавателем С.Е. Жулдызбаевой, по установлению закономерностей изменений состава, фазового состояния, структуры и физико-химических свойств водно-солевых систем, их прикладная значимость в галлургической технологии

- были опубликованы в материалах международных научно-практических конференций: «Актуальные проблемы и тенденции инноваций в современной науке и образования». Туркестан, 2017г. «Сулы-түзды жүйелер құрамдастарының меншіктік қасиеттік ерекшеліктері туралы», «Тенденции и перспективы развития науки и образования в условиях глобализации». Украина, 2018г. «Екі құрамды сулы-түзды жүйелердегі фазалық құрам өзгерістері NaCl-H₂O мысалында»


- внедрены в учебный процесс: в лекционные занятия по дисциплины «Теория и технология галлургических процессов» по тематикам:

- Физические и химические свойства водно-солевых систем, закономерности их изменений;
- Закономерности изменений состава, фазового состояния водно-солевых систем;
- Структура водных растворов, зависимость ее от радиуса ионов и их энергетических показателей.


Научный руководитель темы

 Бестереков У.

Директор ДАВ

 Омашова Г.Ш.

Начальник отдела технических наук НИУ

 Серкебаев М.К.

Директор НИУ





Согласовано:
Проректор по НР и И
Сулейменов У.
(подпись)
«...» _____ 2019 г.



№ 7-07-14
Подтверждено
Проректор по У и УМР
Байболов К.С.
(подпись)
«...» _____ 2019 г.

АКТ № 564

10.10.2019

Внедрения результатов НИР Б-16-02-03 «Исследования по разработке новых технологий получения комплексных удобрений на основе отходов фосфорного производства и угледобычи, **установлению зависимости физико-химических свойств водно-солевых смесей от удельных энергетических показателей ионов**» в учебный процесс

Настоящий акт составлен по итогам НИР, выполненной на кафедре «Химическая технология неорганических веществ» в 2018-2019 уч. году.

Настоящим актом подтверждается, что результаты НИР, выполненные коллективом авторов: д.т.н., профессором У. Бестерековым, PhD докторантом С.Р. Ермаковым, ст. преподавателем С.Е. Жулдызбаевой, по установлению закономерностей изменений состава, фазового состояния, структуры и физико-химических свойств водно-солевых систем, их прикладная значимость в галлургической технологии

- были опубликованы в материалах международных научно-практических конференций: «Ауэзовские чтения-15: третья модернизация Казахстана новые концепции и современные решения». Шымкент, 2017г. «Иондардың жекелей сипаттамалары және олардың меншікті энергетикалық көрсеткіштерін есептеу нәтижелері туралы», «Wyksztalcenie I nauka bez granic-2018» Польша, 2018г. «Сулы-тұзды жүйелердегі құрылымдылық өзгерістер сипаттамалары».

- внедрены в учебный процесс: в лекционные занятия по дисциплины «Теория и технология галлургических процессов» в лекции:

- Зависимость физико-химических свойств водных растворов электролитов от удельных энергетических показателей ионов;
- Влияние радиусов и удельных энергетических показателей ионов по структуру водных растворов электролитов;
- Аналитическое описание зависимости физико-химических свойств водных растворов электролитов от радиусов и удельных энергетических показателей.


Научный руководитель темы

 Бестереков У.

Директор ДАВ

 Омашова Г.Ш.

Начальник отдела технических наук НИУ

 Серкебаев М.К.

Директор НИУ





Согласовано:
 Проректор по НР и И
 Сулейменов У.
 (подпись)
 « » 2019 г.



107-14
 «Утверждаю»
 Проректор по У и УМР
 Байбенов К.С.
 (подпись)
 « » 2019 г.

АКТ № 565

10.10.2019

Внедрения результатов НИР Б-16-02-03 «Исследования по разработке новых технологий получения комплексных удобрений на основе отходов фосфорного производства и угледобычи, установлению зависимости физико-химических свойств водно-солевых смесей от удельных энергетических показателей ионов» в учебный процесс

Настоящий акт составлен по итогам НИР, выполненной на кафедре «Химическая технология неорганических веществ» в 2018-2019 уч. году.

Настоящим актом подтверждается, что результаты НИР, выполненные коллективом авторов: д.т.н., профессором У. Бестерековым, PhD докторантом С.Р. Ермаковым., ст. преподавателем С.Е. Жулдызбаевой по установлению закономерностей изменений состава, фазового состояния, структуры и физико-химических свойств водно-солевых систем, их прикладная значимость в галлургической технологии.

- были опубликованы в материале международной научно-практической конференции «Conduct of modern science-2018». 2018г. «Сулы-тузды жүйелердегі физика-химиялық өзгерістер сипаттамалары» и научно-практической журнале «Аллея Науки». Москва. 2019г. «Новые сведения о радиусах ионов химических элементов».

- внедрены в учебный процесс: в лекционные занятия по дисциплины «Теория и технология галлургических процессов» в лекции:

- Структура водных растворов, зависимость ее от природы и концентрации ионов, температуры;
- Характеристики изменения состава, структуры и фазового состояние двух компонентных систем от температуры, от концентрации;
- Зависимость физико-химических свойств водных растворов электролитов от радиусов ионов;


Научный руководитель темы

 Бестереков У.

Директор ДАВ

 Омашова Г.Ш.

Начальник отдела технических наук НИУ

 Серкебаев М.К.

Директор НИУ





Согласовано:
Проректор по НР и И
Сулейменов У.
(подпись)
« » 2019 г.



Ф 7-07-14
«Утверждено»
Проректор по У и УМР
Байболов К.С.
(подпись)
2019 г.

АКТ № 566

10.10.2019

Внедрения результатов НИР Б-16-02-03 «Исследования по разработке новых технологий получения комплексных удобрений на основе отходов фосфорного производства и угледобычи, установлению зависимости физико-химических свойств водно-солевых смесей от удельных энергетических показателей ионов» в учебный процесс

Настоящий акт составлен по итогам НИР, выполненной на кафедре «Химическая технология неорганических веществ» в 2018-2019 уч. году.

Настоящим актом подтверждается, что результаты НИР, выполненные коллективом авторов: д.т.н., профессором У. Бестерековым, PhD докторантом С.Р. Ермаковым., ст. преподавателем С.Е. Жулдызбаевой по установлению закономерностей изменений состава, фазового состояния, структуры и физико-химических свойств водно-солевых систем, их прикладная значимость в галлургической технологии.

- были опубликованы в журнале «Вестнике КазНИТУ» №6, Алматы, 2018г. «Изменение химического состава водно-солевых систем в области ненасыщенного раствора», «Изменение химического состава водно-солевых систем в области насыщенного раствора».

- внедрены в учебный процесс: в практические занятия по дисциплине «Теория и технология галургических процессов» по тематикам:

- «Исследование процесса кристаллизации в системе NaCl-вода»;
- «Исследование процесса выпаривания в системе NaCl-вода»;


Научный руководитель темы

 Бестереков У.

Директор ДАВ

 Омашова Г.Ш.

Начальник отдела технических наук НИУ

 Серкебаев М.К.

Директор НИУ

