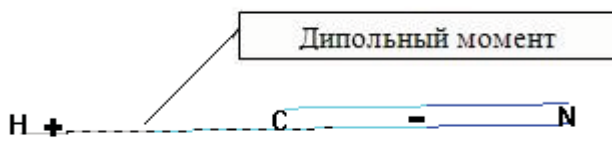


7. Жартылай эмпирикалық әдістің нәтижелерін интерпретациялау
 Дипольдік моменті есептеу және векторлардың бағыттарын көрсету
 Вектордың дипольдік моментін көрсету, Display>Show dipole moment таңдау. Берілген команда қол жетімді болмаса (сұр түс), онда молекуланың есептеуін қайта іске қосу қажет (меню Compute>Single Point). модульдің диполь моментінің мәндері log-файлға келтіріледі.



7-сурет. Синильқышқылының молекуласының вектордың дипольдік моменті

Дипольдік моменттің мәні log-файлде молекуланың оптимизация үшін файлдың соңында орналасқан. Барлық мәндер Дебай(D) бірлігінде.

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-0.000	-1.538	-0.000	1.538
sp Hybrid	0.000	-1.158	-0.000	1.158
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	0.000	-2.696	-0.000	2.696

8-сурет. log-файлынан фрагмент

Симметрияның нүктелі тобы Molecular Point Group тармағында молекуланың энергетикалық сипаттамаларынан кейін log-файлда орналасқан

MOLECULAR POINT GROUP
 C*v

9-сурет. Синильқышқылының симметрияның нүктелі тобы

Пайдаланған әдебиеттер тізімі

1. Кобзев Г.И. Применение неэмпирических и полуэмпирических методов в квантово-химических расчетах. – Оренбург: ГОУ ОГУ, 2004. – 543 с.
2. Young D.C. Computational Chemistry. - New York: Wiley&Sons, - 2001. – P. 398..
3. Hypercube, INC // режим доступа: <http://www.hyper.com/>
4. HyperChem® Computational Chemistry. Canada: Hypercube, inc. 1996. – 350 p.

Жұмағалиева Б. М.¹, Әскербек З.Ж.²

1. Ғылыми жетекшісі, химия ғылымдарының кандидаты, доцент
2. «Химия» мамандығының 4 курс студенті, жаратылыстану ғылымдар кафедрасы

ҚОРШАҒАН ОРТА СУЛАРЫНЫҢ ҚЫШҚЫЛДЫҒЫН ЗЕРТТЕУ

Жаңбыр мен қар көрсеткіштері ауа ластануының индикаторы

Қоршаған орта азот тотықтары мен күкірт тотықтарының әсерлері жергілікті, аймақтық және ғаламдық деңгейлерде көрініс табады. Атмосфераның күкірт және азот тотықтарымен жергілікті және аймақтық деңгейде ластануының экологиялық қауіп-қатері олардың күкірт және азот қышқылдарын түзіп, атмосфералық жауын-шашындарда еріп кетуге және жер бетіне қышқылдық жауындар күйінде төгілуге қабілетті келетіндігінде.

Қышқылдық жауын-шашындар дегеніміз-құрамындағы шығу тегі техногенді күкірт және азот қышқылдарының көп болуы есебінен әрекеті әлдеқайда қышқылды болып келетін (аймақтық фон деңгейлерімен салыстырғанда) атмосфералық жауын-шашындар. Жаңбырлы судың әдетте әлсіз қышқыл ($pH=5,6$) реакциясы болады, бұл атмосферадағы көмір қышқыл газының еруімен негізделген. pH деңгейі 5,5-тен төмен болатын жауын-шашындарды қышқылдық деп атайды. Әлемнің өнеркәсіптік дамыған елдерінің көпшілігінде жаңбыр суының қышқылдылығы бірнеше есе артады, әсіресе шық пен тұманның қышқылдығы көп.[1]

Ауа құрамын ластайтын заттардың негізгі көрсеткіштерін жауынды немесе қар суын зерттеу арқылы да анықтауға болады. Себебі қар қабаты ауаға түскен барлық заттарды өз құрамына жинайды. Сондықтан қардың анализі тек қана оның ластануын емес, онымен қатар ауа құрамының ластануын және ауа ластануы салдарынан топырақ пен судың ластануын көрсететін қолайлы индикатор болып табылады. Ауа құрамын ластайтын заттардың концентрациясы қар бетіне құрғақтай да, ылғалды түрде де түсуі салдарынан ауа құрамындағы мөлшерден әлде қайда жоғары болады, сондықтан олардың мөлшері сенімді қарапайым әдістермен анықталады.

Соңғы жүз жылдың ішіндегі зерттеу нәтижелері бойынша атмосферадағы қышқылдық тұнбалардың тұрақты түрде өсуі байқалады. «Қышқылдық жауын» деген сөзді алғаш британия зерттеушісі Р.А.Смит 1872 жылы қолданған. [2]

XX ғасырдың 50- жылдарында Скандинавия ғалымдары қышқылдық жауынның қоршаған ортаға потенциалдық қауіптігін атап кеткен болатын. Қышқылданған тұнбалар негізінде атмосферада түзіледі, бірақ олар топырақты, суды ластайды. Қышқыл- негіздік жағдайлар табиғаты амфолитоидты топырақтың қатты фазаларының сіңіргіштік қабілеттіліктеріне әсер етеді. Топырақтар сәл қышқылдана бастағанда, олардың катиондарды сіңіру қабілеттілігі төмендейді, бұл өз кезегінде топырақ құнарлылығына кері әсерін тигізеді. Осыған орай ауа құрамының ластануын көрсететін индикатор есебінде қар жамылғысы мен жаңбыр қышқылдылығын анықтау міндеті туындайды.

Жаңбыр мен қар жамылғысының жалпы қышқылдығын анықтау әдістемесі

Қажетті реактивтер және қажетті құрал- жабдықтар:

1. жаңбыр суының немесе жауған қардың сынамасы
2. фенолфталеин
3. $NaOH$ - 0,1 н
4. HCl - 0,1 н

5. конустық колбалар

Анализ жүрісі

1. Қардың сынамасы қардың қалың жауған жерінен алынады. Беткі қабаты тасталынады, м² ауданынан таза қарды банкіге салып ерітеді.
2. Жаңбыр суын ауызы кең воронка арқылы жауып болғанша жияды.
3. Көлемі 100 мл сынамаға үш тамшы фенолфталеин тамызып 0,1 н NaOH ерітіндісімен индикатор түсі қызғылт түске боялғанша титрлейді.

Есептеу формуласы:

$$P = \frac{V(B)0,1 \cdot 1000}{V(A)} = \frac{V(B) \cdot 100}{100} = V(B) \text{ ммоль/л(1)}$$

P- жалпы қышқылдылық ммоль\л;

V_(B)- титрлеуге жұмсалған 0,1 н NaOH ерітіндісінің көлемі;

V_(A)-сынаманың көлемі

Жаңбыр және қар суларының, сонымен қатар салыстыру үшін алынған ауыз су сынамаларының қышқылдығы (1) формуламен есептеліп 1- кестеге қойылды. 1- кестеден көрініп тұрғандай жаз кезінде алынған жаңбыр суларының қышқылдығы жоғары 0,3 ммоль/л екендігі, ауа құрамындағы ластаушы газдардың, жоғары екендігінен, сонымен қатар автотранспорттардан да лақтырылған газдардың әсерінен болуы мүмкін.

Салыстыру мақсатында алынған ауыз суының қышқылдығы 0,15 ммоль/л. Қардың 06.12.2015 жылы жауған сынамасының қышқылдығы 0,12 ммоль/л болса, сол жауған қардың келесі күнгі 07.12 алынған сынамада сәл де болса қышқылдығы 0,01 ммоль/литрге жоғары. Дәл осылай 11.12 күнгі алынған қардағы қышқылдық 0,15 ммоль/л. 1- кестеде қар сынамаларының жерде уақыт өткен сайын алғашқы жауған күнімен салыстырғанда қышқылдығының өсетіндігі байқалады, яғни бұл мәліметтер қардың ауа құрамындағы лақтырылған газдарды әрі қарай сіңіруін көрсетеді.

Бұл нәтижелер өз кезегінде ауа құрамында қышқылдылықты тудыратын азот оксиді, күкірт диоксиді және көмірқышқылгазы бар екендігіне болжам туғызады.

1-кесте. Қоршаған орта суларының қышқылдықтары

Сынамалардың аттары	Сынаманың алынған күндері	Қышқылдылық ммоль\л
Жаңбыр	03.06.2015	0,30
	04.06.2015	0,31
Ауыз суы	03.06.2015	0,15
	04.06.2015	0,15
Қар (03.12)	03.12.2015	0,10
	04.12.2015	0,10
Қар (06.12)	06.12.2015	0,12
	07.12.2015	0,13
	10.12.2015	0,15

	11.12.2015	0,15
Қар (23.02)	23.02.2016	0,13
	24.02.2016	0,14
	25.02.2016	0,14

Пайдаланған әдебиеттер тізімі:

1. Мотузова Г. В., Безуглова О. С. Топырақтың экологиялық мониторингі: Оқулық/Ауд. А. Т. Нұркенова, А. Қ. Әуелбекова. – Алматы. Экономика. – 2013. – 72-77 бет.

2. Роговая О. Г., Алексеева Л. В., Бойцова Т. В., Горбунова В. В. Практикум по химии окружающей среды: Учебно – методическое пособие. – СПб.: Изд-во РПГУ им. А. И. Герцена, 2007. – 36 стр.

Губенко М.А.¹, Ергалиева Э.М.², Геринг Ю.С.³

1. *Научный руководитель, магистр химии, старший преподаватель*
2. *Научный руководитель, магистр химии, преподаватель*
3. *Студентка 2 курса, кафедры естественных наук, специальность «Химия»*

ОРГАНИЗАЦИЯ ГРУППОВОЙ РАБОТЫ ПРИ ОБУЧЕНИИ РЕШЕНИЮ РАСЧЕТНЫХ ЗАДАЧ ПО ХИМИИ В СРЕДНЕЙ ШКОЛЕ

Обучение решению расчетных задач на уроках химии может проводиться с использованием приемов групповой работы. Групповая работа является одной из форм организации совместной деятельности учащихся и подразумевает временное разделение класса на группы от 4-х до 8-ми человек (в зависимости от возраста детей) для совместного решения определенных задач[1]. Ученикам предлагается обсудить задачу, наметить пути её решения, реализовать их на практике и, наконец, представить найденный совместный результат. Такая организация способствует формированию навыков коллективного труда, развивает у обучающихся чувство товарищества, ответственности[2, стр. 63].

Ниже представлена разработка урока химии в 9 классе с использованием приемов групповой работы.

Конспект урока в 9 классе

«Решение задач по теме: «Вычисление количества вещества, массы и объема продукта реакции по химическим уравнениям, если одно из реагирующих веществ в избытке»

Раздел «Теория электролитической диссоциации»

Цели урока:

- обучить алгоритму решения задач на избыток;
- повторить формулы и химические понятия, изученные ранее;