

რ. მახოშვილი, ნ. დიღმანიძე

# კრისტალოქიმია

*მოლეკულების და  
კრისტალების სიმეტრია*

თბილისი, 2007

ნაშრომი წარმოადგენს ქართულ ენაზე შედგენილ კრისტალოქიმიის პირველ სახელმძღვანელოს. მასში მოკლედ, რთული მათემატიკური აპარატის გარეშე, განხილულია ისეთი მნიშვნელოვანი საკითხები, როგორცაა: ნახშირბადატომის სტერეოქიმიური თავისებურება, სიმეტრიის ელემენტები და სიმეტრიის ოპერაციები, ქიმიური ბმა კრისტალებში, არაორგანულ და კოორდინაციულ ნაერთთა ძირითადი სტრუქტურული ტიპები. კოორდინაციული ნაერთებისათვის განხილულია გაცილებით ტიპური მოლეკულური და კრისტალური სტრუქტურები. სახელმძღვანელოში ასევე მოკლედ აღწერილია ქიმიური ნაერთების მოლეკულური აღნაგობის დასადგენად გამოყენებული სწრაფი და საიმედო სპექტროქიმიური მეთოდის ზოგიერთი ასპექტი.

სახელმძღვანელო განკუთვნილია უნივერსიტეტების ქიმიის სპეციალობის სტუდენტებისათვის (ბაკალავრები, მაგისტრები); დახმარებას გაუწევს მეცნიერების ამავე დარგის დოქტორანტებს.

რეცენზენტები: ა. ციგაძე – ქ. მ. დ., პროფესორი, რუსეთის მეცნიერებათა აკადემიის აკადემიკოსი.  
 დ. ალადაშვილი – ფ.მ.დ., პროფესორი.  
 ი. შათირიშვილი – ქ.მ.დ., პროფესორი

© რ. მაჩხოშვილი, ნ. დიდმანიძე.

„კოორდინაციული ნაერთების საერთო არქიტექტურაში არსებობს ორი ასპექტი: კრისტალო-სტრუქტურული – კრისტალში სტრუქტურული ელემენტების (მოლეკულების ან კომპლექსური და ატომური იონების) შეკერის წესი და სტერეოქიმიური – თვით კომპლექსების აღნაგობის ანალიზი.“

მ. პარაი – კოშიცი



## შესავალი

სტერეოქიმია არის მოძღვრება მოლეკულის სივრცითი აღნაგობის შესახებ. სტერეო – ბერძნული სიტყვაა და სივრცითს ნიშნავს. ფორმალურად სტერეოქიმია ორ მიმართულებად იყოფა: სტატიკური სტერეოქიმია, რომელიც სივრცითი იზომერიის სახეებს და მათ თვისებებს შეისწავლის. დინამიკური სტერეოიზომერია განიხილავს მოლეკულის ქიმიური გარდაქმნების მიმართულებასა და სიჩქარეზე სივრცითი ფაქტორების გავლენას.

ვალენტობის თეორია და სტერეოქიმია ვითარდებოდა მე-19 საუკუნეში ერთიმეორესთან მჭიდრო კავშირში. 1852 წელს შრენკმანდმა წამოაყენა ვალენტობის კონცეფცია და აჩვენა, რომ ელემენტები, რეაგირებენ რა ერთიმეორის განსაზღვრულ რაოდენობასთან, წარმოქმნიან ნაერთს. როგორც ვიცით, ელემენტთა ამ განსაზღვრულ რაოდენობას ახლა უწოდებენ ექვივალენტურს. 1858 წელს კეკულემ, ხოლო 1859 წელს კოლბემ გააფართოვეს ვალენტობის ცნება და გამოთქვეს მოსაზრება ნახშირბადის ატომის ოთხვალენტოვნების შესახებ. კეკულემ ივარაუდა, რომ ნახშირბადის ატომებს აქვს უნარი შეუერთდნენ ერთიმეორეს და წარმოქმნან გრძელი ჯაჭვი. 1858 წელსვე კუპერმა შემოიღო ვალენტური ბმის კონცეფცია და დახაზა პირველი სტრუქტურული ფორმულები. ტერმინი “ქიმიური აღნაგობა” პირველად შემოიღო ბუტლეროვმა 1861 წელს. მან აღნიშნა, რომ დიდი მნიშვნელობა აქვს ნაერთების თუნდაც მარტივი ფორმულების დაწერას იმის მიხედვით, თუ როგორ არიან ატომები მოლეკულაში შეერთებული. ასევე დაადგინა, რომ ნაერთების თვისებებს განსაზღვრავს მათი მოლეკულური აღნაგობა და თუ ცნობილია ნაერთის მოლეკულური აღნაგობა, შეიძლება მისი თვისებების წინასწარი ვარაუდი.

მიუხედავად ამისა, მხოლოდ 1874 წელს იყო პირველი ნაბიჯი გადადგმული მოლეკულის სივრცითი აღნაგობის გამოსახვის შესახებ. იმავე წელს ერთიმეორისაგან დამოუკიდებლად მანტ-პოვმა და ლე-ბელმა გამოთქვეს

პოსტულატი ნახშირბადის ატომის ოთხი ბმის ტეტრაედრული განლაგების შესახებ და დაახლოებით 20 წლით გაუსწრეს არაორგანულ ნაერთთა სტერეოქიმიის ჩამოყალიბებას.

1893 წელს ალფრედ ვერნერის მიერ მოწოდებული კოორდინაციული თეორია ითვლება არაორგანული სტერეოქიმიის დასაწყისად, რადგანაც ის პასუხობდა მეტალის ცენტრალური ატომის (იონის) ირგვლივ მოლეკულების თუ იონების სივრცითი განლაგების შესახებ დასმულ კითხვას. ამის შემდეგ, მრავალი წლის მანძილზე არაორგანიკოსი – ქიმიკოსების მიერ მიღებული და შესწავლილი იყო უამრავი კომპლექსური ნაერთი, მაგრამ მათი აღნაგობის შესწავლა ხდებოდა მხოლოდ ქიმიური მეთოდებით, რასაც არ შეეძლო მოეცა ზუსტი შედეგები.

არაორგანული და კოორდინაციული ნაერთების სტერეოქიმიის წარმატებები დაიწყო მე-20 საუკუნის მეორე ათწლეულში, როდესაც აღმოჩენილი იქნა სტერეოქიმიის შესწავლის ორი ძირითადი მეთოდი. პირველი იყო ნივთიერების აღნაგობის შესწავლის ფიზიკური მეთოდების აღმოჩენა, კერძოდ, რენტგენის მეთოდი, ელექტრონული ტალღების დიფრაქცია, ელექტრონული და მაგნიტური მომენტების გაზომვა, ინფრაწითელი და კომბინაციური გაბნევის სპექტრების ინტერპრეტაცია და ა. შ. ეს მეთოდები ნაერთების მოლეკულების სივრცითი აღნაგობის შესწავლის საშუალებას იძლეოდა. მეორე, რამაც საერთოდ სტერეოქიმიის განვითარებას შეუწყო ხელი, იყო ვალენტობის ელექტრონული თეორიის და ქვანტური ქიმიის განვითარება და მათი გამოყენება ქიმიური ბმის და ქიმიური აღნაგობის თეორიაში.

ქიმიური ნაერთი ხასიათდება მისი მოლეკულების (მოლეკულური) და კრისტალების (კრისტალური) აღნაგობით. მოლეკულის აღნაგობა (სტრუქტურა) ჩაითვლება დადგენილად, თუ განსაზღვრულია ამა თუ იმ ატომის მიმართ სხვა ატომების, მოლეკულების ან იონების სივრცითი (ხაზობრივი, სიბრტყივი) განლაგება. ცხადია, იგულისხმება, რომ ამ მოცემულ ატომთან ეს იონები, მოლეკულები ან ატომები დაკავშირებულია ქიმიური ბმებით

(კოვალენტური, იონური, კოორდინაციული). ე. ი. საჭიროა ბირთვებს შორის მანძილების (ბმის სიგრძე) და ამ ბმებს შორის არსებული კუთხეების (ბმების კუთხეები) ცოდნა. ძირითადი ექსპერიმენტული მეთოდები, რომლებიც ამ მონაცემების განსაზღვრის საშუალებას იძლევიან, შეიძლება დაიყოს ოთხ ძირითად ჯგუფად: დიფრაქციული, სპექტროსკოპიული, რეზონანსული და სხვა ფიზიკური მეთოდები.

როგორც აღინიშნა, სტატიკური სტერეოქიმია სწავლობს სიერციითი იზომერიის ანუ სტერეოიზომერიის სახეებსა და თვისებებს, რაც მჭიდრო კავშირშია სინათლის პოლარიზაციასა და სიმეტრიასთან. კერძოდ, ამა თუ იმ ქიმიური ნაერთის დამოკიდებულებასთან პოლარიზებული სინათლის სხივის სიბრტყისადმი. არსებობს მრავალი ქიმიური ნაერთი, წარმოქმნილი ბუნებრივი პროცესების დროს და შემდეგ გამოყოფილი, ან მიღებული ქიმიურ ლაბორატორიებში, ცალკეულ მათგანს აქვს ერთნაირი შედგენილობა, ფიზიკური და ქიმიური თვისებები, მაგრამ მკვეთრად განსხვავდებიან პოლარიზებული სინათლის სხივის სიბრტყის მიმართ თავისი დამოკიდებულებით. კერძოდ, შესაბამისი ნაერთის ერთი იზომერი პოლარიზებული სინათლის სხივის სიბრტყეს აბრუნებს საათის ისრის მოძრაობის მიმართულებით, მეორე კი – საათის ისრის მოძრაობის საწინააღმდეგო მიმართულებით. პირველს უწოდებენ მარჯვნივ მბრუნავს, ხოლო მეორეს – მარცხნივ მბრუნავს. ისეთ ქიმიურ ნაერთებს (ნივთიერებებს), რომელთაც შესწევს პოლარიზებული სინათლის სხივის სიბრტყის შემობრუნების უნარი, ეწოდება ოპტიკურად აქტიური, ხოლო ამ თვისებას კი ოპტიკური აქტიურობა. დადგენილია, იმისათვის, რომ ნივთიერებამ გამოავლინოს ოპტიკური აქტიურობა, აუცილებელია მის მოლეკულას არ გააჩნდეს სიმეტრიის ცენტრი და სიმეტრიის სიბრტყე ან ერთ-ერთი მათგანი.

როგორც ითქვა, სტერეოქიმია ასევე მჭიდრო კავშირშია სიმეტრიასთან, რომლის უამრავ მაგალითსაც უხვად გვაწვდის ბუნება და რომელიც ერთ-ერთი ყველაზე გავრცელებული მოვლენაა დედამიწაზე. ზოგადად, არამა-

თემატიკული აზრით, სიმეტრია დაკავშირებულია ფორმის სისწორესთან, სასიამოვნო პროპორციებთან, პერიოდულობასთან, ჰარმონიულ განწყობასთან. მათემატიკური (გეომეტრიული) კუთხით სიმეტრია შეიძლება გაანალიზდეს გაცილებით ზუსტად, თუ კი გამოვიყენებთ ისეთ ცნებებს, როგორებიცაა სიმეტრიის ღერძი, სიმეტრიის ცენტრი, სიმეტრიის სიბრტყე, რაც განაპირობებს განსახილველი სხეულის (ნაერთის) სიმეტრიულად განლაგებას სწორი ხაზის, წერტილის ან სიბრტყის მიმართ შესაბამისად. ასეთ სწორ ხაზს, წერტილს და სიბრტყეს ეწოდებათ სიმეტრიის ელემენტები. შესასწავლი ობიექტის მიმართ რაიმე ოპერაციას, რომელიც მისი შესრულებით მიგვიყვანს ობიექტის იგივე და საწყის ორიენტაციასთან შეთავსებულს, ეწოდება სიმეტრიის ოპერაცია (მაგალითად, სიმეტრიის ღერძის ირგვლივ შემობრუნება).

უდიდესი მნიშვნელობა აქვს სიმეტრიის ცნებას ქიმიაში, რადგანაც ერთ-ერთ უმთავრეს ამოცანას წარმოადგენს მოლეკულის სტრუქტურის დადგენა. სიმეტრიის მეთოდების ცოდნის შემთხვევაში გაცილებით ადვილი გასაგებია, მაგალითად, ის ფაქტი, რომ ერთხანაცელებული ეთანის მხოლოდ ერთი ფორმაა შესაძლებელი, ხოლო ერთხანაცელებული პროპანისთვის – ორი. სიმეტრიის მეთოდების გამოყენების გარეშე პრაქტიკულად შეუძლებელია ნაერთის მოლეკულური და კრისტალური სტრუქტურების დადგენა როგორც დიფრაქციული, ასევე სპექტროსკოპიული მეთოდებით.

სახელმძღვანელოს შესავალი, I, V–VII თავები დაწერილია პროფ. რ. მაჩხოშვილის მიერ, ხოლო II–IV თავები – პროფ. ნ. დიდმანიძის მიერ.

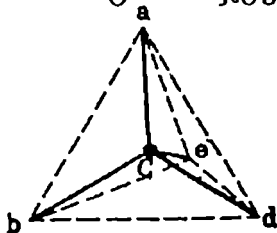


## თავი პირველი

### ნახშირბადატომის სტერეოქიმიური თავისებურება. ვანტ-ჰოფი და ლე-ბელი ორბანულ ნაერთთა სტერეოქიმიის ფუძემდებლები. ალფრედ ვერნერის შრომები

1874 წელს ვანტ-ჰოფმა და ლე-ბელმა ერთმანეთისაგან დამოუკიდებლად გამოთქვეს პოსტულატი ნახშირბადის ატომის ოთხი ბმის სივრცითი, კერძოდ კი ტეტრაედრული განლაგების შესახებ. მათ მიერ ჩამოყალიბებული თეორიის თანახმად ნახშირბადის ატომი მოთავსებულია ტეტრაედრის ცენტრში და მისი ოთხივე ბმა (ოთხი ვალენტობა, როგორც მაშინ თვლიდნენ) მიმართულია ტეტრაედრის წვეროებისაკენ. ეს პიპოთეზა შემდგომ დადასტურებული იქნა ექსპერიმენტულად.

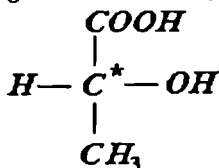
შესავალში აღვნიშნეთ, იმისათვის, რომ ნაერთმა გამოავლინოს ოპტიკური აქტიურობა, მის მოლეკულას არ უნდა გააჩნდეს სიმეტრიის ცენტრი და სიმეტრიის სიბრტყე, ან ერთ-ერთი მათგანი, ე.ი. ნახშირბადის ნაერთის შემთხვევაში ის უნდა შეიცავდეს ნახშირბადის ასიმეტრიულ ატომს, ანუ ატომს, რომელიც დაკავშირებულია სხვადასხვა ატომებთან ან ატომთა ჯგუფებთან, როგორც ეს წარმოდგენილია ქვემოთ ასიმეტრიული ნახშირბადატომის ტეტრაედრულ მოდეულზე ზოგადად (a, b, d, e – სხვადასხვა ატომები ან ატომთა ჯგუფებია).



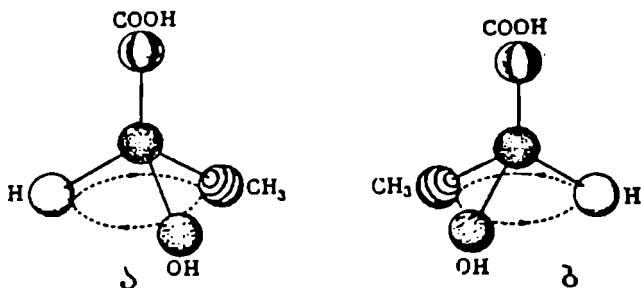
პოლარიზებული სინათლის სხივის სიბრტყის შემობრუნების უნარი განპირობებულია ოპტიკურად აქტიუ-

რი ნაერთის მოლეკულის ასიმეტრიული სივრცითი აღნაგობით. ვანტ-ჰოფმა და ლე-ბელმა აჩვენეს, რომ თუ ნივთიერების მოლეკულაში არსებობს ნახშირბადის თუნდაც ერთი ატომი შეერთებული ოთხ სხვადასხვა ატომთან ან ატომთა ჯგუფთან, მაშინ ასეთი მოლეკულები ასიმეტრიულია, ე.ი. მათ არა აქვთ სიმეტრიის სიბრტყე და სიმეტრიის ცენტრი ან ერთ-ერთი მათგანი, რაც განაპირობებს ოპტიკურ აქტიურობას და ოპტიკური ანუ სტერეოიზომერების წარმოქმნის შესაძლებლობას.

ასიმეტრიული ნაერთის კარგ მაგალითს წარმოადგენს რძის ( $\alpha$ -ჰიდროქსიპროპიონის) მუავა,

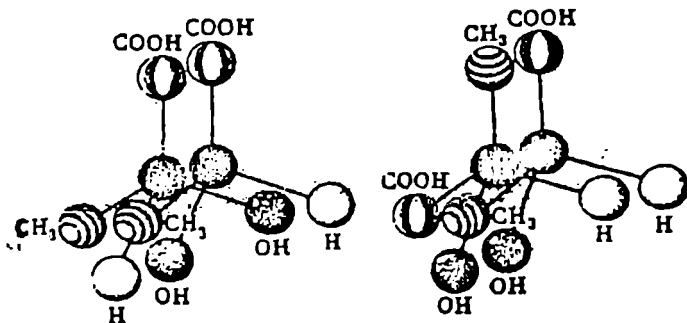


რომელშიც არსებობს ასიმეტრიული ნახშირბადატომი კარბოქსილის ჯგუფთან  $\alpha$ -მდგომარეობაში და, რომელსაც სტრუქტურულ ფორმულებში ვარსკვლავით აღნიშნავენ. პირველ სურათზე წარმოდგენილია რძის მუავას მოლეკულის ორი სივრცითი მოდელი, რომლებშიც ასიმეტრიული ნახშირბადატომი მდებარეობს ტეტრაედრის ცენტრში.



სურ. 1. რძემუავას მოლეკულის ოპტიკური იზომერების მოდელები.

ორივე მოდელი ასიმეტრიულია, რადგანაც არც ერთ მათგანს არ გააჩნია სიმეტრიის სიბრტყე. თუ ყურადღებით დაეაკვირდებით, შევნიშნაეთ, რომ პირველ მათგანში (ა) წყალბადი, მეთილის რადიკალი და ჰიდროქსოჯგუფი განლაგებულია საათის ისრის მოძრაობის მიმართულებით, ხოლო მეორეში (ბ) – საწინააღმდეგო მიმართულებით. ისინი ერთიმეორის მიმართ წარმოადგენენ საგნის სარკეში გამოსახულების ანალოგიურს. უკეთ რომ დავრწმუნდეთ ამ ორი სტრუქტურული მოდელის არაიდენტურობაში, მოვათავსოთ ისინი ერთიმეორესზე, როგორც ეს ნაჩვენებია მეორე სურათზე. როგორც არ უნდა ჩავატაროთ ეს პროცედურა, ისინი არასოდეს არ შეუთავსდებიან ერთიმეორეს ყველა ჯგუფით.



სურ. 2. რბუმჟავას ოპტიკური იზომერების შეუთავსებლობა.

ამრიგად, რძის მჟავა, ისევე როგორც ნებისმიერი ნაერთი ასიმეტრიული ნახშირბადატომის შემცველი, უნდა არსებობდეს ორი ოპტიკური (სარკული) იზომერის სახით.

ოპტიკური იზომერები, რომლებიც პოლარიზებული სინათლის სხივის სიბრტყეს მარჯვნივ შემობრუნებენ (გადახრიან), იწოდებიან მარჯვნივმბრუნავებად და მათ (+) ნიშნით, ან d-თი აღნიშნავენ, ხოლო სიბრტყის მარ-

ცხნივ მბრუნავი იზომერები – მარცხნივმბრუნავებად და აღნიშნავენ (-) ნიშნით ან  $\ell^*$ -ით.

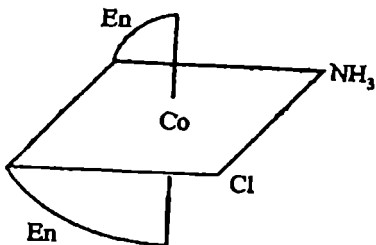
თუ ნაერთი ერთდროულად შეიცავს ორი ოპტიკური იზომერის ერთნაირ რაოდენობას, ასეთი ნაერთი არ შემოაბრუნებს პოლარიზაციის სიბრტყეს, რადგანაც ერთი მათგანი იწვევს სიბრტყის შემობრუნებას მარჯვნივ გარკვეული კუთხით, ხოლო მეორე – მარცხნივ იგივე კუთხით. ოპტიკური იზომერების ოპტიკურად არააქტიური ნარევები იწოდებიან რაცემულ ნარევებად, ხოლო ნივთიერებები კი – რაცემატებად. მათ აღნიშნავენ ( $\pm$ ) ნიშნით. ვანტ-ჰოფს თავისი ბრწყინვალე შრომებისათვის მინიჭებული ჰქონდა ნობელის პრემია.

როგორც ზემოთ აღინიშნა, 1893 წელს აღფრედ ვერნერის მიერ მოწოდებული კოორდინაციული თეორია ითვლება არაორგანული და კოორდინაციული ნაერთების სტერეოქიმიის დასაწყისად. გასაოცარია, მაგრამ ფაქტია, რომ მას შემდეგ, რაც 27 წლის ა. ვერნერმა აღნიშნული თეორია ჩამოაყალიბა, რისთვისაც ათიოდ წლის შემდეგ ნობელის პრემია მიიღო, საუკუნეზე მეტი გავიდა და იგი კვლავ უცვლელად ძალაშია.

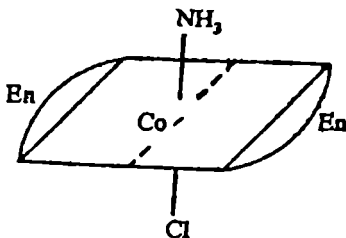
კოორდინაციულ ნაერთთა ოპტიკური იზომერიაც პირველად ა. ვერნერმა აღმოაჩინა 1911 წელს კობალტის(III) კოორდინაციული ნაერთის  $[CoCINH_3En_2]Cl_2$ , სადაც  $En = H_2N(CH_2)_2NH_2$ , შესწავლისას. ამ ნაერთის კომპლექსურ კათიონს  $[CoCINH_3En_2]^{2+}$  ორი გეომეტრიული იზომერის სახით შეუძლია არსებობა:

---

\* d-ლათ. dexter – მარჯვენა;  $\ell$ -ლათ. laevus – მარცხენა.

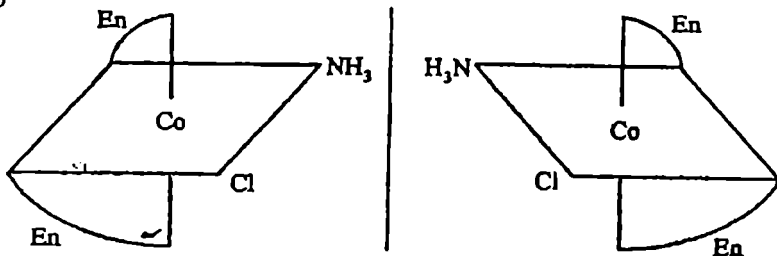


ცის-იზომერი

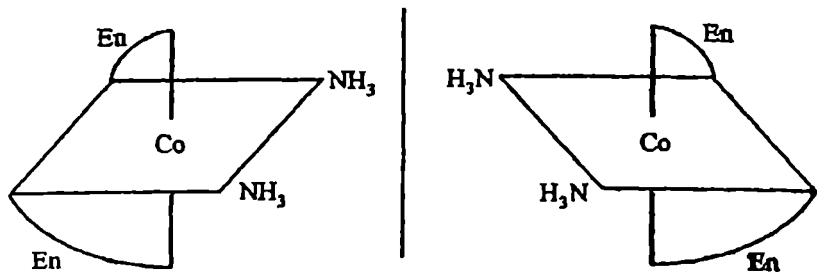


ტრანს-იზომერი

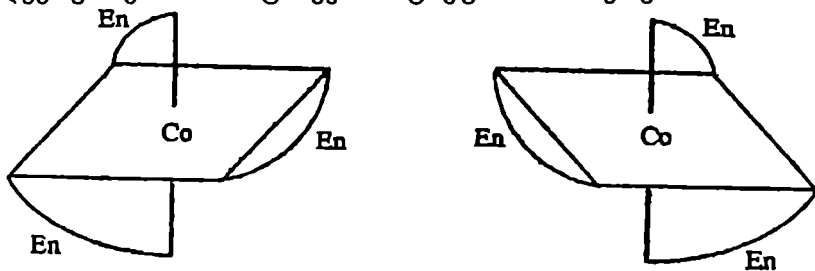
მოცემული ნაერთის ტრანს-იზომერს აქვს სიმეტრიის სიბრტყე, რომელიც ამიაკის მოლეკულისა და ქლორის ატომით დაკავებული ოქტაედრის ორ წვეროზე გადის და სიბრტყეს კვეთს პუნქტირის გასწვრივ. ცის-იზომერის შემთხვევაში ასეთი სიბრტყე არ არსებობს, რის გამოც ცის-იზომერი ასიმეტრიული მოლეკულაა (იონი) და შეუძლია არსებობდეს ორი ოპტიკური იზომერის სახით:



როგორც ჩანს, ოპტიკურ იზომერებში ლიგანდების განლაგება იმგვარია, რომ ამ იზომერების მოლეკულები ერთიმეორის სარკული გამოსახულებაა. ოპტიკური იზომერები არსებობენ იმ შემთხვევაშიც, როდესაც უკვე განხილულ კოორდინაციულ ნაერთში  $[CoClNH_3En_2]Cl_2$  ორივე მონოდენტატური ლიგანდი  $(Cl, NH_3)$  ერთიდაიგივეა. მაგალითად:



ოპტიკური იზომერების არსებობა დადგენილია იმ ნაერთების შემთხვევაშიც, როდესაც ლიგანდების ფუნქციას ასრულებენ მხოლოდ ბიდენტატური ნაერთები ან იონები, მაგალითად, იგივე ეთილენდიამინი, ოქსალატიონი და ა. შ. კერძოდ, კომპლექსის  $[CoEn_3]Cl_3$  კომპლექსურ კათიონსაც აქვს ოპტიკური იზომერები:

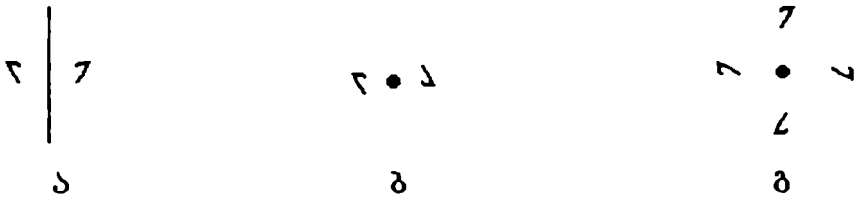


ეფორდინაციულ ნაერთს, რომელშიც ცენტრალური ატომის საკოორდინაციო რიცხვი ოთხის ტოლია, ოპტიკური იზომერები მხოლოდ იმ შემთხვევაში შეიძლება ჰქონდეს, როდესაც მას ტეტრაედრული აღნაგობა აქვს და მისი ოთხივე ლიგანდი (მონოდენტატური) სხვადასხვაა  $[MABCD]$ .

თავისი ფიზიკური თვისებებით ოპტიკური იზომერები პრაქტიკულად არ შეიძლება განსხვავდებოდნენ ერთიმეორისაგან მაშინ, როდესაც მათი ფიზიოლოგიური ზემოქმედება უკვე მკვეთრად განსხვავდება ერთმანეთისაგან.

სიმეტრიის ელემენტები და სიმეტრიის  
ოპერაციები

მოცემული სახელმძღვანელოს ძირითადი მასალის უკეთ გაგებისათვის განვიხილოთ ზოგიერთი მაგალითი და საკითხი. თუ დაეაკვირდებით სურათს 3(ა), რომელზედაც გამოსახულია ციფრი 7, დავინახავთ, რომ თითოეული შვიდიანი წარმოადგენს ერთიმეორის სარკულ გამოსახულებას.



სურ. 3. ა - სიმეტრიის სიბრტყე; ბ - სიმეტრიის ღერძი;  
გ - მე-4 რიგის სიმეტრიის ღერძი.

მოცემულ სურათზე რომ არ იყოს გატარებული ვერტიკალური ხაზი, შეიძლებოდა გვეთქვა, რომ ამ ფიგურას (7) აქვს სიმეტრიის სიბრტყე, რომელიც პერპენდიკულარულია ნახაზის (ფურცლის) და გადის ამ ვერტიკალურ ხაზზე. ახლა თუ გადავებრუნებთ (სიმეტრიის ოპერაცია) ერთ-ერთ შვიდიანს, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახაზზე (ბ), დავინახავთ, რომ მიღებულ მდგომარეობას აღარ ექნება სიმეტრიის სიბრტყე. სამაგიეროდ, გაჩნდა სიმეტრიის ახალი ელემენტი, კერძოდ, სიმეტრიის ღერძი, რომელიც ნახაზის პერპენდიკულარულია და გადის იქ აღნიშნულ წერტილზე. თუ ამ ღერძის ირგვლივ შემოვებრუნებთ (სიმეტრიის ოპერაცია) ნებისმიერ შვიდიანს 180°-ით, ისინი შეუთავსდებიან ერთიმეორეს. ადვილი მისახვედრია, რომ ანალოგიურ სურათს (შვიდიანების ერ-

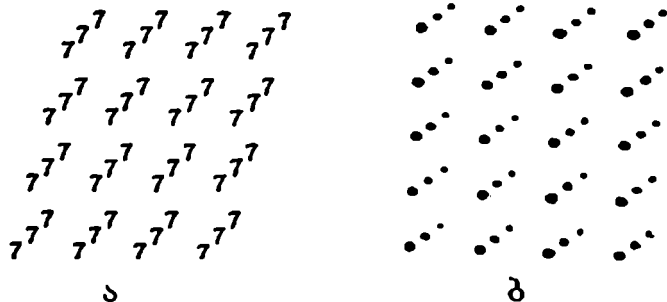
თი-ჩეორეზე დამთხვევას) მივიღებთ, თუ ნებისმიერ შეი-  
დიანს შემოვაბრუნებთ 90<sup>0</sup>-ით (გ).

ჩვენს მიერ აღებული შეიდიანი შეიძლება არა მარ-  
ტო აერეკლოთ სწორი ხაზიდან, შემოვაბრუნოთ ღერძის  
ორგულივ, არამედ, გადავაადგილოთ სიერცეში სწორი  
ხაზის გასწვრივ. ასეთ სიმეტრიას ტრანსლაციური სი-  
მეტრია ეწოდება.



სურ. 4. ა - ტრანსლაციური სიმეტრია ხაზის გასწვრივ;  
ბ - ტრანსლაციური სიმეტრია სიბრტყეში.

თუ შეიდიანებისგან შემდგარ ხაზს გავიმეორებთ  
პარალელური გადაადგილებით ერთი მიმართულებით, მა-  
გალითად, მაღლა, მივიღებთ (ბ) მდგომარეობას. ანალო-  
გიურად, შეიდიანებისგან შედგენილ სწორ ხაზს თუ  
გადავაადგილებთ უკვე მესამე მიმართულებით, კერძოდ  
სიბრტყის (ფერცლის) პერპენდიკულარულად, მივიღებთ  
ჩე-5 სურათზე გამოსახულ მდგომარეობას (ა), რომელსაც  
ეწოდება ტრანსლაციური სიმეტრია სამი მიმართულებით.



სურ. 5. ა-ტრანსლაციური სიმეტრია  
სამი მიმართულებით; ბ-სამგანზომილებიანი გისოსი  
(ცხაური).



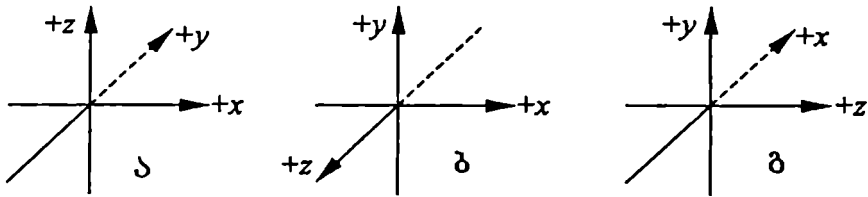
თუ შეიდიანებს შეეცვლით წერტილებით, როგორც ეს ნაჩვენებია სურათზე 5, ბ, მივიღებთ წერტილების ერთობლიობას, რომელსაც სამგანზომილებიანი სივრცითი გისოსი ეწოდება.

ამ თემის გაერცობა—განეითარება ჩვენ მიგვიყვანს კრისტალურ სტრუქტურებთან, კრისტალოგრაფიასთან, რაც ქვემოთ იქნება განხილული.

ჯერ კიდევ საუკუნის წინ, თავის შესანიშნავ ნაშრომში ახასიათებდა რა გეომეტრიული თვალსაზრისით ბოტანიკის, ზოოლოგიის, ქიმიის, გეოლოგიის, ფიზიკის, ასტრონომიის და ტექნიკის განეითარებას, რაც პირდაპირ თუ ირიბად დაფუძნებულია სიმეტრიის ოპერაციებზე, დ'არსი, ტომპსონი წერდა: “უჯრედი და ქსოვილი ეს მატერიის ნაჭერია, მათი ნაწილაკები მოძრაობენ, ფორმირდებიან და ყალიბდებიან ფიზიკის კანონების შესაბამისად და ისინი არ წარმოადგენენ გამონაკლისს წესიდან “ბუნებას უყვარს გეომეტრია”.

ქიმიის ერთ-ერთ ძირითად ამოცანას წარმოადგენს ნაერთის მოლეკულური და კრისტალური სტრუქტურის დადგენა. ამისათვის კი აუცილებელია იმის გაგება, თუ როგორ არიან მოლეკულაში ატომები განლაგებული და როგორ არიან ერთიმეორესთან დაკავშირებული ცალკეული მოლეკულები კრისტალში. ამიტომაც შემდგომში გაცილებით მოსახერხებელი იქნება თუ მოლეკულას “მოვათავსებთ” კოორდინატების დეკარტის სისტემაში. ჩვეულებრივ მიღებულია, რომ კოორდინატთა სისტემის დასაწყისი მოვათავსოთ მოლეკულის სიმძიმის ცენტრში. ურთიერთ პერპენდიკულარული ღერძები, როგორც წესი, აღინიშნებიან  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , რომელთა აღნიშვნის რიგზე შეეჩერდებით ქვემოთ. გარდა ამისა, აუცილებელია განისაზღვროს თუ ნულოვანი წერტილიდან რა მიმართულება ექნება დადებით ღერძს და რა მიმართულება — უარყოფითს. ამისათვის, ჩვეულებრივ, გამოიყენება ე.წ. მარჯვენა ხელის წესი. მარჯვენა ხელის დიდ, საჩვენებელ და შუათითებს განალაგებენ სამი ურთიერთპერპენდიკულარული მიმართულებით. დიდი თითის, საჩვენებელი და შუათითის მიმართულებებს შესაბამისად ღებულაობენ  $y$  და  $z$

დერძებად. მე-ნ სურათზე წარმოდგენილია ამ წესის გამოყენება. ორიენტაცია (ა) შეესაბამება კოორდინატთა სისტემის ჩვეულებრივ ორიენტაციას; ორიენტაცია (ბ) მიიღება (ა) სისტემის კოორდინატების ბრუნვით  $x$  ღერძის ირგვლივ  $90^{\circ}$ -ით, ხოლო ორიენტაცია (გ) კი მიიღება (ბ) სისტემის კოორდინატების ბრუნვით  $y$  ღერძის ირგვლივ  $90^{\circ}$ -ით.



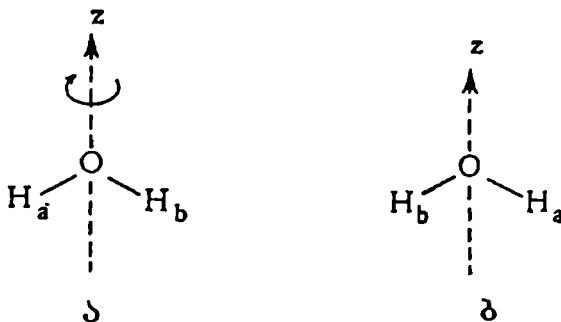
სურ. 6. კოორდინატთა სისტემის სამი ორიენტაცია, რომლებიც აკმაყოფილებენ მარჯვენა ხელის წესს.

მარტივ მაგალითებზე უკვე გავეცანით სიმეტრიის ელემენტებს (სიმეტრიის ღერძი, სიმეტრიის ცენტრი, სიმეტრიის სიბრტყე) და სიმეტრიის ოპერაციებს, რომელთა შესრულებასაც ობიექტის მიმართ მიყვავართ ამ ობიექტის ახალ ორიენტაციასთან, რომელიც სრულად ემთხვევა მის საწყის მდგომარეობას (სახეს). მაგალითად, ზემოთ განხილული შვიდიანის სიმეტრიის ღერძის ირგვლივ შემობრუნება.

რაიმე საგნის ან რაიმე ნაერთის მოლეკულის სიმეტრიული თვისებების განხილვა გაცილებით ადვილი და თვალსაჩინოა, იმ სიმეტრიის ოპერაციების გამოყენებით, რომლებიც მიესადაგებიან მოლეკულას. არსებობს სიმეტრიის ოპერაციის მხოლოდ ხუთი ძირითადი ტიპი, რომლებიც უცვლელად ტოვებენ მოლეკულის სიმძიმის ცენტრს. ქვემოთ განხილულია ეს ხუთი სიმეტრიის ოპერაცია და მათთან დაკავშირებული სიმეტრიის ელემენტები.

## 2.1. სიმეტრიის ღერძის ირგვლივ ბრუნვა

თუ მოვათავსებთ წყლის მოლეკულას  $HOH$  ნახაზის სიმეტრეში (სურ. 7) და შემოვაბრუნებთ მას ღერძის ირგვლივ, რომელიც გადის ჟანგბადის ატომზე და წყალბადატომებს შორის კუთხეს ყოფს შუაზე  $180^\circ$ -ით, მივიღებთ ახალ ორიენტაციას, რომელიც არ განსხვავდება საწყისი ორიენტაციისაგან.



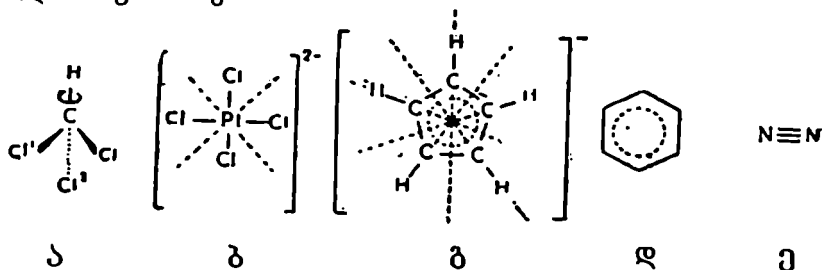
სურ. 7.  $HOH$  მოლეკულა  $C_2^v$  ოპერაციამდე და შემდეგ: ა—საწყისი მდგომარეობა; ბ— $180^\circ$ -ით შემობრუნების შემდეგ.

ამ მაგალითში სიმეტრიის ელემენტს წარმოადგენს ბრუნვის ღერძი, ხოლო სიმეტრიის ოპერაციას — ღერძის ირგვლივ ბრუნვა.  $180^\circ$ -ით მეორე შემობრუნება, ცხადია, დააბრუნებს მოლეკულას საწყის მდგომარეობაში. თუ კუთხეს, რომელიც საჭიროა მოლეკულის შემობრუნებისათვის, რათა ახალი და საწყისი ორიენტაციები ერთიმეორეს დაემთხვეს აღვნიშნავთ  $\theta$  (თეტა), მაშინ იტყვიან, რომ მოლეკულას აქვს  $360^\circ/\theta$  რიგის ბრუნვის ღერძი და აღვნიშნავენ  $C_p$ , სადაც  $p = 360^\circ/\theta$ , ხოლო  $C$  ნიშნავს — “ციკლური”. ზემოთ განხილული წყლის მოლეკულისთვის გვექნება  $360^\circ/180^\circ = 2$  ანუ  $C_2$  — მეორე რიგის ბრუნვის ღერძი. კრისტალოგრაფიაში სიმეტრიის ღერძს ხშირად

აღნიშნავენ უბრალოდ ციფრით, მაგალითად 2, რაც შეესაბამება  $C_2$ -ს.

ნებისმიერ მოლეკულას აქვს უსასრულო რაოდენობა  $C_1$  ღერძებისა. ნებისმიერი ღერძის ირგვლივ მოლეკულის შემობრუნება  $360^\circ$ -ით მას საწყის მდგომარეობაში დააბრუნებს.

იხეთი მოლეკულების მაგალითები, რომელთაც აქვთ ორზე მეტი რიგის მქონე ბრუნვის ღერძები, წარმოდგენილია სურათზე 8.



სურ. 8. მეორე რიგზე მაღალი ბრუნვის ღერძის მქონე მოლეკულები.

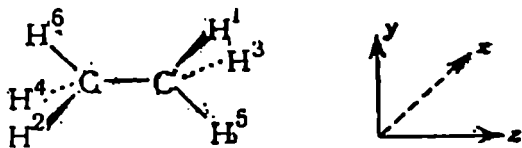
ქლოროფორმის მოლეკულას (ა) აქვს მესამე რიგის ღერძი ( $C_3$  ან 3). რომელიც ემთხვევა  $C-H$  ბმას.  $PCl_4^{2-}$  (ბ) იონს გააჩნია მეოთხე რიგის ღერძი, ანუ  $C_4$  (4), რომელიც იონის სიბრტყის პერპენდიკულარულია და გადის პლატინის ატომზე (იონზე). ციკლოპენტადიენილის ანიონსა და ბენზოლის მოლეკულას კი შესაბამისად აქვთ მეხუთე  $C_5$  და მეექვსე  $C_6$  რიგის ღერძები, რომლებიც ნახაზის (სიბრტყის) პერპენდიკულარულია და გადიან ამ იონისა და მოლეკულის ცენტრებში.  $C_4$  ღერძი იონში  $PCl_4^{2-}$  ამავედროულად არის  $C_2$  ღერძი, ხოლო ბენზოლში ღერძი  $C_6-C_2$  და  $C_3$ . გარდა ამისა,  $PCl_4^{2-}$  იონში გარდა  $C_4$  და  $C_2$ , რომელიც ემთხვევა  $C_4$ -ს, არსებობს

კიდევ ორი  $C_2$  ღერძი, რომლებიც მდებარეობენ სიბრტყეში და გადიან მოპირდაპირე ქლორის ატომებზე (იონებზე) და კიდევ ორი დამატებითი  $C_2$  ღერძი, ერთიმეორის პერპენდიკულარული, რომლებიც კუთხეებს  $Cl - Pt - Cl$  ყოფენ შუაზე.

ხაზობრივი მოლეკულა, მაგალითად  $N_2$  (ე) შეიძლება შემობრუნებული იქნას ორივე ატომზე გამავალი ღერძის ირგვლივ ნებისმიერი კუთხით, შესაბამისად ასეთ მოლეკულებს გააჩნიათ  $p = \infty$  ღერძი, რომელიც აღინიშნება  $C_\infty$ .

## 2.2. ინვერსია, ან სიმეტრიის ცენტრში არეკლვა

თუ მოლეკულის ნებისმიერი ატომიდან მოლეკულის ცენტრზე გამავალი სწორი ხაზის იმავე მიმართულებით, იმავე მანძილზე არსებობს ექვივალენტური ატომი, მაშინ მოლეკულას გააჩნია სიმეტრიის ცენტრი, რომელსაც ხშირ შემთხვევაში აღნიშნავენ  $i$  (ინვერსია) სიმბოლოთი. ასეთ შემთხვევაში, ცენტრიდან არეკლილი ნებისმიერი ატომი გადადის ექვივალენტურ ატომში. მოლეკულებსა და იონებს შორის, რომლებიც წარმოდგენილია სურათზე 8, სიმეტრიის ცენტრები აქვს მხოლოდ  $PtCl_4^{2-}$ ,  $C_6H_6$  და  $N_2$ . თუ სიმეტრიის ცენტრი არსებობს, მაშინ ის მდებარეობს კოორდინატთა სისტემის სამი ღერძის გადაკვეთის წერტილში. უნდა აღინიშნოს, რომ ინვერსია  $x$ ,  $y$ , და  $z$  ყოველ წერტილს გარდაქმნის  $-x$ ,  $-y$ ,  $-z$  წერტილებში. თუ დავაკვირდებით ეთანის ჭადრაკულ კონფორმაციას (სურ. 9), დავინახავთ, რომ მას აქვს მეორე რიგის სიმეტრიის სამი ღერძი  $C_2$ , რომელთაგანაც ერთი ემთხვევა  $x$  ღერძს.  $C_2^x$  ოპერაციას მიყვარათ  $H^1 \rightarrow H^2$ ,  $H^3 \rightarrow H^4$ ,

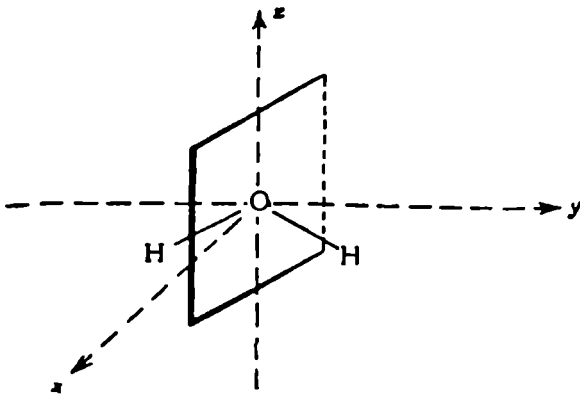


სურ. 9. ეთანის ჭადრაკული ტრანსფორმაცია.

$H^5 \rightarrow H^6$  გადასვლებში.  $H^3$  შეიძლება წარმოვიდგინოთ წერტილით  $(x, y, z)$ ;  $C_2^x$  ოპერაციას ეს წერტილი გადაყავს წერტილში  $(-x, -y, -z)$ ; ანუ ღერძის ირგვლივ  $C_2$  ბრუნვის შემდეგ  $x$  ღერძის ირგვლივ  $y$  და  $z$  ნიშნები იცვლება, ხოლო  $x$ -სა არა.  $C_2^y$  ოპერაცია ცვლის  $x$  და  $y$  ნიშნებს, ხოლო  $C_2^z$  -  $x$  და  $y$  ნიშნებს. სიმეტრიის ოპერაციების ჩატარებისას სიმეტრიის ელემენტზე მდებარე ყველა წერტილი რჩება უცვლელი.

### 2.3. სიმეტრიის სიბრტყეში არეკლვა (სარკული სიბრტყე)

სიბრტყეს, რომლითაც შეიძლება გავეყოთ მოლეკულა შუაზე ისე, რომ თითოეული ატომი მოლეკულის ერთ ნახევარში, ამ სიბრტყეში არეკლვის შემდეგ გადავიდეს მეორე ნახევარში არსებულ ექვივალენტურ ატომში (სიმეტრიის ოპერაცია), ეწოდება სარკული სიბრტყე (სიმეტრიის ელემენტი). ასეთი სიბრტყის აღნიშვნაა  $\sigma$ ; კრისტალოგრაფიაში კი -  $m$  (mirror-სარკე). ასე, მაგალითად, წყლის მოლეკულაში (სურ. 10)  $xz$  სიბრტყე წარმოადგენს სარკულ სიბრტყეს.



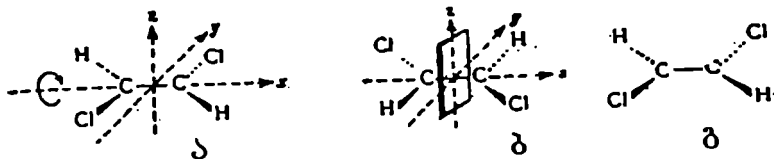
სურ. 10. წყლის მოლეკულა ერთი ვერტიკალური სარკული სიბრტყით  $\sigma^z$  გამოსახული; მეორე სარკული სიბრტყე  $\sigma_v$  ემთხვევა მოლეკულის  $yz$  სიბრტყეს.

$\sigma^z$  სარკულ სიბრტყეში ძეგს  $C_2^z$  ღერძი. წყლის მოლეკულაში ( $HOH$ ) არსებობს მეორე სარკული სიბრტყეც, რომელიც ემთხვევა ნახაზის სიბრტყეს,  $\sigma^x$  ამ სიბრტყეშიც მდებარეობს  $C_2^x$  ღერძი. რადგანაც  $z$  ღერძი ვერტიკალურია ორივე სარკული სიბრტყეც  $\sigma^z$  და  $\sigma^x$  ასევე ვერტიკალურია და მათი აღნიშვნაა  $\sigma_v$ .

#### 2.4. ღერძის ირგვლივ შემოგბრუნება ამ ღერძის პერპენდიკულარულ სიბრტყეში არეკვით

წარმოვიდგინოთ, რომ მოლეკულა შემოგაბრუნეთ სიმეტრიის ღერძის ირგვლივ და მიღებული ორიენტაციის არეკვლა მოხდა ამ ღერძის პერპენდიკულარულ სიბრტყეში (სიმეტრიის ოპერაცია). თუ ამ ორი ერთდროული ოპერაციის შედეგად მიღებული ორიენტაცია ემთხვევა საწყ-

ყის ორიენტაციას, მაშინ ამ მოლეკულას აქვს ბრუნვით-სარკული ღერძი (სიმეტრიის ელემენტი), რომელიც აღინიშნება  $S_p$  (კრისტალოგრაფიაში -  $\bar{P}$ , "პე-ტილდა").



სურ. 11. ტრანს-დიქლორეთილენის მიმართ სარკული ბრუნვის გამოყენება.

ა-საწყისი კონფიგურაცია; ბ- $x$  ღერძის ირგვლივ  $180^\circ$ -ით შემობრუნებით მიღებული კონფიგურაცია. გ- $yz$  სიბრტყეში ბ-კონფიგურაციის არეკვლით მიღებული კონფიგურაცია.

თუ ტრანს-დიქლორეთილენის მოლეკულას (სურ. 11, ა) შემოვებრუნებთ  $x$  ღერძის ირგვლივ  $180^\circ$ -ით და მოხდება მიღებული ორიენტაციის (სურ. 11,ბ) არეკვლა  $yz$  სიბრტყეში, მივიღებთ ორიენტაციას (სურ. 11,გ), რომელიც საწყისი ორიენტაციის (ა) ექვივალენტურია. შესაბამისად,  $x$  ღერძი წარმოადგენს ბრუნვით-სარკულ ღერძს. რადგანაც მოლეკულის ბრუნვა განხორციელდა  $180^\circ$ -ით, მაშასადამე

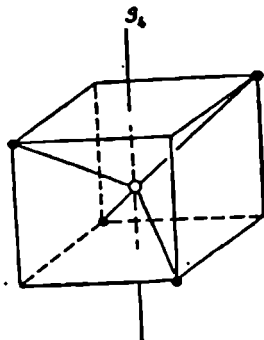
$$p = \frac{360^\circ}{180^\circ} = 2 \text{ და } x \text{ ღერძი წარმოადგენს } S_2 \text{ (ან } \bar{2}\text{).}$$

ყველა მოლეკულას, რომელსაც აქვს სიმეტრიის სიბრტყე, ასევე აქვს  $S_1$  ღერძი ( $\bar{1}$ ) - ეს ღერძი ამ სიმეტრიის სიბრტყის პერპენდიკულარულია.

თუ მოლეკულას გააჩნია ინვერსიის ცენტრი  $i$ , ასეთ მოლეკულას აუცილებლად აქვს ასევე  $S_2$ . მრავალ მოლეკულას აქვს ერთი ან რამდენიმე  $S_p$ . მაგაღლითად, მეთანის მოლეკულას აქვს  $S_6$  (ფაქტიურად სამი ასეთი ღერძი, სურ. 12). თითოეული ასეთი ღერძი გადის მო-



ლეკულის ცენტრზე და შუაზე ყოფს მოპირდაპირე  $H - C - H$  კუთხეებს.



სურ. 12. მეთანის მოლეკულა; ნაჩვენებია სამი  $S_4$  ღერძიდან ერთი.

რადგანაც კუბს, რომელშიც შეიძლება ჩაეხაზოთ  $CH_4$ -ის ტეტრაედრი (სურ. 12), აქვს ექვსი ექვივალენტური წახნაგი, შესაძლებელია სამი  $S_4$ , ზემოთ აღნიშნული ერთი ღერძის ჩათვლით. თითოეული  $S_4$  ღერძი ასევე წარმოადგენს  $C_2$  ღერძს. შესაბამისად გარდა სამი  $S_4$  ღერძისა, ნებისმიერ ტეტრაედრულ მოლეკულას  $AB_4$ , მაგალითად,  $CH_4$ ,  $Ni(CO)_4$  და ა.შ. ასევე აქვს სამი  $C_2$ .

## 2.5. ბრუნვით-ინვერსიული ღერძები

ბრუნვით-სარკული ღერძი  $S_p$  წარმოადგენს სიმეტრიის რთულ ელემენტს, შემდგარს ორი თანმიმდევრული ოპერაციისაგან, რომელთაგანაც ცალკე არც ერთი არ არის სიმეტრიის ოპერაცია, ხოლო ერთად – კი. მათი ჯამური ოპერაცია შეიძლება დაყოფილი იქნას ორ სხვა

ნაწილად, რომელთაგანაც ერთი წარმოადგენს ბრუნვას, ხოლო მეორე – ინვერსიას. ამ რთულ ოპერაციას უწოდებენ ბრუნვას ინვერსიით. თუმცა ნებისმიერი  $S_p$  ღერძი ზოგიერთი ბრუნვით – ინვერსიული ღერძის ექვივალენტურია; მაგრამ განსხვავდება რიგით. ასე, მაგალითად, ინვერსიის ცენტრი  $S_2(\tilde{2})$  ექვივალენტურია პირველი რიგის ბრუნვით-ინვერსიული ღერძისა  $\bar{1}$  და, პირიქით, თუ  $\rho$  არსებობს სიმეტრიის ცენტრი, ნებისმიერი არჩეული ღერძი წარმოადგენს  $\bar{1}$  ღერძს. სიმეტრიის სიბრტყე  $S_1$ , ან  $\tilde{1}$ ,  $\bar{2}$ -ის ექვივალენტურია. ოპერაცია  $S_4$  ექვივალენტურია  $\bar{4}$ -ის, ანუ  $S_4$  ოპერაცია, შესრულებული საათის ისრის მოძრაობის საწინააღმდეგოდ ექვივალენტურია  $\bar{4}$  ოპერაციის საათის ისრის მოძრაობის მიმართულებით. ხშირად ბრუნვით-სარკულ და ბრუნვით-ინვერსიულ ღერძებს უწოდებენ არასაკუთარ ღერძებს, საკუთარ ღერძებად წოდებული ბრუნვითი ღერძებისაგან განსხვავებით.

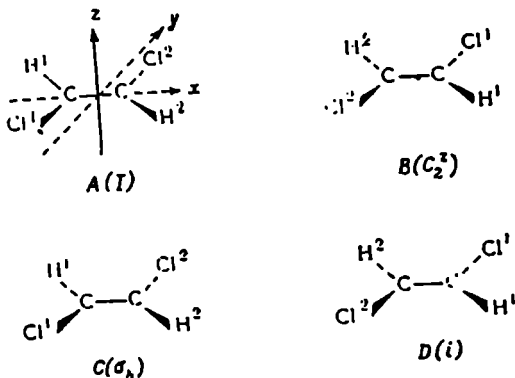
## თავი მესამე

### სიმეტრიის ჯერადი ოპერაციები და წერტილოვანი ჯგუშები

#### 3.1. ჯგუშები, ოპერაციის გადამრავლება, სტიქეომორფიული პროექციები

ჩვენ უკვე ვიცით, რომ თუ მოლეკულას ან იონს აქვს  $C_4$  ღერძი, როგორც მაგალითად, იონს  $PtCl_4^{2-}$ , მაშინ მას გააჩნია აგრეთვე  $C_2$  ღერძიც. ამის მაგალითს წარმოადგენს  $CH_4$  მოლეკულა. ასევე,  $S_3$  ღერძის არსებობა ნიშნავს  $C_3$  ღერძისა და  $\sigma_h$  სიბრტყის არსებობას (ჰორიზონტალური სიმეტრიის სიბრტყე). წყლის მოლეკულაში  $HOH$  (სურ. 10)  $xy$  სიმეტრიის სიბრტყეში არეკვლას  $y$  გადაყავს  $-y$ -ში, ხოლო  $yz$  სიმეტრიის სიბრტყეში არეკვლას  $x-x$ -ში.  $(x, y, z)$ -ის გარდაქმნა  $(-x, -y, -z)$ -ში მიიღწევა აგრეთვე  $C_2^z$  ოპერაციის შედეგად და შესაბამისად  $\sigma^{yz} \times \sigma^{xz} = C_2^z$ . ამრიგად, ურთიერთპერპენდიკულარული სიმეტრიის ორი სიბრტყის არსებობა ნიშნავს, რომ ამავედროულად არსებობს  $C_2$  ღერძი, რომელიც ემთხვევა ამ ორი სიბრტყის გადაკვეთის ხაზს.

სურათზე 13 წარმოდგენილია ტრანსდიქლორეთილენის მოლეკულა, რომელსაც აქვს სიმეტრიის ოთხი ელემენტი, ე. ი. ოთხი სხვადასხვა სიმეტრიის ოპერაცია. ცალკეული ეს ოპერაცია მოლეკულის ბოლო ორიენტაციას აბრუნებს საწყისის ექვივალენტურ ორიენტაციაში. სიმეტრიის ეს ელემენტებია:  $I, C_2^z, \sigma^{yz}, i$ . ამ ელემენტების შესაბამისი სიმეტრიის ოპერაციები მოცემულია სურათზე 13.



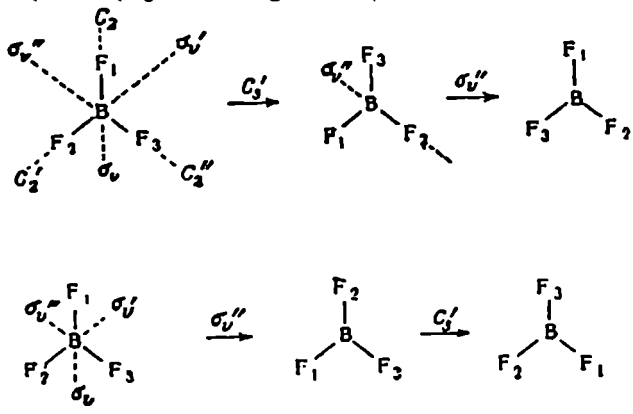
სურ. 13. ოთხი სიმეტრიის ოპერაციის შესაბამისი კონფორმაციები. (სიმეტრიის ელემენტები:  $I$ ,  $C_2^z$ ,  $\sigma^h$ ,  $i$ , ანუ  $C_{2h}$  წერტილოვანი ჯგუფი).

B, C, D კონფიგურაციები საწყისის ექვივალენტურია და ემთხვევა მას, ხოლო I საწყისის იდენტურია. სიმეტრიის ელემენტების (ან სიმეტრიის ოპერაციების) ასეთი ერთობლიობა წარმოქმნის ჯგუფს. ჯგუფში შემავალი ელემენტების რიცხვი განსაზღვრავს ჯგუფის რიზს. ყველა ზემოთ აღნიშნული ოპერაციის დროს მხოლოდ ერთი წერტილი – მოლეკულის სიმძიმის ცენტრი – რჩება უცვლელი და ამიტომ ჯგუფს წერტილოვანი ჯგუფი ეწოდება. კრისტოლოგრაფიაში განიხილავენ ჯგუფებს, რომლებიც მოიცავენ სიმძიმის ცენტრის ტრანსლაციას; ასეთი ჯგუფები შეიძლება იყოს ხაზობრივი, სიბრტყივი ან მოცულობითი.

ზემოთ განხილულ ჯგუფში თითოეული სიმეტრიის ელემენტი წარმოადგენს ოპერატორს, ანუ მიუთითებს თუ რა მოქმედება უნდა შესრულდეს, რათა განხორციელდეს ოპერაცია. ოპერატორების ნამრავლში ელემენტები ჩაიწერება მარჯვნიდან მარცხნივ. მაგალითად,  $i \times \sigma_h$  ნიშნავს ჯერ  $\sigma_h$  სიბრტყეში არეკვლას, მხოლოდ შემდეგ ინვერ-

სიას. ორი ოპერაციის თანმიმდევრულ გამოყენებას მათ ნამრავლს უწოდებენ.

სურათზე 13 განხილულ მაგალითში  $A \times B = C$  და  $B \times A = C$ . ალგებრაში ასეთ გამრავლებას, როდესაც  $A \times B = B \times A$  უწოდებენ კომუტაციურს, ხოლო ჯგუფებს, რომელთათვისაც კომუტაციური გამრავლება სამართლიანია ეწოდება აბელური (მათამატიკოს ჰენრიკ აბელის საპატივცემულოდ). ჩვენს მიერ განხილულ მაგალითში გამრავლება კომუტაციურია, მაგრამ ეს ასე არ არის ყოველთვის, ანუ გამრავლება არ არის კომუტაციური, რაც თვალნათლივ ჩანს სურათიდან 14.

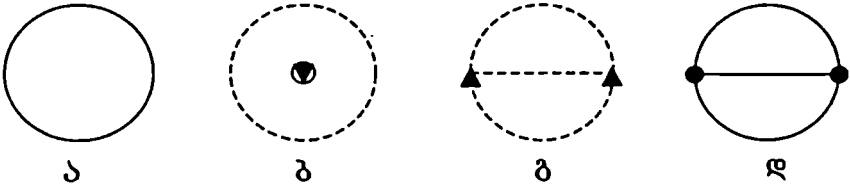


სურ. 14. არამაკომუტაცირებელი ოპერაციები  
 $\sigma_v'' \times C_3' = \sigma_v \neq \sigma_v' = C_3'' \times \sigma_v''$

სიმეტრიის ოპერაციების გამრავლების წესის გამოყვანა და შემოწმება ძალზე ადვილია თუ ვისარგებლებთ სტერეოგრაფიული პროექციების მეთოდით. ამ მეთოდით სარგებლობა შეიძლება აგრეთვე, მაგალითად, კრისტალებში კუთხეების, სიმეტრიულად განლაგებული ატომების რიცხვის განსაზღვრისათვის და ა.შ. ეს საკუთხები განხილული იქნება უშუალოდ კრისტალების სიმეტრიის განხილვისას.

წარმოვიდგინოთ, რომ მოლეკულა მოთავსებულია სფეროში ისე რომ მისი სიმძიმის ცენტრი ემთხვევა ამ სფეროს ცენტრს. ასეთ შემთხვევაში სიმეტრიის ყველა ცენტრსა და სიბრტყეს ექნება ერთი საერთო გადაკვეთის წერტილი ცენტრში. სტერეოგრაფიული პროექციის შემოღება განპირობებულია სიმეტრიის ყველა ელემენტის ორგანოზომილებიანი გამოსახვისათვის. ასეთი პროექციის აგებისათვის სფეროსთან სიმეტრიის ელემენტების გადაკვეთის ყველა წერტილის პროექციას ჩვეულებრივი მეთოდით ახდენენ სფეროს ეკვატორიალურ სიბრტყეზე. ჰორიზონტალური სიბრტყით სფეროს გადაკვეთა, რომელიც ემთხვევა ეკვატორიალურ სიბრტყეს, წარმოადგენს იმავე წრის (სფეროს) მქონე რადიუსის წრეს. თუ მოლეკულას აქვს ასეთი, სიმეტრიის ჰორიზონტალური სიბრტყე, მაშინ მას (წრეს) აღნიშნავენ მთლიანი ხაზით, წინააღმდეგ შემთხვევაში – პუნქტირით. სიმეტრიის ვერტიკალური ღერძი, კვეთს რა სფეროს ჩრდილო და სამხრეთ პოლუსებს, გადაკვეთის ეს წერტილები პროექცირდებიან ეკვატორიალური სიბრტყის ცენტრში და მათ აღნიშნავენ პატარა მრავალკუთხედებით, რომელთა გვერდების რიცხვი შეესაბამება მოცემული სიმეტრიის ღერძის რიგს. ბრუნვით-სარკული სიმეტრიის ღერძის პროექციის შემთხვევაში ხაზავენ მრავალკუთხას მხოლოდ კონტურს, სხვა დროს ასეთ ღერძს აღნიშნავენ გაშავებული მრავალკუთხათი. მაგალითად,  $A_4$  აღინიშნება  $\square$ ,  $C_4$  –  $\blacksquare$ ,  $C_2$  –  $\bullet$ . ჰორიზონტალური სიმეტრიის ღერძი, რომელიც ძევს ეკვატორიალურ სიბრტყეში და სფეროს ორ მოპირდაპირე წერტილში კვეთს, პროექციას არ საჭიროებს. ორივე წერტილი აღინიშნება შესაბამისი მრავალკუთხედით და მათ აერთებენ წყვეტილი ხაზით. თუ ასეთი სიმეტრიის ღერძი ასევე მდებარეობს არეკვლის ვერტიკალურ სიბრტყეში, მაშინ ამ წერტილების შემაერთებელ ხაზს აღნიშნავენ მთლიანით, რათა წარმოდგენილი იქნეს ნახაზზე სიბრტყე. ზოგიერთი სიმეტრიის ელემენტის აღნიშვნა წარმოდგენილია სურათზე 15. სიმეტრიის ცენტრი რა თქმა უნდა მდებარეობს ეკვატორიალურ სიბრტყეში,

მაგრამ მისი სტერეოგრაფიული პროექციის გამოსახვა ადვილი არაა, ამიტომ სიმეტრიის ცენტრის არსებობის შემთხვევაში მიუთითებენ ვერტიკალურ მეორე რიგის ბრუნვით-სარკულ ღერძს, რომელიც სიმეტრიის ცენტრის ექვივალენტურია



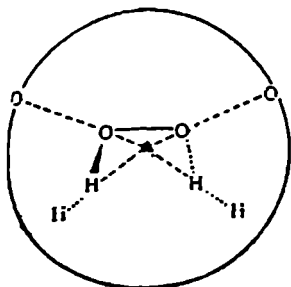
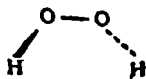
სურ. 15. სიმეტრიის ელემენტები სტერეოგრაფიულ პროექციაზე.

ა-ჰორიზონტალური სიბრტყე; ბ-მეექვსე რიგის ბრუნვით-სარკული ღერძი, შესაბამისად, მესამე რიგის ბრუნვითი ღერძი; გ-მესამე რიგის ჰორიზონტალური ბრუნვის ღერძი; დ-მეორე რიგის ჰორიზონტალური ბრუნვის ღერძი, ჰორიზონტალური და ვერტიკალური სიბრტყეები.

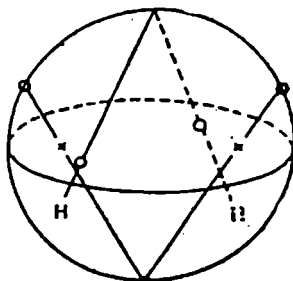
განვიხილოთ  $H_2O_2$  მაგალითზე თუ როგორ აიგება სფერული და შესაბამისად სტერეოგრაფიული პროექცია. უანგბადის ატომები მდებარეობენ ნახაზის სიბრტყეში, ხოლო წყალბადის ერთი ატომი მდებარეობს ნახაზისაღმე 94<sup>0</sup>-ით მაღლა, ხოლო მეორე - ნახაზისაღმე იგივე კუთხით დაბლა (ძირს). მოვათავსოთ ეს მოლეკულა სფეროს ცენტრში ისე, რომ მისი სიმძიმის ცენტრი დაემთხვას სფეროს ცენტრს (სურ. 16).

ახლა დავუშვათ, რომ სფეროს ცენტრში მოთავსებულია სინათლის ძლიერი წყარო. მაშინ სფეროს ზედაპირზე თითოეული ატომისაგან წარმოიქმნება ჩრდილი. ეს არის სწორედ სფერული პროექცია (სურ. 16, ა).

სფერული პროექციის გადაყვანა ორგანზომილებიან სიბრტყე პროექციაში ხდება შემდეგნაირად: ჯერ სფერო "გავჭრათ" ეკვატორიალური სიბრტყით, რომელიც ნახაზ-



ა



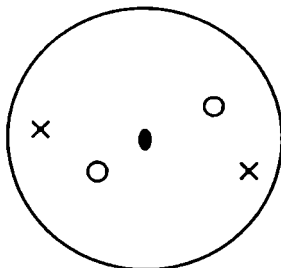
ბ

სურ. 16.  $HOOH$  მოლეკულის სფერული პროექცია.  
 ა—ზოგადი სახე; ბ—ჰორიზონტალურ სიბრტყეზე  $HOOH$   
 მოლეკულის ატომების (წერტილების) პროექცირება.

ზე მოჩანს, როგორც ჰორიზონტალური დიამეტრი. ახლა სფეროს სამხრეთი პოლუსიდან ჩრდილო ნახევარსფეროში ცალკეული წერტილისაკენ (უანგბადატომები, სურ. 16, ბ) გავატაროთ ხაზები. ეს ხაზები ამ შემთხვევაში მდებარეობენ ნახაზის სიბრტყეში, რადგანაც აღნიშნული ატომები ამ სიბრტყეში მდებარეობენ. ანალოგიურად შევაერთოთ ჩრდილო პოლუსი სამხრეთ ნახევარსფეროში მდებარე წერტილებთან (წყალბადატომები). ჩრდილო პოლუსიდან გამომავალი მარცხენა ხაზი, იწყება რა ნახაზის სიბრტყიდან, შემდეგ გამოვა ამ სიბრტყიდან, ხოლო მარჯვენა ხაზი გაივლის სიბრტყის უკან, როგორც ეს ნაჩვენებია სურ. 16, ბ. ახლა ჩავთვალოთ ეკვატორიალური სიბრტყე პროექციის სიბრტყედ. ის ადგილები, სადაც სამხრეთ პოლუსიდან გამომავალი ხაზები კვეთენ ამ სიბრტყეს, აღენიშნოთ ჯერებით (x), ხოლო ჩრდილო პოლუს-



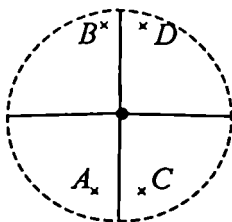
სიდან გამომავალი ხაზების ამ სიბრტყესთან გადაკეთა - პატარა წრეებით. ნახაზის სიბრტყის პერპენდიკულარული პროექციის სიბრტყე (სურ. 16, ბ) შემოვაბრუნოთ  $90^{\circ}$ -ით და შევუთავსოთ ნახაზის სიბრტყეს. შედეგად მივიღებთ განხილულ მოლეკულაში არსებული ატომების ერთადერთ პროექციას (სურ. 17). სფეროზე მდებარე წერტილების ეს პროექცია სიბრტყეზე არის სტერეოგრაფიული პროექცია.



სურ. 17.  $HOOH$  მოლეკულის სტერეოგრაფიული პროექცია.

სტერეოგრაფიული პროექციიდან შესაძლებელია მოლეკულის სიმეტრიის და საერთოდ, წერტილოვანი ჯგუფის შესახებ მნიშვნელოვანი მონაცემების მიღება. სურათზე 18, წარმოდგენილია ორი ურთიერთპერპენდიკულარული სიბრტყე და რაღაც საგნის ან მოლეკულის ნებისმიერი ოთხი წერტილი ( $A, B, C, D$ ), რომლებიც არ მდებარეობენ სიმეტრიის არც ერთ ელემენტზე. დავუშვათ, ერთი სარკიდან არეკვლით ( $\sigma_1$ ) წერტილი  $A$  გადადის  $B$ -ში, ხოლო მეორედან არეკვლით ( $\sigma_2$ ) -  $C$ -ში. ასე, რომ  $A, B, C$  წერტილები წარმოადგენენ ექვივალენტურ წერტილებს. მაგრამ  $C$  გარდაიქმნება  $D$ -ში  $\sigma_1$  მოქმედებისას, ხოლო  $B - D$ -ში,  $\sigma_2$  მოქმედებისას.

ამიტომაც წერტილს ზოგად მდგომარეობაში უნდა ჰქონდეს ოთხი ექვივალენტური მდებარეობა  $A, B, C, D$ . ამასთან, შემობრუნება ვერტიკალური ღერძის ირგვლივ



სურ. 18. არეკელის ორი სიბრტყის მქონე საგნის ოთხი ექვივალენტური წერტილი.

გარდაქმნის A-ს D-ში, B-ს C-ში და პირიქით, შესაბამისად, ორი სიბრტყის არსებობა ნიშნავს  $C_2$  არსებობას. ადვილი მისახედრია, რომ  $\sigma_1$  და  $\sigma_2$  თანმიმდევრული გამოყენება ანუ  $\sigma_2 \times \sigma_1$  გარდაქმნის A-ს B-ს საშუალებით D-ში, რაც ექვივალენტურია  $C_2$ , ანუ  $\sigma_2 \times \sigma_1 = C_2$ . სტერეოგრაფიული პროექციების გამოყენება სიმეტრიის ოპერაციის ნამრავლის ადვილად მონახვის საშუალებას იძლევა.

### 3.2. წერტილოვანი ჯგუფები

ზემოთ გავეცანით რამდენიმე მოლეკულასა და იონს ( $BF_3$ , ტრანს- $CHCl=CHCl$ ,  $[PtCl_4]^{2-}$ ) და გამოვიყენეთ მათ მიმართ ყველა სიმეტრიის ოპერაცია, რომლებიც შეადგენენ ამ მოლეკულებისადმი შესაბამის წერტილოვან ჯგუფებს. ნებისმიერ მოლეკულას პასუხობს წერტილოვანი ჯგუფი, რომელიც განისაზღვრება ამ მოლეკულის სიმეტრიის ელემენტების ერთობლიობით. ქვემოთ განხილული იქნება წერტილოვანი ჯგუფები, რომლებიც მნიშვნელოვანია მოლეკულის (ნაერთის) აღნაგობის შესასწავლად.

კრისტალოგრაფიაში წერტილოვანი ჯგუფების ჩამოთვლისას სარგებლობენ ბერმან-მოჰმენის საერთაშორისო აღნიშვნის სისტემით. ამ სისტემაში მიეთითება სიმეტრიის ელემენტების მინიმალური რიცხვი, რომელიც საკმარისია წერტილოვანი ჯგუფის განსაზღვრისათვის. მაგალითად, ტრანს-დიქლორეთილენის (სურ. 11) და მისი მსგავსი მოლეკულებისათვის სიმეტრია სრულად აღიწერება  $2/m$  (ან  $\frac{2}{m}$ ) სიმბოლოთი, ისე, რომ სიმეტრიის

მესამე ელემენტი  $i$  განისაზღვრება ამ ორი ელემენტის არსებობით. ის, რომ სიმეტრიის სარკული სიბრტყე ჰორიზონტალურია და სიმეტრიის ღერძის პერპენდიკულარული, აღინიშნება წილადის ხაზით. წყლის მოლეკულის წერტილოვანი ჯგუფი აღინიშნება  $mm$ , ხოლო 2 იგულისხმება. ექვივალენტური  $2m$  სიმბოლოც საკმარისია, თუ კი  $m$  მოდის 2-ის შემდეგ, რაც მიუთითებს, რომ სიმეტრიის სიბრტყე და ღერძი პარალელურია; თუმცა უპირატესობას ანიჭებენ  $mm$  სიმბოლოს.

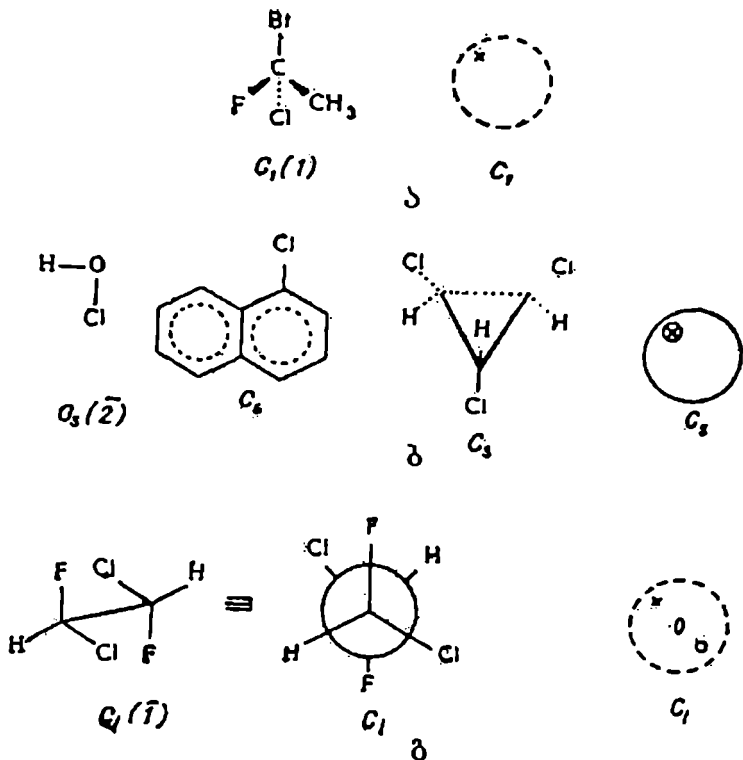
მაგალითის სახით ქვემოთ წარმოდგენილია სხვადასხვა ნაერთის მოლეკულის წერტილოვანი ჯგუფი და შესაბამისი სტერეოგრაფიული პროექციები. წერტილოვანი ჯგუფები პირობითად შეიძლება დაიყოს ოთხ ჯგუფად (ტიპად).

ტიპი I. ბრუნვითი ღერძების არ არსებობა. წერტილოვანი ჯგუფები:  $C_1, C_s, C_i$ .

1. წერტილოვანი ჯგუფი  $C_1$  (1). ჯგუფს არა აქვს არც ერთი სიმეტრიის ელემენტი (ასიმეტრიული მოლეკულები, სურ. 19, ა).

2. წერტილოვანი ჯგუფი  $C_s$  ( $\bar{2}$ ). ჯგუფს აქვს მხოლოდ ერთი სიმეტრიის სიბრტყე  $\sigma$  ან  $S_1$  ( $\bar{2}$ ) (სურ. 19, ბ).

3. წერტილოვანი ჯგუფი  $C_i$  ( $\bar{1}$ ). ჯგუფს აქვს მხოლოდ ინვერსიის ცენტრი  $i$  ან  $S_2$  ( $\bar{1}$ ) (სურ. 9, გ).

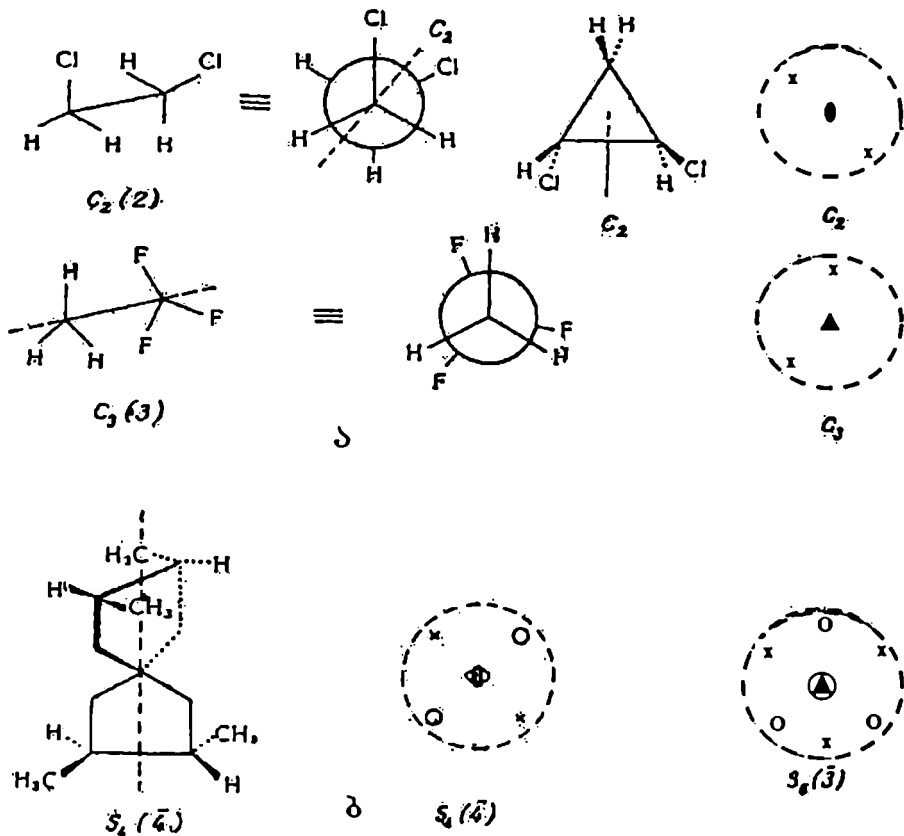


სურ. 19. ზოგიერთი მოლეკულის წერტილოვანი ჯგუფი და სტერეოგრაფიული პროექცია.

ტიპი II. მხოლოდ ერთი ბრუნვითი ღერძი.  
 წერტილოვანი ჯგუფები:  $C_p$ ,  $C_{pv}$ ,  $C_{ph}$ .

1. წერტილოვანი ჯგუფი  $C_p$  ( $p$ ). ასეთ ჯგუფს აქვს მხოლოდ ერთად-ერთი პირველზე მაღალი რიგის ღერძი. ასეთი მოლეკულები დისიმეტრიულია და ოპტიკურად აქტიური.

2. წერტილოვანი ჯგუფი  $S_p$ . მაგალითად  $S_4(\bar{4})$  და  $S_6(\bar{3})$ . მოლეკულას,  $S_1$ -ის მქონეს აქვს აგრეთვე  $\sigma(\bar{2})$ , ხოლო მოლეკულას, რომელსაც გააჩნია  $S_2$  აქვს ასევე



სურ. 20. ზოგიერთი მოლეკულის წერტილოვანი ჯგუფი და სტერეოგრაფიული პროექცია.

$i(\bar{1})$ . თუმცა  $S_4$  ნიშნავს, რომ არსებობს  $C_2$ ,  $S_6-C_3$ .  $S_4$  და  $S_6$  წარმოადგენენ გაცილებით მაღალ წერტილოვან ჯგუფებს, ე. ი. ჯგუფებს, რომლებსაც აქვთ სიმეტრიის მეტი ელემენტი, ვიდრე  $C_2$  და  $C_3$ -ს შესაბამისად (სურ. 20, ბ).

3. წერტილოვანი ჯგუფი  $C_p(pn)$ . ამ ჯგუფს აქვს შემდეგი სიმეტრიის ელემენტები:  $C_p$  ღერძი და  $p$  ვერტიკალური სიბრტყეები ( $\sigma_v$ ), რომელთა გადაკვეთის ხაზიც ემთხვევა ღერძს. ძალიან ხშირად მოლეკულები მიეკუთვნებიან ამ წერტილოვან ჯგუფს (სურ. 21).

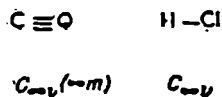
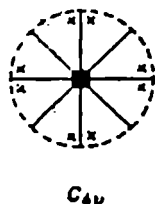
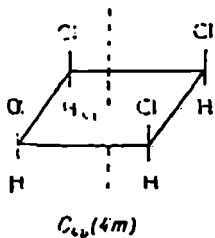
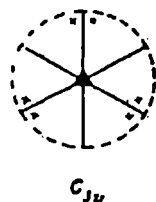
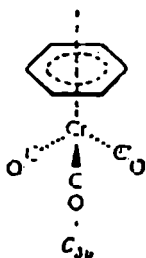
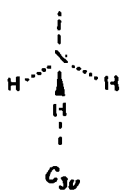
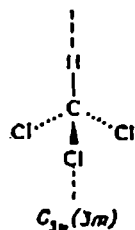
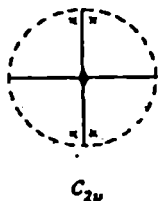
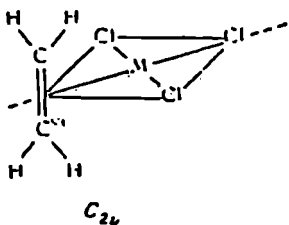
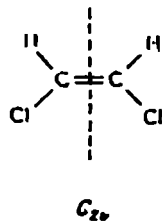
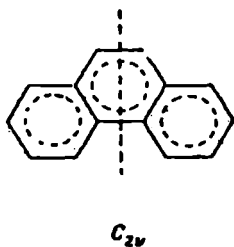
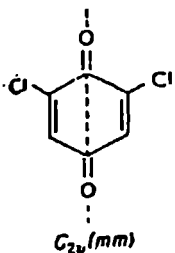
4. წერტილოვანი ჯგუფი  $C_{ph}(p/m)$ . ამ ჯგუფის სიმეტრიის ელემენტია  $C_p$  ღერძი და მისი პერპენდიკულარული  $\sigma_h$  არეკელის სიბრტყე. როდესაც  $p$  წყვილია,  $\sigma_h$  ნიშნავს, რომ არსებობს ასევე  $i$  (სურ. 22).

ტიპი III.  $p$ -რიგის მხოლოდ ერთი ღერძი და მეორე რიგის  $p$  ღერძები. წერტილოვანი ჯგუფები:  $D_p, D_h, D_{pd}$ .

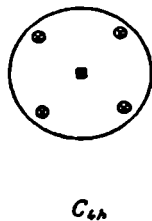
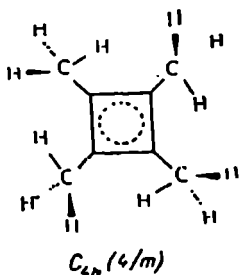
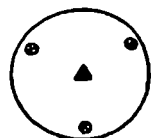
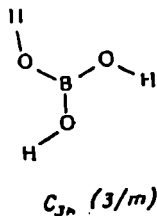
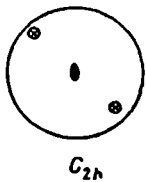
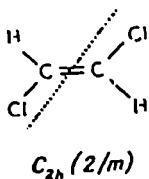
1. წერტილოვანი ჯგუფი  $D_p$ . თუ მთავარ  $C_p$  ღერძთან ერთად არსებობს მეორე რიგის  $p$  ღერძები და ჯგუფში არავითარი სხვა სიმეტრიის ელემენტი, მისი აღნიშვნაა  $D_p(p2)$  ( $D$ -დიედრული ჯგუფი). ამ ჯგუფს მიეკუთვნება, მაგალითად ეთილენის მოლეკულა,  $CH_2$  ჯგუფების არასიბრტყივი და არაპერპენდიკულარული განლაგებით. ამ ჯგუფის აღნიშვნისას (222) მიეთითება მეორე რიგის სამივე სიმეტრიის ღერძი (სურ. 23).

2. წერტილოვანი ჯგუფი  $D_{ph} [p/m \ 2/m \ 2m \ \text{ან} \ (p/m)mm]$ .

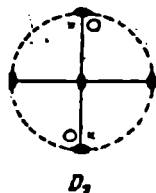
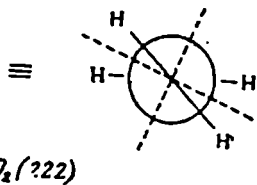
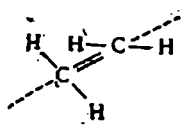
თუ მოლეკულას აქვს  $C_p$  ღერძი, მეორე რიგის  $p$  ღერძები და სიმეტრიის  $\sigma_h$  სიბრტყე, მაშინ ის მიეკუთვნება აღნიშნულ წერტილოვან ჯგუფს.  $\sigma_h$  სიბრტყის არსებობა განაპირობებს  $p\sigma_v$  თანაარსებობას. მაგალითები



სურ. 21. ზოგიერთი მოლეკულის წერტილოვანი ჯგუფი და სტერეოგრაფიული პროექცია.



სურ. 22. ზოგიერთი მოლეკულის წერტილოვანი ჯგუფი და სტერეოგრაფიული პროექცია.



სურ. 23. ეთილენის მოლეკულის წერტილოვანი ჯგუფი და სტერეოგრაფიული პროექცია.



მოცემულია სურათზე 24.

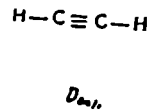
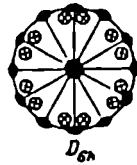
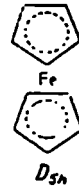
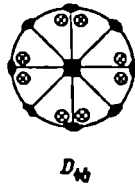
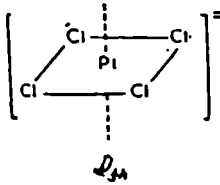
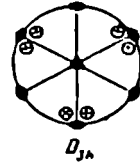
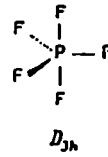
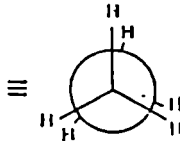
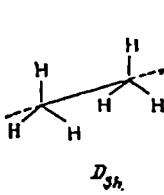
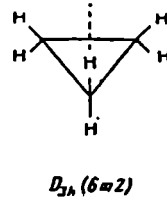
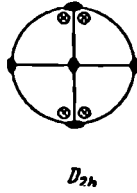
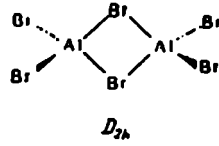
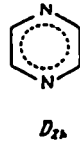
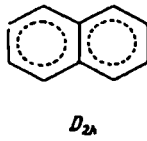
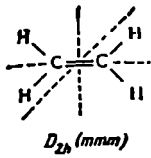
3. წერტილოვანი ჯგუფი  $D_{pd}$  ( $\bar{p}2m$ , სადაც  $\bar{p}$  შეესაბამება ბრუნვით-ინვერსიულ ღერძს და განსხვავდება  $p$  და  $D_p$ -საგან). ზოგადად,  $D_{pd}$  ჯგუფში უნდა იყოს  $S_{2p}$  ღერძი, აგრეთვე ინვერსიის ცენტრი, თუ კი  $p$  კენტია (სურ. 25).

ტიპი IV. მეორე რიგზე მაღალი რიგის მქონე ერთზე მეტი სიმეტრიის ღერძი; წერტილოვანი ჯგუფები:  $T_d, O_h$ , აგრეთვე  $T, T_h, O, I, I_h$  და  $K_h$ .

1. წერტილოვანი ჯგუფი  $T_d$  ( $\bar{4} 3m$ ). ამ წერტილოვან ჯგუფს, როგორც წესი, მიეკუთვნებიან ტეტრაედრული მოლეკულები, ოთხივე წვეროში განლაგებული ერთი და იგივე ატომებით, იონებით, ან ზოგადად ლიგანდებით. ჯგუფში ასევე არსებობენ სიმეტრიის ელემენტები:  $4C_3, 3C_2$ . მაგალითები წარმოდგენილია სურ. 26-ზე.

2. წერტილოვანი ჯგუფი  $O_h$  ( $m\bar{3}m$  ან  $4/m \bar{3} 2/m$ ). ამ წერტილოვან ჯგუფს განეკუთვნება სიმეტრიული (წესიერი) ოქტაედრული აღნაგობის მქონე მოლეკულა. კუბიც ასევე მიეკუთვნება ამ წერტილოვან ჯგუფს და ამ ჯგუფის სიმეტრიის ელემენტების განხილვა თვალნათლივია ამ მაგალითზე. მოცემული წერტილოვანი ჯგუფის სიმეტრიის ელემენტებია:  $3C_4, 4C_3, 6C_2, i$  და  $9\sigma$

$C_4$  ღერძები გადიან კუბის ცენტრზე მოპირდაპირე გვერდებს შორის და რადგანაც კუბს აქვს 6 გვერდი,  $C_4$  ღერძი იქნება 3.  $C_3$  ღერძები აერთებენ კუბის მოპირდაპირე კუთხეების წვეროებს და ცენტრს. არსებობს რა 8 წვერო, ასეთი ღერძები იქნება 4.  $C_2$  ღერძები გადიან მოპირდაპირე წიბოების და კუბის ცენტრებში; რადგანაც კუბს აქვს 12 წიბო, იქნება 6  $C_2$  ღერძი. სარკული სიბრტყეების ნაწილი შუაზე ყოფს მოპირდაპირე გვერდებს (6 გვერდი), მაშასადამე იქნება 3 $\sigma$ ; ხოლო მეორე ნაწილი –



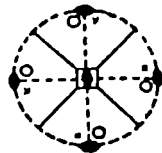
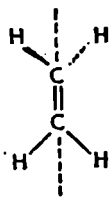
სურ. 24. ზოგიერთი მოლეკულის წერტილოვანი ჯგუფი და სტერეოგრაფიული პროექცია.



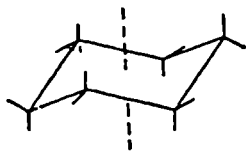
$D_{2d}$  ანუ  $V_d$  ( $\bar{4}2m$ )



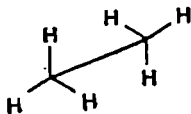
$D_{2d}$



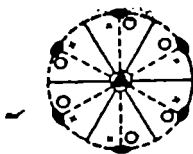
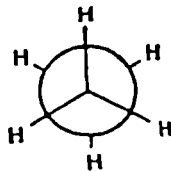
$D_{2d}$



$D_{3d}$  ( $\bar{6}2m$ )



$D_{3d}$



$D_{3d}$

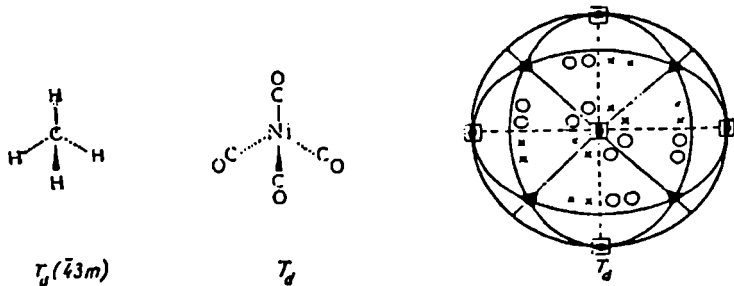


Fe



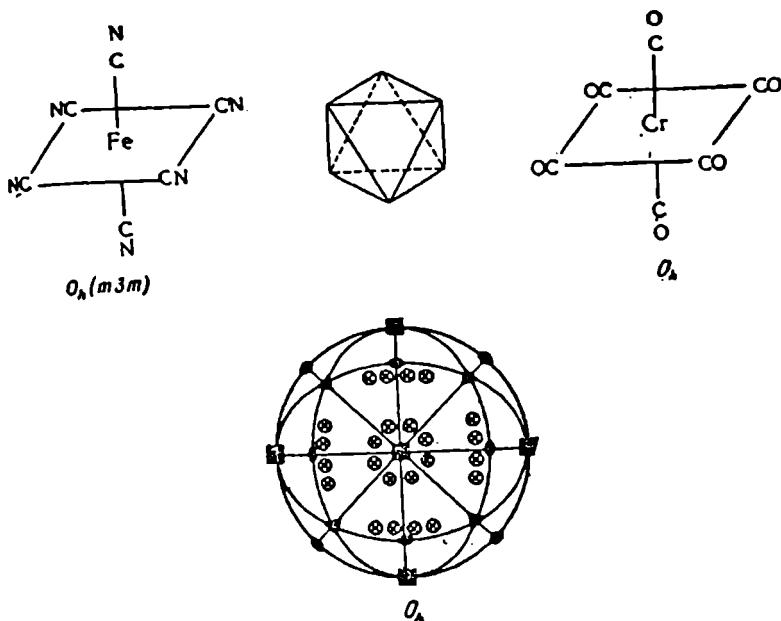
$D_{5d}$

სურ. 25. ზოგიერთი მოლეკულის წერტილოვანი ჯგუფი და სტერეოგრაფიული პროექცია.



სურ. 26.  $CH_4$  და  $Ni(CO)_4$  მოლეკულების წერტილოვანი ჯგუფი და სტერეოგრაფიული პროექცია.

მოპირდაპირე წიბოებს (12 წიბო), შესაბამისად იქნება  $n\sigma$  და ჯამში –  $9\sigma$  (სურ. 27).



სურ. 27.  $[Fe(CN)_6]^{2-}$  იონის და  $Cr(CO)_6$  მოლეკულის წერტილოვანი ჯგუფი და სტერეოგრაფიული პროექცია.

### 3.3. წერტილოვანი ჯგუფისადმი მიკუთვნების ბანსახდვრის წესი

ჩვენ გავეცანით პრაქტიკულად ყველა წერტილოვან ჯგუფს. ახლა საჭიროა ვიცოდეთ, თუ როგორ განესაზღვროთ სიმეტრიის ის წერტილოვანი ჯგუფი, რომელსაც მიეკუთვნება ამა თუ იმ ნაერთის მოლეკულა. ცხადია, უნდა დავიწყოთ მოლეკულაში არსებული უმაღლესი რიგის სიმეტრიის ღერძიდან და გადავიდეთ უფრო დაბალი რიგის ღერძებზე და სიმეტრიის სხვა ელემენტებზე. ასეთი მეთოდი მოიცავს რამდენიმე სტადიას.

1. ეპოულობთ უმაღლესი რიგის სიმეტრიის ბრუნვით ღერძს. თუ კი ეს ღერძი უსასრულო რიგისაა, ე. ი. მოლეკულა ხაზობრივია, მაშინ ის მიეკუთვნება წერტილოვან ჯგუფს  $D_{\infty h}$  ან  $C_{\infty v}$ . თუ მოლეკულას აქვს სიმეტრიის ცენტრი  $i$ , მას უნდა ჰქონდეს ჰორიზონტალური სიბრტყეც  $\sigma_h$ ; გარდა ამისა მისი ორივე ბოლო უნდა იყოს ერთნაირი და შესაბამისად ასეთი მოლეკულა მიეკუთვნება  $D_{\infty h}$  ჯგუფს. წინააღმდეგ შემთხვევაში მოლეკულა მიეკუთვნება  $C_{\infty v}$  ჯგუფს.

2. თუ უმაღლესი რიგის ბრუნვითი ღერძი წარმოადგენს მე-3, მე-4 ან მე-5 რიგის ღერძს, უნდა მოიძებნოს იმავე რიგის სხვა ღერძები. აქ შესაძლებელია სამი შემთხვევა:

ა) არსებობს მე-5 რიგის რამდენიმე ღერძი, მაშასადამე მოლეკულა მიეკუთვნება  $I_h$  ან  $I$  ჯგუფს, იმის მიხედვით აქვს თუ არა ამ მოლეკულას სიმეტრიის სიბრტყეები.

ბ) მოლეკულას აქვს მე-4 რიგის 3 ღერძი, იგი მიეკუთვნება  $O_h$  ან  $O$  ჯგუფებს, იმის მიხედვით არსებობს თუ არა სიმეტრიის სიბრტყეები.

გ) არსებობს მე-3 რიგის 4 ღერძი, მაგრამ არაა მე-4 და მე-5 რიგის ღერძები. თუ ასეთ შემთხვევაში არ არსებობს სიმეტრიის ცენტრი და სიბრტყეები, მოლეკულა

მიეკუთვნება წერტილოვანი ჯგუფს  $T$ ; თუ სიმეტრიის ცენტრი არსებობს –  $T_h$ , თუ სიმეტრიის 6 სიბრტყე და 3  $S_4$  ღერძი –  $T_d$ -ს.

3. თუ არსებობს სიმეტრიის მხოლოდ ერთი ღერძი  $p > 2$  ან თუ უმაღლესი რიგის ღერძი არის მე-2 რიგის, უნდა შემოწმდეს აქვს თუ არა მოლეკულას მე-2 რიგის  $p$  ღერძი, რომლებიც ერთიმეორის მიმართ  $90^\circ$ -იანი კუთხითაა განლაგებული. თუ ეს ღერძები არსებობს და მოლეკულას არა აქვს სიმეტრიის სიბრტყეები, მოლეკულა მიეკუთვნება ჯგუფს  $D_p$ ; თუ არსებობს სიმეტრიის ჰორიზონტალური სიბრტყე – ჯგუფს  $D_{ph}$ ; თუ არსებობს  $p$  ვერტიკალური სიბრტყე და არც ერთი ჰორიზონტალური – წერტილოვანი ჯგუფს  $D_{pd}$ .

4. თუ არსებობს  $p$  რიგის ერთად-ერთი ბრუნვის ღერძი, უნდა განისაზღვროს არის თუ არა  $S_{2p}$  ღერძი. ასეთი ღერძის არსებობის შემთხვევაში მოლეკულა მიეკუთვნება წერტილოვანი ჯგუფს  $S_p$ . თუ  $S_{2p}$  ღერძი არ არსებობს, მოლეკულა მიეკუთვნება  $C_p$  ჯგუფს, სიმეტრიის სიბრტყეების არ არსებობის შემთხვევაში –  $C_{ph}$ .

5. თუ არ არსებობს არაერთი სიმეტრიის ღერძი, მაგრამ არსებობს სიმეტრიის სიბრტყე, მოლეკულა მიეკუთვნება  $C_i$  წერტილოვანი ჯგუფს, ხოლო სიმეტრიის ცენტრის არსებობის შემთხვევაში –  $C_i$ ; სიმეტრიის არაერთი ელემენტის შემთხვევაში –  $C_1$ . სურათზე 28, წარმოდგენილია წერტილოვანი ჯგუფების იერარქია.



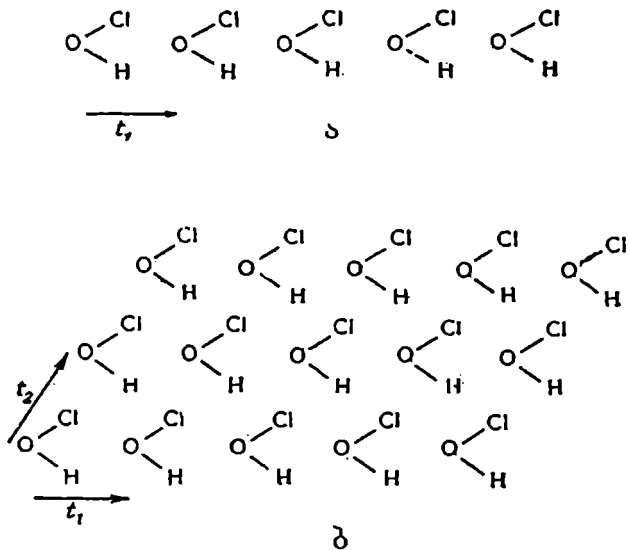
კრისტალების სიმეტრია. კრისტალური  
სისტემები. ძირითადი ზმა კრისტალუმი

4.1. კრისტალური მდგომარეობა

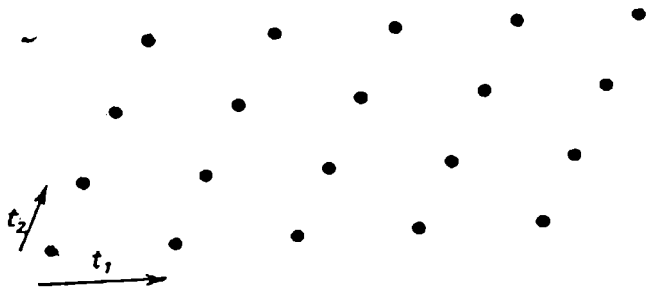
ქიმიკში სიმეტრიის პრინციპების გამოყენების ძირითად და უმნიშვნელოვანეს სფეროს წარმოადგენს ნაერთების მოლეკულური და კრისტალური სტრუქტურების შესწავლა. კრისტალური ნივთიერება შეიძლება განვიხილოთ როგორც ატომთა ან მოლეკულების განსაზღვრული რიგის განმეორებითი უსასრულო განლაგება. ზემოთ განხილული იყო სიმეტრიის ოპერაციები, რომელთა დროსაც მოლეკულის სიმეტრიის ცენტრი რჩება უცვლელი, ე.ი. განვიხილეთ წერტილოვანი ჯგუფები. კრისტალური ნივთიერების განხილვისას აუცილებელია ვიცოდეთ ოპერაციები, რომელთაც მიყვართ კრისტალში არსებული ძირითადი ერთეულის გამეორებამდე მთელ კრისტალში. ასეთ ოპერაციას ეწოდება ტრანსლაცია ( $t$ ).

დაეუშვათ  $HOCl$  მოლეკულა რაღაც ინტერვალით მეორდება სწორი ხაზის გასწვრივ რამდენიც გვინდა (სურ. 29, ა). ასეთი განმეორება წარმოადგენს ერთ ზანსომილებაში ტრანსლაციის ოპერაციას ( $t_1$ ). ანალოგიურად შეიძლება შევასრულოთ ეს ოპერაცია მეორე მიმართულებით სიბრტყეში (სურ. 29, ბ). თუ ამ მოლეკულის სიმეტრიის ცენტრს (ან მოლეკულის ნებისმიერ წერტილს) შევცვლით წერტილით, მივიღებთ ორგანოსომილებიან ცხაურს (სურ. 30).



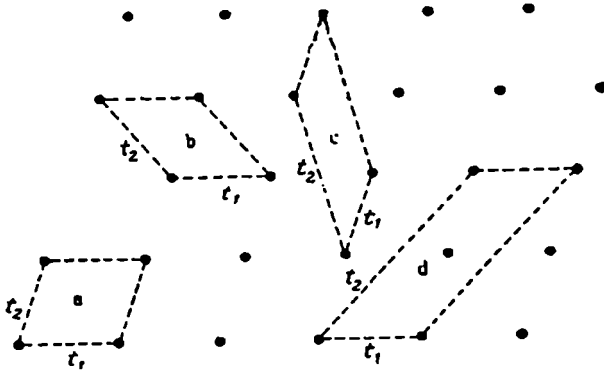


სურ. 29. ერთგანზომილებიანი (ა) და ორგანზომილებიანი (ბ) ტრანსლაცია.



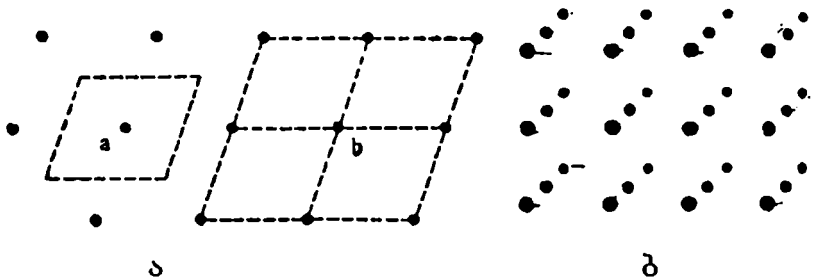
სურ. 30 ორგანზომილებიანი ცხაური.

ახლა შეიძლება ავირჩიოთ ნებისმიერი მონაკვეთი (სურ. 29, ბ; სურ. 30) და განვიხილოთ ის, როგორც განმეორებადი ერთეული, ელემენტარულ უჯრედად წოდებული. ამასთან მისი არჩევა თავისუფალია. სურათზე 31 ნაჩვენებია ამ არჩევანის რამდენიმე ვარიანტი.



სურ. 31. ელემენტარული უჯრედები.

ამ სურათზე მოცემულია  $a$ ,  $b$  და  $c$  ელემენტარული უჯრედები, რომელთაგანაც თითოეული შეიცავს ერთ წერტილს (კვანძს), რომელიც კარგად ჩანს სურათზე 32.



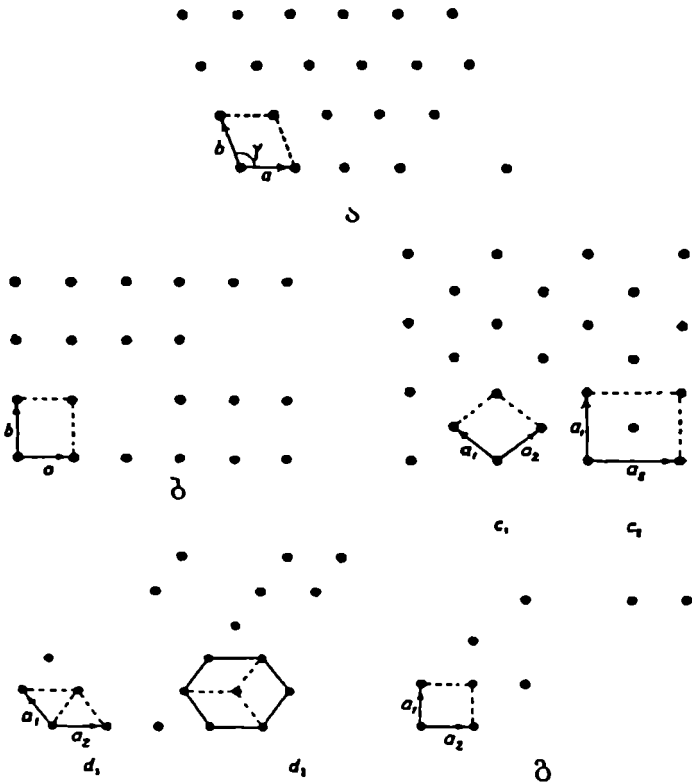
სურ. 32. პრიმიტიული ელემენტარული უჯრედი (ა) და სამგანზომილებიანი (კუბური) (ბ).

ელემენტარულ უჯრედში ცალკეული კუთხის წვერო ერთნაირად ეკუთვნის ოთხ ელემენტარულ უჯრედს. რადგანაც თითოეულ უჯრედს აქვს ოთხი კუთხე, ერთ უჯრედს მიეკუთვნება თითოეული წვეროს ერთი მეოთხედი  $4 \times 1/4 = 1$ .  $a, b, c$  ელემენტარული უჯრედები (სურ. 31) შეიცავენ ერთ კვანძს ცალკეული, ამიტომაც მათ უწოდებენ პრიმიტიულს (სურ. 32, ა).  $d$  უჯრედი და მისი მსგავსი, შეიცავენ რა ორ კვანძს, იწოდებიან ორმაგ უჯრედებად და ა. შ.  $l_1$  და  $l_2$  ტრანსლაციები, რომელთა დროსაც უჯრედი მეორდება, იწოდებიან ჯერად ტრანსლაციებად. ელემენტარული უჯრედის არსევა განისაზღვრება მოსახერხებლობით და იმით, რომ ის კარგად უნდა ასახავდეს ცხაურის სიმეტრიას. ცხაურის გავრცობა შეიძლება ასევე მესამე განზომილებაშიც  $l_3$  ტრანსლაციის დახმარებით, რის საფუძველზედაც მიიღება სამგანზომილებიანი ცხაური (სურ. 32, ბ).

## 4.2. სიბრტყივი ცხაურები და სიბრტყივი ჯგუშები

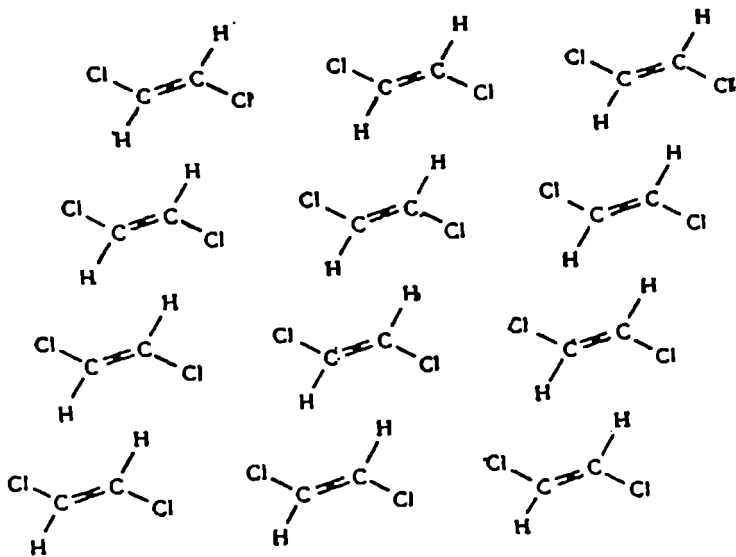
ლინტერესთა გაეარკვიოთ თუ სიმეტრიის რა თვისებები გააჩნია სიბრტყივი ცხაურის ელემენტარულ უჯრედს.

ზემოთ განხილულ  $HOCl$  სიბრტყივ მოლეკულას არ გააჩნია სიმეტრიის არავითარი ელემენტი ორგანზომილებიან სივრცეში. ასეთ შემთხვევას მიყვართ ცხაურის ისეთ სახესთან, რომელსაც  $l_1$  და  $l_2$  მიმართულებით აქვს  $a$  და  $b$  ერთეული სიგრძეები და მათ შორის  $\gamma$  კუთხე (სურ. 33, ა). ასეთ ცხაურს პარალელოგრამის ტიპისას უწოდებენ. ასეთ ცხაურშივე შეიძლება მოთავსდეს სიმეტრიის ცენტრის მქონე ორგანზომილებიანი ტრანს-დიქლორეთილენის მოლეკულა (სურ. 34). ცხაურის მეორე ტიპს წარმოადგენს მართკუთხოვანი



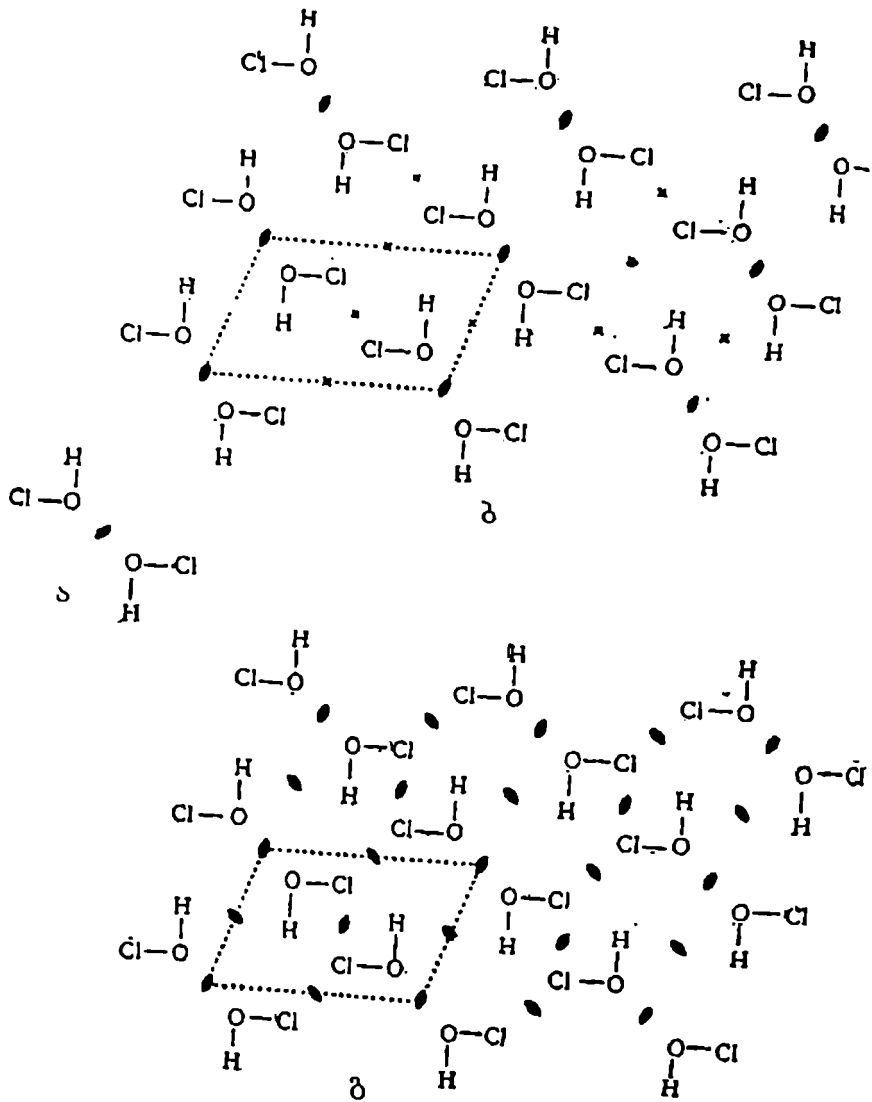
სურ. 33. სიბრტყივი ცხაურების ხუთი ტიპი.

(სურ. 33 ბ,  $\gamma = 90^\circ$ ) ან რომბული ცხაური ( $c_1$ ,  $a = b$ , ან  $a_1 = a_2$ ). თუ  $a_1$  და  $a_2$  შორის კუთხე შეადგენს  $60^\circ$  ან  $120^\circ$ , ცხაური წარმოადგენს სამკუთხას.  $d_2$  წარმოადგენს პექსაგონალურ ცხაურს, ხოლო ბ - კვადრატულს ( $a_1 = a_2$ ,  $\gamma = 90^\circ$ ). 33-ე სურათზე წარმოდგენილი ხუთი ტიპის ცხაური არის ერთად-ერთი შესაძლებელი ვარიანტი ორგანოზომილებიანი ცხაურებისა.



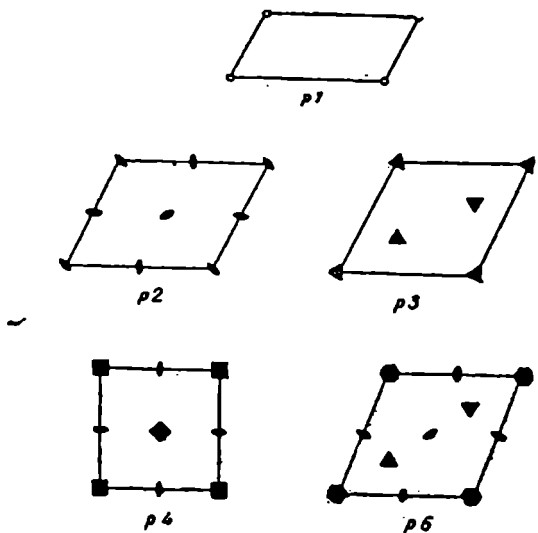
სურ. 34. სიმეტრიის ცენტრის მქონე მოლეკულის პარალელოგრამის ტიპის ცხაური.

ქვემოთ განხილულია ტრანსლაციის ოპერაციისა და სიმეტრიის ოპერაციის ერთდროული გამოყენება პარალელოგრამის ტიპის ორგანოზომილებიანი ცხაურისადმი მე-2 რიგის სიმეტრიის ღერძით. კერძოდ, განხილულია პრიმიტიული ელემენტარული ცხაური, რომელშიც  $HOCl$  ორი მოლეკულა ცხაურის კვანძის მიმართ განლაგებულია სიმეტრიულად (სურ. 35, ა). ორი მიმართულებით ტრანსლაცია ამრავლებს ამ მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძსა და მოლეკულებს ისე, როგორც ეს ნაჩვენებია სურ. 35, ბ. როგორც ამ სურათზე ჩანს, ჩნდება მეორე რიგის ღერძები, რომლებიც აღნიშნულია ჯვრებით. ეს ღერძები გამოსახულია სურ. 35 გ-ზე, ამასთან, ერთი ღერძი მდებარეობს ტრანსლაციის ხაზზე ცხაურის ცალკეულ წყვილ კვანძს შორის, ხოლო მეორე – ცხაურის კვანძების შუაზე ელემენტარული უჯრედის დიაგონალზე.



სურ. 35. ტრანსლაციისა და ბრუნვის შედეგად სიმეტრიის მეორე რიგის ახალი ღერძების აღძვრა.

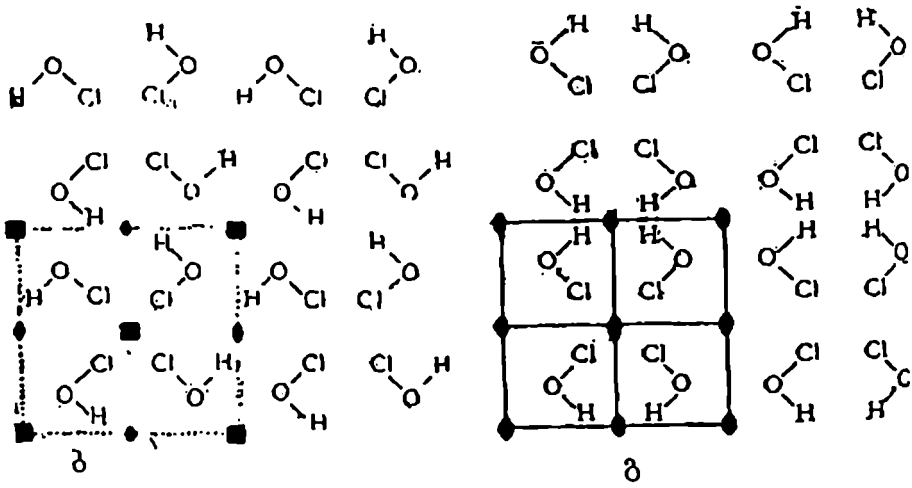
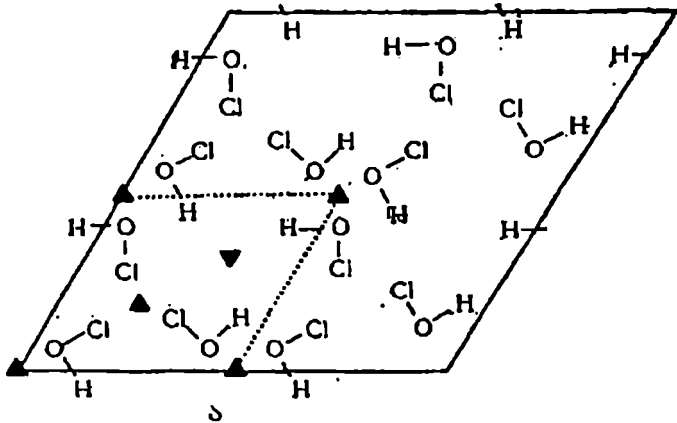
ანალოგიურად, მესამე რიგის ღერძის კომბინაციას ტრანსლაციასთან მიყუევართ მესამე რიგის ახალი ღერძის წარმოქმნასთან. ოპერაციების კომბინაციით წარმოქმნილ ჯგუფებს სიბრტყიე ჯგუფებს უწოდებენ. ბრუნვით ღერძისა და ტრანსლაციის კომბინაციით მიიღება მხოლოდ ხუთი სიბრტყიე ჯგუფი (სურ. 36,  $p$ -პრიმიტიული). ცხადია, ყველაზე არასიმეტრიული სიბრტყიე ჯგუფი, რომელსაც არ გააჩნია სიმეტრიის რაიმე ელემენტი (ე.ი. აქვს ღერძი 1), არ წარმოქმნის სიმეტრიის ახალ ელემენტებს ტრანსლაციის შედეგად და აღინიშნება  $p_1$ .



სურ. 36. სიბრტყიე ჯგუფები:  $p_1$ ,  $p_2$ ,  $p_3$ ,  $p_4$ ,  $p_6$ .

თუ დავაკვირდებით სურათებს 35 და 37 დავინახავთ, რომ ორი მოლეკულის მოთავსება ელემენტარულ უჯრედში გვაძლევს სიმეტრიის ელემენტებს 2,  $m$  ან  $m$ ,  $g$  ელემენტარულ უჯრედში იმ შემთხვევაშიც კი, როდესაც მოლეკულას არ გააჩნია არავითარი სიმეტრიის ელემენტი.

სამი მოლეკულის ( $HOCl$ ) ჩართვით წარმოიქმნება ელემენტარული უჯრედი  $p3$ , მესამე რიგის ლერძით (სურ. 37, ა). ოთხი მოლეკულის ჩართვას მიეყვება რამდენიმე შესაძლებლობასთან, კერძოდ,  $p4$  ან 2 და ორი  $m$  ( $pmm$ ) (სურ. 37, ბ, გ).



სურ. 37.  $HOCl$  სხვადასხვა ცხაური.

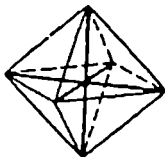
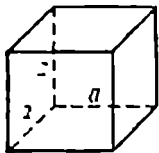


### 4.3. სივრცითი ცხაურები და სივრცითი ჯგუფები

სიბრტყივი ჯგუფების და ცხაურების განხილვით მიღებული შედეგების გამოყენება შეიძლება სივრცითი ჯგუფების პირობებში. ზემოთ ნაჩვენები იყო, რომ ორგანზომილებიანი ელემენტარული უჯრედისათვის შესაძლებელია მხოლოდ 1, მე-2, მე-3, მე-4 და მე-6 რიგის ბრუნვითი ღერძები. ეს ასევე კანონზომიერია სამგანზომილებიანი უჯრედებისათვის. ამასთან ერთად, მესამე განზომილების შემთხვევაშიც დასაშვებია ბრუნვით-სარკული და ინვერსიული ღერძების არსებობა.

ბრუნვითი ღერძების რიცხვის შეზღუდვას მიუყვართ იქამდე, რომ კრისტალოგრაფიაში არსებობს მხოლოდ 32 წერტილოვანი ჯგუფი, რომლებიც წარმოადგენილია ცხრილში 1.

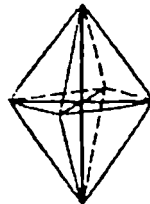
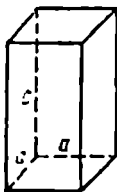
32 წერტილოვანი ჯგუფი დაყოფილია 6 ცალკე კლასად – კრისტალურ სისტემად (სურ. 38), ელემენტარული უჯრედის ფორმისა და შეფარდებითი ზომების შესაბამისად, რომლებიც დამოკიდებულია მისი სიმეტრიის თვისებებზე. უჯრედი, რომელსაც სიმეტრიის არაერთარი თვისებები არ გააჩნია, არ ექვემდებარება რაიმე შეზღუდვას. ასეთი უჯრედი წარმოადგენს პარალელეპედს, სადაც  $a \neq b \neq c$  და  $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$  ( $\alpha - a$  წვეროს მოპირდაპირე კუთხე). ასეთი უჯრედი წარმოადგენს ტრიკლინურ სისტემის ელემენტარულ უჯრედს (ტრიკლინური, რადგანაც სამი კუთხიდან  $(\alpha, \beta, \gamma)$  არც ერთი არაა  $90^\circ$  ტოლი).



კუბური

$$a = b = c$$

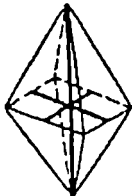
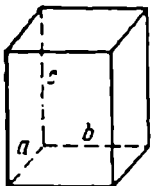
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



ტეტრაგონალური

$$a = b \neq c$$

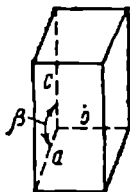
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



ორთორომბული

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

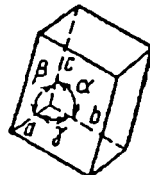


მონოკლინური

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma \neq 90^\circ$$

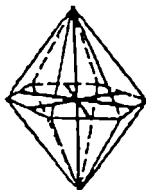
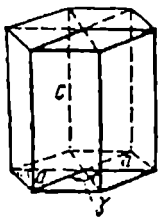
$$\beta \neq 90^\circ$$



ტრიკლინური

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



ჰექსაგონალური

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$$



რომბოედრული

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

სურ. 38. კრისტალების ძირითადი სისტემები.

შემაჯავთნო კრისტალური სისტემა

წერტილოვანი ჯგუფის სიმბოლო		სისტემა	ელემენტარული უჯრედი	სიმეტრიის ელემენტების მიხედვით
$S^a$	$H - M^b$			
1	2	3	4	5
$C_1$	1	ტრიკლინური	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ $a \neq b \neq c$	არც ერთი
$S_2$	$\bar{1}$		$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $\gamma \neq 90^\circ$ $a \neq b \neq c$	ერთი გე-2 რიგის ღერძი ან სარკული სარტყე
$C_2$	2	მონოკლინური		
$C_h$	$m$			
$C_{2h}$	$2/m$			
$D_2$	222	ორთორომბული	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a \neq b \neq c$	მეორე რიგის ურთიერთპერპენდიკულარული ღერძების ან სარკული სობრტყეების ნებისმიერი კომბინაცია.
$D_{2h}$	$mmm$			
$C_{2v}$	$mm$			

ცხრილი 1 (გაგრძელება)

1	2	3	4	5	
$C_3$	3	პექსაგონალური  (რომბოედრული)  (პექსაგონალური)	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	მე-3 რიგის ერთი ღერძი ან მე-3 რიგის ერთი ინვერსიული ღერძი	
$D_3$	32		$a = b = c$		
$S_6$	$\bar{3}$				
$D_{3d}$	$\bar{3}m$				
$C_{3v}$	$3m$				
$C_6$	6			ან	
$C_{3h}$	6				
$C_{6h}$	$6/m$			$\alpha = \beta = 90^\circ$	მე-6 რიგის ერთი ღერძი ან მე-6 რიგის ინვერსიული ღერძი
$D_6$	62			$\gamma = 120^\circ$	
$D_{3h}$	$\bar{6}2m$			$a = b \neq c$	
$D_{6h}$	$\bar{6}/mmm$				
$C_{6v}$	$6mm$				

ცხრილი 1 (გაგრძელება)

1	2	3	4	5
$C_4$	4	ტეტრაგონალური	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a = b \neq c$	მე-4 რიგის კრტი ღერძი ან მე-4 რიგის ერთი ინვერსიული ღერძი
$C_{4h}$	$4/m$			
$D_4$	42			
$D_{4h}$	$4/mmm$			
$S_4$	$\bar{4}$			
$D_{2d}$	$\bar{4}2m$			
$C_{4v}$	$4mm$			
$T$	23	კუბური	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a = b = c$	ერთი მეორის მიმართ $109^\circ 28'$ გრადუსით მდებარე მე-3 რიგის ოთხი ღერძი.
$O$	432			
$T_h$	$m\bar{3}$			
$O_h$	$m\bar{3}m$			
$T_d$	$\bar{4}3m$			

ა - შიონფლისის აღნიშვნა; ბ - გერმან-მოპენის აღნიშვნა.

მე-2 რიგის ბრუნვითი ან ინვერსიული ღერძის შემოტანას მიეყავართ რომბული პრიზმის ელემენტარულ უჯრედამდე, სადაც ასევე  $a \neq b \neq c$  და  $\gamma \neq 90^\circ$ , მაგრამ  $\alpha = \beta = 90^\circ$  და განაპირობებს მონოკლინური სისტემის არსებობას (მონოკლინური რადგანაც მხოლოდ ერთი კუთხე  $\gamma \neq 90^\circ$ ). მე-2 რიგის სამი ღერძის არსებობა (ვალკე ან კომბინაციაში) განაპირობებს სწორკუთხა პრიზმას, სადაც  $a \neq b \neq c$ , სამაგიეროდ  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ , რომელსაც ორთორომბული სისტემა ეწოდება. მე-4 რიგის ერთი ღერძი იწვევს შეზღუდვას:  $a = b$ , ანუ ელემენტარული უჯრედი ხდება კვადრატული პრიზმა – ტეტრაბონალური სისტემა. მე-3 რიგის ოთხი ღერძის შემთხვევაში  $a = b = c$ , რასაც მიეყავართ კუბამდე – კუბური სისტემა. მესამე რიგის ერთი ღერძის ან მე-6 რიგის ერთი ღერძის არსებობისას წარმოიქმნება კუბაბონალური სისტემა.

ორგანზომილებიანი უჯრედის შემთხვევაში ჩვენ შევხვდით პრიმიტიულ უჯრედს ( $p$ ) და ცენტრირებულ უჯრედს ( $c$ ). სამგანზომილებიან სივრცეში უჯრედების არსებობის გაცილებით მეტი შესაძლებლობაა. განხილული ექვსი სისტემიდან, პრიმიტიული უჯრედის არსებობა შეუძლებელია ნებისმიერში და მას აღნიშნავენ  $P$ -თი. სიბრტყივ ცენტრირებულ უჯრედს სამგანზომილებიან სივრცეში შეესაბამება ორი ტიპის ცენტრირებული უჯრედი. ყველა სისტემაში ტრიკლინური, მონოკლინური და კუბაბონალურის გარდა შესაძლებელია უჯრედები კვანძით ელემენტარული უჯრედის ცენტრში, რომლებიც იწოდებიან მოცულობითცენტრირებულად და აღნიშნავენ  $I$

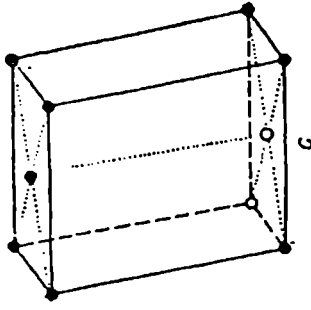
გარდა ამისა, ორთორომბულ და კუბურ სისტემებში კვანძები შეიძლება იყოს უჯრედის ყველა გვერდის წახნაგის ცენტრში – წახნაბცენტრირებული –  $F$ . მონოკლინურ და ორთორომბულ სისტემებში შესაძლებელია არა ყველა გვერდი იყოს ცენტრირებული, არამედ

რამდენიმე. ასეთი ცენტრირებული გვერდი აღინიშნება:  $A, B, C$  იმის მიხედვით შესაბამისი გვერდი  $a, b, c$  მიმართულებიდან რომლის პერპენდიკულარულია. რადგანაც  $a, b, c$  არსევა ნებისმიერია, მიღებულია, რომ უჯრედის ყველაზე გრძელი წიბო აღინიშნოს  $b$ -თი, ყველაზე მოკლე  $a$ -თი. პექსაგონალური პრიზმის ტიპის ელემენტარული უჯრედის პრიმიტიული ცხაური აღინიშნება  $R$ -ით. ამ თოთხმეტი სივრცითი ცხაურის ელემენტარულ უჯრედს ბრავეს ცხაურები ეწოდება, რომლებიც წარმოდგენილია სურ. 38, ა. ოცდათორმეტი კრისტალოგრაფიული სივრცითი ჯგუფები ბრავეს თოთხმეტ ცხაურთან გაერთიანებით (კომბინაციაში) გვაძლევს ე. წ. სიმრცითი ჯგუფებს.

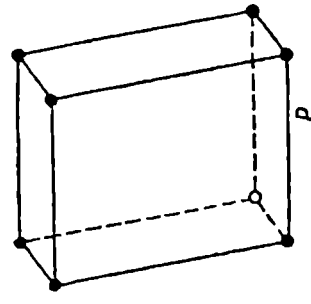
#### 4. 4. ძირითადი ბმის ტიპები კრისტალებში

კრისტალური ცხაური შეიძლება იყოს იონური, ატომური (კოვალენტური ან მეტალური) და მოლეკულური. იონური ცხაური შედგება ურთიერთსაწინააღმდეგო ნიშნის მუხტის მქონე იონებისაგან, რომლებიც მონაცვლეობენ კვანძებში. ატომურ ცხაურებში ატომები დაკავშირებულია ერთიმეორესთან კოვალენტური ან მეტალური ბმით. მეტალები და მათი შენადნობები წარმოქმნიან ატომურ-მეტალურ კრისტალებს. მოლეკულური კრისტალური ცხაურები წარმოქმნილია მოლეკულებისაგან.

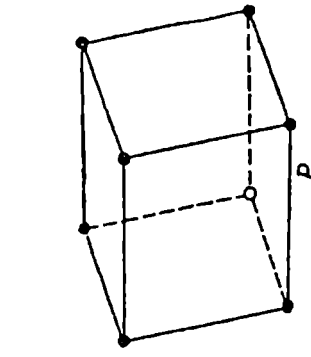
ცნობილია, რომ იონურ ბმას, კოვალენტური ბმისაგან განსხვავებით, არ გააჩნია არც მიმართულება და არც ნაჯერობა. ამის გამო ენერგეტიკულად გაცილებით ხელსაყრელია, როდესაც თითოეული იონი გარშემორტყმულია საწინააღმდეგო მუხტის მქონე იონების მაქსიმალური რაოდენობით.



C



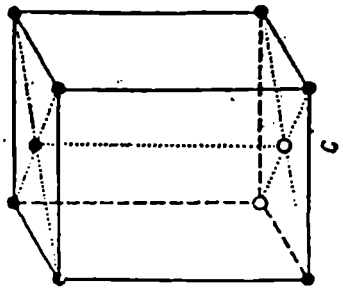
P



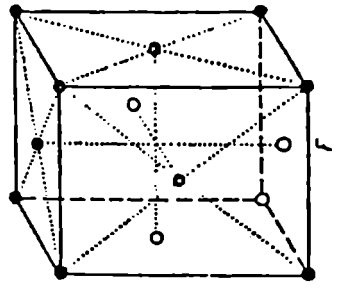
P

მონოკლინური

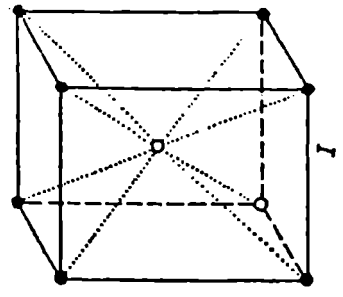
ტრიკლინური



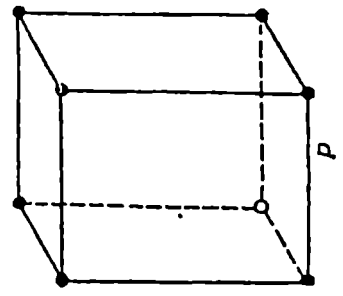
C



F



I

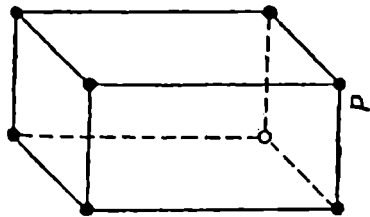


P

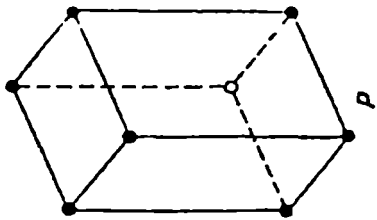
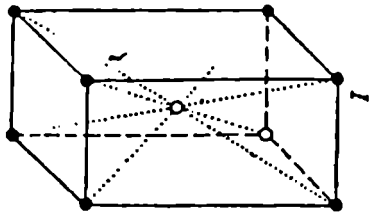
ორთორომბული

სურ. 38ა. ბრავეს ცხატები-

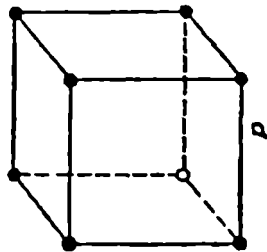
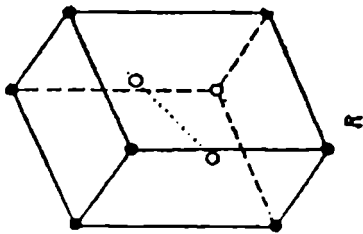




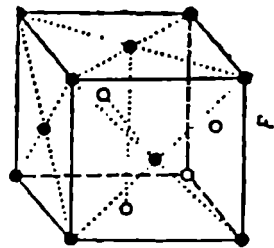
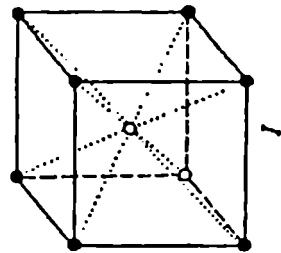
ტეტრაგონალური



ჰექსაგონალური



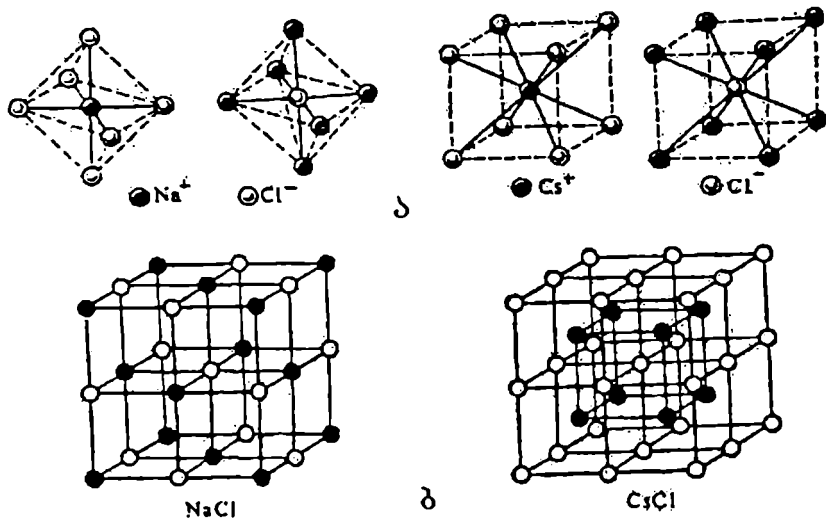
ტეტრაგონალური



იზომეტრული

სურ. 38ა. პრაქტის ცხატრები.

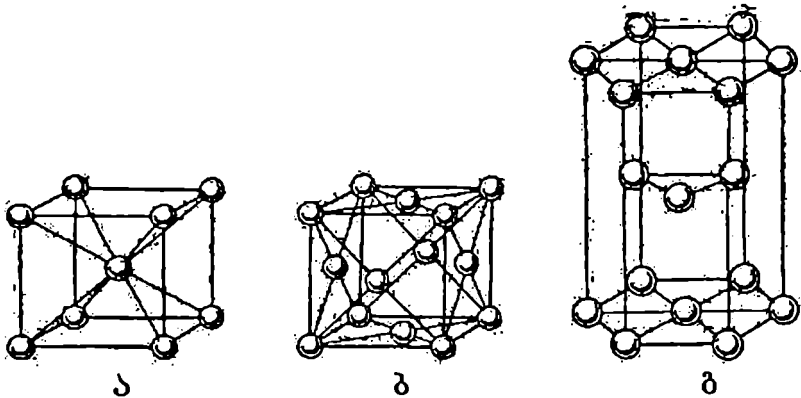
კოვალენტური ნაერთებისაგან განსხვავებით “სუფთა” იონურ ნაერთებში საკოორდინაციო რიცხვი დამოკიდებული არაა ელემენტის ელექტრონულ სტრუქტურაზე და განისაზღვრება იონების რადიუსების თანაფარდობით. მაგალითად, იონური რადიუსების 0,41–0,73 თანაფარდობისას ადგილი აქვს იონების ოქტაედრულ კოორდინაციას, 0,73–1,37 თანაფარდობისას – კუბურ კოორდინაციას და ა.შ.  $Na^+$  ( $r_{Na^+} = 0,098$  ნმ) და  $Cl^-$  ( $r_{Cl^-} = 0,181$  ნმ) იონების ურთიერთქმედებისას, რომელთა რადიუსების თანაფარდობა შეადგენს 0,54, წარმოიქმნება ოქტაედრული კოორდინაცია (სურ. 39, ა). ასეთივე კოორდინაციას აქვს ადგილი  $NaCl$ -ის კუბურ კრისტალურ ცხაურში (სურ. 39, ბ).  $Cs^+$  ( $r_{Cs^+} = 0,165$  ნმ) და  $Cl^-$  ( $r_{Cl^-} = 0,181$  ნმ) იონების რადიუსების თანაფარდობა შეადგენს 0,91, რაც პასუხობს კუბურ კოორდინაციას (სურ. 39, ა).



სურ. 39. იონების  $Na^+$ ,  $Cl^-$  და  $Cs^+$ ,  $Cl^-$  ურთიერთკოორდინაცია (ა) და კრისტალების  $NaCl$ ,  $CsCl$  სტრუქტურა (ბ).

ამრიგად, ჩვეულებრივ პირობებში იონური ნაერთები წარმოადგენენ კრისტალურ ნიეთიერებებს. ამიტომაც, იონური ნაერთებისათვის ცნება მარტივი ორიონიანი მოლეკულები მაგალითად,  $NaCl$ ,  $CsCl$  და ა.შ. აზრს კარგავს. თითოეული კრისტალი შედგება იონების განუსაზღვრელად დიდი რიცხვისაგან:  $Na_nCl_n$ ,  $Cs_nCl_n$ .

კოვალენტური და იონური ნაერთებისაგან განსხვავებით მეტალებში ელექტრონების მცირე რიცხვი ერთდროულად აკავშირებს ატომური ბირთვების დიდ რაოდენობას ხოლო თვით ელექტრონები გადაადგილდებიან მეტალში. სხვანაირად რომ ვთქვათ, მეტალებში არსებობს ძლიერ დელოკალიზებული ქიმიური ბმა. სურ. 40 წარმოადგენილია მეტალებში განხორციელებული კრისტალური ცხაურის ზოგიერთი სისტემა.



სურ. 40. მეტალების კრისტალური ცხაურები:

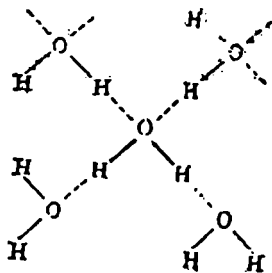
ა - მოცულობითცენტრირებული კუბური;

ბ - გრანეცენტრირებული კუბური;

გ - შექსაგონალური მჭიდრიდ შეკვრა.

განსაკუთრებულ ფუნქციას კრისტალში ასრულებს წყალბადური ბმა. ექსპერიმენტულად დადგენილია, რომ

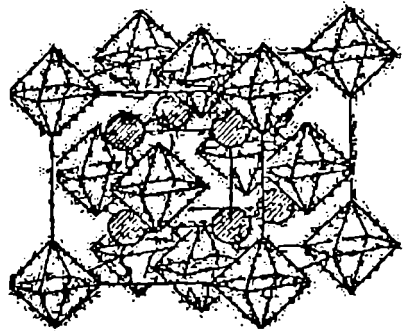
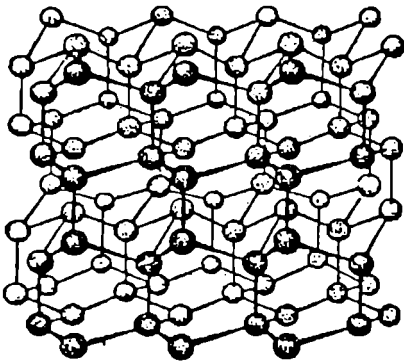
წყალბადის ატომს შეუძლია ერთდროულად დაუკავშირდეს ორ ატომს, რომლებიც შედიან სხვადასხვა მოლეკულაში ან ერთსა და იმავე მოლეკულაში. პირველ შემთხვევაში წყალბადურ ბმას მოლეკულათა შორის წყალბადურ ბმას უწოდებენ, ხოლო მეორე შემთხვევაში — შიდა-მოლეკულურს. ცხადია, წყალბადური ბმა ხორციელდება არა მარტო კრისტალებში, არამედ თხევად ნაერთებში (ნივთიერებებში). მაგალითად, წყალში, სპირტებში, ამინებში და ა. შ. (წყალბადურ ბმაზე კრისტალებში უფრო დაწვრილებით ქვემოთ).



კრისტალებში მოლეკულები დაკავშირებულია ერთიმეორესთან გარდა წყალბადური ბმებისა, ასევე ე. წ. ვან-დერ-ვაალსური ძალებით (ვან-დერ-ვაალსური ურთიერთქმედება). თუმცა, სიმტკიცით წყალბადური ბმა მნიშვნელოვნად აღემატება ვან-დერ-ვაალსური ურთიერთქმედებით განპირობებულ კავშირს. წყალბადური ბმის წარმოქმნა ხორციელდება ერთსა და იმავე მოლეკულაში, ან სხვა მოლეკულაში არსებულ ატომებთან: ჰალოგენი, აზოტი, ჟანგბადი (გამორიცხული არაა ზოგიერთი სხვა ატომიც). ვან-დერ-ვაალსურ ურთიერთქმედებას ადგილი აქვს კრისტალებში მოლეკულებს შორის თუ კი ამისათვის ხელსაყრელი პირობები არსებობს (უფრო დაწვრილებით სტრუქტურების განხილვისას).

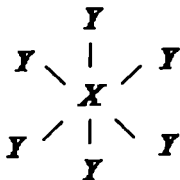
არაორბანული და კოორდინაციული  
ნაერთების პირითადი სტრუქტურული ტიპები

კრისტალებში ატომთა შორის მანძილების და ზოგიერთი სხვა მახასიათებლის მიხედვით ანსხეავენ სტრუქტურებს: კუბურისებური, ფეოვანი, კარკასული. ამ სტრუქტურების ცხაურებში შეიძლება გამოყოფილი იქნეს ატომთა ჯგუფები, რომლებიც წარმოქმნიან შესაბამისად იზოლირებულ კუნძულებს, უსასრულო ჯაჭვს ან ფენას. ეს ფუნქცია შეიძლება შეასრულონ მოლეკულებმა ან კომპლექსურმა იონებმა. კუნძულისებურ სტრუქტურას მიეკუთვნებიან მოლეკულური (სურ. 41) ან იონური (სურ. 42) ცხაურები.  $[Ni(NH_3)_6]Cl_2$  სტრუქტურაში კუნძულების როლს ასრულებენ იონები  $[Ni(NH_3)_6]^{2+}$



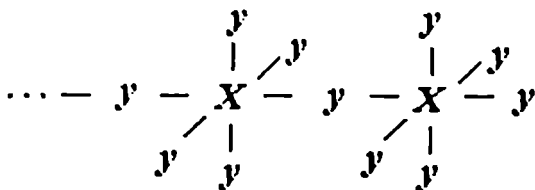
სურ. 41. ყინულის სტრუქტურა. სურ. 42.  $[M(NH_3)_6]x_2$  ტიპის ნაერთების სტრუქტურა: ოქტაედრები -  $Ni(NH_3)_6^{2+}$ ; წრეები,  $Cl^-$ ,  $Br^-$ , ...

დაეუშვათ, რომ ნაერთის მოლეკულას  $XY_6$  აქვს ოქტაედრული აღნაგობა

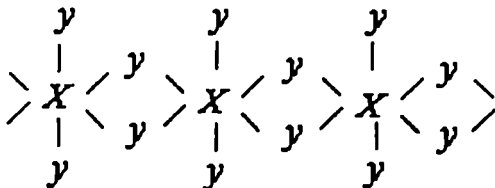


თუ ეს სტრუქტურული ერთეულები ერთიმეორესთან არ არიან შეერთებული, მაშინ წარმოიქმნება კუნძულისებრი სტრუქტურა. თუკი ეს სტრუქტურული ერთეულები შეერთებულია ერთიმეორესთან, მაშინ იმის მიხედვით თუ როგორი სახით ხდება შეერთება, ადგილი აქვს ქვემოთ განხილულ შემთხვევებს.

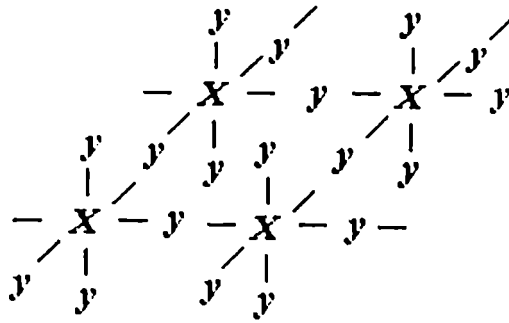
ოქტაედრების ერთი წვეროთი შეერთებისას წარმოიქმნება  $XY_6$  შედგენილობის უსასრულო ჯაჭვი



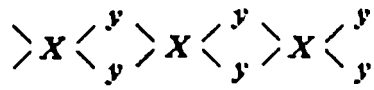
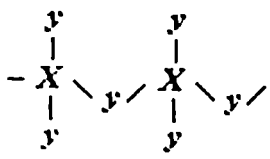
ოქტაედრების ორი წვეროთი შეერთებისას მიიღება  $XY_4$  შედგენილობის უსასრულო ჯაჭვი



ოქტაედრების ოთხი მეზობელი წვეროთი შეერთებისას წარმოიქმნება ორგანზომილებიანი სიბრტყივი ბადე (ფენა)



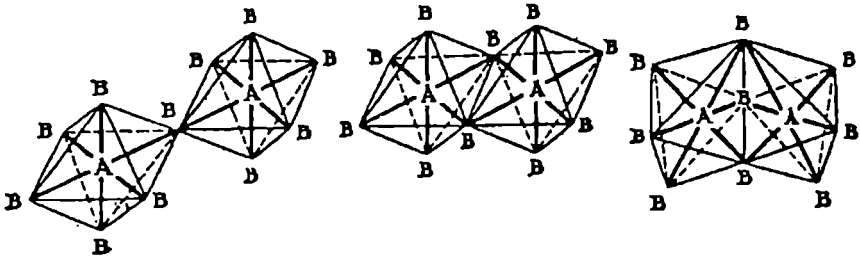
და ა. შ. ანალოგიურ მდგომარეობას აქვს ადგილი, როდესაც  $XY_4$  მოლეკულას აქვს ტეტრაედრული აღნაგობა



$XY_2$

$XY_3$

სურ. 43-ზე წარმოდგენილია ოქტაედრული აღნაგობის მქონე  $AB_6$  მოლეკულის (კომპლექსური) მიერ ორბიტრთვიანი კომპლექსის წარმოქმნის შესაძლებლობები.



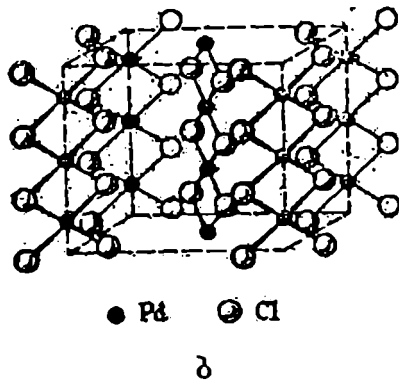
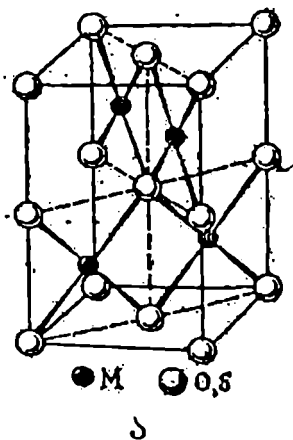
სურ. 43. ოქტაედრების ერთიმეორესთან დაკავშირება ერთი, ორი და სამი ხიდური ატომით.





აღმასის განსაკუთრებულ სიმტკიცესა და ჩვეულებრივ პირობებში არაელექტროგამტარობას.

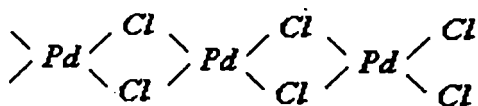
გრაფიტს აღმასისაგან განსხვავებით აქვს ფენოვანი კექსაგონალური სტრუქტურა (სურ. 45, ბ). რეალიზდება რა გრაფიტში  $sp^2$  ჰიბრიდიზაცია, ნახშირბადის ატომები ერთიანდებიან  $C_{2\infty}$  მაკრომოლეკულადად, რომლებიც თავის მხრივ წარმოადგენენ ექვსწვერიანი რგოლების უსასრულო ფენებს.  $sp^2$  ჰიბრიდული მდგომარეობა სტაბილიზირდება დელოკალიზებული  $\pi$ -ბმით, რომელიც წარმოიქმნება მაკრომოლეკულის ატომების მეოთხე ელექტრონის საშუალებით. გრაფიტში  $\pi$ -ბმა დელოკალიზებულია მაკრომოლეკულის მთელ სივრცეზე. ამით განპირობებულია გრაფიტის ელექტროგამტარობა, ნაცრისფერი და მეტალური ბზინვა. გრაფიტი საკმარისად რბილია, ადვილად განშრელება და აღმასთან შედარებით ქიმიურად აქტიურია.



სურ. 46. სტრუქტურები:  $PdO$ ,  $PtO$ ,  $PdS$ ,  $PtS$  (ა);  $PdCl_2$  (ბ).

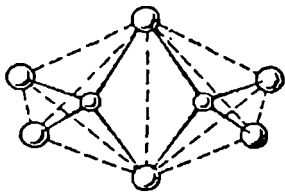
*Pd* (II) და *Pt* (II) ნაერთების სტრუქტურულ უჯრედს (ერთეულს) წარმოადგენს კვადრატი. *PdO* და *PtO* კრისტალებში (სურ. 46, ა) პალადიუმისა და პლატინის ატომები გარშემორტყმულია ოთხკუთხედის წვეროებში განლაგებული ჟანგბადის ატომებით. ეს კვადრატები გვერდებით შეერთებულია ჯაჭვში, რომლებიც გადაჯვარედინებულია  $90^\circ$ -იანი კუთხით. ანალოგიური სტრუქტურა აქვს *PdS* და *PtS*.

*PdCl<sub>2</sub>* კრისტალები შედგება კვადრატული სტრუქტურული ერთეულების გრძელი ჯაჭვისაგან (სურ. 46, ბ).



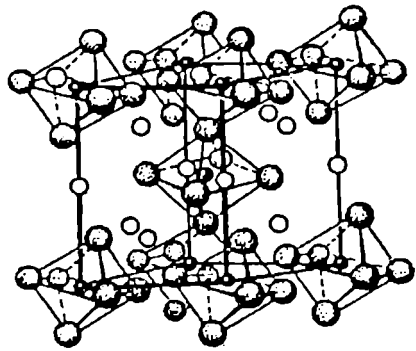
ზოგიერთ ორგანულ გამხსნელსა და ასევე აირად მდგომარეობაში  $AlX_3$  ( $X = Cl, Br, I$ ) არსებობენ დიმერული მოლეკულების სახით  $Al_2X_6$ , რომელთა კონფიგურაციაც წარმოადგენს საერთო წიბოთი გაორებულ ტეტრაედრებს (სურ. 47). თავის მხრივ ალუმინის ტრიჰალოგენიდები ადვილად წარმოქმნიან  $M_3[AlF_6]$  ტიპის ნაერთებს. მაგალითად, ნატრიუმის ჰექსაფტოროალუმინატი  $Na_3[AlF_6]$  (კრიოლითი), რომლის კრისტალებიც კუნძულისებურ ტიპს განეკუთვნებიან, წარმოიქმნებიან  $Na^+$  და  $[AlF_6]^{3-}$  იონებისაგან (სურ. 48).

ალუმინის ჰიდროქსიდი წარმოადგენს პოლიმერულ ნაერთს. ბუნებრივ ჰიდროქსიდს (მინერალი ჰიდრარგილიტი) აქვს ფენოვანი კრისტალური ცხაური (სურ. 49). ფენები, შედგებიან ოქტაედრული აღნაგობის მქონე  $Al(OH)_6$ -საგან; ფენებს შორის არსებობს საკმარისად მტკიცე წყალბადური ბმები.



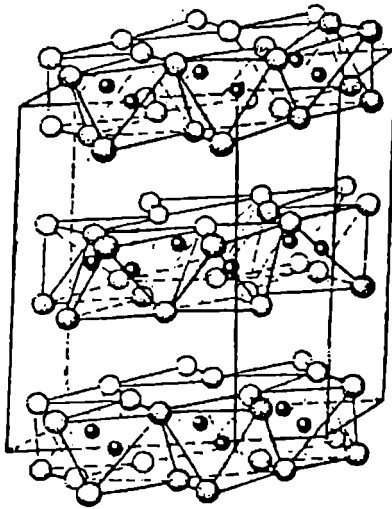
● Al ○ Hal

სურ. 47.  $Al_2X_6$  მოლეკულების  
აღნაგობა.



○ Na ● Al ● F

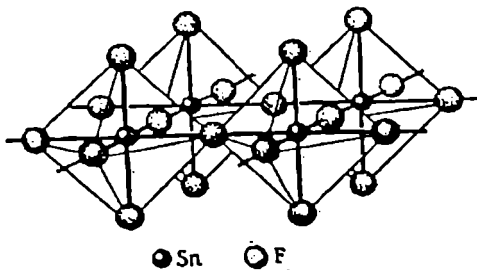
სურ. 48.  $Na_3[AlF_6]$   
სტრუქტურა.



● Al ● OH

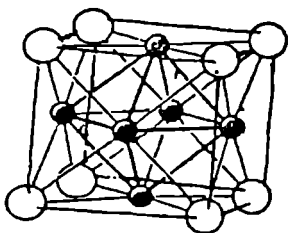
სურ. 49. ჰიდრაოგილიტის ( $Al(OH)_3$ ) სტრუქტურა.

კალისა და ტყვიის პოლიმერული ტეტრაფტორიდების  $SnF_4$ ,  $PbF_4$  კრისტალების ფენოვანი ცხაურები შედგება ოქტაედრული სტრუქტურული ერთეულებისაგან (სურ. 50), რაც განაპირობებს მაგალითად, ტყვიის სხვა პალოგენიდებისაგან განსხვავებით  $PbF_4$  სიმტკიცეს.

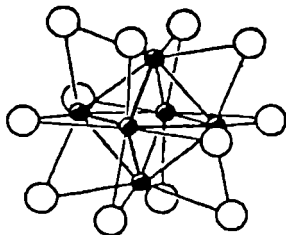


სურ. 50.  $SnF_4$  სტრუქტურა.

არაორგანულ ნაერთთა მნიშვნელოვან კლასს წარმოადგენს კლასტერები (კლასტერული ნაერთები), რომლებსაც წარმოქმნიან  $4d$  და  $5d$  მეტალები:  $Mo$ ,  $W$ ,  $Tc$ ,  $Re$  და ა.შ. საინტერესო კლასტერულ ნაერთს წარმოადგენს  $MoCl_2$ . რენტგენოსტრუქტურული ანალიზით დადგენილია, რომ  $MoCl_2$ -ს პასუხობს ფორმულა  $[Mo_6Cl_8]Cl_4$  (სურ. 51). მოლიბდენის ექვსი ატომი მდებარეობს კუბის გვერდების ცენტრებში და წარმოქმნის ოქტაედრს  $Mo_6$ . ქლორის რვა ატომი განლაგებულია კუბის წვერობებში და თითოეული ქლორის ატომი დაკავშირებულია მოლიბდენის სამ ატომთან. გარესფერული  $Cl^-$  ასრულებს ხიდურ ფუნქციას, აკავშირებენ (აერთიანებენ) რა  $[Mo_6Cl_8]^{4+}$  ერთიმეორესთან.



ა



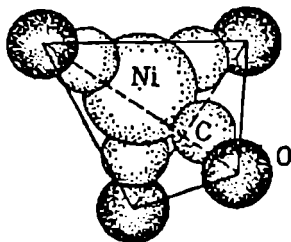
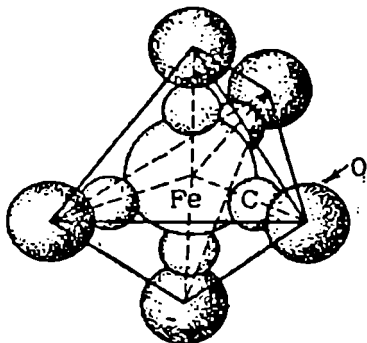
ბ

● M ○ X

სურ. 51. ოქტაედრული კლასტერების სტრუქტურა.

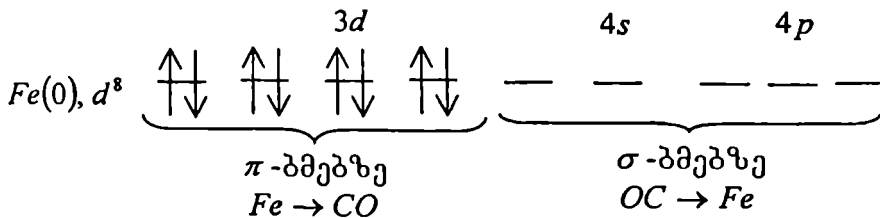
ა -  $[Mo_6Cl_8]^{4+}$ ; ბ -  $[Nb_6Cl_{12}]^{2+}$

არაორგანულ ნაერთთა საინტერესო კლასს წარმოადგენს მეტალთა კარბონილები, რომლებსაც ბევრი *d*-მეტალი წარმოქმნის (*Mn, Fe, Ru, Os, Cr, Co, Ni*) ნულოვანი უანგეითი ხარისხის პირობებში. ყველა ეს ნაერთი, წარმოიქმნება მხოლოდ დონორულ-აქცეპტორული ურთიერთქმედების საფუძველზე. მაგალითის სახით სურ. 52 წარმოდგენილია რკინის(0) და ნიკელის(0) კარბონილების აღნაგობა

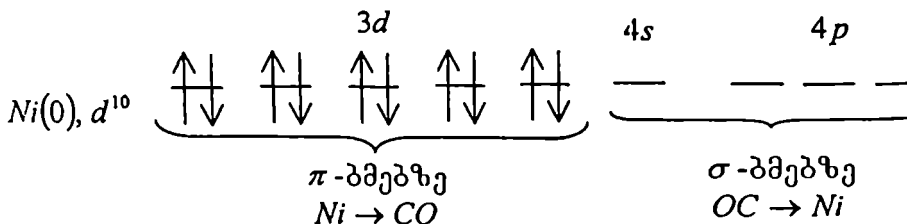


სურ. 52. რკინის პენტაკარბონილის და ნიკელის ტეტრაკარბონილის აღნაგობა.

რკინის პენტაკარბონილის მოლეკულას აქვს ტრიგონალური ბიპირამიდის კონფიგურაცია (სურ. 52), რაც შეესაბამება რკინის ატომის  $\sigma$ -მაკავშირებელი ორბიტალების  $dsp^3$ -ჰიბრიდიზაციას.



ნიკელის ტეტრაკარბონილი ტეტრაედრული აღნაგობისაა, ნიკელის ატომით მის ცენტრში, რასაც მისი ატომის  $\sigma$ -მაკავშირებელი ორბიტალების  $sp^3$ -ჰიბრიდიზაცია შეესაბამება.



როგორც ცნობილია კომპლექსწარმომქმნელი მეტალის ატომის (ცენტრალური ატომის) ყველაზე გავრცელებული საკოორდინაციო რიცხვი არის 4 და 6, ხოლო ყველაზე იშვიათი — 2 და 3. ქვემოთ განხილულია ნაერთები მათში ცენტრალური ატომის საკოორდინაციო რიცხვის ზრდის შესაბამისად.

კოორდინაციული ნაერთები ცენტრალური ატომის ორის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვით იმდენად უჩვეულო არ არის, რამდენადაც ნაკლებად გავრცელებული. ასეთი კომპლექსები ყველაზე მეტად დამახასიათებელია სპილენძის(I), ვერცხლის(I) და ოქროსათვის(I):

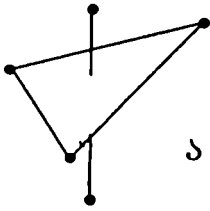
$[Cu(NH_3)_2]Cl$ ,  $[Cu(Tio)_2]Cl$ ,  $M^+[MX_2]$  ( $M^*$ -ტუბე მეტალი,  $M = Ag, Au$ ,  $X = Hal, CN$ ),  $[M(NH_3)_2]X$  ყველა ამ კომპლექსს აქვს ხაზობრივი კონფიგურაცია.

ოთხმოცდაათიან წლებში გამოიჩინა მონაცემები ძალზე საინტერესო კომპლექსების შესახებ, რომლებშიც საკოორდინაციო რიცხვი ორის ტოლია და ცენტრალური ატომის (იონის) ფუნქციას პალოგენიდიონები ასრულებენ, ხოლო ლიგანდისას - ვერცხლის(I) იონები:  $[Ag_2Cl]NO_3$ ,  $[Ag_2Br]NO_3$ ,  $[Ag_2I]NO_3$ .

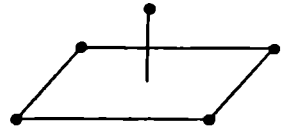
ცენტრალური ატომის სამის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვის მქონე კოორდინაციული ნაერთები კიდევ უფრო იშვიათად გვხვდება. არსებობს კომპლექსი  $K[Cu(CN)_3]$ , რომლის იონსაც აქვს სამკუთხედის აღნაგობა. მიღებულია აგრეთვე სპილენძის კომპლექსი  $Cs[CuCl_3]$ .

ბოლო პერიოდში მკვლევართა განსაკუთრებული ყურადღება აქვს დათმობილი კოორდინაციული ნაერთების კვლევას, რომლებშიც საკოორდინაციო რიცხვი არის 5. ასეთი კომპლექსების განსაკუთრებით დიდი რიცხვია მიღებული მეტალებისათვის (იონებისათვის)  $Fe(II)$ ,  $Co(II)$ ,  $Ni(II)$ . აღნიშნულ კომპლექსებში ლიგანდის როლში გამოდიან როგორც ერთვალენტიანი იონები, ასევე ორვალენტიანი ლიგანდები, მაგალითად ტრიფენილფოსფინი  $(C_6H_5)_3P$ , ტრიპთილფოსფინი  $(CH_3)_3P$  ფოსფორის დონორული ატომით.

რენტგენოსტრუქტურული კვლევით დადგენილია, რომ კომპლექსის  $[Co(Dphp)_2Cl](SnCl_3)$  (წითელი მოდიფიკაცია) კომპლექსურ იონს აქვს ტეტრაგონალური პირამიდის, ხოლო მწვანე მოდიფიკაციისას  $[Co(Dphp)_2Cl](SnCl_3) \cdot C_6H_5Cl$  ( $Dphp = (C_6H_5)_2PCH_2CH_2P(C_6H_5)_2$ ) - ტრიგონალური ბიპირამიდის კონფიგურაცია.



ა



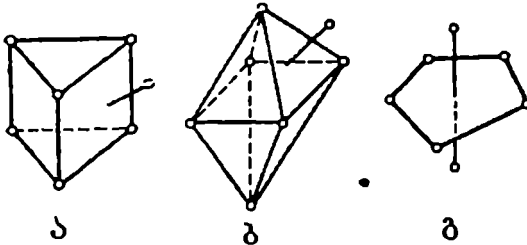
ბ

სურ. 53. ხუთის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვის მქონე კომპლექსების კონფიგურაცია

ა - ტრიგონალური ბიპირამიდა; ბ - ტეტრაგონალური პირამიდა.

კოორდინაციული ნაერთები ცენტრალური ატომის  $n$ -ის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვით, რომელთაც აქვს ოქტაედრული აღნაგობა ალბათ გაცილებით მრავალრიცხოვანია, ვიდრე სხვა ცალკეული კონფიგურაციის მქონეა. ამიტომაც მათს შესახებ მასალა კონკრეტულ მაგალითზე ქვემოთ იქნება მოცემული.

კომპლექსები შეიძის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვით ისევე ცოტაა, როგორც  $3$ -ის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვის მქონენი. ვარაუდობენ, რომ ასეთი კომპლექსების კონფიგურაციას შეიძლება შეესაბამებოდეს: ერთქუდიანი ტრიგონალური პრიზმა, ერთქუდიანი ოქტაედრი, ან პენტაგონალური ბიპირამიდა (სურ. 54).



ა

ბ

გ

სურ. 54. შეიძის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვის მქონე კომპლექსების კონფიგურაცია:

ა - ქუდიანი ტრიგონალური პრიზმა;

ბ - ქუდიანი ოქტაედრი;

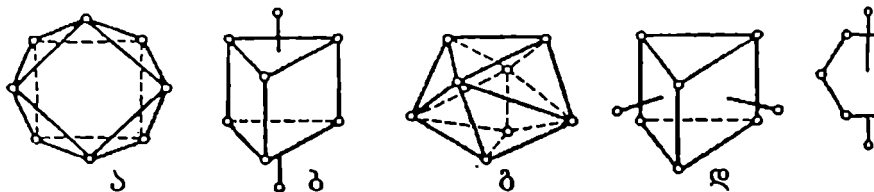
გ - პენტაგონალური ბიპირამიდა.



რენტგენოსტრუქტურული კვლევით დადგენილია, რომ ნაერთის  $K_3[ZrF_7]$  კომპლექსურ იონს  $[ZrF_7]^-$  აქვს ქუდიანნი ოქტაედრის აღნაგობა. ოქტაედრი გამრუდებულია მე-7 ლიგანდის მიერ იმ გვერდზე არსებული ლიგანდების განზიდვით, რომლის მაღლაც ის იმყოფება. კომპლექსური იონები  $[MF_7]^{2-}$ , სადაც  $M(V) = Sb, Nb, Ta$ , აგებულია ტრიგონალური პრიზმის სახით, სადაც მე-7 ფტოროლიგანდი მდებარეობს ერთ-ერთი ვერტიკალური გვერდის მაღლა. ასევე რენტგენოსტრუქტურული ანალიზით დადგენილია, რომ ურანილის ( $UO_2(II)$ ) კომპლექსების  $K_3[UO_2F_5]$  და  $Cs_3[UO_2(NCS)_5]$  კოორდინაციული პოლიედრი წარმოადგენს პენტაგონალურ ბიპირამიდას.

კომპლექსები, რომლებშიც ცენტრალური ატომის საკოორდინაციო რიცხვი 8-ის ტოლია, გაცილებით ბევრია. უფრო ხშირად ასეთ კოორდინაციულ ნაერთებს წარმოქმნიან:  $Y(III)$ ,  $Zr(IV)$ ,  $Hf(IV)$ ,  $Nb(V)$ ,  $Ta(V)$ ,  $Mo(IV)$ ,  $Mo(V)$ ,  $W(IV)$  და  $W(V)$ . თელიან, რომ რეის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვი ძირითადად განპირობებულია ცენტრალური ატომების (იონების) დიდი ზომებითა და დაუანგვის მაღალი ხარისხით. ადრე თვლიდნენ, რომ ასეთ ნაერთებს აქვს კუბური აღნაგობა, მაგრამ რენტგენოსტრუქტურულმა კვლევებმა დაადასტურეს, რომ ასეთი აღნაგობის კომპლექსები თითქმის არ არსებობენ. რეის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვის მქონე კომპლექსებისათვის ნავარაუდები იყო და შემდგომ ექსპერიმენტულად დადგენილი შემდეგი კონფიგურაციები (სურ. 55).

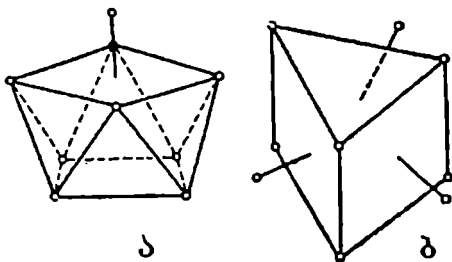
რეის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვის მქონე კომპლექსებიდან, რომელთაც აქვს დოდეკაედრის კონფიგურაცია, კარგად შესწავლილია მოლიბდენისა და ვოლფრამის ციანიდოკომპლექსები:  $K_4[Mo(CN)_8]$  და  $K_4[W(CN)_8]$ . პალოგენოკომპლექსებიდან ყველაზე გავრცელებულია ფტოროკომპლექსები. ცნობილია კომპლექსები:  $H_3[SbF_8]$ ,  $Na_3[TaF_8]$ ,  $(NH_4)_3H[PbF_8]$ . კომპლექსური იონი  $[TaF_8]^{2-}$



სურ. 55. კომპლექსების კონფიგურაციები საკოორდინაციო რიცხვით რვა:

- ა - არქიმედეს ანტიპრიზმა;
- ბ - ვერტიკალურად ორქუდიანი ტრიგონალური პრიზმა;
- გ - დოდეკაედრი;
- დ - ჰორიზონტალურად ორქუდიანი ტრიგონალური პრიზმა;
- ე - ჰექსაგონალური ბიპირამიდა.

აგებულია ტეტრაგონალური ანტიპრიზმის სახით.  $\beta$ -დი-კეტონების შემცველი ლანთანოიდების კომპლექსებიდან  $M[Ln(RCOCHCOR')]_4$  ზოგს აქვს ანტიპრიზმული, ნაწილს - დოდეკაედრული კონფიგურაცია.

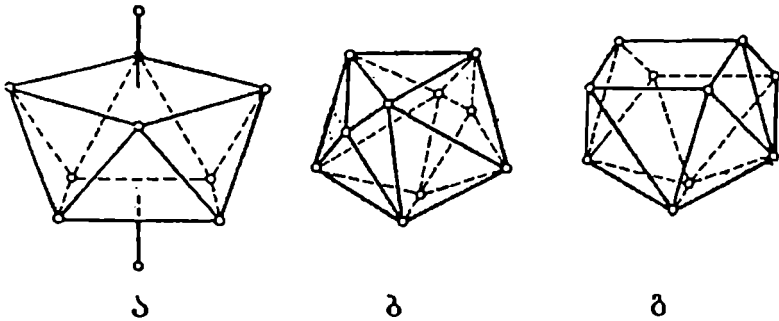


სურ. 56. კომპლექსების კონფიგურაციები საკოორდინაციო რიცხვით 9.

- ა - ქუდიანი კეადრატული ანტიპრიზმა;
- ბ - ჰორიზონტალურად სამქუდიანი ტრიგონალური პრიზმა.

კოორდინაციული ნაერთები საკოორდინაციო რიცხვით 9 და უფრო მეტი, ცნობილია მხოლოდ  $f$ -ელემენტებისათვის – ლანთანოიდები და აქტინიდები. თუმცა გამონაკლისს წარმოადგენს რენიუმის ჰიდრიდული ნაერთი  $K_2[ReH_9]$ , რომელსაც აქვს ჰორიზონტალურად სამკუდიანი ტრიგონალური პრიზმას ტიპის აღნაგობა (სურ. 56, ბ).

ათის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვიანი კომპლექსები პრაქტიკულად უცნობია ათი მონოდენტატური ლიგანდის შემთხვევაში. ყველა ცნობილი კომპლექსი ათის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვის მქონე ცენტრალური ატომით შეიცავს  $NO_3^-$  და  $CO_3^{2-}$  ბიდენტატურ იონებს. ამასთან, ცენტრალურ ატომთან ამ იონების მიერ წარმოქმნილ ოთხწვერიან ციკლებში ჟანგბადის ატომებს შორის მანძილი გაცილებით მცირეა, ვიდრე ჟანგბადის ორ ატომს შორის ვან-დერ-ვაალსური ურთიერთქმედებისას.



სურ. 57. კომპლექსების კონფიგურაციები საკოორდინაციო რიცხვით 10.

- ა – ორქუდიანი კვადრატული ანტიპრიზმა;
- ბ – ორქუდიანი დოდეკაედრი;
- გ – დოდეკაედრი გაორებული წვეროებით.

ასეთი კომპლექსებისათვის ყველაზე მეტად გავრცელებული პოლიედრია ორქუდიანი ანტიპრიზმა. ორი სხვა პოლიედრი დაფუძნებულია დოდეკაედრზე: ორქუდიანი დოდეკაედრი და დოდეკაედრი გაორებული წვეროებით

(სურ. 57). ბოლო პოლიედრის ტიპის აღნაგობის მქონე კომპლექსების მაგალითს წარმოადგენს ნაერთები  $La(DMCO)_4(NO_3)_3$  და  $Nd(DMCO)_4(NO_3)_3$ . სამივე ნიტრატოჯგუფი ასრულებს ბიდენტატური აციდოლიგანდის ფუნქციას. დიმეთილსულფოქსიდის მოლეკულების ჟანგბადატომებს უკავიათ დანარჩენი ოთხი საკოორდინაციო ადგილი. ანალოგიური აღნაგობა აქვს კომპლექსებს  $La(Dipy)_2(NO_3)_3$  და  $Tb(Dipy)_2(NO_3)_3$ .

საკოორდინაციო რიცხვი 11 ამჟამად ზუსტად დადგენილია მხოლოდ ორ კომპლექსში  $[Th(H_2O)_3(NO_3)_3(OH)]_2$  და  $[Th(H_2O)_5(NO_3)_4]$ . კოორდინაციული ნაერთები 12-ის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვით გაცილებით მეტია. ასე, მაგალითად,  $M[Ce(NO_3)_6]$ ,  $M[Th(NO_3)_6] \cdot 8H_2O$ , სადაც  $M(II) = Mg, Mn, Co, Ni, Zn$ , კომპლექსებში ცენტრალური ატომის საკოორდინაციო რიცხვი არის 12. კოორდინაციული ნაერთები 13 ტოლი საკოორდინაციო რიცხვით ცნობილი არაა. რაც შეეხება 14-ის ტოლ საკოორდინაციო რიცხვს, ის რეალიზდება კომპლექსებში:  $U(BH_4)_4$  (ურანის ატომი დაკავშირებულია წყალბადის 14 ატომთან),  $U(BH_4)_4 \cdot 2(C_4H_8O)$  (ურანის ატომი დაკავშირებულია 12 წყალბადატომსა და 2 ჟანგბადატომთან).

მომდევნო თავში წარმოდგენილია კოორდინაციული ნაერთების რენტგენოსტრუქტურული კვლევების მონაცემები, რომლებიც სრულყოფილად ასახავენ და ადასტურებენ ამ ნაერთებში კრისტალოქიმიურ და სტერეოქიმიურ ასპექტებს.

## კოორდინაციული ნაერთების კრისტალოქიმია

„კოორდინაციული ნაერთების საერთო არქიტექტურაში არსებობს ორი ასპექტი: კრისტალოსტრუქტურული – კრისტალში სტრუქტურული ელემენტების (მოლეკულების ან კომპლექსური და ატომური იონების) შეკერის წესი და სტერეოქიმიური – თვით კომპლექსების აღნაგობის ანალიზი“ (მ. პორაი-კოშიცი).

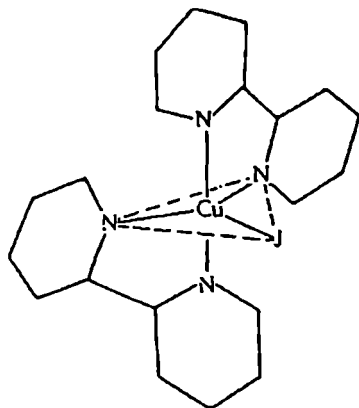
### 6. 1. მეტალების კოორდინაციული ნაერთები სხვადასხვა ლიგანდებთან

როგორც აღინიშნა, ყველაზე დაბალი საკოორდინაციო რიცხვი არის 2 და ასეთი ნაერთების კომპლექსური იონებს აქვს ხაზობრივი სტრუქტურა. აღინიშნა, ისიც, რომ 3 საკოორდინაციორიცხვიანი ნაერთები გაცილებით ნაკლებია, ვიდრე ორი საკოორდინაციო რიცხვის მქონე. „უჩვეულო“ კოორდინაციულ რიცხვად ითვლება 5 და 7. ასეთი საკოორდინაციო რიცხვი მონახულია შემდეგი მეტალების კომპლექსებში:  $Cu$ ,  $Zn$ ,  $Fe$ ,  $Co$ ,  $Ni$ ,  $Nb$ .

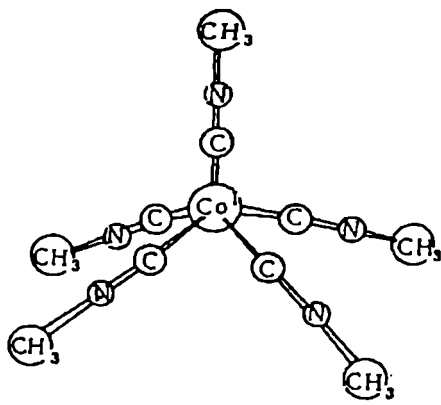
სამი საკოორდინაციო რიცხვის მქონე  $Cu(I)$  შესაბამისი კომპლექსების მაგალითები მოცემულია სურ. 59.

შეიღის და რვის ტოლი საკოორდინაციო რიცხვის მქონე კომპლექსების მაგალითები წარმოდგენილია სურ. 60, 61.

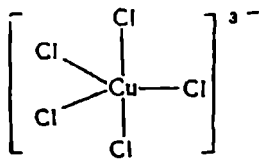
ნიობიუმის კომპლექსების მაგალითები  $K_2[NbF_7]$ ,  $K_3[NbOF_6]$ , რომლებშიც ცენტრალური ატომის საკოორდინაციო რიცხვი არის 7 წარმოდგენილია სურ. 61 ა, ბ.



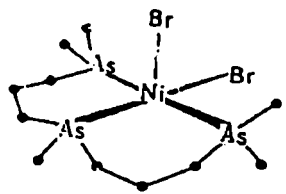
ა



ბ



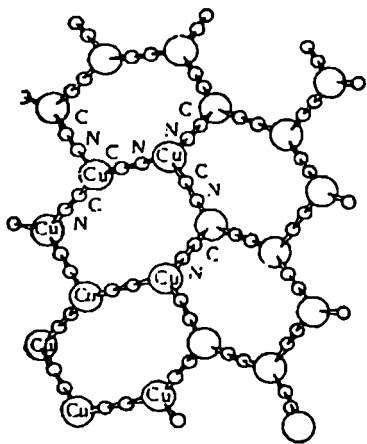
გ



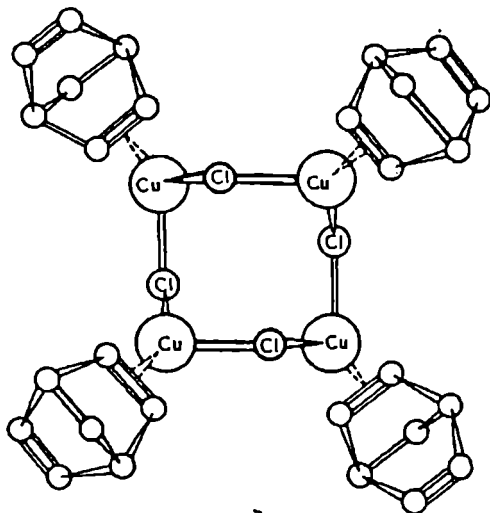
დ

სურ. 58. ხუთკოორდინაციული კომპლექსების იონების მაგალითები:

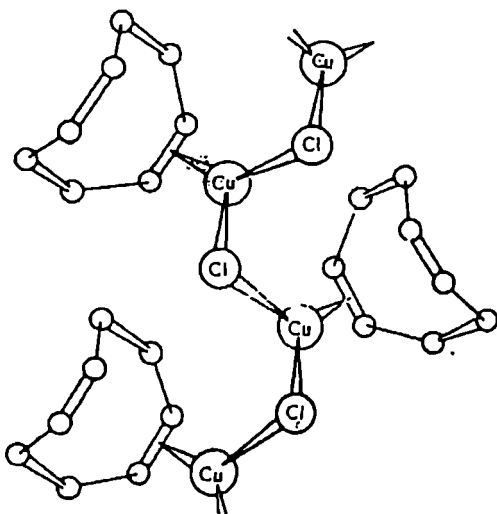
- ა -  $[Cu(Dipy)_2I]^+$  ;
- ბ -  $[CuCl_5]^{3-}$
- გ -  $[Co(CH_3CN)_5]^+$  ;
- დ -  $NiBr_2$  (ტრიარსინი).



ა

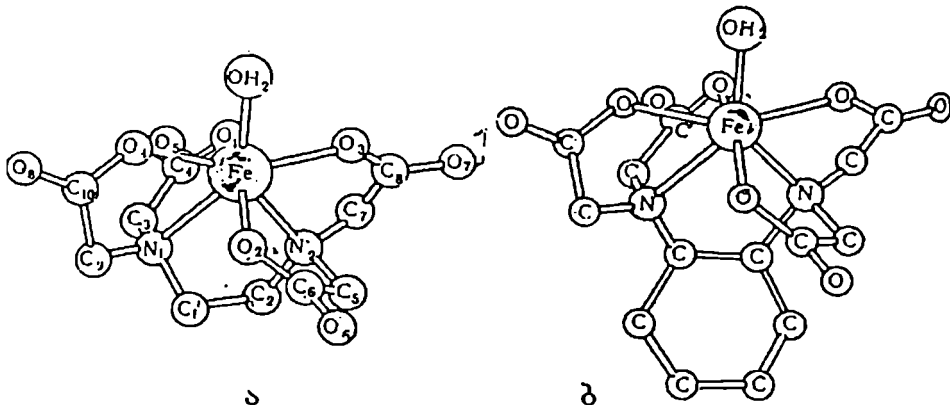


ბ



გ

სურ. 59.  $Cu(I)$  ტრიგონალური კოორდინაციის  
მაგალითები:  
ა -  $KCu_2(CN)_3 \cdot H_2O$ ; ბ -  $(C_7H_8CuCl)_4$ ; გ -  $C_8H_8CuCl$ .  
(ბ, გ -  $\pi$  კომპლექსები).



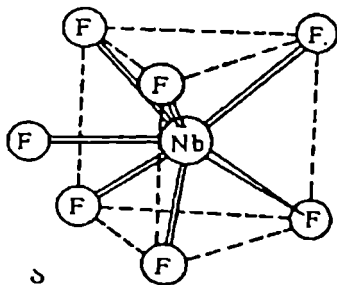
სურ. 60. შვიდკოორდინაციული კომპლექსების  
მაგალითები:

- ა -  $[FeY(H_2O)]^+$ , Y - ეთილენდიამინტეტრა-  
აცეტატი;  
ბ -  $[FeZ(H_2O)]^+$ , Z - დიამინციკლოჰექსან-  
N, N' - ტეტრააცეტატი.

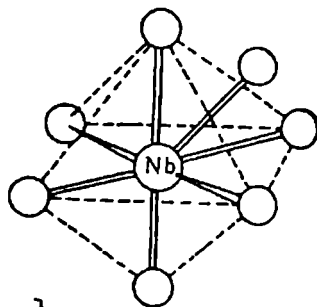
$[NbF_7]^{2-}$  წარმოადგენს ტრიგონალურ პრიზმას, რომლის ერთ-ერთი კვადრატული წახნაგის (გვერდის) ცენტრში მდებარეობს ერთი ფტოროლიგანდი, ხოლო  $[NbOF_6]^{2-}$  - ოქტაედრს, მეშვიდე ატომით ერთ-ერთი სამკუთხა წახნაგის ცენტრში (სურ. 61 ა, ბ).

ანალოგიურ მდგომარეობას აქვს ადგილი ცირკონიუმის კომპლექსებში, რომლის რვაწევროიან პოლედრებს შეიძლება ჰქონდეს დოდეკაედრის ან არქიმედეს ანტიპრიზმის ფორმა. პირველი მონახულია, მაგალითად, კომპლექსში  $Li_6[BeF_4][ZrF_8]$  (სურ. 61 გ), ხოლო მეორე - ცირკონიუმის ტეტრააცეტილაცეტონატში (სურ. 61, დ).

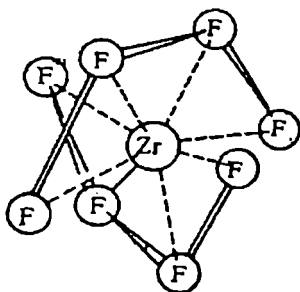




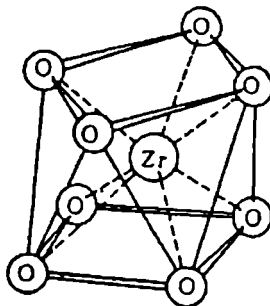
ა



ბ



გ



დ

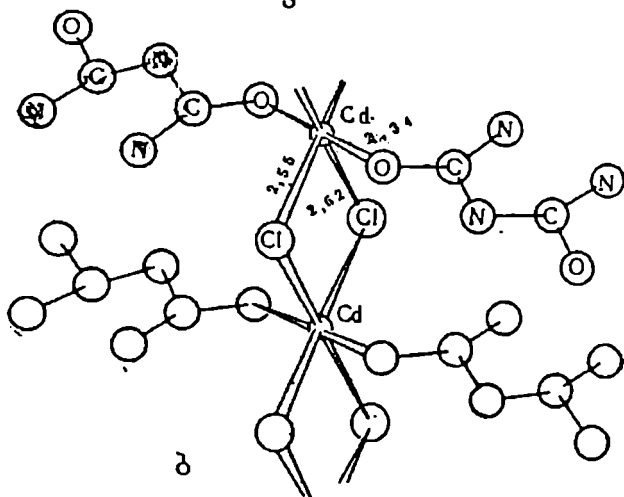
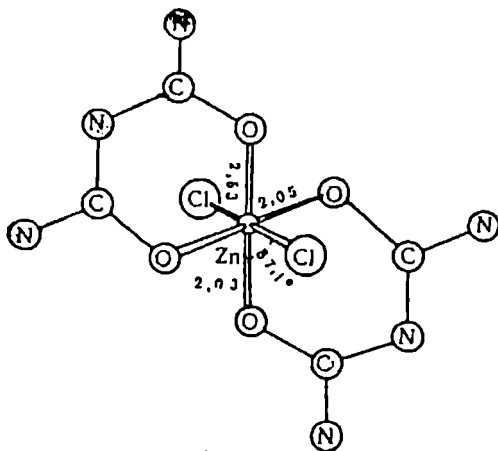
სურ. 61. Nb და Zr-ის შვიდ- და რვაკოორდინაციული კომპლექსების მაგალითები.

რენტგენოსტრუქტურული კვლევების საფუძველზე ერთმნიშვნელოვნადაა დადგენილი, რომ თუთიისათვის დამახასიათებელია როგორც ტეტრაედრული, ასევე ოქტაედრული კოორდინაცია, მაშინ როდესაც კადმიუმისათვის ჭარბობს ოქტაედრული კოორდინაცია. ამასთან, როდესაც თუთიას აქვს ოქტაედრული კოორდინაცია, მისი და კადმიუმის კომპლექსები ხშირად იზოსტრუქტურულია. მაგალითად, კომპლექსები:  $Zn(N_2H_4)_2Cl_2$  და  $Cd(N_2H_4)_2Cl_2$ ;  $Zn(N_2H_4)_2(NCS)_2$  და  $Cd(N_2H_4)_2(NCS)_2$ . ორივე შემთხვევაში მეტალის ატომის პოლიედრი ოქტაედრია; თუმცა თუთიის კომპლექსებში სტრუქტურა

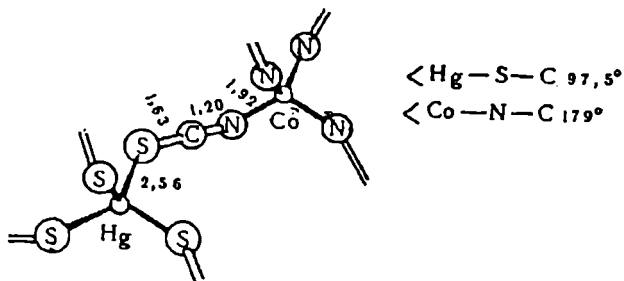
კუნძულისებურია, ხოლო კადმიუმისაში – ჯაჭვეური; პირველში ოქტაედრი წარმოქმნილია ბიურეტის ორი ბიდენტატური მოლეკულითა და ორი ქლოროლიგანდით, ხოლო მეორეში – ბიურეტის ორი მონოდენტატური მოლეკულითა და ორი ხიდური ქლორით (სურ. 62 ა, ბ).

როგორც ცნობილია, ვერცხლისწყლისათვის დამახასიათებელია ბმების ხაზობრივი, ტეტრაედრული და ოქტაედრული განლაგება. ხაზობრივი კოორდინაცია ხორციელდება კომპლექსში  $Hg_2(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$ , რომლის კრისტალებიც აგებულია ასეთი ტიპის იონებისაგან  $[H_2O - Hg - Hg - OH_2]^+$  ვერცხლისწყლისათვის ასევე ერთობ დამახასიათებელია ისეთი პოლიედრები, რომელნიც წარმოადგენენ ხაზობრივსა, ტეტრაედრულსა და ოქტაედრულს შორის შუალედურს. კომპლექსის  $[Hg(BH)_2Cl_2]$  მოლეკულა ოქტაედრული აღნაგობისაა: ოთხი წვერო დაკავებულია ბენზოილჰიდრაზინის ( $C_6H_5CONHNH_2$ ) ორი ბიდენტატური მოლეკულით, ხოლო ორი – ქლოროლიგანდით.

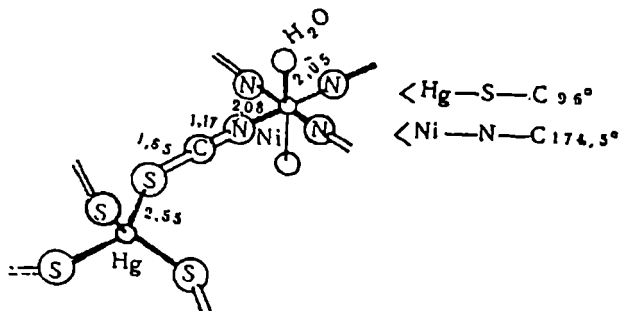
კარკასული სტრუქტურების საინტერესო მაგალითებს წარმოადგენს კომპლექსები, რომლებშიც ხიდური ჯგუფები  $NCS^-$  ერთიმეორესთან აკავშირებს ვერცხლისწყლისა და  $3d$ -მეტალის ატომს. (სურ. 63). ძალზე საინტერესოა თვით ის ფაქტიც, რომ ვერცხლისწყლის ცენტრალური ატომი ტეტრაედრულად გარშემორტყმულია  $S$  ატომებით, ხოლო კობალტის და ნიკელის ატომების მიერ კოორდინირებულია  $N$  ატომები. ამასთან, კობალტის ცენტრალური ატომის ირგვლივ  $N$  ატომები განლაგებულია ტეტრაედრულად, ნიკელის ატომის ირგვლივ – კვადრატულად.



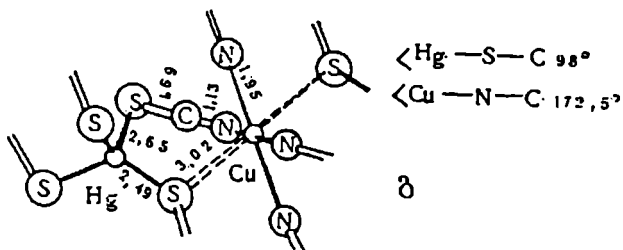
სურ 62.  $Zn(C_2H_5O_2N_3)_2Cl_2$  და  $Cd(C_2H_5O_2N_3)_2Cl_2$   
 კომპლექსებში Zn და Cd ატომების კოორდინაციის  
 შედარება.



ა



ბ



გ

სურ. 63. სხვადასხვა სტრუქტურაში კარკასული მოტივების ფრაგმენტები: ა -  $\text{Hg}(\text{SCN})_4\text{Co}$ ; ბ -  $\text{Hg}(\text{SCN})_4\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_2$ ; გ -  $\text{Hg}(\text{SCN})_4\text{Cu}$ .

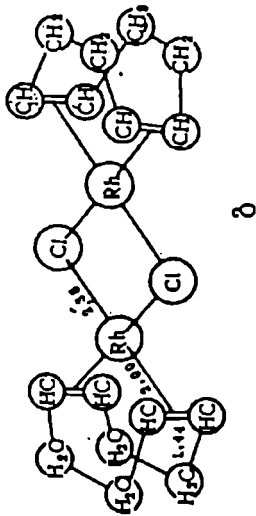
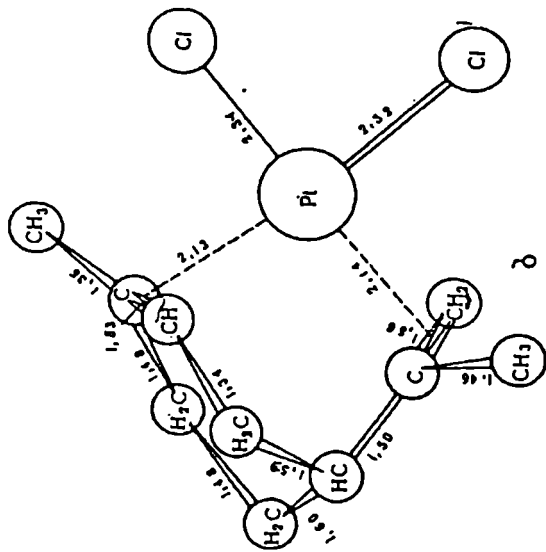
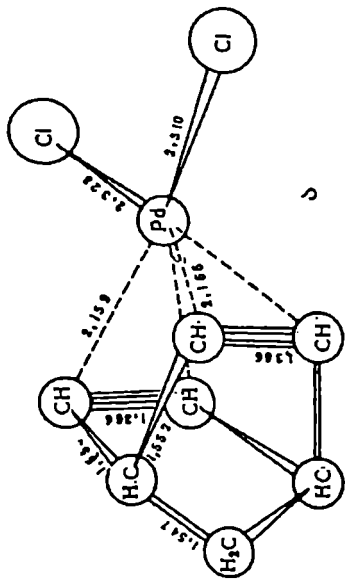
გარდა ამისა, ნიკელის ატომი ამავედროულად ახდენს წყლის ორი მოლეკულის (ხსნარიდან) კოორდინირებას, ავსებს რა თავის ირგვლივ პოლიედრს ოქტაედრამდე, რაც მიუთითებს იმაზე, რომ ნიკელისათვის გაცილებით “ხელსაყრელია” ოქტაედრული კოორდინაცია, ვიდრე ტეტრაედრული ან კვადრატული.

$\pi$ -კომპლექსების წარმოქმნა დამახასიათებელია პლატინის ჯგუფის მეტალებისათვის, კერძოდ:  $Pd(II)$ ,  $Pt(II)$ ,  $Rh(II)$ . ასეთი კომპლექსების მაგალითები წარმოდგენილია სურ. 64, 65.

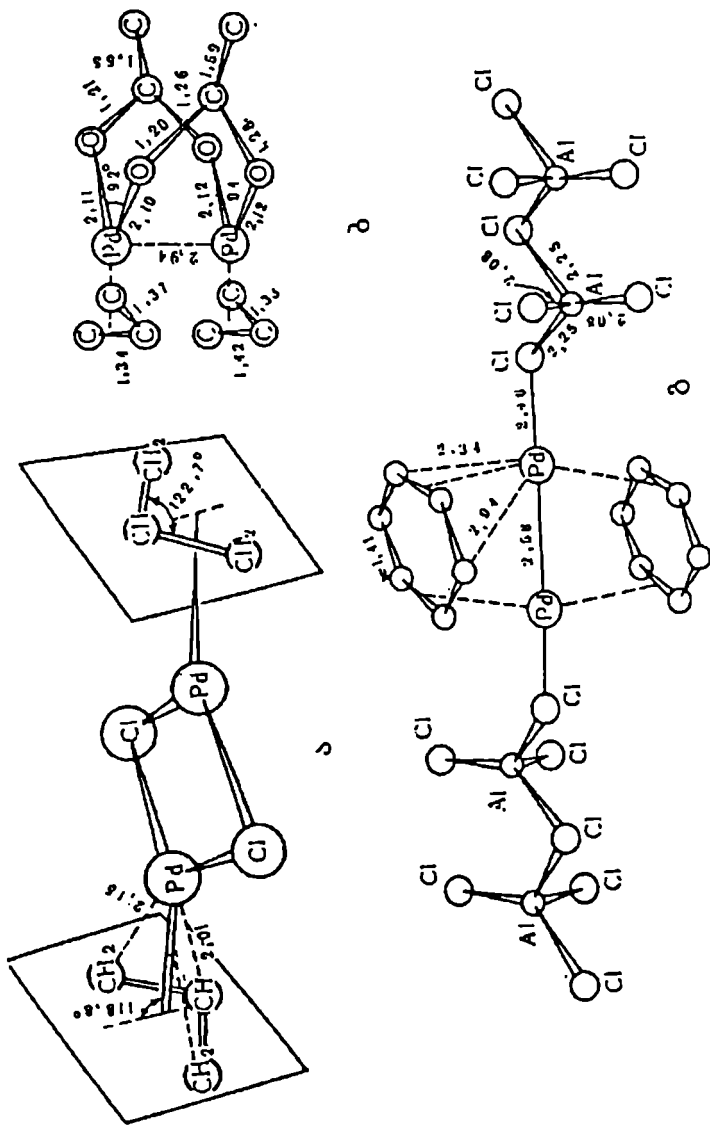
ცნობილია, რომ  $Pt(II)$  საკოორდინაციო რიცხვია 4, ხოლო  $Pt(IV)$  – 6, რასაც პირველ შემთხვევაში შეესაბამება ბმების კვადრატული განლაგება, ხოლო მეორე შემთხვევაში – ოქტაედრული. ხშირად მე-4 და მე-6 ბმები არის საკმარისად სუსტი ისეთ ჯგუფებთან, როგორებიცაა მეთილის, მეთინის და ა. შ. სხვადასხვა (შერეულ) ლიგანდებიანი პლატინის კომპლექსების აღნაგობა წარმოდგენილია სურ. 66, 67.

ცენტრალური ატომის მაღალი საკოორდინაციო რიცხვით ხასიათდებიან  $Nd$ ,  $Zr$ ,  $Hf$ ,  $Th$ ,  $Ce$  და ა.შ. მეტალების ატომები. სურათზე 68 წარმოდგენილია მაღალკოორდინაციული ზოგიერთი კომპლექსის აღნაგობა.

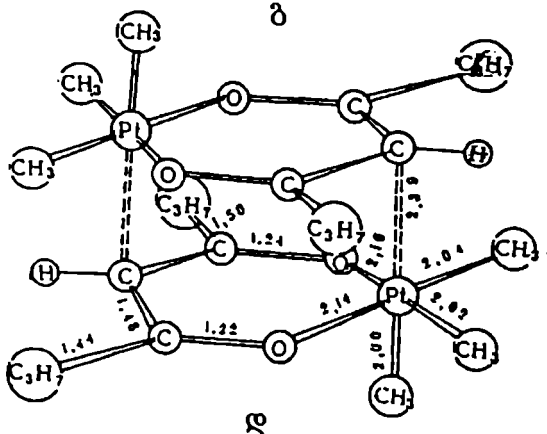
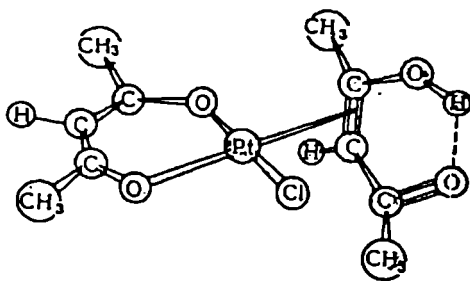
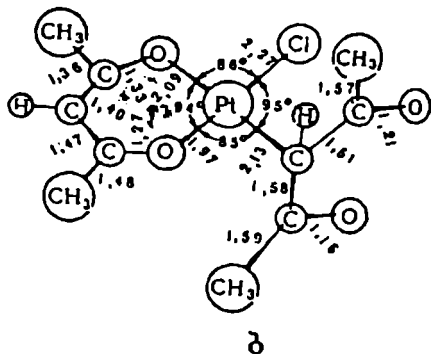
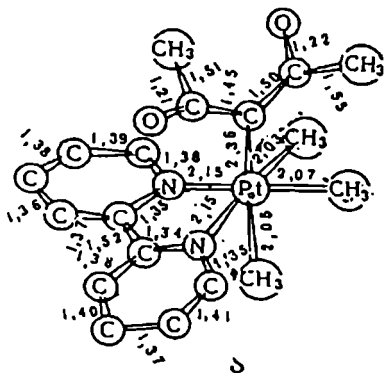
როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, ნიკელის ცენტრალური ატომი ყოველთვის “ცდილობს” რათა მის ირგვლივ ბმების განლაგება იყოს არა კვადრატული ან ტეტრაედრული, არამედ ოქტაედრული. გარდა ამისა, ზოგი მეტალის მსგავსად, ნიკელისთვისაც შესაძლებელია მიღებული იქნეს ისეთი კომპლექსები, რომლებშიც ერთდროულად კოორდინირებულია ნეიტრალური მოლეკულები, მათ შორის ციკლწარმომქმნელი და სხვადასხვა აციდოჯგუფები. რამდენიმე ასეთი კომპლექსის სტრუქტურა წარმოდგენილია სურ. 69, 70.



სურ. 64.  $\text{Pd}$  (II),  $\text{Pt}$  (II),  $\text{Rh}$  (II) ზოგიერთი  $\pi$ -კომპლექსის კოორდინაცია: ა -  $\text{PdCl}_2\text{H}_8\text{Cl}_2$ ; ბ -  $\text{PtCl}_2\text{H}_8\text{Cl}_2$ ; გ -  $\text{RhCl}_2\text{H}_8\text{Cl}_2$ .

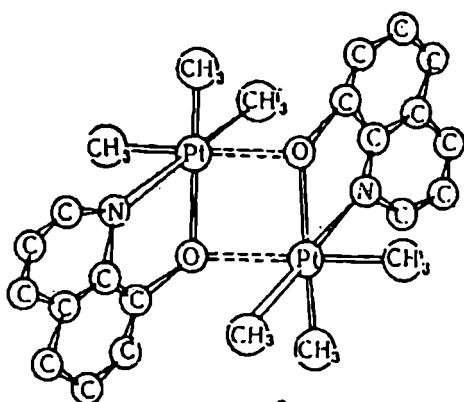
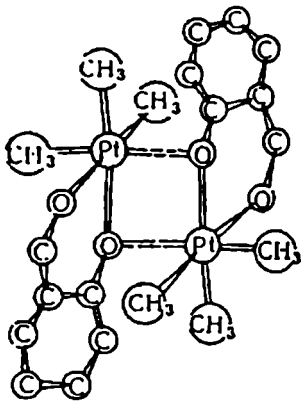
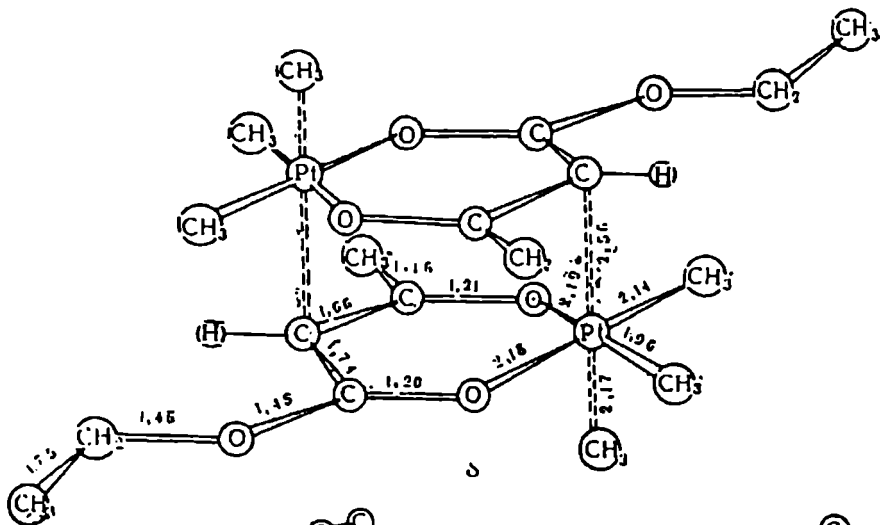


სურ. 65. პალადიუმის ზოგერთი  $\pi$ -კომპლექსის კონფიგურაცია: ა -  $(C_3H_5PdCl)_2$ ; ბ -  $(C_3H_5PdCH_3COO)_2$ ; გ -  $[(C_6H_6)Pd(Al_2Cl_7)]_2$ .

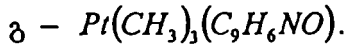
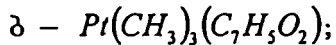
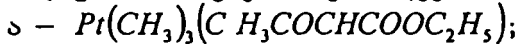


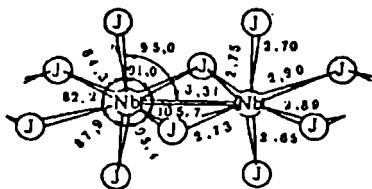
სურ. 66. პლატინის ზოგიერთი კომპლექსის აღნაგობა:  
 ა- $Pt(CH_3)_2(C_5H_7O_2)(C_{10}N_2H_8)$ ; ბ- $K[Pt(CH_3)_2Cl(C_5H_7O_2)]$ ;  
 გ- $K[Pt(CH_3)_2Cl(C_5H_7COCHCOC_3H_7)]$ ; დ- $Pt(CH_3)_3(C_5H_7COCHCOC_3H_7)$ .



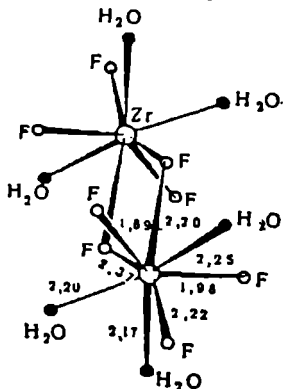


სურ. 67. პლატინის ზოგიერთი კომპლექსის აღნაგობა:

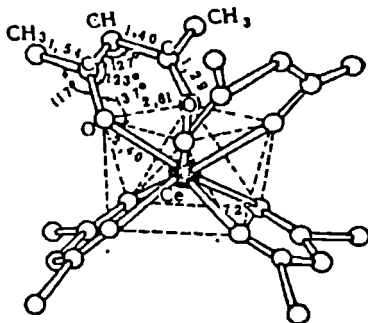




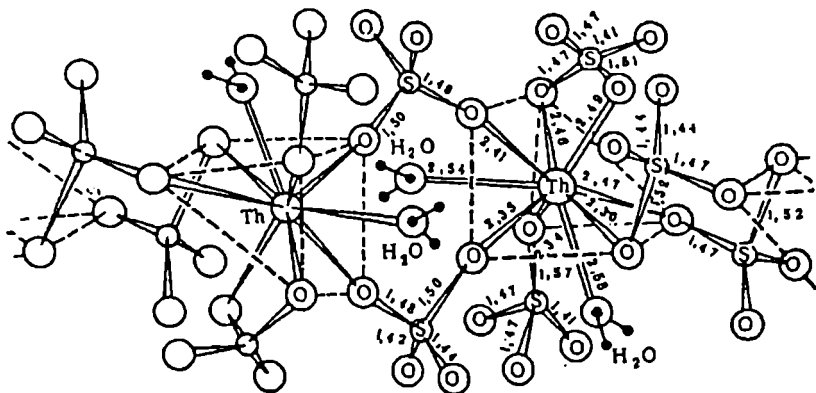
ა



ბ



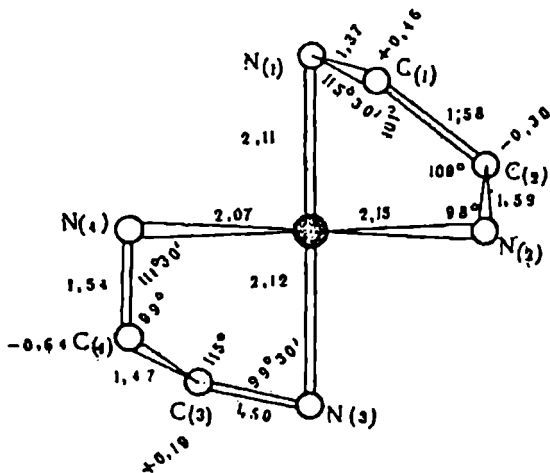
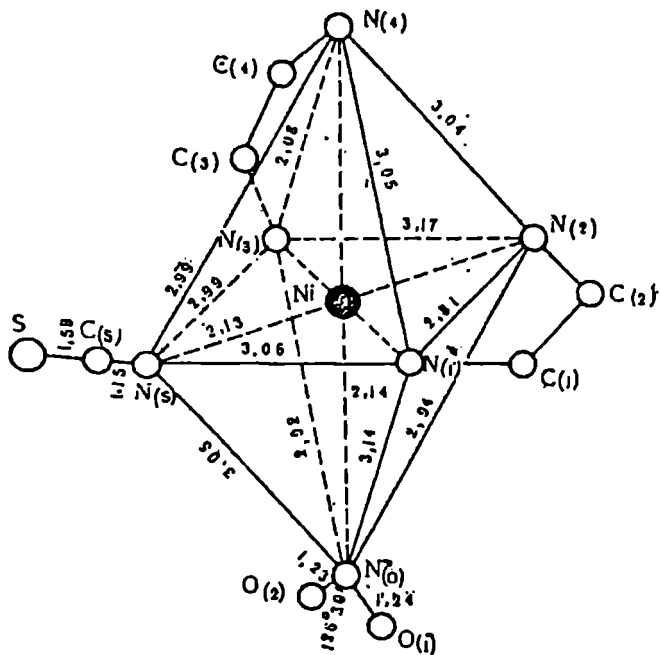
გ



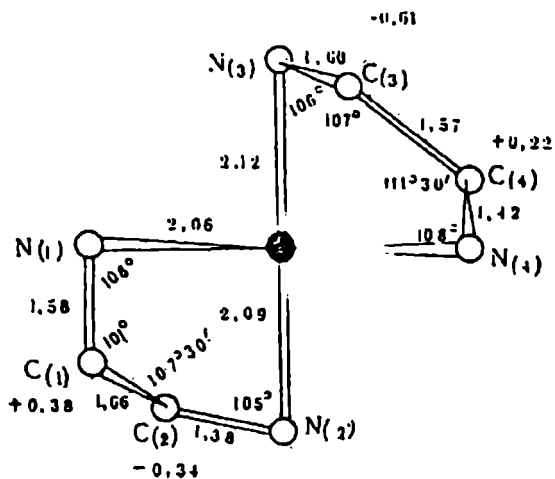
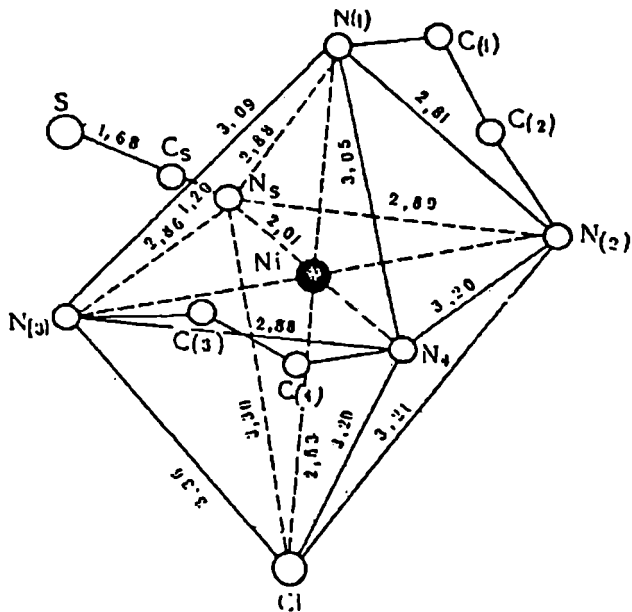
დ

სურ. 68. მაღალკოორდინაციული ზოგიერთი კომპლექსის აღნაგობა:

ა -  $NbI_4$ ; ბ -  $ZrF_4 \cdot 3H_2O$ ; გ -  $Ce(CH_3COCHCOCH_3)_4$ ;  
 დ -  $K_4[Th(SO_4)_4(H_2O)_2]$ .



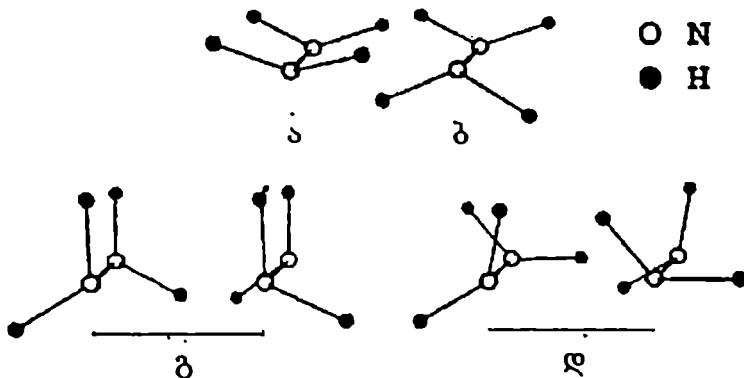
სურ. 69. კომპლექსის  $NiEn_2NO_2NCS$  სტრუქტურა და  $En$  მოლეკულების კონფიგურაცია.



სურ. 70. კომპლექსის  $NiEn_2NCSCI$  სტრუქტურა და  $En$  მოლეკულების კონფიგურაცია.

6. 2. მეთალების კოორდინაციული ნაერთები  
ჰიდრაზინკარბონმჟავასთან

ჰიდრაზინის მოლეკულა  $H_2N-NH_2$  შედგება აზოტის ატომებით ერთიმეორესთან დაკავშირებული ორი  $NH_2$  ჯგუფისაგან. ჰიდრაზინი შეიძლება განვიხილოთ, როგორც ამიაკის ნაწარმი, რომელშიც წყალბადის ერთი ატომი ჩანაცვლებულია  $NH_2$  ჯგუფით. რადგანაც ამიაკის მოლეკულა არ არის სიბრტყივი და აქვს პირამიდული აღნაგობა, მოსალოდნელია, რომ არც ჰიდრაზინის მოლეკულას ჰქონდეს სიბრტყივი აღნაგობა. გამომდინარე აქედან, მოსალოდნელი იყო ჰიდრაზინის მოლეკულის არსებობა რამდენიმე ბრუნვითი იზომერის სახით (სურ. 71), რომლებიც ერთი მეორისაგან უნდა განსხვავდებოდნენ  $NN$  ბმის ირგვლივ  $NH_2$  ჯგუფების ერთიმეორის მიმართ ბრუნვის  $\varphi$  კუთხის სიდიდით.



სურ. 71. ჰიდრაზინის მოლეკულის ბრუნვითი იზომერების შესაძლო კონფიგურაციები:

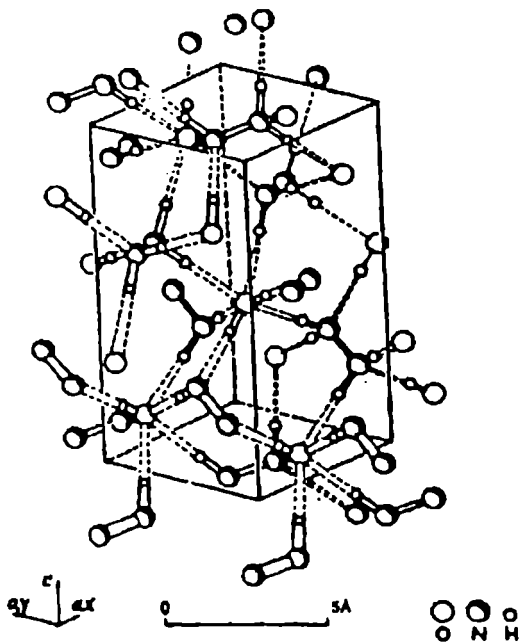
ა - ცის-იზომერი ( $\varphi=0^\circ$ ); ბ - ტრანს-იზომერი ( $\varphi=180^\circ$ );

გ - გოშ-იზომერი; დ - გოშ-იზომერი.

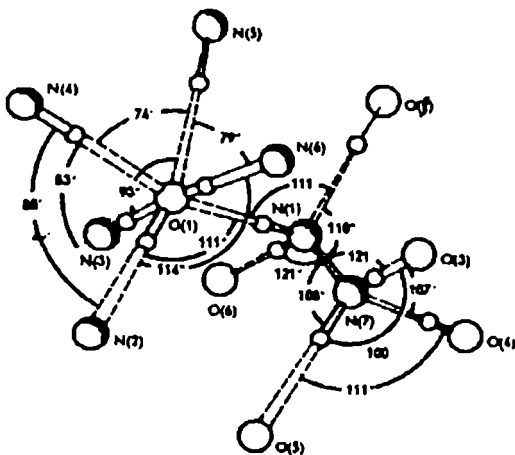
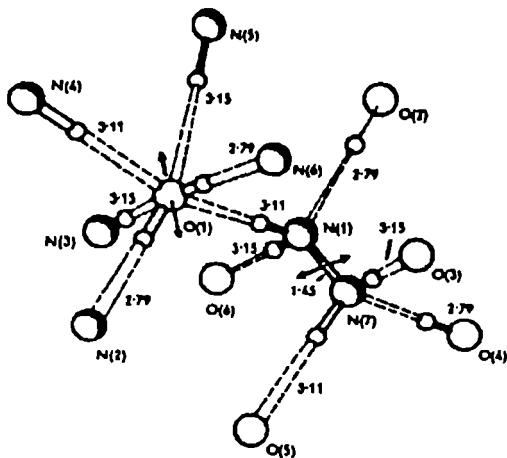
$\varphi$  - ცის-მდგომარეობიდან  $NN$  ბმის ირგვლივ ერთი  $NH_2$  ჯგუფის მეორის მიმართ შემობრუნების კუთხე.

მრავალი კვლევის შედეგად დადგენილი იქნა, რომ ენერგეტიკულად ყველაზე ხელსაყრელია გოშ-ფორმა, როდესაც  $\varphi=90-94^{\circ}$ . უფრო ზუსტად: ენერგეტიკულად ტრანს-იზომერი ნაკლებ მდგრადია, ვიდრე გოშ-იზომერი, ხოლო ცის-იზომერი ენერგეტიკულად კიდევ ნაკლებ ხელსაყრელია.

ჰიდრაზინ-ჰიდრატის  $N_2H_4 \cdot H_2O$  მოლეკულური კრისტალური სტრუქტურა შესწავლილი იყო  $-60$  და  $-165^{\circ}C$ -ზე. ჰიდრაზინ-ჰიდრატის კრისტალები ტრიგონალურია. კრისტალური სტრუქტურის ზოგადი მოტივი წარმოდგენილია სურ. 72, ხოლო სურ, 73 მოცემულია ატომთა შორის მანძილები ( $\text{Å}$ ) და ბმათა შორის კუთხეები (გრად.).



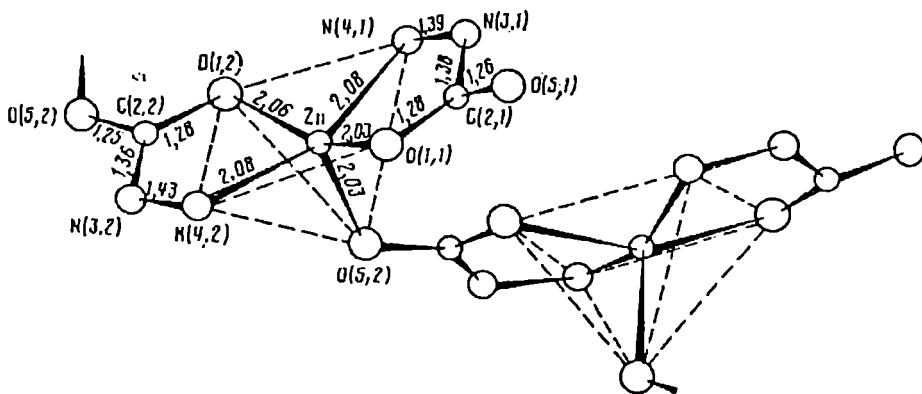
სურ. 72. ჰიდრაზინ-ჰიდრატის კრისტალური სტრუქტურა.



სურ. 73. კრისტალურ ჰიდრაზინ-ჰიდრატში  $N_2H_4 \cdot H_2O$  წყლისა და ჰიდრაზინის მოლეკულების უახლოესი გარემოცვის ატომთა შორის მანძილები ( $\text{Å}$ ) და ბმათა შორის კუთხეები (გრად.). ისრებით აღნიშნულია მე-2 რიგის ლერძები, გამავალი ჟანგბადის ატომზე  $O_1$  და  $NN$  ბმის შუაზე.

ჰიდრაზინკარბონმჟავა  $NH_2NHCOOH$  უმდგრადია თავისუფალ მდგომარეობაში, მაგრამ მდგრადია კოორდინაციული ნაერთების შედგენილობაში. მოცემული მჟავა მეტალთა კომპლექსებში ასრულებს მონოდენტატური, ციკლური, რიგ შემთხვევაში – ხიდური ლიგანდის ფუნქციას. რენტგენოსტრუქტურული მეთოდით შესწავლილია  $Mg$ ,  $Ca$ ,  $Zn$ ,  $Cd$ ,  $Mn$ ,  $Co$ ,  $Ni$  კოორდინაციული ნაერთები ჰიდრაზინკარბონმჟავასთან. ამ კომპლექსების კრისტალოგრაფიული მონაცემები წარმოდგენილია ცხრილში 2.

თუთიის ატომის საკოორდინაციო რიცხვი, როგორც აღინიშნა 4 ან 6 და შესაბამისად კოორდინაციული პოლიედრი წარმოადგენს ტეტრაედრს ან ოქტაედრს. თუმცა, უჩვეულო საკოორდინაციო რიცხვი 5 რეალიზდება თუთიის ზოგიერთ კომპლექსშიც. ასე, მაგალითად, კომპლექსის  $Zn(NH_2NHCOO)_2$ , კრისტალების რენტგენოსტრუქტურული კვლევით ერთმნიშვნელოვნადაა დადგენილი, რომ ამ ნაერთში თუთიის ცენტრალური ატომი ხუთკოორდინაციულია (სურ. 74).



სურ. 74. კომპლექსის  $Zn(NH_2NHCOO)_2$  სტრუქტურა.



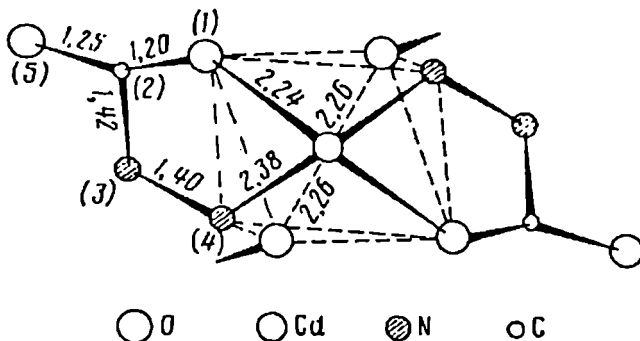
ჰიდრაზინკარბონფუკასთან მეტალების კომპლექსების კრისტალოგრაფიული მონაცემები

ნაერთი	A			ბრად.		Z	სივრც. ჯგ.	V, Å <sup>3</sup>	d - გ/სმ <sup>3</sup>		
	a	b	c	α	β				γ	გმო თეულ.	ქსკ.
Zn(N <sub>2</sub> H <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (NH <sub>2</sub> NHCOO) <sub>2</sub>	8.41	7.38	9.58		125.45		2	P2 <sub>1</sub> /c	483	1.936	1.926
Zn(NH <sub>2</sub> NHCOO) <sub>2</sub>	6.87	5.08	9.10		111.20		2	Pc	296.5	2.41	2.38
Cd(NH <sub>2</sub> NHCOO) <sub>2</sub>	5.37	9.12	6.44				2	P2 <sub>1</sub> ·2 <sub>1</sub> ·2	315.6	2.761	2.745
Cd(NH <sub>2</sub> NHCOO) <sub>2</sub> · H <sub>2</sub> O	7.40	12.36	7.83				4	Pbcn	716.2	2.60	2.63
Mg(NH <sub>2</sub> NHCOO) <sub>2</sub> · 2H <sub>2</sub> O	7.78	9.60	11.03				4	Pbcm	824	1.691	1.690
Ca(NH <sub>2</sub> NHCOO) <sub>2</sub> · H <sub>2</sub> O	7.67	7.87	6.37	99.77	90.15	105.99	2	P1	356.8	1.937	1.920
Mn(N <sub>2</sub> H <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (NH <sub>2</sub> NHCOO) <sub>2</sub>	8.22	7.45	8.57		110.56		2	P2 <sub>1</sub> /c	495	1.819	1.80
Mn(NH <sub>2</sub> NHCOO) <sub>2</sub> · 2H <sub>2</sub> O	11.05	9.86	7.85				4	Pba 2	855.3	1.872	1.893
Co(N <sub>2</sub> H <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (NH <sub>2</sub> NHCOO) <sub>2</sub>	9.55	7.32	8.11		122.38		2	P2 <sub>1</sub> /a	489	1.868	1.872
Ni(NH <sub>2</sub> NHCOO) <sub>2</sub> · H <sub>2</sub> O	11.78	6.95	10.54		111.55		4	C2/c	802.3	2.026	2.038
Σ Ni <sub>2</sub> H <sub>5</sub> [Ni(NH <sub>2</sub> NHCOO) <sub>3</sub> ]	12.13	10.86	10.26		121.1		4	Cc	1156	1.889	1.868

კომპლექსის  $Zn(NH_2NHCOO)_2$  კრისტალებში ხორციელდება ტეტრაგონალურ-პირამიდული კოორდინაცია. ბაზისურ სიბრტყეში მდებარე თუთიის ცენტრალური ატომი გარშემორტყმულია ჟანგბადისა და აზოტის ორ-ორი ატომით, რომლებიც მიეკუთვნებიან ხელატწარმომქმნელ ორ  $NH_2NHCOO^-$  ანიონს. მეხუთე საკოორდინაციო ადგილი პირამიდის წვეროში უკავია კომპლექსის მეზობელი მოლეკულის ჟანგბადატომს (სურ. 74), რის საფუძველზეც ადგილი აქვს [0 01] სიბრტყის პარალელური კომპლექსების ჯაჭვის წარმოქმნას. ციკლწარმომქმნელი ორი სხვადასხვა ანიონის აზოტისა და ჟანგბადის ატომები მდებარეობენ ერთიმეორის მიმართ ტრანს-მდგომარეობაში. თუთიის ატომი გამოდის (გადახრილია) ბაზისური

სიბრტყიდან 0,47 Å-ით ჟანგბადის აპიკალური ატომის მიმართულებით.

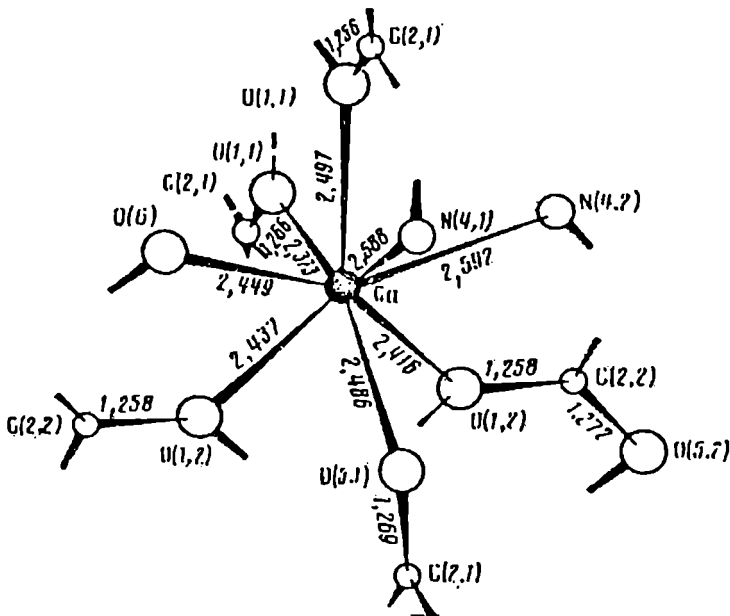
კომპლექსის  $Cd(NH_2NHCOO)_2$  კრისტალურ სტრუქტურაში ცენტრალური ატომის პოლიედრი წარმოადგენს ოქტაედრს, რომლის ოთხი წვერო დაკავებულია ხელატური  $NH_2NHCOO^-$  ჟანგბადის ორი და აზოტის ორი დონორული ატომით; ოქტაედრის დარჩენილ ორ წვეროში კი განლაგებულია მეზობელი ორი კომპლექსური მოლეკულის თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ჟანგბადატომები (სურ. 75). კომპლექსი მიეკუთვნება ცცტ-ტიპს (ც-ცის, ტ - ტრანს). ერთიმეორესთან ცის- მდგომარეობაშია ხელატური  $NH_2NHCOO^-$  ანიონების აზოტის ატომები და მეზობელი მოლეკულების ჟანგბადატომები შესაბამისად. ხელატური ანიონის ჟანგბადატომები მდებარეობენ ერთი-მეორის მიმართ ტრანს-მდგომარეობაში. მაშასადამე, მოცემულ კომპლექსში  $NH_2NHCOO^-$  ერთდროულად ასრულებს ციკლურ-ბიდენტატური და ხიდური ლიგანდის ფუნქციას.



სურ. 75. კომპლექსის  $Cd(NH_2NHCOO)_2$  სტრუქტურა.

$NH_2NHCOO^-$  ანალოგიური ფუნქცია (ხელატური და ხიდური) რეგისტრირებულია კომპლექსის  $Ca(NH_2NHCOO)_2 \cdot H_2O$  კრისტალების რენტგენოსტრუქტურული კვლევისას. კალციუმის ცენტრალური ატომის პოლიედრი წარმოადგენს პენტაგონალურ ბიპირამიდას, საკოორდინაციო რიცხვი კი არის 8 (სურ. 76).

კოორდინაციული ნაერთის  $Mn(NH_2NHCOO)_2 \cdot (H_2O)_2$  კრისტალები აგებულია (სურ. 77) ოქტაედრული აღნაგობის მქონე ორი, C და D ტიპის მოლეკულებისაგან. C ტიპის მოლეკულაში ოქტაედრის ოთხი წვერო დაკავებულია ორი ხელატური ანიონის აზოტისა და ჟანგბადის ატომებით, ხოლო ორი – მეზობელი მანგანუმის ატომების მიერ კოორდინირებული  $NH_2NHCOO^-$  ჟანგბადის ატომებით. D ტიპის მოლეკულაში ოქტაედრის ორი წვერო უკავია კოორდინირებული წყლის მოლეკულებს, ხოლო ოთხი – ასევე ციკლურ-ხიდური ფუნქციის მატარებელი  $NH_2NHCOO^-$  აზოტისა და ჟანგბადის ატომებს. ამასთან, ნაერთში არსებული წყლის ნაწილი წარმოადგენს კრისტალიზაციურს (სურ. 77, ბ). სტრუქტურაში ხორციელდება წყალბადური ბმები.



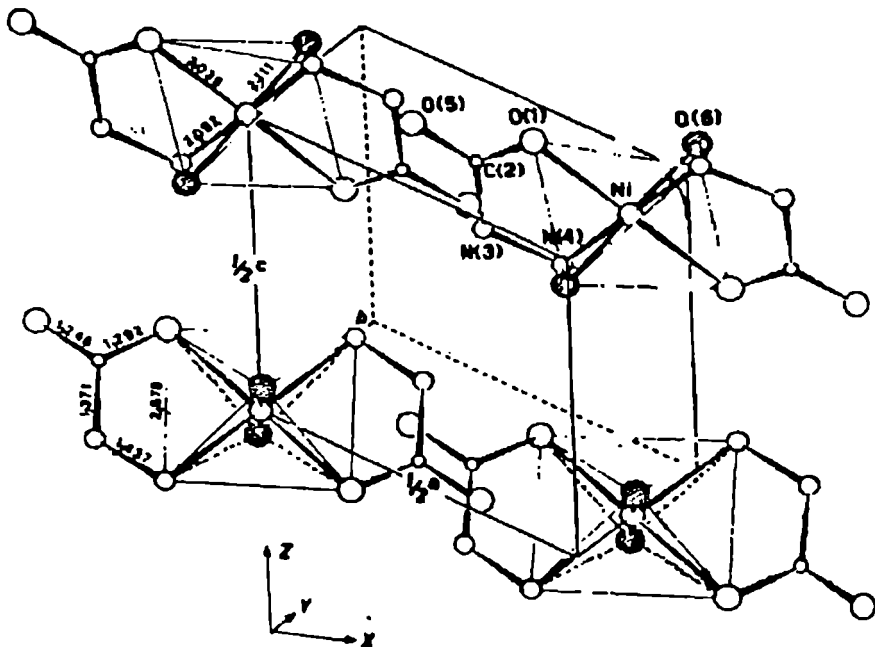
სურ. 76. კომპლექსის  $Ca(NH_2NHCOO)_2 \cdot H_2O$  სტრუქტურა.

ნიკელის ცენტრალური ატომის პოლიედრი კომპლექსში  $Ni(NH_2NHCOO)_2 (H_2O)_2$  წარმოადგენს ასევე ოქტაედრს, რომელიც განეკუთვნება ტეტ ტიპს (ტ-ტრანს), ანუ  $NH_2NHCOO^-$  ხელატური იონების აზოტისა და ჟანგბადის ატომები, ასევე კოორდინირებული წყლის მოლეკულების ჟანგბდატომები მდებარეობენ ერთი-მეორის მიმართ ტრანს-მდგომარეობაში შესაბამისად (სურ. 78). ამ სტრუქტურაშიც ადგილი აქვს საკმარისად ძლიერი

წყალბადური ბმების არსებობას ( $\sim 2,68 \text{ \AA}$ ).

კომპლექსის  $(N_2H_5)[Ni(NH_2NHCOO)_3] \cdot H_2O$  კრისტალები აგებულია კომპლექსური ანიონების  $[Ni(NH_2NHCOO)_3]^-$ , კათიონების  $(N_2H_5)^+$  და საკრისტალიზაციო წყლის მოლეკულებისაგან (სურ. 79). ნიკელის

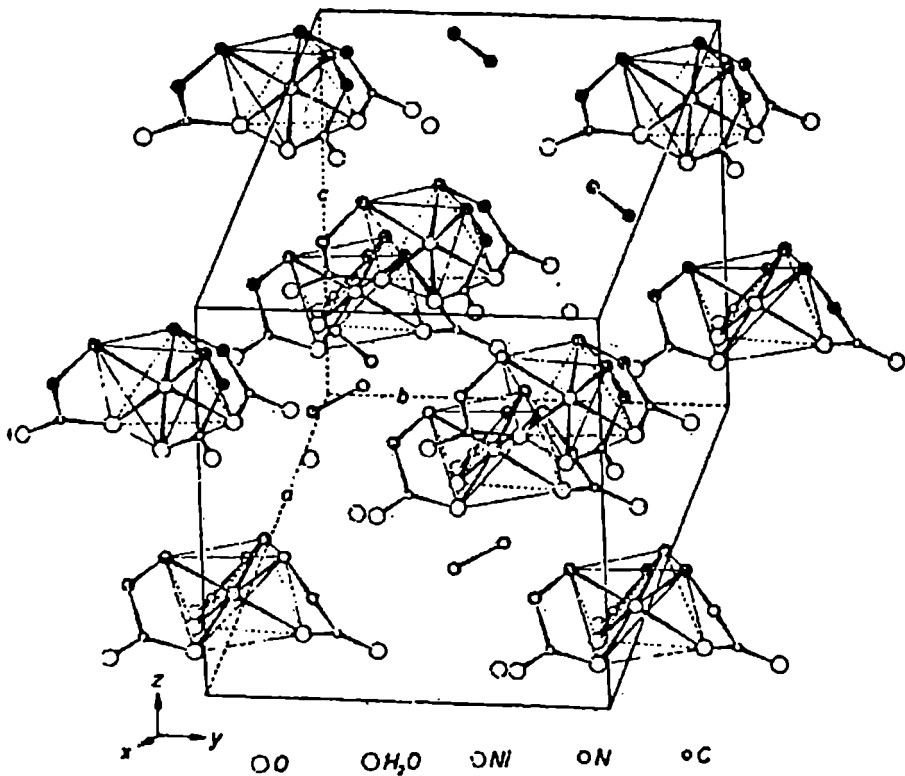




სურ. 78. კომპლექსის  $Ni(NH_2NHCOO)_2(H_2O)_2$  კრისტალური სტრუქტურა.

ცენტრალური ატომის კოორდინაციული პოლიედრი გამრუდებული ოქტაედრია.

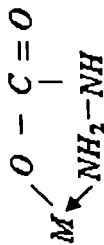
სამი ხელატური ანიონის  $NH_2NHCOO^-$  აზოტისა და უანგბადის ატომები, განლაგებული ოქტაედრის წვეროებში, მდებარეობენ ერთი-მეორის მიმართ ცის-მდგომარეობაში (ცცც ტიპის ოქტაედრი; ც - ცის). სამივე მეტალოციკლი ეკვივალენტურია. კრისტალებში ხორციელდება წყალბადური ბმების რთული სისტემა, რომელთა წარმოქმნაშიც მონაწილეობენ კომპლექსური ანიონების, ჰიდრაზონიუმის ანიონების და საკრისტალიზაციო წყლის მოლეკულების დონორული და აქცეპტორული ატომები.



სურ. 79. კომპლექსის  
 $(N_2H_5)[Ni(NH_2NHCOO)_3] \cdot H_2O$  კრისტალური  
 სტრუქტურა.

ზემოთ განხილულ სტრუქტურებში მონახულ ზო-  
 გიერთ ბმათა სიგრძეები და ბმათაშორისი კუთხეები წარ-  
 მოდგენილია ცხრილში 3.

ატომთა შორის მანძილები (Å) და ბმათა შორისი კუთხეები (გრად.) მეტალოციკლებში  
(H ატომების გარეშე)



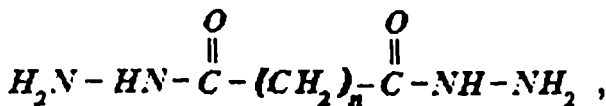
	M-O	M-N	C-O	C-N	N-N	O-M-N	M-O-C	M-N-N	O-C-N	C-N-N
$\text{Zn}(\text{N}_2\text{H}_4)_2(\text{NH}_2\text{NHCOO})_2$	2.05	2.25	1.30	1.39	1.39	77.8	115.9	103.6	117.4	120.3
$\text{Zn}(\text{NH}_2\text{NHCOO})_2$	2.03 2.06	2.08	1.28	1.36 1.38	1.39 1.43					
$\text{Cd}(\text{NH}_2\text{NHCOO})_2$	2.24	2.38	1.20	1.42	1.40	88.3	122.3	109.8	116.1	118.6
$\text{Cd}(\text{NH}_2\text{NHCOO})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	2.34	2.40	1.28	1.37	1.41	68.5	116.0	105.8	116.9	120.3
$\text{Ca}(\text{NH}_2\text{NHCOO})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	2.50	2.58	1.27	1.35	1.43	64.1	123.1	112.6	118.3	121.1
$\text{Mn}(\text{NH}_2\text{NHCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	2.42	2.59	1.26	1.36	1.42	63.7	123.6	112.4	118.2	118.5
$\text{Ni}(\text{NH}_2\text{NHCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	2.14 2.15	2.21 2.19	1.32 1.31	1.45 1.36	1.37 1.44	75.6 75.2	119.2 118.9	111.4 109.9	113.6 114.4	120.1 120.7
$\text{Ni}(\text{NH}_2\text{NHCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	2.04	2.09	1.29	1.37	1.44	80.3	113.9	105.7	118.1	118.0
$(\text{N}_2\text{H}_5)[\text{Ni}(\text{NH}_2\text{NHCOO})_3] \cdot \text{H}_2\text{O}$	2.04 2.07 2.07	2.11 2.11 2.11	1.27 1.25 1.34	1.40 1.42 1.37	1.44 1.42 1.42	80.24 79.19 80.60	117.62 116.38 112.13	105.21 109.12 107.07	118.11 118.29 122.50	120.76 116.65 120.40



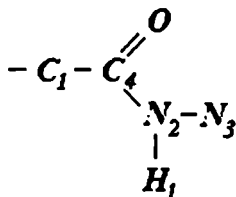
### 6.3. მეტალების ჰიდრაზიდოკომპლექსები

თუ ჰიდრაზინის მოლეკულაში  $NH_2 - NH_2$  წყალბადის ატომს ჩაენაცვლებთ აცილის რადიკალით, წარმოიქმნება პირველადი ჰიდრაზიდი, რომელსაც შეესაბამება ფორმულა  $R - CONHNH_2$ , სადაც  $R$  - ნახშირწყალბადის რადიკალია. წყალბადის ორი ატომის ჩანაცვლებას აზოტის სხვადასხვა ატომთან აცილის რადიკალებით მიეყვება მეორადი ჰიდრაზიდების  $R - CONHNOC - R$  წარმოქმნამდე. ორფუძიან კარბონმჟავებს შეესაბამება დიჰიდრაზიდები  $H_2NHNOC - (CH_2)_n - CONHNH_2$ .

პირველადი, მეორადი და დიჰიდრაზიდების კრისტალების რენტგენოსტრუქტურული კვლევების საფუძველზე დადგენილია, რომ მათი მოლეკულები არსებობენ ამიდურ ფორმაში



თუმცა  $CN$  და  $NN$  ბმების სიგრძეები ორდინარული ბმების სიგრძეებზე ნაკლებია. დადგენილია ასევე, რომ ფრაგმენტს



აქვს სხორტყვივი კონფიგურაცია. ატომები  $C_4$ ,  $N_3$ ,  $H_1$  გამოდიან შესაბამისად 0,09, 0,06 და 0,05  $\text{\AA}$ -ით სიბრტყიდან, რომელშიც მდებარეობენ ატომები  $O$ ,  $C_1$ ,  $N_2$ . ჯგუფს  $NNH_2$  აქვს პირამიდული აღნაგობა. სამივე აღნიშნული ტიპის ჰიდრაზიდების კრისტალებში ხორციელდება წყალბადური ბმების რთული სისტემა.

მეტალთა კოორდინაციული ნაერთები ჰიდრაზიდებთან წარმოადგენს კომპლექსნაერთთა ერთ-ერთ საინტერესო კლასს. სპექტროქიმიური და რენტგენოსტრუქტურული კვლევების საფუძველზე დადგენილია ჰიდრაზიდოლიგანდების უნიკალური კომპლექსოქიმიური თვისებები. მაგალითად, კომპლექსწარმოქმნის რეაქციებში სარეაქციო არეს მჟავიანობისაგან დამოკიდებულებით მეორადი ჰიდრაზიდები, არომატულ მჟავათა პირველადი ჰიდრაზიდები მეტალთა კომპლექსებს წარმოქმნიან ორ სხვადასხვა ტაუტომერულ ფორმაში. ბევრი ჰიდრაზიდოკომპლექსი წარმოადგენს ბიოლოგიურად აქტიურ ნივთიერებას და გამოიყენება სხვადასხვა სფეროში.

რენტგენოსტრუქტურული მეთოდით ამჟამად შესწავლილია რამდენიმე ათეული ნაერთის კრისტალის მოლეკულური და კრისტალური სტრუქტურა, რომელთა კრისტალოგრაფიული მონაცემები წარმოდგენილია ცხრილში 4, ხოლო ქვემოთ მოკლედ აღწერილია ზოგიერთი მათგანის სტრუქტურა.

$[Zn(C_6H_5CONHNH_2)_2(NO_2)_2]$ . ცნობილია, რომ კომპლექსებში თუთიის ცენტრალური ატომის ირგვლივ ბმების განლაგება არის ოქტაედრული ან ტეტრაედრული. ოქტაედრული კოორდინაცია ხორციელდება თუთიის ჰიდრაზიდოკომპლექსებშიც. ბენზოილჰიდრაზინთან თუთიის ნიტრიტის კომპლექსის რენტგენოსტრუქტურული და რხევითი სპექტრისკოპიული მეთოდებით შესწავლისას ერთმნიშვნელოვნად იქნა დადგენილი, რომ თუთიის აღნიშნულ კომპლექსს აქვს სრულიად განსხვავებული აღნაგობა.

კომპლექსის  $Zn(C_6H_5CONHNH_2)_2(NO_2)_2$  კრისტალებში თუთიის ცენტრალური ატომის პოლიედრი წარმოადგენს გამრუდებულ ორქუდიან ტრიგონალურ პრიზმას. ბენზოილჰიდრაზინის მოლეკულები დაკავშირებულია თუთიის ატომთან ციკლურ-ბიდენტატურად, პირველადი ამინოჯგუფის აზოტის ატომის და კარბონილის ჯგუფის უანგბადატომის საშუალებით (სურ. 80). ორივე  $NO_2^-$  ჯგუფი ასრულებს ციკლურ ფუნქციას (ბმა უანგბადის ორივე ატომის მეშვეობით). თუთიის ატომის მიერ კოორდინირებულია უანგბადის ექვსი ატომი, ოთხი მიეკუთვნება ციკლურ-ბიდენტატურ  $NO_2^-$  ჯგუფებს, ხოლო ორი – ბენზოილჰიდრაზინის ბიდენტატურ მოლეკულებს და ბენზოილჰიდრაზინის პირველადი ამინოჯგუფის აზოტის ორი ატომი. თუთიის პოლიედრში მანძილები

$Zn - Lig$  აშკარად დაგრძელებულია:  $Zn - O$  2,32–2,54 Å,

$Zn - N$  2,38–2,40 Å, რაც შეიძლება აიხსნას თუთიის მაღალი საკოორდინაციო რიცხვით და ნაწილობრივ ბმების კოვალენტურობის ხარისხის შემცირებით, განსაკუთრებით ნიტრიჯგუფების უანგბადტომებისათვის. ოთხწევრიან მეტალოციკლებში სავალენტო კუთხეები თუთიის ატომთან (51,0 და 51,7°) მნიშვნელოვნად შემცირებულია ხუთწევრიანი მეტალოციკლების შემთხვევაში მეტალის ცენტრალურ ატომთან (65,2 და 66,2°) შედარებით. კრისტალებში მოლეკულების შეკრვის წესი და მოლეკულათაშორისი კონტაქტები ნაჩვენებია სურ. 80.

$Zn(H_3CCONHNH_2)_3S_2O_6 \cdot 2,5H_2O$ . კრისტალები

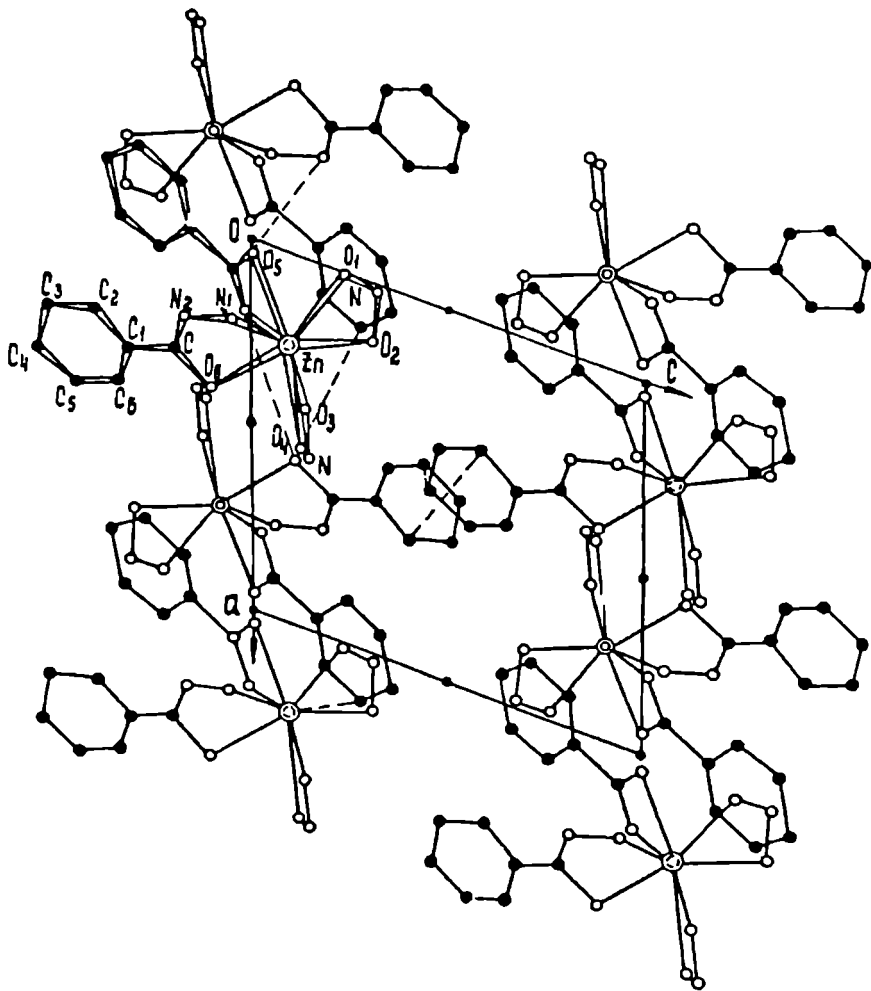
$Zn(AH)_3S_2O_6 \cdot 2,5H_2O$  ( $AH = H_3CCONHNH_2$ ) აგებულია დისკრეტული კომპლექსური კათიონების  $[Zn(AH)_3]^+$  ანიონების  $S_2O_6^{2-}$  და საკრისტალიზაციო წყლის მოლეკულებისაგან. თუთიის ატომის კოორდინაციული პოლიედრი უმნიშვნელოდ გამრუდებული ოქტაედრია. აცეტილჰიდრაზინის „მოლეკულები“ ასრულებენ ციკლურ-ბიდენტატურ

მეტალების ჰიდრაზიდოკომპლექსების კრისტალოგრაფიული მონაცემები

კომპლექსი	A				გრად.			სივრც. ჯგ	Z	V, Å <sup>3</sup>	d . გ/სმ <sup>3</sup>	
	a	b	c	α	β	γ	კომ				მოც	
												კმ.
$Cu(BH)_2Cl_2 \cdot 3CuCl$	9.289	18.165	28.656						8		2.18	2.17
$Zn(m - NBH)_2(NCS)_2$	10.02	13.76	7.90							10739	1.68	1.69
$Zn(BH)_2(NO_2)_2$	8.86	9.97	12.11	70.90	69.01	69.77			2			
$Zn(AH)_3S_2O_6 \cdot 2.5H_2O$	9.140	10.278	20.834	83.50	81.51	93.67			4	1916.7	1.706	
$Zn(DM)SO_4 \cdot 3H_2O$	11.63	11.72	11.89			130.5			4			
$Cd(FH)(NCS)_2$	17.58	17.12	8.96								1.90	
$Cd(BH)(NCS)_2 \cdot H_2O$	7.883	13.258	12.213						4	1277.9	1.71	
$Cd(BH)_2(HCOO)_2$	10.182	7.534	7.845			108			2	935.5		
$Cd(BH)_2(SCN)(NCS)$	18.501	23.282	9.381			103.41			4	2013.3	1.51	
$Cd(AH)(NCS)_2 \cdot H_2O$	11.301	12.903	6.787			99.08			4	879.1	1.56	
$Hg(BH)_2Cl_2$	21.34	9.88	8.53						4	798.5	2.02	2.254
$Mn(NH)_2Cl_2$	16.960	14.124	6.664						4	1577	1.685	1.681
$[Mn_2(INH)_3Cl(H_2O)_3]Cl_3$	10.572	12.125	14.411	90.22	109.41	104.75			2	1678.9	1.99	1.81
$Mn(DM)_2SO_4 \cdot H_2O$	11.582	19.306	8.142						4	1820.7		

ცხრილი 4 (გაგრძელება)

კომპლექსი	λ			ღრად.			სივრც. ჯგ.	Z	V, Å <sup>3</sup>	d. გ/სმ <sup>3</sup>	
	a	b	c	α	β	γ				გამოთვლ.	ექსპ.
$Mn(DM)_2(NCS)_2$	14.70	7.19	16.03				<i>Jba2</i>	4			
$Mn(DM)_2(ClO_4)_2$	17.26	6.96	14.87				<i>J222</i>	4			
$Mn(AH)_2(NCS)_2 \cdot H_2O$	19.409	10.499	13.869				<i>Pbcn</i>	8	2832.8	1.52	
$Mn(BH)_2(NCS)_2$	13.897	10.704	13.685			101.06	$P2_1/n$	4	1999.7	1.58	
$Fe(DM)(NCS)_2 \cdot H_2O$	10.71	8.48	7.67	76.25	101.62	73.08	<i>P1</i>	2			
$Fe(DM)SO_4 \cdot 3H_2O$	11.53	9.78	11.79			116.96	$P2_1/a$	4			
$Co(FH)_2(NCS)_2$	7.890	6.854	10.051		95.36		$P2_1/c$	2	541.2	1.812	
$Co(NCAH)_2(NCS)_2$	8.240	23.453	8.623		116.28		$P2_1/n$	4	1494.4	1.859	
$Co(PH)_2(NCS)_2$	39.619	10.102	7.851				$Pca2_1$	8	3142	1.485	
$Co(BIH)_2(NCS)_2 \cdot H_2O$	13.274	13.080	10.216		99.71		<i>J2/c</i>	4	1750	1.440	
$Co(OBH)_2(NCS)_2 \cdot H_2O$	7.706	8.318	9.578	101.47	107.23	108.01	<i>P1</i>	1	528.3	1.608	
$Sm(INH)_3(NO_3)_3 \cdot 3H_2O$	11.805	16.050	16.058	99.22	109.41	104.75	<i>P1</i>	2	1678.9	1.69	1.61
$Dy(AH)_3Cl_3 \cdot 3H_2O$	9.841			97.72			<i>R3</i>	2			
$Er(AH)_4(NO_3)_3 \cdot H_2O$	16.479	9.122	31.750				<i>Pbcn</i>	8			



სურ. 80. კომპლექსის  $[Zn(C_6H_5CONHNH_2)_2(NO_2)_2]$   
სტრუქტურის პროექცია OXY სიბრტყეზე.

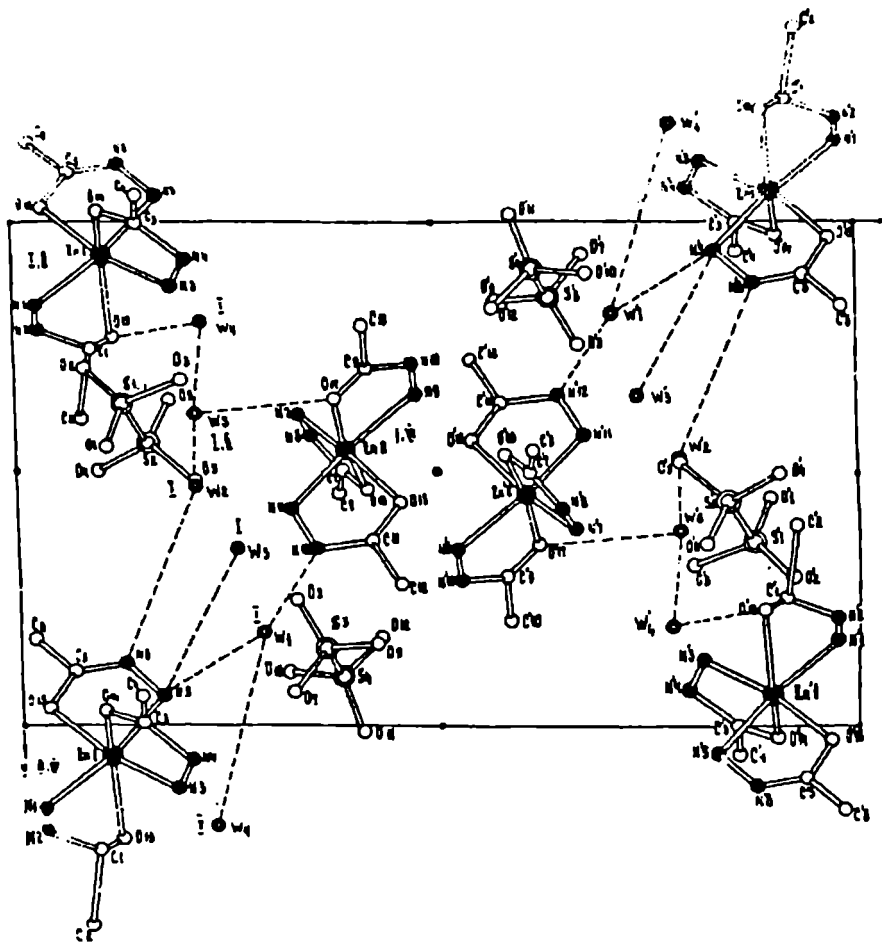
ფუნქციას, უკავშირდებიან რა ცენტრალურ ატომს პირველადი ამინოჯგუფის აზოტის ატომის და კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადატომის საშუალებით (ბენზოილპიდრაზინის მოლეკულის ანალოგიურად, იხ. ზემოთ). იონები  $S_2O_6^{2-}$  და წყლის მოლეკულები გარესფერულია (სურ. 81).

ტრიკლინური ცხაურის ელემენტარულ უჯრედში შედის ოთხი ფორმულური ერთეული. შესაბამისად, უჯრედის დამოუკიდებელი ნაწილი (ნახევარი) შეიცავს ორ სხვადასხვა კათიონს -  $[Zn(1)(AH)_3]^+$  და  $[Zn(2)(AH)_3]^+$ , ორ სხვადასხვა ანიონს -  $S_{2(1-2)}O_6^{2-}$  და  $S_{2(3-4)}O_6^{2-}$ , საკრისტალიზაციო წყლის ხუთ მოლეკულას. ამასთან, როგორც ორივე დამოუკიდებელი კათიონი, ასევე ორივე დამოუკიდებელი ანიონი დიდად არ განსხვავდებიან თავისი აღნაგობით (სურ. 82). ატომთა შორის მანძილები და დონორული ატომები, რომლებიც მდებარეობენ ეკვატორიალურ სიბრტყესა და აქსიალურ ღერძებზე ნაჩვენებია სურ. 82.

დიტიონატიონებში  $S_2O_6^{2-}$  გოგირდის თითოეული ატომის ირგვლივ ბმების განლაგება არის ტეტრაედრული. ტეტრაედრის სამი წვერო დაკავებულია ჟანგბადის სამი ატომით, ხოლო მეოთხე - გოგირდის მეორე ატომით. S-S და S-O საშუალო მანძილებია 2,123 და 1,443 Å შესაბამისად.

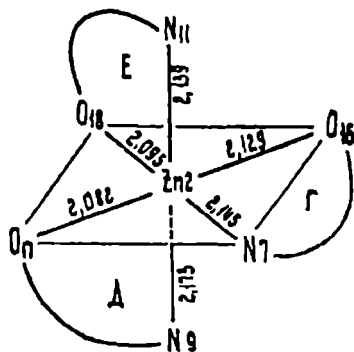
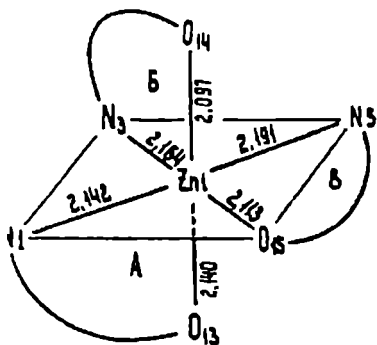


კრისტალებს აქვთ ჯაჭვური აღნაგობა, ხოლო კომპლექსს - ცის-ოქტაედრული (სურ. 83). მალონმჟეავას დიპიდრაზინი ასრულებს ხიდური ბის-ბიდენტატური ლიგანდის ფუნქციას, წარმოქმნის რა თუთიის სხვადასხვა ატომთან ხუთწევრიან მეტალოციკლებს. ოქტაედრის დარჩენილი ორი წვერო უკავია კოორდინირებული წყლის ორ მოლეკულას. კომპლექსების ჯაჭვი სტრუქტურაში განლაგებულია ფენებად 001 სიბრტყის პარალელურად (სურ. 83).



სურ. 81. YZ სიბრტყის კოორდინატებზე  
 $[Zn(CH_3CONHNH_2)_3]S_2O_6 \cdot 2,5H_2O$  სტრუქტურის  
 პროექცია.



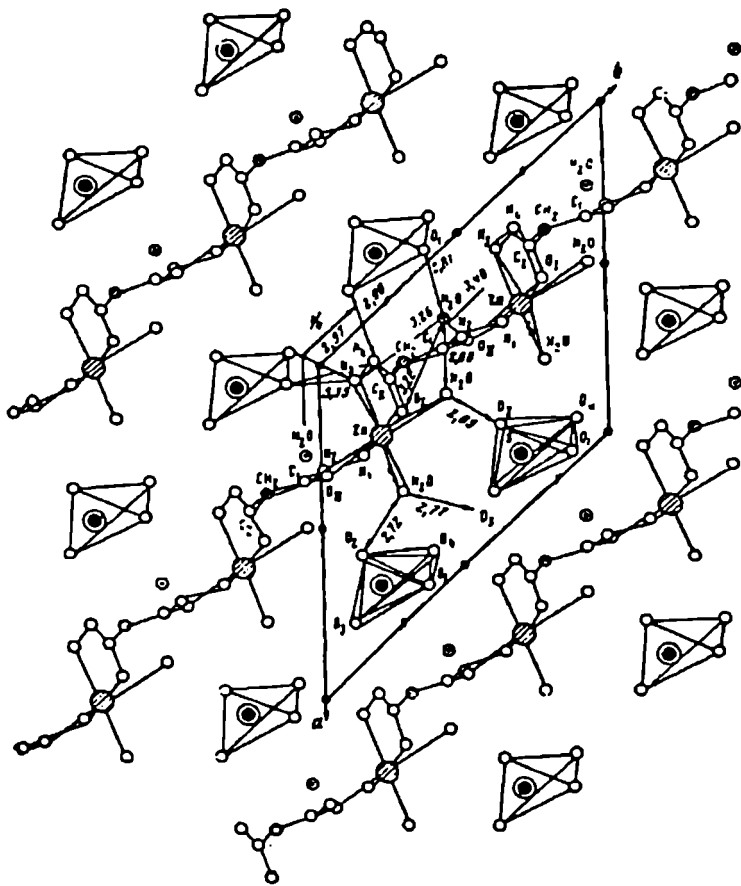


სურ. 82. Zn(1) და Zn(2) პოლიედრების სქემები.

გარესფერული წყლის მოლეკულები წარმოქმნიან მრავალ კონტაქტს ერთის მხრივ პოლიმერულ კათიონებთან  $[Zn(DM)(H_2O)_2]^{2+}$ , ხოლო მეორეს მხრივ – სულფატ-იონებთან. თუთიის კოორდინაციული პოლიედრი მნიშვნელოვნად გამრუდებული ოქტაედრია. ოქტაედრის ოთხ წვეროში განლაგებულია ოთხი უანგბადატომი (ორი ორგანული ლიგანდების, ორი კოორდინირებული წყლის მოლეკულების), ხოლო ორი წვერო კი უკავია ლიგანდის აზოტის ატომებს, რომლებიც ერთი-მეორის მიმართ მდებარეობენ ცის-მდგომარეობაში.  $Zn-O$ ,  $Zn-N$  ბმათა სიგრძეები ცდომილების ფარგლებშია.  $SO_4^{2-}$  ჯგუფს, როგორც მოსალოდნელი იყო აქვს ტეტრაედრული აღნაგობა.

S-O ზმის საშუალო სიგრძე შეადგენს  $1,53 \text{ \AA}$ .

$\{[Mn(H_2NHNOCCH_2CONHNH_2)_2]SO_4 \cdot 4H_2O\}_n$ . კომპლექსის კრისტალების ორ პოლიმერულ მოდიფიკაციას აქვს ანალოგიური სტრუქტურული სახე. მაღონპიდრაზიდის მოლეკულები ასრულებენ ხიდური ბის-ბიდენტატური ლიგანდის ფუნქციას, უკავშირდებიან რა მანგანუმის



სურ. 83.  $XYO$  სიბრტყეზე კომპლექსის  $\{Zn(H_2NHNOCCH_2CONHNH_2)\}SO_4 \cdot H_2O\}_n$  სტრუქტურის პროექცია.

ცენტრალურ ატომს ორივე მოდიფიკაციაში კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადატომისა და  $NH_2$  ჯგუფის აზოტის ატომის საშუალებით. მოდიფიკაციებს შორის სხვაობას განაპირობებს ჯაჭვში მეტალის ატომების შეერთებაში ორგანული ლიგანდის მოლეკულების მიერ – პირველში ჯაჭვის წარმოქმნა, ხოლო მეორეში – ბადესი (სურ. 84).

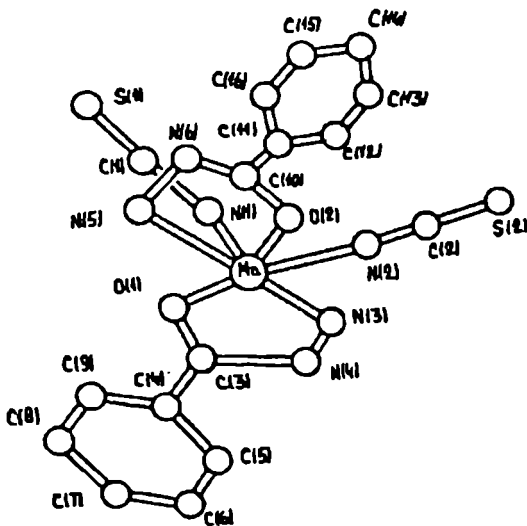
მანგანუმის ცენტრალური ატომის საკოორდინაციო რიცხვი უჩვეულოა მისთვის (6 ან 4) და შეადგენს 8-ს. კრისტალებში ხორციელდება მტკიცე წყალბადური ბმები, რომელთა წარმოქმნაშიც მონაწილეობენ  $Cl^-$ , საკრისტალური წყლის მოლეკულები და  $NH$ ,  $NH_2$  ჯგუფების წყალბადატომები.

$[Mn(C_6H_5CONHNH_2)_2(NCS)_2]$ . მანგანუმის ცენტრალური ატომის კოორდინაციული პოლიედრი წარმოადგენს ძლიერ გამრუდებულ ოქტაედრს, რაც განპირობებულია მეტალის ატომთან ორგანული ლიგანდების მიერ წარმოქმნილი ციკლების გამო, შესაბამისი კუთხის შემცირებით. ბენზოილჰიდრაზინის მოლეკულები ამ კომპლექსშიც ასრულებენ ციკლურ-ბიდენტატურ ფუნქციას (კოორდინაცია  $CO$  ჯგუფის ჟანგბადატომის და  $NH_2$  ჯგუფის აზოტის ატომის საშუალებით). ჯგუფები  $NCS^-$  უშუალოდაა დაკავშირებული ცენტრალურ ატომთან აზოტის ატომის მეშვეობით (სურ. 85).

ბმათა სიგრძეების საშუალო მნიშვნელობებია:  $Mn-O$  (1) 2,188,  $Mn-O$  (2) 2,205  $\text{Å}$ ;  $Mn-N$  (3) 2,355,  $M-N$  (5) 2,316  $\text{Å}$ .  $Mn-N$  (1) და  $Mn-N$  (2) პრაქტიკულად ხაზობრივი  $NCS^-$  ჯგუფების შემთხვევაში შესაბა-

მისად შეადგენს 2,157 და 2,125  $\text{Å}$ . კრისტალებში ხორციელდება წყალბადური ბმების რთული სისტემა, რომლის წარმოქმნაშიც მონაწილეობს პრაქტიკულად ყველა დონორული და აქცეპტორული ჯგუფები.





სურ. 85. კომპლექსის  $[Mn(C_6H_5CONHNH_2)_2(NCS)_2]$  სტრუქტურა.

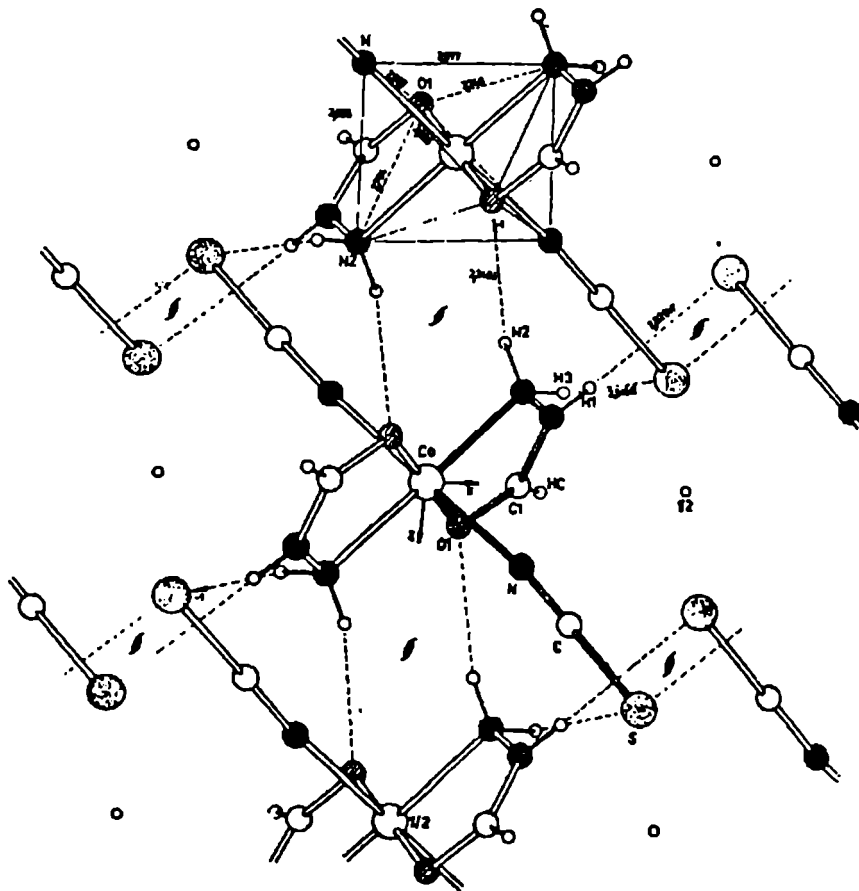
მეტალების ჰიდრაზიდოკომპლექსებიდან დღეისათვის რენტგენოსტრუქტურული მეთოდით გაცილებით სრულყოფილად არის შესწავლილი კობალტის(II) კომპლექსები. ამ კომპლექსების მაგალითზე პირველადაა შესწავლილი ჰიდრაზიდების მოლეკულების კოორდინაციის შემდეგ ჰიდრაზიდოჯგუფში ( $-CONHNH_2$ ) მიმდინარე ცვლილებები; ამ ჯგუფში ელექტრონული სიმკვრივის განაწილების ზოგიერთი ასპექტი. ჩატარებულია ბის-ბიდენტატური და ტრის-ბიდენტატური ოქტაედრული კომპლექსების სტერეოიზომერების კლასიფიკაცია.

$[Co(HCONHNH_2)_2(NCS)_2]$ . დისკრეტული მოლეკულები  $Co(HCONHNH_2)_2(NCS)_2$  განლაგებულია სტრუქტურაში სიმეტრიის ცენტრებში და დაკავშირებულია ერთიმეორესთან წყალბადური ბმების სისტემით (სურ. 86). კობალტის ცენტრალური ატომის კოორდინაციული

პოლიედრი წარმოქმნილია ფორმილჰიდრაზინის ციკლურ-ბიდენტატური ორი მოლეკულის აზოტისა და ჟანგბადის ატომებით და იზოთიოციანატოჯგუფების აზოტის ატომებით. მოცემული ოქტაედრი მიეკუთვნება ტრანს-ტიპს (ტტტ), ანუ დონორული ატომები  $O_{Co}$ ,  $N_{NH_2}$  და  $N_{NCS}$ -ნიყოფებიან ერთი-მეორის მიმართ ტრანს-მდგომარეობაში შესაბამისად. ოქტაედრის მნიშვნელოვანი გამრუდება ხდება მის ეკვატორიალურ სიბრტყეში შიდაციკლური კუთხის  $O(1)-Co-N(2)$   $77,87^\circ$ -მდე შემცირების გამო. კობალტ-ფორმილჰიდრაზინოციკლებს პრაქტიკულად სიბრტყივი აღნაგობა აქვს; კობალტის ატომი ამ სიბრტყიდან გამოდის  $0,045 \text{ \AA}$ -ით. დაახლოებით ხაზობრივი ჯგუფები  $NCS^-$  წარმოქმნიან ცენტრალურ ატომთან  $167,9^\circ$ -იან კუთხეს. სტრუქტურაში ხორციელდება სუსტი წყალბადური ბმები პროტონოდონორული  $NHNH_2$  ჯგუფების და მათი აქცეპტორების კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადატომის და  $NCS^-$  ჯგუფების გოგირდის ატომის მონაწილეობით.

$[Co(NCCH_2CONHNH_2)_2(NCS)_2]$ . კრისტალები აგებულია ასეთი შედგენილობის მქონე იზოლირებული მოლეკულებისაგან, რომლებიც ერთი-მეორესთან დაკავშირებულია წყალბადური ბმებით. წყალბადური ბმების წარმოქმნაში მონაწილეობას იღებენ ჰიდრაზიდოჯგუფის პროტონოდონორული  $NH$  და  $NH_2$  და მათი აქცეპტორები  $CO$  ჯგუფის ჟანგბადატომი,  $NCS^-$  ჯგუფის გოგირდის ატომი და ციანაცეტილჰიდრაზინის მოლეკულის აზოტის ატომი.

კობალტის ატომის პოლიედრი – ოქტაედრია, რომლის ოთხი წვერო დაკავებულია ციანაცეტილჰიდრაზინის მოლეკულების აზოტის და ჟანგბადის ორ-ორი ატომით, ხოლო ორი – იზოთიოციანატოჯგუფების აზოტის ატომებით. მოცემული ოქტაედრი მიეკუთვნება ცის-ტიპს (ცცც),



სურ. 86.  $[Co(HCONHNH_2)_2(NCS)_2]$  სტრუქტურის  
პროექცია  $XOY$  სიბრტყეზე.

ანუ ერთსახელოვანი დონორული ატომები  $O_{CO}$ ,  $N_{NH_2}$  და  $N_{NCS}$ - მდებარეობენ ერთიმეორის მიმართ ცის-მდგომარეობაში შესაბამისად (სურ. 87). შიდაციკლური კუთხეების  $O(1)-Co-N(2)$   $75,50^\circ$ -მდე შემცირების გამო ოქტაედრი შესამჩნევად გამრუდებულია. მოცემული სტრუქტურის განსაკუთრებულობას წარმოადგენს ბმების  $Co-O(1)$  და  $Co-N(2)$  სიგრძეების შებრუნებული რიგი. პირველ მეტა-

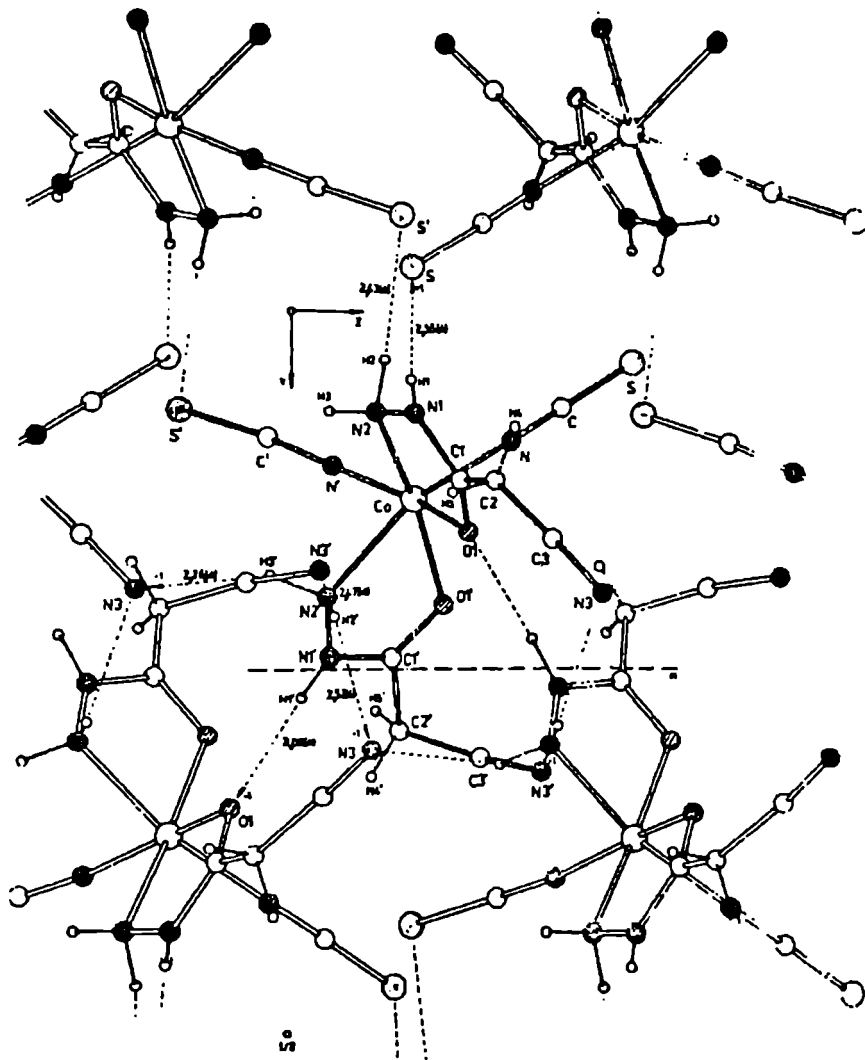
ლოციკლში ამ ბმების სიგრძეებია: 2,23 და 2,13  $\text{Å}$ , ხოლო მეორეში - 2,14 და 2,20  $\text{Å}$ . ხუთწევრიანი მეტალოციკლები გამრუდებულია, მაგრამ ინარჩუნებენ კონვერტის ფორმას. იზოთიოციანატოჯგუფები პრაქტიკულად ხაზოვანია

$N-C-S$   $178,2, 178,3^\circ$ ;  $N-C$   $1,55 \text{ Å}$ ,  $C-S$   $1,63 \text{ Å}$ .

$[Co(CH_3(CH_2)_2CONH_2)_2(NCS)_2]$ . ამ კომპლექსის სტრუქტურაში კობალტის ატომს უკავია კერძო მდგომარეობა მეორე რიგის ღერძზე და გარშემორტყმულია ოქტაედრულად ერბოს მჟავას ჰიდრაზიდის ციკლური ბიდენტატური მოლეკულების აზოტისა და ჟანგბადის ატომებით და იზოთიოციანატოჯგუფების აზოტის ატომებით (სურ. 88). გამრუდებული ოქტაედრი მიეკუთვნება ტ(33 ტიპს, ერთიმეორეს მიმართ ტრანს-მდგომარეობაში განლაგებული ჟანგბადის ატომებით. ორგანული ლიგანდის აზოტის ატომებსა და იზოთიოციანატოჯგუფების აზოტის ატომებს შესაბამისად ერთიმეორის მიმართ უკავია ცის-მდგომარეობა. ოქტაედრის გამრუდება ხდება ეკვატორიალურ სიბრტყეში კობალტის ცენტრალური ატომის ირგვლივ მეტალოციკლების წარმოქმნისას კუთხის  $75,84^\circ$ -მდე შემცირებით.

ორგანული ლიგანდის მოლეკულები წარმოქმნიან ბრტყელ სისტემას  $O(1)$ ,  $C(1)$ ,  $N(1)$ ,  $C(2)$ , რომლიდანაც ატომები:  $Co$ ,  $N(2)$  და  $H(1)$  გამოდიან შესაბამისად  $0,445$ ,  $0,0055$  და  $0,172 \text{ Å}$ -ით. პრაქტიკულად ხაზობრივი





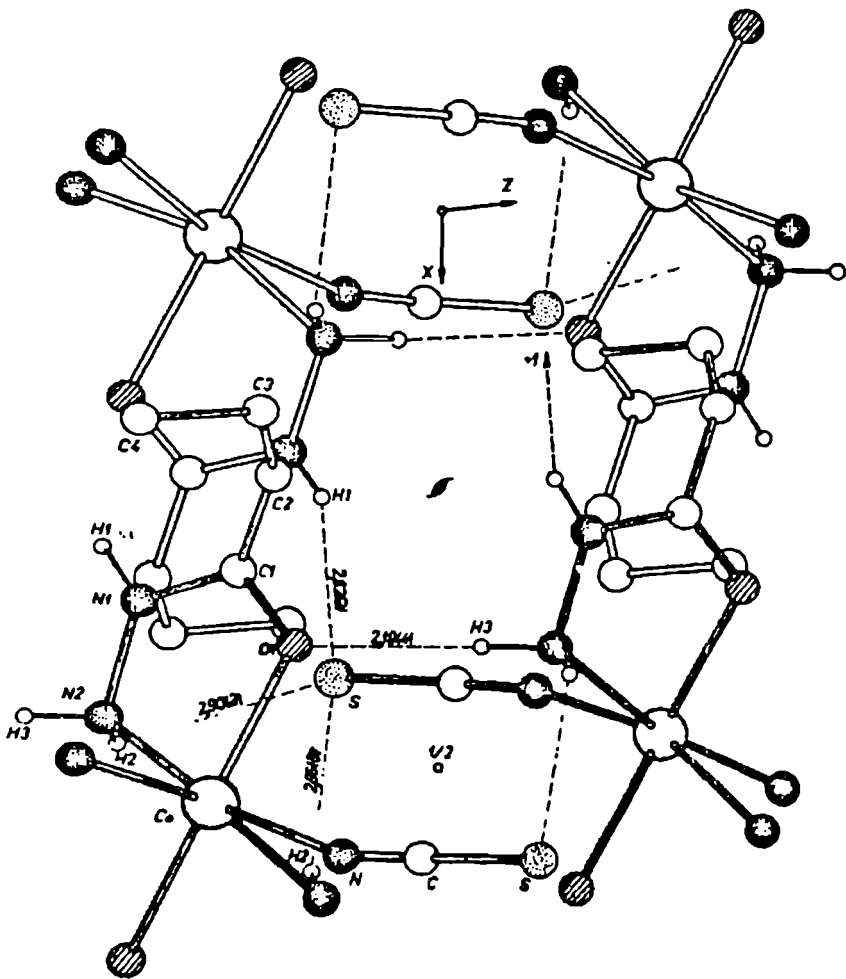
სურ. 87.  $[Co(NCCH_2CONHNH_2)_2(NCS)_2]$  სტრუქტურის  
პროექცია OYZ სიბრტყეზე.

იზოთიოციანატოჯგუფები წარმოქმნიან კობალტის ატომთან 164,39<sup>0</sup> ტოლ კუთხეს ( $Co-N-C$ ). ბმების სიგრძეებია:  $N-C$  1,150,  $C-S$  1,640 Å; კუთხე  $N-C-S$  შეადგენს 177,78<sup>0</sup>; თანახმად ამ მონაცემებისა  $N-C$  ბმა უპირატესად სამმაგია, ხოლო  $C-S$  - ერთმაგი.

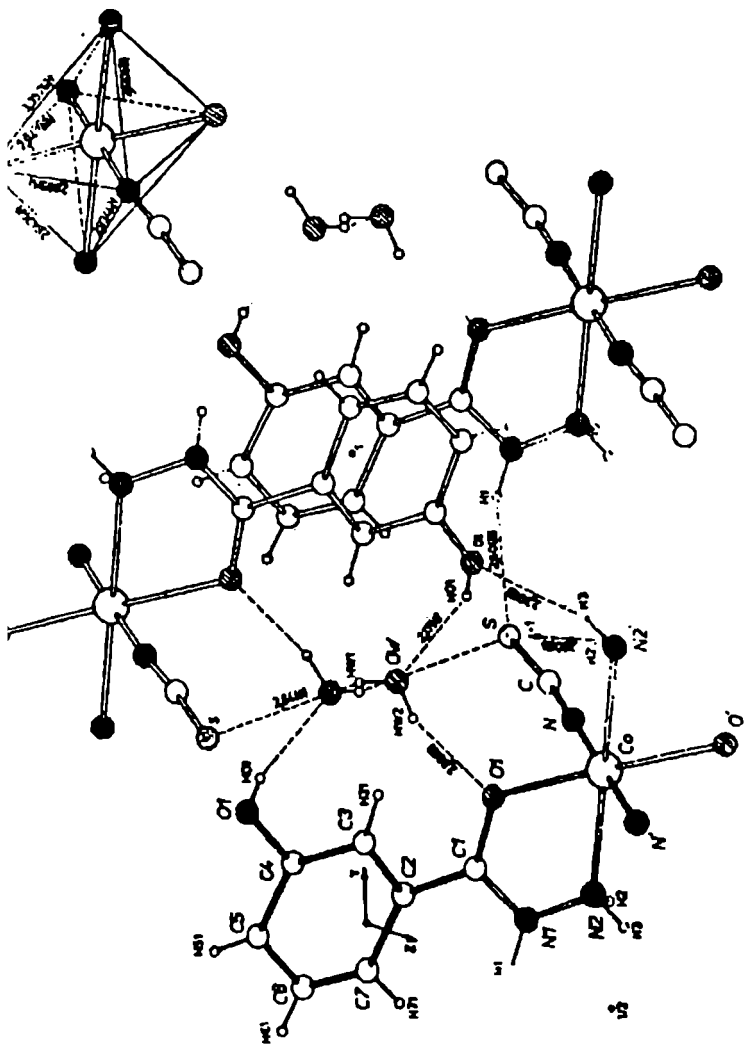
სტრუქტურაში ხორციელდება მოლეკულათა შორისი წყალბადური ბმები  $NH$  და  $NH_2$  ჯგუფების წყალბადის ატომების,  $C=O$  ჯგუფის ჟანგბადის ატომის და  $NCS^-$  ჯგუფის გოგირდის ატომის მონაწილეობით.

$[Co(m-HOC_6H_4CONH_2)_2(NCS)_2] \cdot H_2O$ . კრისტალები აგებულია დისკრეტული მოლეკულებისაგან  $Co(m-OBH)_2(NCS)_2 \cdot H_2O$  ( $m-OBH =$  მეტა- $HOC_6H_4CONH_2$ ), რომლებიც გაერთიანებულია კრისტალებში წყალბადური ბმების სისტემებით (სურ. 89). კობალტის ატომი მდებარეობს სიმეტრიის ცენტრში და გარშემორტყმულია ოქტაედრულად. ორგანული ლიგანდის მოლეკულები ციკლურ-ბიდენტატურადაა დაკავშირებული კობალტის ატომთან.  $NCS^-$  ჯგუფებიც ასევე უშუალო კონტაქტშია კობალტის ატომთან. ატომები  $O_{Co}$ ,  $N_{NH_2}$ ,  $N_{NCS}$  მდებარეობენ შესაბამისად ერთი-მეორის მიმართ ტრანს-მდგომარეობაში, ანუ მოცემული ოქტაედრი მიეკუთვნება ტტტ ტიპს (ტ-ტრანს).

$[Dy(H_3CCONH_2)_3(H_2O)_3]Cl_3$ . კრისტალები აგებულია დისკრეტული კომპლექსური კათიონების  $[Dy(H_3CCONH_2)_3(H_2O)_3]^+$  და  $Cl^-$  ანიონებისაგან (სურ. 90). აცეტილჰიდრაზინის მოლეკულები ასრულებენ ციკლურ-ბიდენტატურ ფუნქციას, კოორდინირდებიან რადისპროზიუმის ცენტრალური ატომის მიერ კარბონილის ჯგუფის ჟანგბდატომისა და პირველადი ამინოჯგუფის აზოტის ატომის საშუალებით (ანალოგიურად  $d$ -მეტალების კომპლექსებისა, იხ. ზემოთ). კოორდინირებული წყლის მოლეკულები ავსებენ პოლიედრს სამქუდიან

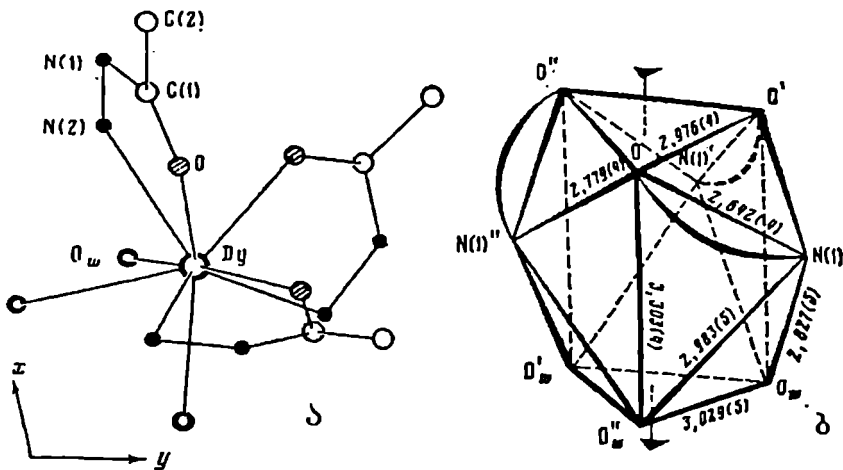


სურ. 88.  $[Co(CH_2CH_2CH_2CONHNH_2)_2(NCS)_2]$   
 სტრუქტურის პროექცია X0Z სიბრტყეზე.



სურ. 89.  $[Co(m-HOC_6H_4CONH_2)_2(NCS)_2] \cdot H_2O$  სტრუქტურის პროექცია OYZ სიბრტყეზე.

ტრიგონალურ პრიზმამდე. დისპროზიუმის(III) ატომის საკოორდინაციო რიცხვი არის 9. ბმათა სიგრძეები  $Dy-O$  ( $H_2O$ ),  $Dy-O(Lig)$ ,  $Dy-N$  შესაბამისად ტოლია 2,43, 2,36 და  $2,57 \text{ \AA}$  კუთხეები  $O-Dy-N$  64,6,  $Dy-O-C$  123,7,  $O-C-N$  121,5,  $C-N-N$  118,1,  $Dy-N-N$  111,5 $^{\circ}$ .



სურ. 90. კომპლექსური კათიონის  $[Dy(CH_3CONHNH_2)_3(H_2O)_3]^+$  აღნაგობა (ა) და დისპროზიუმის ატომის პოლიედრის გეომეტრია (ბ).

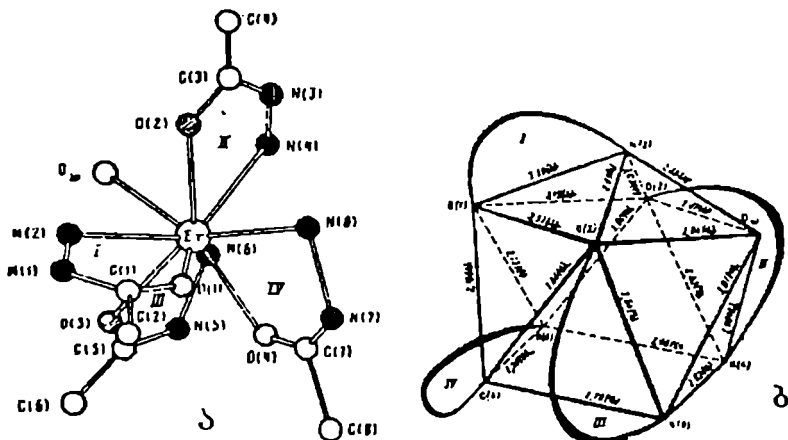
მეტალპიდრაზიდული ციკლები არ არის ბრტყელი. დისპროზიუმის ატომი გამოდის  $C, O, N, N$  სიბრტყიდან  $0,2 \text{ \AA}$ -ით და შესაბამისად მეტალოციკლს აქვს  $Dy$ -კონვერტის კონფორმაცია.

სტრუქტურაში კომპლექსური კათიონები  $[Dy(CH_3CONHNH_2)_3(H_2O)_3]^+$  და ანიონები  $Cl^-$  დაკავში-

რებულია ერთიმეორესთან  $O-H \cdots Cl$ ,  $NH \cdots Cl$  ტიპის წყალბადური ბმებით.



კომპლექსური კათიონები  $[Er(H_3CCONH_2)_4(H_2O)]^{3+}$  და  $NO_3^-$  ანიონები (სურ. 91) გაერთიანებულია წყალბადური ბმების სისტემით, რომელთა წარმოქმნაშიც მონაწილეობენ  $NH$ ,  $NH_2$  ჯგუფების წყალბადის ატომები, კოორდინირებული წყლის მოლეკულები და კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადატომები.



სურ. 91. კომპლექსური კათიონის  $[Er(CH_3CONH_2)_4(H_2O)]^{3+}$  აღნაგობა (ა) და ერბიუმის ატომის პოლიედრის გეომეტრია (ბ).

აცეტილჰიდრაზინის მოლეკულები კოორდინირებულია ისევე, როგორც ზემოთ განხილულ დისპროზიუმის კომპლექსში. ერბიუმის(III) ატომის საკოორდინაციო რიცხვი არის 9. ერბიუმის ცენტრალური ატომის კოორდინაციული პოლიედრი წარმოადგენს ერთქუდიან კვადრატულ ანტიპრიზმას (სურ. 91), რომლის ფუძესაც შეადგენენ ანოტის სამი ატომი და ჟანგბადატომი, შუა სარტყელს –

აცეტილჰიდრაზინის მოლეკულების და კოორდინირებული  
წყლის მოლეკულის ოთხი უანგბადატომი, ხოლო წვერო  
კი უკავია ორგანული ლიგანდის მოლეკულების აზოტის  
მეოთხე ატომს. ბმათა სიგრძეები  $Er-O (Lig)$  და  
 $Er-N$  მდებარეობენ ზღვრებში 2,32–2,34 და 2,54–2,56 Å  
შესაბამისად. ბმის სიგრძე  $Er-O (H_2O)$  შეადგენს 2,63  
Å მაშასადამე, ბმა  $Er-O (Lig)$  შედარებით მტკიცეა,  
ვიდრე  $Er-O (H_2O)$ . თავის მხრივ  $Er-N$  ბმები საგრ-  
ძნობლად შესუსტებულია  $Er-O$  შედარებით. ამასთან,  
ყველაზე გრძელია ბმა  $Er-N$  წვეროში მდებარე  
აზოტთან, რაც შეიძლება აიხსნას ერბიუმის საკოორ-  
დინაციო რიცხვის მაღალი მნიშვნელობით. ანალოგიუ-  
რად დისპროზიუმის კომპლექსისა (იხ. ზემოთ) მეტალ-  
ჰიდრაზიდული ციკლები არ არის სრულად სიბრტყიე.  
 $O, C, N, N$  ატომების მიერ წარმოქმნილი სიბრტყიდან  
ერბიუმის ატომი გამოდის (გადახრილია) 0,21 Å

## თავი მეშვიდე

### სპექტროქიმია

სემოთ განვიხილეთ კრისტალური ნაერთების რენტგენოსტრუქტურული კვლევის საფუძველზე მიღებული შედეგები. კვლევის ეს პირდაპირი მეთოდი, მიუხედავად მისი ხანგრძლივობისა და სირთულისა, აძლევს ქიმიკოსს სრულყოფილ პასუხს საკვლევი ობიექტის მოლეკულური და კრისტალური სტრუქტურის შესახებ.

ამჟამად ნაერთის აღნაგობის შესასწავლად არსებობს კვლევის რამდენიმე ფიზიკური მეთოდი, რომელთა შორისაც რხევითი სპექტროსკოპია – შთანთქმის ინფრაწითელი და კომბინაციური გაბნევის სპექტრები – ერთ-ერთი სწრაფი და საიმედო მეთოდია. თუ იმასაც გავითვალისწინებთ, რომ გასული საუკუნის მეორე ნახევარში დამკვიდრდა ქიმიური ნაერთის კვლევის კომბინირებული მეთოდი – სპექტროქიმიური, ცხადი გახდება სპექტროსკოპიული მეთოდის მნიშვნელობა. ამ მეთოდით არაორგანულ და კოორდინაციულ ნაერთთა მოლეკულური აღნაგობის კვლევის კონკრეტული მაგალითები წარმოდგენილი იქნება ქვემოთ. მანამდე კი განვიხილოთ რხევითი სპექტროსკოპიის საკვანძო საკითხები მისი დაფუძნების მოკლე ისტორიასთან ერთად.

ქიმიური ნაერთის აღნაგობის, ქიმიური პროცესის კვლევის ფიზიკურ-ქიმიურ მეთოდებს შორის ერთ-ერთ ეფექტურ მეთოდს წარმოადგენს ოპტიკური სპექტროსკოპია, რომელმაც უდიდესი როლი შეასრულა ატომისა და მოლეკულის აღნაგობაზე ამჟამად არსებული წარმოდგენების ჩამოყალიბებაში.

ატომის ელექტრონული აღნაგობისა და ატომში ელექტრონული გადასვლების კანონზომიერების შესახებ ინფორმაციას იძლევა ატომური სპექტრების შესწავლა. მოლეკულური სპექტროსკოპია კი შესაძლებელს ხდის განსაზღვრული იქნეს მოლეკულის გეომეტრიული და



ენერგეტიკული მახასიათებლები, ატომთა შორის მოქმედი ძალები და ქიმიური ბმის ენერგია. მოლეკულური სპექტროსკოპია საშუალებას იძლევა გადაჭრილი იქნას რიგი ფიზიკურ-ქიმიური ამოცანებისა, რომლებიც დაკავშირებულია ნიუთონების რთულ მატერიალურ სისტემებში არსებობასთან. იგი წარმატებით გამოიყენება ხსნარების სტრუქტურისა და მათში მოქმედი მოლეკულათა შორის ურთიერთქმედების ძალების ბუნების დასადგენად, კოორდინაციული ნაერთების აღნაგობისა და მდგომარეობის, პოლიმერიზაციის პროცესების სინქარისა და მექანიზმის შესასწავლად. მოლეკულური სპექტრები გამოიყენება ნიუთონების თერმოდინამიკური თვისებების განსაზღვრისათვის. თერმოდინამიკური კონსტანტების გამოთვლის სტატისტიკური მეთოდები, რომლებსაც ამჟამად უდიდესი მნიშვნელობა აქვს, დაფუძნებულია მოლეკულის სტრუქტურული მონაცემების ცოდნაზე, ეგრეთწოდებულ მოლეკულურ კონსტანტებზე, რომელთა შესახებაც ყველაზე სრულ და ზუსტ ინფორმაციასაც მოლეკულური სპექტრები იძლევა.

მოლეკულური სპექტროსკოპია წარმოადგენს მოლეკულური სპექტრალური ანალიზის თეორიულ საფუძველს, რომელიც ამჟამად გამოიყენება არა მარტო ქიმიასა და ქიმიურ ტექნოლოგიაში, არამედ მეცნიერებისა და ტექნიკის სხვა დარგებშიც. ყოველივე ეს მოლეკულურ სპექტროსკოპიას ქიმიკოს-მკვლევარის ხელში კვლევის მძლავრ მეთოდად ხდის, მიუხედავად იმისა, იგი არაორგანული, ორგანული თუ ანალიზური ქიმიის სპეციალისტია.

სპექტროსკოპიის, როგორც მეცნიერების, აღმოცენების თარიღად შეიძლება ჩაითვალოს 1666 წელი, როდესაც ნიუტონმა უბრალო მინის პრიზმით მზის სინათლე დაშალა სპექტრად. თითქმის ორი საუკუნის შემდეგ ადამიანმა აღმოაჩინა, რომ ხილულის გარდა არსებობს სპექტრის სხვა უბნებიც.

1800 წელს გერშელმა გამოაქვეყნა ცნობა სითბური გამოსხივების შესახებ. ის თერმომეტრს ათავსებდა ხილული სპექტრის სხვადასხვა უბანში და შეამჩნია, რომ

სითბური გამოსხივება არსებობს იქაც, სადაც არაა ხილული გამოსხივება – გაცილებით გრძელი ტალღების უბანში, წითელი ფერის იქით. ასე იყო აღმოჩენილი სპექტრის ახალი, უხილავი უბანი, რომელსაც ახლა ინფრაწითელს ეუწოდებთ.

1801 წელს აღმოჩენილი იყო სპექტრის სხვა უბანი, რომელიც ხილული სპექტრის უფრო მოკლეტალღიან უბანში, კერძოდ, იისფერის იქით მდებარეობს. მას ამჟამად ულტრაიისფერს ეუწოდებთ. სპექტრის ეს უბანი ერთი-მეორისაგან დამოუკიდებლად აღმოაჩინეს ვოლას-ტონმა და რიტერმა.

XIX საუკუნის ბოლოს მაქსველის გამოკვლევებმა აჩვენეს, რომ სინათლე წარმოადგენს ელექტრომაგნიტურ გამოსხივებას და ეს უბანი ხილული, ინფრაწითელი და ულტრაიისფერი – მხოლოდ მცირე ნაწილია ფართე ელექტრომაგნიტური სპექტრისა რადიოტალღებიდან რენტგენისა და  $\gamma$  გამოსხივებამდე.

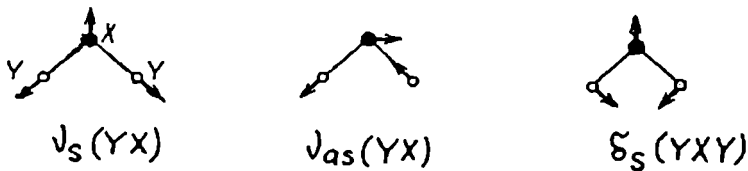
XX საუკუნის დასაწყისისათვის დაგროვილი იყო უზარმაზარი სპექტროსკოპიული ექსპერიმენტული მასალა, მაგრამ სპექტრსა და ნივთიერების აღნაგობას შორის კავშირის დადგენა ვერ მოხერხდა. პლანკის, ეინშტეინის, ბორის შრომების შემდეგ ნივთიერების სპექტრის განხილვა დაიწყო, როგორც ამ ნივთიერების სტრუქტურის შედეგი. 1924–1926 წლებში ქვანტური მექანიკის შექმნამ დაასრულა ატომისა და მოლეკულის აღნაგობის შესახებ დღევანდელი წარმოდგენების საბოლოო ფორმირება. ამით მტკიცე თეორიული ფუნდამენტი ჩაეყარა თანამედროვე ატომურ და მოლეკულურ სპექტროსკოპიას.

## *7.1. სიმეტრიის რხევიით სპექტროსკოპიაში*

სიმეტრიის თვისებები ფართოდ გამოიყენება ქიმიასა და ფიზიკაში. შთანთქმის ინფრაწითელ და კომბინაციური გაბნევის სპექტრებზე მოლეკულის სიმეტრიის გავლენა დეტალურად განიხილება ჯგუფთა თეორიის გამოყენებით

რხევეთი სპექტროსკოპიის სრულ კურსში. ქვემოთ მოკლედ არის განხილული ყველაზე გავრცელებული და ტიპიური მოლეკულებისა და იონების რხევათა სიმეტრია.

გზსაახილველი საკითხის არსი რომ გავიგოთ, გავაანალიზოთ მარტივი მრავალატომიანი არახაზობრივი მოლეკულის  $Y_1XY_2$  რხევები. ასეთ მოლეკულას, თანახმად  $3N - 6$ , ექნება სამი ნორმალური რხევა. იმ პირობის შემთხვევაში, რომ  $m_{Y_1} \gg m_{Y_2}$ ,  $f_{Y_1}x = f_{Y_2}x$ , მოცემულ მოლეკულას დეფორმაციული რხევის გარდა ექნება ორი მახასიათებელი - სავალენტო რხევა  $\nu(y_1x)$  და  $\nu(y_2x)$ . თანაც  $\nu(y_1x)$  ნაკლები იქნება  $\nu(y_2x)$ -ზე. თუ ახლა დავიწყებთ  $Y_1$  ატომის მასის შემცირებას ისე, რომ მიუახლოვოთ  $Y_2$  მასას, მაშინ  $\nu(y_1x)$  სიხშირე იწყებს გაზრდას და მიუახლოვდება  $\nu(y_2x)$  სიხშირეს. მაგრამ იმ შემთხვევაშიც კი, როდესაც  $my_1 = my_2$  (ე. ი. როცა გვექნება მოლეკულა  $YXY$ )  $\nu(y_1x)$  სიხშირე არ გახდება  $\nu(y_2x)$ , სიხშირის ტოლი.  $XY$  ბმების რხევათა მექანიკური ურთიერთქმედების გამო (მათ საერთო  $X$  ატომი აქვთ) სპექტრში შენარჩუნებული იქნება ბმების სავალენტო რხევების შთანთქმის ორი ზოლი (სურ. 92).



სურ. 92.  $YXY$  არახაზობრივი სამატომიანი მოლეკულის რხევები.

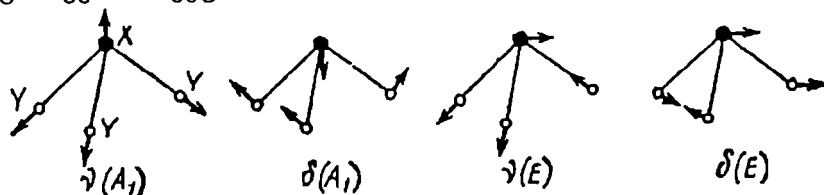
ერთი ზოლი შეესაბამება  $YX$  ბმების რხევას ერთ ფაზაში, ხოლო მეორე ზოლი კი შეესაბამება  $YX$  ბმების რხევას საწინააღმდეგო ფაზაში.

მოცემულ მოლეკულას  $YXY$  აქვს სიმეტრიის სამი ელემენტი: ორი სიბრტყე ( $\sigma_1$  და  $\sigma_2$ ) ( $\sigma$ —“სიგმა”) და ერთი მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძი  $C_2$ . ე. ი. მოლეკულა მიეკუთვნება სიმეტრიის წერტილოვან ჯგუფს, რომელიც ჯგუფთა თეორიაში აღინიშნება  $C_{2v}$  სიმბოლოთი. პირველი რხევის დროს სიმეტრიის სამივე ელემენტი შენარჩუნებულია და ასეთი რხევა იწოდება “პოლნოსიმეტრიულად” და აღინიშნება  $\nu_s(YX)$  ან  $\nu(A_1)YX$  მეორე რხევის დროს ხდება სიმეტრიის ორი ელემენტის “გაქრობა” ( $\sigma_2$  და  $C_2$ ). მას ეწოდება ანტისიმეტრიული და აღინიშნება  $\nu_{as}(YX)$  ან  $\nu(B_1)YX$ .  $YXY$  მოლეკულას აქვს კიდევ ერთი, “პოლნოსიმეტრიული” დეფორმაციული რხევა, რომელიც აღინიშნება:  $\delta_s(YXY)$  ან  $\delta(A_1)YXY$

$\nu_{as}(YX)$  და  $\nu_s(YX)$  შორის სხვაობა მით მეტი იქნება, რაც ნაკლებია  $X$  ატომის მასა და რაც მეტად განსხვავდება  $YXY$  კუთხე  $90^\circ$ -იანი კუთხისაგან. სამატომიანი მოლეკულებისათვის, რომლებიც მიეკუთვნებიან  $C_{2v}$  სიმეტრიის წერტილოვან ჯგუფს ყველა რხევა აქტიურია როგორც შთანთქმის ინფრაწითელ სპექტრში, ასევე კომბინაციური გაბნევის სპექტრში.

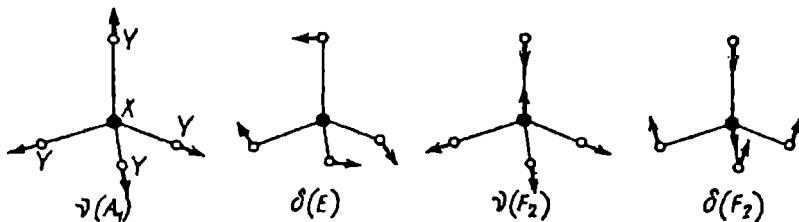
ხაზობრივი სამატომიანი  $YXY$  მოლეკულის შემთხვევაში თავისუფლების ხარისხი ტოლია  $3N - 5$ , ხოლო ნორმალურ რხევათა რიცხვი კი  $- 3 \cdot 3 - 5 = 4$ . ასეთი მოლეკულა მიეკუთვნება  $D_{\infty h}$  სიმეტრიის წერტილოვან ჯგუფს და მოიცავს სიმეტრიის შემდეგ ელემენტებს:  $C_\infty$ ,  $\infty C_2$ ,  $\sigma_h$ ,  $\infty \sigma_v$ ,  $i$  (სიმეტრიის ცენტრი). ამ მოლეკულის რხევით სპექტრში ვლინდება არა ოთხი, არამედ მხოლოდ სამი, რადგანაც ორი დეფორმაციული რხევა ხდება ორ ურთიერთპერპენდიკულარულ სიბრტყეში ერთნაირი სიხშირით (აქვთ ერთნაირი ტალღური რიცხვი). ასეთ რხევებს ორჯერ გადაგვარებულს უწოდებენ და აღნიშნავენ

$\delta_d$ . რხევების გადაგვარება დაკავშირებულია მოლეკულაში უსასრულო რიგის სიმეტრიის ღერძის  $C_\infty$  არსებობასთან. სიმეტრიის ცენტრის არსებობა კი განაპირობებს ალტერნატიული აკრძალვის გამოჩენას:  $\nu_{as}$  და  $\sigma_d$  რხევები ელინდებიან მხოლოდ შთანთქმის ინფრაწითელ სპექტრში, ხოლო  $\nu_s$  რხევა მხოლოდ კომბინაციური გაბნევის სპექტრში.



სურ. 93.  $XY_3$  პირამიდული მოლეკულის რხევები.

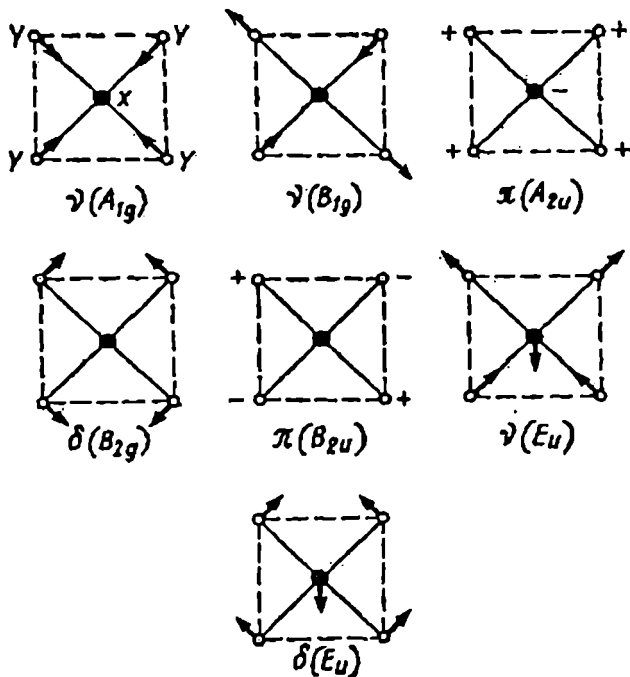
განვიხილოთ ტეტრაედრული აღნაგობის მქონე მოლეკულები ან იონები  $XY_4$ , რომლებიც მიეკუთვნებიან  $T_d$  სიმეტრიის წერტილოვან ჯგუფს. ასეთებია მაგალითად,  $SO_4^{2-}$ ,  $ClO_4^-$  და ა. შ. ( $4C_3$ ,  $3C_2$ ,  $6\sigma_d$ ). თანახმად  $3N-6$ , ხუთატომიან სისტემას წესიერი ტეტრაედრის სიმეტრიით უნდა ჰქონდეს 9 ნორმალური რხევა ( $3 \cdot 5 - 6 = 9$ ). სინამდვილეში რხევით სპექტრში შეიძლება მოინახოს მხოლოდ ოთხი.



სურ. 94.  $XY_4$  ტეტრაედრული მოლეკულის რხევები.

ამ ოთხი რხევის ფორმა და აღნიშვნა წარმოდგენილია 94-ე სურათზე. ერთი რხევათაგანი  $\delta(E)$  ორჯერ გადაკარებულია, ხოლო ორი  $\nu(F_2)$  და  $\delta(F_2)$  კი სამჯერ გადაგვარებული.  $A_1$  და  $E$  სიმეტრიის რხევების დროს დიპოლური მომენტის ცვლილება არ ხდება, ამიტომაც ისინი აქტიურია მხოლოდ კომბინაციური გაბნევის სპექტრში.  $F_2$  რხევები კი აქტიურია როგორც შთანთქმის ინფრაწითელ, ასევე კომბინაციური გაბნევის სპექტრში.

ხუთატომიანი კვადრატული აღნაგობის მოლეკულა  $XY_4$  მიეკუთვნება სიმეტრიის ჯგუფს  $D_{4h}$  და მოიცავს სიმეტრიის შემდეგ ძირითად ელემენტებს:  $C_4$ ,  $2C_2'$ ,  $2C_2''$ ,  $2\sigma_v$ ,  $\sigma_h$ ,  $i$ .



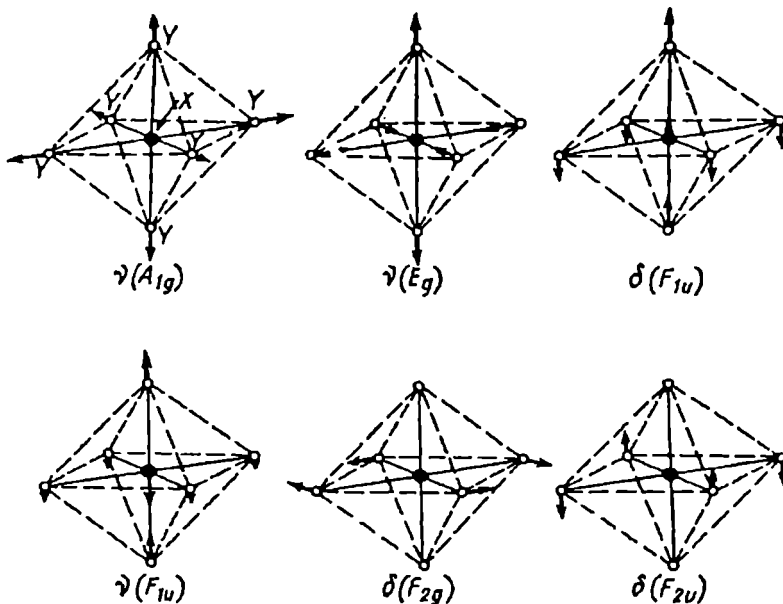
სურ. 95.  $XY_4$  კვადრატული მოლეკულის რხევები.

ამ რხევების ფორმები და მათი აღნიშვნები მოცემულია 95-ე სურათზე. სიმეტრიის ცენტრის არსებობა მოცემულ შემთხვევაში განაპირობებს ალტერნატიული აკრძალვის გამოვლენას. კომბინაციური გაბნევის სპექტრში აქტიურია მხოლოდ  $\nu(A_{1g})$ ,  $\nu(B_{1g})$  და  $\sigma(B_{2g})$ , მაშინ როდესაც შთანთქმის ინფრაწითელ სპექტრში ვლინდება  $\pi(A_{2u})$ ,  $\nu(E_g)$ ,  $\sigma(E_g)$ .  $\pi(B_{2u})$  სიხშირე არც ერთ, არც მეორე სპექტრში არ ვლინდება.  $g$  ინდექსით აღნიშნავენ რხევებს, რომელთა დროსაც სიმეტრიის ცენტრი შენარჩუნებულია, ხოლო  $u$  ინდექსით რხევებს, რომელთა დროსაც სიმეტრიის ცენტრი "ქრება".

ამრიგად, ხუთატომიანი კვადრატული მოლეკულა შეიძლება განვასხვაოთ ხუთატომიანი კვადრატული მოლეკულის თუ იონისაგან შთანთქმის ინფრაწითელი და კომბინაციური გაბნევის სპექტრების საფუძველზე. ტეტრაედრის შთანთქმის ინფრაწითელ სპექტრში ვლინდება მხოლოდ შთანთქმის ორი ზოლი, ხოლო კვადრატისაში – სამი.

შვიდატომიანი ოქტაედრული აღნაგობის მქონე მოლეკულა  $XY_6$  არის გაცილებით მაღალი სიმეტრიის მქონე. სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფი მისთვის არის  $O_h$ , ხოლო სიმეტრიის ძირითადი ელემენტებია:  $3C_4$ ,  $4C_3$ ,  $9C_2$ ,  $9\sigma_2$ ,  $i$ . მეოთხე და მესამე რიგის სიმეტრიის ღერძების-ღიდი რიცხვის არსებობას მიყვებართ გადაგვარებული რხევების ასევე დიდ რიცხვამდე. ასეთი მოლეკულის რხევებს შორის ოთხი სამჯერ გადაგვარებული და ერთი ორჯერ გადაგვარებული რხევაა (სურ. 96).

რხევით სპექტრებზე სიმეტრიის გავლენის ცოდნას მნიშვნელობა აქვს არა მარტო სტრუქტურული ამოცანების გადასაწყვეტად, არამედ დიდი მნიშვნელობა აქვს ნორმალურ რხევათა ანალიზისათვის (გათვლებებისათვის).



სურ. 96.  $XY_6$  ოქტაედრული მოლეკულის რხევები.

## 7.2. მრავალატომიანი მოლეკულების რხევები და სკეპტრები

მრავალატომიანი მოლეკულა შეიძლება განვიხილოთ როგორც ერთიმეორესთან პატარა ზამბარებით შეერთებული მასის მქონე წერტილების სიმრავლე. ენერჯის მიწოდების (აღზნების) შემთხვევაში ასეთი სისტემა შეასრულებს რთულ რხევით მოძრაობას. თუმცა აღმოჩნდა, რომ ყველაზე რთული მოლეკულური რხევებიც კი შეიძლება დაიშალოს (დანაწილდეს) შედარებით მცირე რაოდენობა ე.წ. ნორმალურ რხევებად.



ნორმალური რხევები – მოლეკულაში ატომთა ბირთვების დამოუკიდებელი პერიოდული მოძრაობა, როდესაც ყველა ბირთვი გადის წონასწორობის მდგომარეობას. ამ რხევების დროს მოლეკულაში მასების ცენტრის წანაცვლება არ ხდება. მოლეკულის ნორმალური რხევების რიცხვი შეესაბამება შინაგანი თავისუფალი რხევების რიცხვს. თუ მოლეკულა შედგება  $N$  ატომისაგან, თავისუფლების ხარისხის რაოდენობა იქნება  $3N$  თუ გამოერიცხავთ მთლიანი მოლეკულის მოძრაობასთან დაკავშირებულ სამ თავისუფლების ხარისხს და ასევე ბრუნვითი მოძრაობის სამ თავისუფლების ხარისხს, არახაზობრივი მოლეკული-სათვის ნორმალურ რხევათა საერთო რიცხვი ( $n$ ) იქნება

$$n = 3N - 6$$

თუ მოლეკულა წრფივია, მაშინ ბირთვებზე გამავალი ღერძის ირგვლივ მოლეკულის ბრუნვა არ გამოიწვევს თავისუფლების ხარისხის ცვლილებას და ნორმალურ რხევათა რიცხვი ტოლი იქნება

$$n = 3N - 5$$

კლასიკური ელექტროდინამიკის თანახმად ნაწილაკების ნებისმიერი მოძრაობისას, რომელიც დაკავშირებულია დიპოლური მომენტის ცვლილებებთან, ადგილი აქვს ელექტრომაგნიტური ენერჯიის შთანთქმას ან გამოსხივებას. მაშასადამე, თუ ნორმალური რხევის დროს ადგილი აქვს დიპოლური მომენტის ცვლილებას, მაშინ შთანთქმის ინფრაწითელ სპექტრში გამოვლინდება ზოლი, რომლის სიხშირეც ტოლი იქნება ამ ნორმალური რხევის სიხშირისა. ღრატომიანი მოლეკულისათვის შთანთქმის ზოლის ინტენსივობა პროპორციული იქნება დიპოლური მომენტის პირველი წარმოებულის კვადრატისა:

$$\left( \frac{d\mu}{dt} \right)_0^2$$

აქედან გამომდინარეობს, რომ შთანთქმის ინფრაწითელ სპექტრში ყველაზე ინტენსიური შთანთქმის ზოლები ექნება მოლეკულებს, რომლებიც შეიცავენ ძლიერ

იონურ ბმებს. ამასთან ჰომობირთვული (არაპოლარული) მოლეკულების რხევისას მაგალითად,  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $Cl_2$  და ა.შ., ადგილი არ ექნება დიპოლური მომენტის ცვლილებას და ასეთი რხევები შთანთქმის ინფრაწითელ სპექტრში არ გამოვლინდება. აღნიშნული ჰომობირთვული მოლეკულის ერთად-ერთი სიხშირე შეიძლება მონახული იქნეს მხოლოდ კომბინაციური გაბნევის სპექტრში.

მოლეკულაში არსებული ყველა რხევა შეიძლება დაიყოს ორ ტიპად: 1. სავალენტო რხევები, რომლებიც აღინიშნებიან  $\nu$  ("ნიუ") და რომელთა დროსაც ადგილი აქვს ქიმიური ბმის გასწვრივ ატომთა ბირთვებს შორის მანძილის სიმეტრიულ  $\nu_s$  ან ანტისიმეტრიულ  $\nu_{as}$  პერიოდულ ცვლილებას. 2. დეფორმაციული, რომელიც აღინიშნება  $\delta$  ("დელტა") სიმეტრიული  $\delta_s$  და ანტისიმეტრიული  $\delta_{as}$ , რომელთა დროსაც ადგილი აქვს ქიმიურ ბმებს შორის კუთხეების (სავალენტო კუთხეების) პერიოდულ ცვლილებას.

### *7.3. ქიმიაში რხევითი სპექტროსკოპიის გამოყენების ზოგიერთი ასპექტი*

რხევითი სპექტროსკოპია ქიმიკოსისათვის კვლევის მძლავრ იარაღს წარმოადგენს. ამასთან, სპექტროსკოპიის სახის (ბრუნვითი, რხევითი, ელექტრონული) არჩევა დამოკიდებულია კონკრეტულ ამოცანაზე, რომლის გადაწყვეტასაც მიზნად ისახავს მკვლევარი, საკვლევი ნაერთის ბუნებასა და მის აგრეგატულ მდგომარეობაზე.

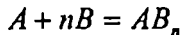
მოლეკულის აღნაგობის შესწავლისას მიზანშეწონილია გამოყენებული იქნეს შთანთქმის გაცილებით ფართო უბანი, რადგანაც ელექტრონული, რხევითი და ბრუნვითი სპექტრების ანალიზის საფუძველზე მიღებული მონაცემები ნივთიერების (მოლეკულის) აღნაგობის პრობლემის სხვადასხვა მხრიდან განხილვის საშუალებას იძ-

ლევა. გარდა ამისა, ცალკეული ამ მეთოდთაგანითაც ბევრი, ძალზე მნიშვნელოვანი საკითხის გადაჭრა შეიძლება. მოკლედ განვიხილოთ რხევითი სპექტროსკოპიის გამოყენების ზოგიერთი ასპექტი.

### 7.3.1. ხსნარებში კომპლექსწარმოქმნის შესწავლა

კოორდინაციულ ქიმიაში დიდი მნიშვნელობა აქვს ხსნარებში კომპლექსწარმოქმნის დროს მიმდინარე პროცესების შესწავლას. ასევე მნიშვნელოვანია როგორც ხსნარებში, ასევე კრისტალურ მდგომარეობაში გამოყოფილი წაერთების უმდგრალობის კონსტანტის დადგენა.

დაეუშვათ, სისტემაში მიმდინარეობს კომპლექსწარმოქმნა რეაქციით



ამ პროცესის დროს თითქმის ყოველთვის ადგილი აქვს შთანთქმის ახალი ზოლის გამოჩენას სპექტრის ხილულ ან ულტრაიისფერ უბანში. მას შემდეგ, როდესაც სპექტრის საფუძველზე ხსნარში კომპლექსის წარმოქმნა დადგენილია, ისმება მისი შედგენილობის და უმდგრალობის (მდგრალობის) შესწავლის საკითხი.

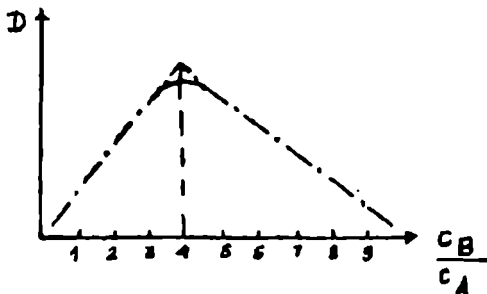
კომპლექსის შედგენილობის დასადგენად ხშირად სარგებლობენ იზომოლური სერიების მეთოდით, რომელიც წარმოადგენს ხსნარების სერიას,  $A$  და  $B$  კომპონენტების მუდმივი ჯამური კონცენტრაციით

$$(c_A + c_B = const) \text{ და სხვადასხვა თანაფარდობით } \frac{c_B}{c_A}$$

(ყველაზე ხშირად 9:1 ან 1:9).

თუ ხსნარში წარმოიქმნება მხოლოდ ერთი კომპლექსი, ე.ი. ადგილი აქვს მხოლოდ ერთ შთანთქმას, და, ამასთან  $A$  და  $B$  კომპონენტები შთანთქმას არ ახდენენ, მაშინ სერიის ცალკეული ხსნარის გაზომილი ოპ-

ტიკური სიმკვრივე მასში წარმოქმნილი კომპლექსის კონცენტრაციის პროპორციულია. ამ შემთხვევაში ოპტიკური სიმკვრივის დამოკიდებულების მრუდი  $\frac{c_B}{c_A}$  კომპონენტების თანაფარდობასთან, გაივლის მაქსიმუმზე (სურ. 97).



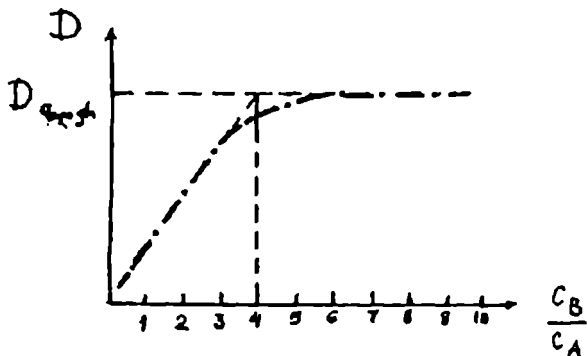
სურ. 97. ოპტიკური სიმკვრივის ( $D$ ) დამოკიდებულება იზომოლური ხსნარის შედგენილობისაგან. მოცემულ შემთხვევაში კომპლექსში ის ტოლია 4:1.

ეს ექსტრემალური წერტილი პასუხობს წარმოქმნილი კომპლექსის შესაძლო მაქსიმალურ კონცენტრაციას, ხოლო აბსცისათა ღერძზე მისი მდგომარეობა კი შეესაბამება სტექიომეტრული კოეფიციენტების თანაფარდობას.

იზომოლური სერიების მეთოდი არ არის უნივერსალური და იგი გამოიყენება იმ შემთხვევაში, როდესაც ხსნარში ადგილი აქვს მხოლოდ ერთად-ერთი კომპლექსის წარმოქმნას. ხსნარში კომპლექსწარმოქმნის შესასწავლად გაცილებით უკეთესია მოლური ფარდობის, ანუ გაჯერების მეთოდი. ამ მეთოდით სარგებლობისას ამზადებენ ხსნარების სერიას, რომლებშიც ერთ-ერთი კომპონენტის კონცენტრაცია მუდმივია, ხოლო მეორესი – ცვლადი (სხვადასხვა). ზომავენ მათ ოპტიკურ სიმკვრივეს

და ოპტიკური სიმკვრივის  $\frac{c_B}{c_A}$ -თან დამოკიდებულების

გრაფიკს აგებენ  $c_A$  მუდმივი კონცენტრაციის პირობებში, როგორც ეს მოცემულია 98-ე სურათზე.



სურ. 98. გაჯერების მრუდის მიხედვით კომპლექსის შედგენილობის განსაზღვრა. მოცემულ შემთხვევაში

$$c_B : c_A = 4 : 1.$$

მიღებულ მრუდზე გარდატეხის წერტილი შეესაბამება კომპლექსში კომპონენტების სტექიომეტრიულ თანაფარდობას.

როდესაც კომპლექსის შედგენილობა ცნობილია, გაჯერების მეთოდი საშუალებას იძლევა განისაზღვროს კომპლექსის უმდგარადობის კონსტანტა

$$K = \frac{[A]_{\text{ხსნ}} [B]_{\text{ხსნ}}^n}{[AB_n]_{\text{ხსნ}}} \quad (1)$$

შემდგომ უნდა მოინახოს  $[A]_{\text{ხსნ}}$ ,  $[B]_{\text{ხსნ}}$  და  $[AB_n]_{\text{ხსნ}}$  წონასწორული კონცენტრაციები. რადგანაც სინათლეს შთანთქავს მხოლოდ  $AB_n$ , მისი წონასწორული კონცენტრაცია შთანთქმის კანონის თანახმად იქნება

$$[AB_n]_{\text{ხსნ}} = \frac{D}{\epsilon l} \quad (2)$$

სადაც  $\epsilon$  - კომპლექსის ჩაქრობის კოეფიციენტი.

$\varepsilon$ -ის მოსანახად შეიძლება ვისარგებლოთ გაჯერების მრუდით. ამისათვის უნდა გავითვალისწინოთ, რომ  $D$ -ის ზღვრული მნიშვნელობა ( $D_{\text{ზღვ.}}$ ) სისტემის ისეთ მდგომარეობას შეესაბამება, როდესაც კომპლექსის კონცენტრაცია არ იცვლება.  $B$  კომპონენტის რაოდენობის გაზრდის დროსაც კი ეს შეიძლება მოხდეს იმ შემთხვევაში, როდესაც აღებული  $A$  კომპონენტი მთლად დაიხარჯა, მოლიანად შევიდა კომპლექსწარმოქმნის რეაქციაში. ამრიგად, მოცემულ შემთხვევაში კომპლექსის ზღვრული კონცენტრაცია რიცხობრივად გამოსავალი  $A$  კომპონენტის კონცენტრაციის ტოლია  $[AB_n]_{\text{ზღვ.}} = [A]_{\text{გამოს.}}$ . ეს კი საშუალებას გვაძლევს განისაზღვროს  $\varepsilon$ :

$$\varepsilon = \frac{D_{\text{ზღვ.}}}{[A]_{\text{გამოს.}} \cdot i}$$

ვიცით რა  $\varepsilon$ , შეიძლება ვიპოვოთ წონასწორული კონცენტრაცია  $[AB_n]_{\text{ხსნ.}}$  თითოეულ ხსნარში (2) ფორმულით.  $[A]_{\text{ხსნ.}}$  და  $[B]_{\text{ხსნ.}}$  წონასწორული კონცენტრაციების განსაზღვრის შემდეგ

$$\begin{aligned} [A]_{\text{ხსნ.}} &= [A]_{\text{გამოს.}} - [AB]_{\text{ხსნ.}} \\ [B]_{\text{ხსნ.}} &= [B]_{\text{გამოს.}} - n[A] \end{aligned}$$

შეიძლება გამოთვლილი იქნეს უმდგრადობის კონსტანტის სიდიდე (1) ფორმულით. ამ მარტივი მაგალითის გარდა სპექტროფოტომეტრიული მეთოდით შეიძლება უფრო რთული საკითხების გადაწყვეტა. კერძოდ, როდესაც ხსნარებში ადგილი აქვს არა ერთი, არამედ რამდენიმე კომპლექსის წარმოქმნას.

### 7.3.2. ოპტიკური იზომერიის კვლევა

ელექტრონული სპექტროსკოპიის გამოყენებით შესაძლებელია ქიმიური ნაერთებისათვის დამახასიათებელი ოპტიკური იზომერიის შესწავლა. როგორც ცნობილია, ოპტიკური იზომერები განსხვავდება ერთი მეორისაგან ოპტიკური აქტიურობით. ოპტიკურად აქტიური ეწოდება ისეთ ნაერთს, რომელსაც შესწევს სინათლის პოლარიზაციის სიბრტყის შემობრუნების უნარი. მრავალი ქიმიური ნაერთის დამახასიათებელი თვისებაა მისი არსებობა ორი იზომერიის სახით, რომელთაგანაც ერთი თავისი კონფიგურაციით მეორეს სარკული გამოსახულებაა. ასეთ იზომერებს ოპტიკური (სარკული) იზომერები ეწოდება.

დადგენილია, რომ ოპტიკური აქტივობის გამოვლენა შეუძლია ისეთ ნაერთებს (ორგანულს, კოორდინაციულს და ა.შ.), რომელთა მოლეკულებსაც არ გააჩნიათ სიმეტრიის ცენტრი და სიმეტრიის სიბრტყე, ან ერთ-ერთი მათგანი. ასეთი მოლეკულები ასიმეტრიულია. როგორც ცნობილია, ოპტიკურ იზომერებს აღნიშნავენ იმის მიხედვით, თუ რომელი მათგანი რა მიმართულებით აბრუნებს სინათლის პოლარიზაციის სიბრტყეს: იზომერი, რომელიც ამ სიბრტყეს მარცხნიდან მარჯვნივ აბრუნებს, აღნიშნავენ  $d$ -თი (ან  $+$ ), ხოლო სიბრტყის მარჯვნიდან მარცხნივ მბრუნავ იზომერს  $I$ -ით (ან  $-$ ).

ოპტიკური იზომერების აბსოლუტური კონფიგურაციის მონახვისათვის ფართოდ გამოიყენება ელექტრონული სპექტროსკოპია, კერძოდ, ოპტიკური ბრუნვის დისპერსია და წრიული დიქროიზმი.

ნივთიერებასთან ელექტრომაგნიტური გამოსხივების ურთიერთქმედებისას (სახელდობრ, სინათლის ელექტრონული ვექტორისა ნივთიერების ელექტრონებთან) არეში აღიძვრება დიპოლები, რის შედეგადაც ადგილი აქვს სინათლის სხივის გარდატეხას, რაც გარდატეხის მანევრებით ( $n$ ) განიზომება.

სპექტრის იმ უბანში, სადაც საკვლევი ნაერთი გამჭვირვალეა (არ შთანთქავს) გარდატეხის მანევრებელი

შედარებით მუდმივია. ნივთიერების მიერ სინათლის შთანთქმის უბანში კი  $n$  მკვეთრად იცვლება. უნდა აღინიშნოს, რომ სინათლის სხივის პოლარიზაციას შეიძლება აქონდეს სხვადასხვა სახე, კერძოდ, წრფივი პორი-სონტალური, წრფივი ვერტიკალური, წრიული მარცხნივი და წრიული მარჯვნივი.

თუ ოპტიკურად აქტიური ნივთიერების ერთ-ერთი ენანტიომერული კონფორმაციის მქონე მოლეკულების შემცველ ხსნარში გავატარებთ სიბრტყეე პოლარიზებულ სინათლეს, მაშინ სინათლის სხივი მარცხნივ ან მარჯვნივ ბრუნვას დაიწყებს. ფიქსირებული ტალღის სიგრძის ( $\lambda$ ) და ტემპერატურის ( $t$ ) დროს ხვედრითი ოპტიკური ბრუნვა ( $\alpha$ ) და მოლური ოპტიკური ბრუნვა  $[\Phi]$  განისაზღვრებიან ფორმულებით:

$$[\alpha]_{\lambda}^t = \frac{\alpha}{\ell \rho}, \quad [\Phi]_{\lambda}^t = \frac{M[\alpha]_{\lambda}^t}{100},$$

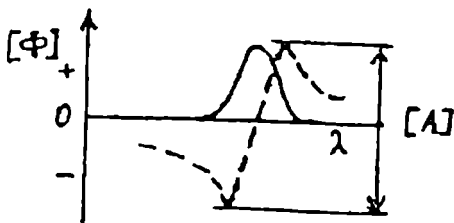
სადაც  $\alpha$  იზომება გრადუსებში;  $\ell$ —ოპტიკურად აქტიურ გარემოში სინათლის სხივის გზის სიგრძეა, დმ;  $\rho$ —კონცენტრაცია, გ/მლ;  $M$ —ოპტიკურად აქტიური ნივთიერების მოლური მასა, გ/მოლი.

ოპტიკური ბრუნვა აღიძვრება მარცხნივ და მარჯვნივ წრიულად პოლარიზებული სინათლის არაერთგვაროვანი გარდატეხის გამო. ამასთან, სინათლის სხივი შეიძლება დაიშალოს სხვადასხვა ინტენსივობის მქონე ორ წრიულად პოლარიზებულ კომპონენტად, რომლებიც ურთიერთსაწინააღმდეგო მიმართულებით ბრუნავენ. პოლარიზებული სინათლის სხივის ბრუნვა ხდება იმის გამო, რომ მარცხნივ და მარჯვნივ წრიულად პოლარიზებული სინათლის სხივის მიმართ ასიმეტრიულ მოლეკულებს არაერთნაირი გარდატეხის მაჩვენებელი აქვთ. ორი კომპონენტი სხვადასხვა სახით ურთიერთქმედებს არესთან და წაინაცვლებიან ფაზით. მათი რეკომბინაციის შემთხვევაში სინათლის პოლარიზაციის სიბრტყე შემობრუნდება საწყისი მიმართულებიდან  $\alpha$  კუთხით.



თუ ოპტიკური ბრუნვა იზომება სპექტრის იმ უბანში, რომელიც მნიშვნელოვნად დაშორებულია საკელევი ნაერთის შთანთქმის ზოლების უბნიდან, მაშინ ერთადერთი ფაქტორი, რომელიც გაელენას მოახდენს, იქნება გარდატეხის მაჩვენებელთა სხვაობა. ამასთან, გათვალისწინებულ უნდა იქნეს ის გარემოება, რომ ხვედრითი ბრუნვა დამოკიდებულია გამოყენებული სინათლის ტალღის სიგრძეზე, რომლის განსაზღვრაც ყოველთვის აუცილებელია.

ნაერთის (ნიეთიერების) შთანთქმის ზოლების უბანში გაზომვისას კუთრი ბრუნვა მკვეთრად იცვლება, რადგანაც ასევე მნიშვნელოვნად იცვლება ორივე იზომების გარდატეხის მაჩვენებელიც. ხვედრითი ან მოლური ოპტიკური ბრუნვის დამოკიდებულებას ტალღის სიგრძისაგან ეწოდება ოპტიკური ბრუნვის დისპერსია, ხოლო შთანთქმის ზოლების უბანში ბრუნვის მიმართულების საწინააღმდეგოდ მკვეთრ ცვლილებას – კოტონის დადებითი ეფექტი. შთანთქმის ზოლების მაქსიმუმების სიახლოვეს გარდატეხის მაჩვენებლის მკვეთრი ცვლილება იწვევს სინათლის სხივის ორი, წრიულად პოლარიზებული, კომპონენტის შთანთქმის სხვაობას. მარცხნივ და მარჯვნივ წრიულად პოლარიზებული სინათლის შთანთქმის მოლური მაჩვენებლის სხვაობას ( $\Delta\epsilon = \epsilon_l - \epsilon_r$ ) წრიული დიქროიზმი ეწოდება, რომელიც მჭიდროდაა დაკავშირებული ოპტიკური ბრუნვის დისპერსიის მრუდებთან და ნაერთის შთანთქმის სპექტრთან. ქვემოთ მოცემულ ნახაზზე წრიული დიქროიზმის მრუდი წარმოდგენილია როგორც  $\Delta\epsilon$ -ს ტალღის სიგრძისაგან ( $\lambda$ ) დამოკიდებულება.



$\Delta\epsilon$  სიდიდის ნიშანი ემთხვევა კოტონის ეფექტის ნიშანს (ამ შემთხვევაში დადებითს). ოპტიკური ბრუნვის დისპერსიის მრუდის მოლური ამპლიტუდა განისაზღვრება  $[A] = 40,28\Delta\epsilon$  დამოკიდებულებით ნა-

ჯერ კარბონილშემცველ ორგანულ ნაერთებში  $\pi \rightarrow \pi^*$  გადასვლებისათვის. ამპლიტუდის ნახევარ სიმაღლეზე წრიული დიქროიზმის სიგანე  $\Delta\nu = 0,95 (\nu_{\text{ახს.}} - \nu_{\text{ანს.}})$ , სადაც  $\nu_{\text{ახს.}}$  და  $\nu_{\text{ანს.}}$  — სიხშირეებია, რომლებიც ოპტიკური ბრუნვის დისპერსიის მრუდზე მაქსიმუმსა და მინიმუმს შეესაბამებიან.

უნდა აღინიშნოს, რომ რადგანაც წრიულ დიქროიზმს ადგილი აქვს მხოლოდ შთანთქმის ზოლის უბანში, მისი მრუდების ინტერპრეტირება გაცილებით იოლია, ვიდრე ოპტიკური ბრუნვის დისპერსიის მრუდებისა, რომელთა გართულება შეიძლება გამოიწვიოს შთანთქმის სხვადასხვა ზოლებით გადაფარვამ.

—

### 7.3.3. ნაერთის მოლეკულური სტრუქტურის დადგენა

ნიეთიერების აღნაგობასა და მის სპექტრს შორის არსებობს ღრმა ორგანული კავშირი, რაც ქიმიური ნაერთის აღნაგობისა და მოლეკულათა შორის ურთიერთქმედების შესწავლის ფართო შესაძლებლობას იძლევა.

მოლეკულის აღნაგობა გამოხატულებას პოულობს როგორც რხევით, ასევე ელექტრონულ შთანთქმის სპექტრებში. რხევის მკვეთრად გამოხატული მახასიათებლობა და მასთან დაკავშირებული შთანთქმის შერჩევითობა შთანთქმის ინფრაწითელ სპექტროსკოპიას მკვლევარის ხელში მძლავრ იარაღად ხდის ნაერთში ქიმიური ბმების რაობის და მოლეკულური სტრუქტურის დასადგენად.

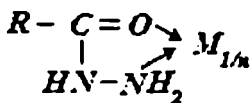
სპექტროსკოპიის სახის (ტიპის) გამოყენება დამოკიდებულია კონკრეტულ პრობლემაზე, თუ რა სტრუქტურული მონაცემების მიღებაა საჭირო. ძალიან ხშირად სპექტრის სხვადასხვა უბანში ნაერთის კვლევისას მიღებული შედეგები ავსებენ ერთი-მეორეს.

შთანთქმის ინფრაწითელი და კომბინაციური გაბნევის სპექტრები იძლევიან უმნიშვნელოვანეს ინფორმაციას ახლად სინთეზირებულ კოორდინაციულ ნაერთებში ბმების ხასიათისა და მათი მოლეკულური აღნაგობის შესახებ.

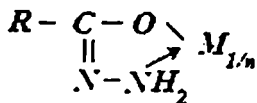
ხშირად, ქიმიკოსი სინთეზირებული ახალი ნაერთის ქიმიური მეთოდებით შესწავლისას საჭიროებს მის მიერ გაკეთებული დასკვნების დადასტურებას სხვა, დამოუკიდებელი მეთოდით. ასეთ მეთოდს, ამასთან საიმედოსა და სწრაფს წარმოადგენს რხევითი სპექტროსკოპია. ასე მაგალითად, არომატული ერთფუძიანი მჟავების პირველადი ჰიდრაზიდების ურთიერთქმედებისას გარდამავალი მეტალების მარილებთან ეთანოლ-წყალხსნარებში  $pH \approx 6-7$  პირობებში, მიღებული იყო კომპლექსები  $ML_nX_2 \cdot mH_2O$ , სადაც  $M = Cu, Zn, Cd, Mn, Fe, Co, Ni, Pt, L$  -ჰიდრაზიდის მოლეკულა  $R-CONHNH_2$ ,  $X = Cl, Br, NO_3, \frac{1}{2}SO_4$ ,  $n = 2$  ან  $3$ .

ასეთივე რეაქციების სუსტ ტუტე არეში ( $pH \approx 8-9$ ) ჩატარებისას მიღებული იყო კომპლექსები, რომლებიც აღარ შეიცავდა აციდოჯგუფებს და მათი შედგენილობა პასუხობდა ფორმულას  $ML_n \cdot mH_2O$ . ეს კომპლექსები მკვეთრად განსხვავდებოდნენ სუსტმჟავა არეში მიღებული კომპლექსებისაგან არა მარტო იმიტომ, რომ არ შეიცავდნენ აციდოჯგუფებს, არამედ პრაქტიკული უხსნადობით წყალსა და ორგანულ გამხსნელებში.

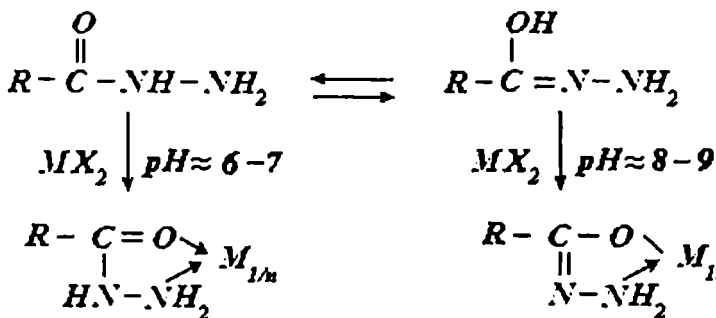
ამ ორი სხვადასხვა ტიპის კომპლექსების რხევითი სპექტრების შესწავლამ აჩვენა, რომ აციდოჯგუფების შემცველ კომპლექსებში ორგანული ლიგანდები კოორდინირებულია ამიდურ ტაუტომერულ ფორმაში



ხოლო სუსტტუტე არეში სინთეზირებულ კომპლექსებში – დეპროტონირებულ იმიდოალკოპოლურ ტაუტომერულ ფორმაში.



ამრიგად, სპექტროქიმიური მეთოდით დადგენილი იქნა, რომ აღნიშნული ორგანული ლიგანდები – ჰიდრაზიდები სარეაქციო არეს მუავიანობისაგან დამოკიდებულებით: წარმოქმნიან კოორდინაციულ ნაერთებს ორ სხვადასხვა ტაუტომერულ ფორმაში:

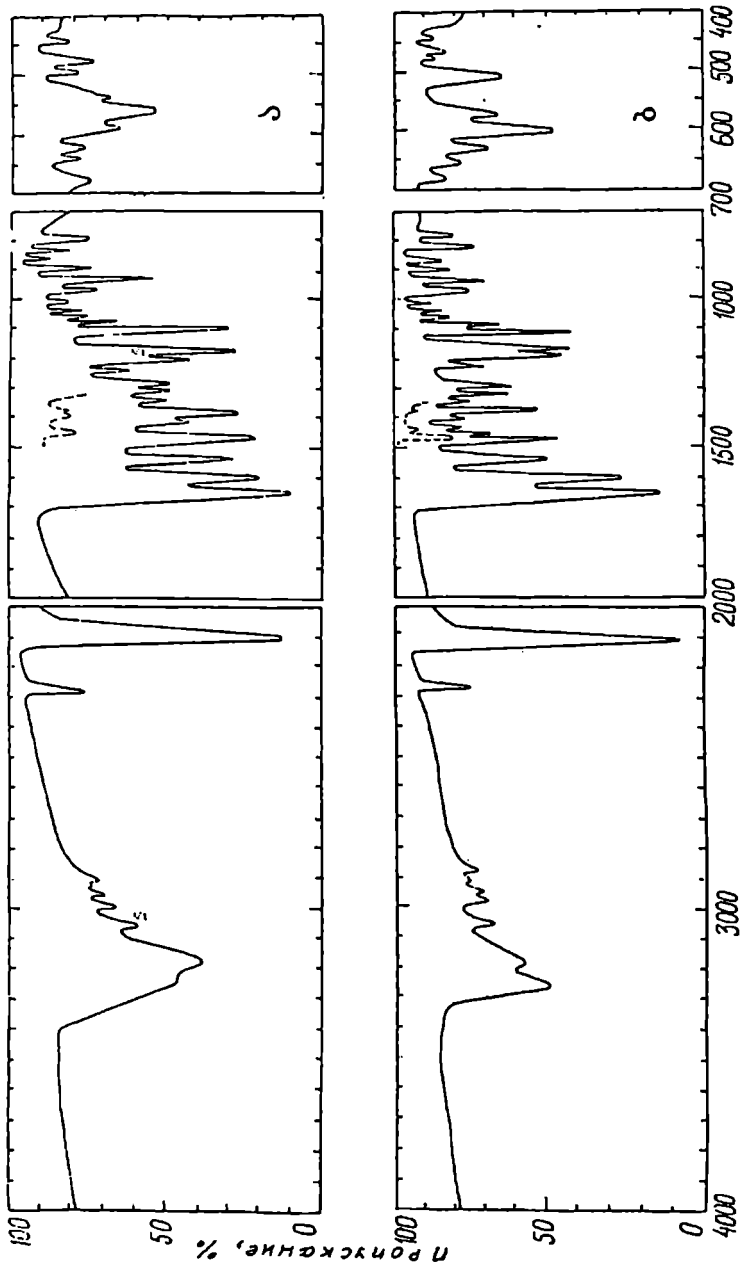


ქიმიური ანალიზის საფუძველზე დადგენილი იყო, მაგალითად, ბენზოილჰიდრაზინთან კობალტის ორივე ტიპის კომპლექსების შედგენილობა:  $Co(C_6H_5CONHNH_2)_3Cl_2 \cdot H_2O$ ,  $Co(C_6H_5CONNH_2)_3$ . სპექტროსკოპიული მეთოდით, როგორც ზემოთ ვნახეთ, ნაჩვენებია, რომ პირველ კომპლექსში ორგანული ლიგანდი კოორდინირებულია ამიდურ, ხოლო მეორეში – დეპროტონირებულ იმიდოალკოპოლურ ტაუტომერულ ფორმაში. ამასთან, მეორე კომპლექსი განეკუთვნება შიდაკომპლექსურ ნაერთთა კლასს. გამომდინარე სპექტროქიმიური კვლევით მიღებული შედეგებიდან ორივე კომპლექსის მოლეკულას აქვს ოქტაედრული აღნაგობა:  $[Co(C_6H_5CONHNH_2)_3]Cl_2 \cdot H_2O$ ,  $[Co(C_6H_5CONNH_2)_3]$ .

სპექტროქიმიური კვლევების საფუძველზე გამომუშავებულია, მაგალითად,  $NCS^-$  ჯგუფის მიერ სხვადასხვა ფუნქციის შესრულების განსაზღვრის კრიტერიუმები. ასე, მაგალითად, მისი იონური ფუნქციის შემთხვევაში  $\nu(CN) \approx 2050-2060$  სმ<sup>-1</sup>,  $\nu(CS) \approx 750$  სმ<sup>-1</sup>. თუ  $NCS^-$  უშუალოდაა დაკავშირებული მეტალთან აზოტის ატომის საშუალებით  $M - NCS$ :  $\nu(CN) > 2050$  სმ<sup>-1</sup>,  $\nu(CS) \approx 800$  სმ<sup>-1</sup>. გოგირდის ატომით ბმის წარმოქმნის შემთხვევაში  $M - SCN$   $\nu(CN) > 2050$  სმ<sup>-1</sup>,  $\nu(CS) \approx 700$  სმ<sup>-1</sup>. ხიდური ფუნქციის შესრულების შემთხვევაში  $M - NCS - M$ :  $\nu(CN) \approx 2130-2180$  სმ<sup>-1</sup>,  $\nu(CS) \approx 700-800$  სმ<sup>-1</sup>.

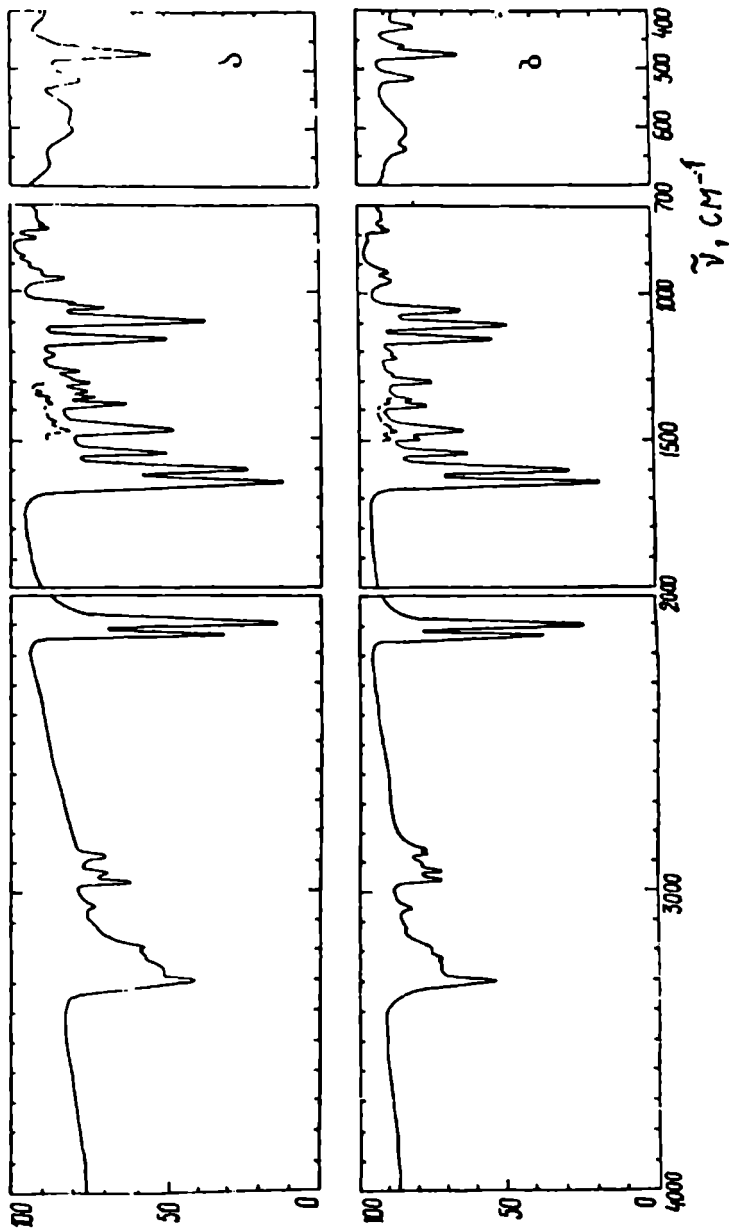
ასევე ერთმნიშვნელოვნადაა დადგენილი კოორდინაციული ნაერთების შიდა სფეროში არსებული  $NCS^-$  ჯგუფების ერთი-მეორის მიმართ ცის- და ტრანს- მდგომარეობაში განლაგების სპექტრალური კრიტერიუმი, დადასტურებული პირდაპირი - რენტგენოსტრუქტურული მეთოდით.

მაგალითის სახით სურ. 99 წარმოდგენილია ოქტაედრული აღნაგობის მქონე კობალტის და ნიკელის ჰიდრაზიდოკომპლექსების შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრები, რომლებშიც იზოთიოციანატოჯგუფები ერთი-მეორის მიმართ განლაგებულია ტრანს-მდგომარეობაში. სურ. 100 მოცემულია ანალოგიური აღნაგობის იმავე მეტალების ჰიდრაზიდოკომპლექსების შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრები, სადაც იზოთიოციანატოჯგუფები ერთი-მეორის მიმართ მდებარეობენ ცის- მდგომარეობაში.



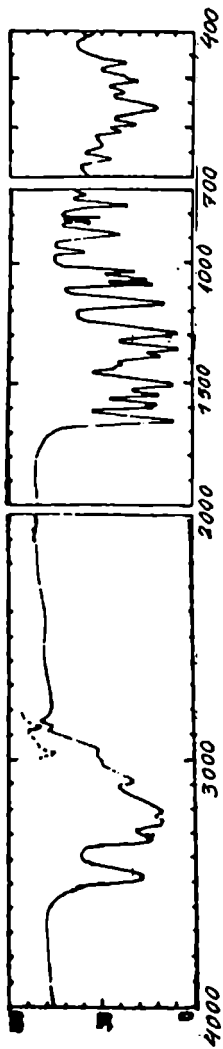
სურ. 99. შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრები:

ა -  $\text{Co}(\text{NCCH}_2\text{CONHNH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ; ბ -  $\text{Ni}(\text{NCCH}_2\text{CONHNH}_2)_2(\text{NCS})_2$ .

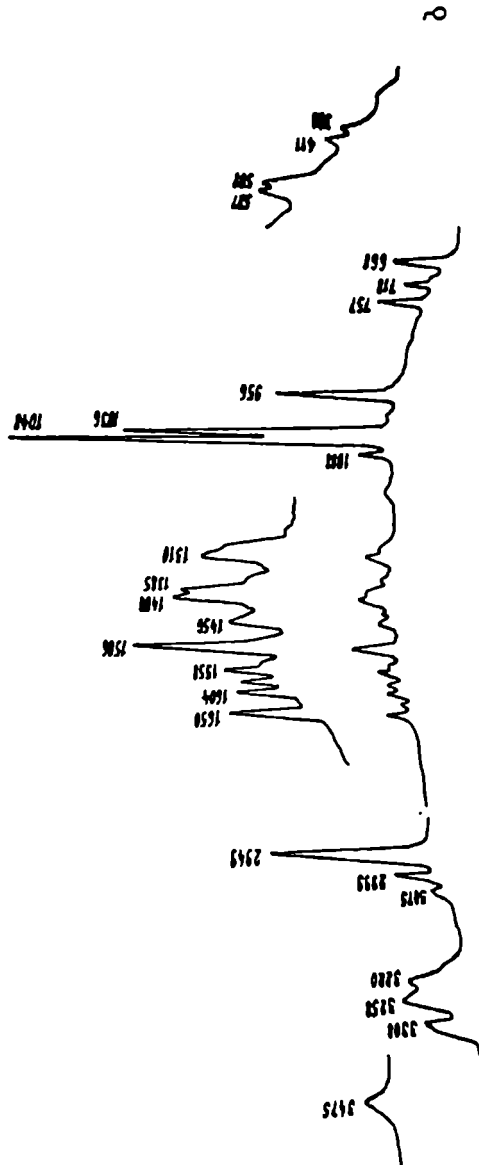


სურ. 100. შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრები:

ა -  $\text{Co}(\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_4\text{CONHNH}_2)_2(\text{NCS})_2$ ; ბ -  $\text{Ni}(\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_4\text{CONHNH}_2)_2(\text{NCS})_2$ .



ა



ბ

სურ. 101. კომპლექსის  $Sc(H_3CCONHNH_2)_2(NO_3) \cdot C_2H_5OH$  შთანთქმის ინფრაწითელი (ა) და კომბინაციური გაბნევის (ბ) სპექტრები.



სურ. 101-ზე წარმოდგენილია სკანდიუმის აცეტილ-ჰიდრაზინოკომპლექსის შთანთქმის ინფრაწითელი და კომბინაციური გაბნევის სპექტრები. სპექტროქიმიური მონაცემების საფუძველზე გაკეთებული დასკვნები ერთმნიშვნელოვნად დადასტურებულია რენტგენოსტრუქტურული კვლევებით (იხ. მითითებული ლიტერატურა, მაგალითად, [16]).

- Thompson D'Arcy W. On Growth and Form. University Press. Cambridge, England. 1915.
2. С. Гольдшмидт. Стереохимия. Перевод с немецкого, под ред. А.А. Гринберга и Ю. С. Залькина. ГНТИ химической лит. М.-Л. 1940.
  3. К. Джерасси. Дисперсия оптического вращения. Перевод с англ. под ред. В. М. Потапова. М. Мир. 1962.
  4. Г. Б. Бокий, М. А. Порай-Кошиц. Рентгеноструктурный анализ. М.: Изд-во МГУ им. М. В. Ломоносова. 1964.
  5. М. А. Порай-Кошиц, Э.А. Гилянская. Кристаллохимия. М.: ВИНТИ. 1966.
  6. Г. Джаффе, М. Орчин. Симметрия в химии. Перевод с англ. под ред. М. Е. Дяткиной. М. Мир. 1967.
  7. Э. Илиел и др. Конформационный анализ. Перевод с англ. под ред. А. А. Ахрема. М.: Мир. 1969.
  8. М. Рабан, К. Мислоу. Избранные проблемы Стереохимии. М.: Мир. 1970.
  9. К. Блага и др. Основы стереохимии и конфационного анализа. Л.: Изд-во «Химия». 1974.
  10. Л. Полинг. Общая химия. М.: Мир. 1974.
  11. М. Ноградь. Стереохимия. Перевод с англ. под ред. В. А. Никанорова. М.: Мир. 1984.
  12. Ю. Н. Кукушкин. Химия координационных соединений. М.: «Высшая школа». 1988.
  13. Н. С. Ахметов. Общая и неорганическая химия. М.: «Высшая школа». 1981, 1988.
  14. Дж. Марч. Стереохимия. Перевод с англ. под ред. И. П. Белецкой. М.: Мир. 1988.
  15. Р. И. Мачхошвили. Гидразин (получение, свойства, строение). М.: Наука. 1995.
  16. Р. И. Мачхошвили. Химия гидразидокомплексов металлов. М. Наука. 1996.
  17. რ. მაჩხოშვილი. კოორდინაციული ქიმიის შესავალი. თბილისი. განათლება. 1992, 2004.

# შინაარსი

შესავალი.....	5
თავი პირველი.....	9
ნახშირბადატომის სტრუქტურული თავისებურება. ვანტ-კოფი და ლე-ბელი ორბანულ ნაერთთა სტრუქტურის შესემდეგლები. ალფრედ ვერნერის შრომები.....	9
თავი მეორე .....	15
სიმეტრიის ელემენტები და სიმეტრიის ოპერაციები.....	15
2.1. სიმეტრიის ღერძის ირგვლივ ბრუნვა.....	19
2.2. ინვერსია, ან სიმეტრიის ცენტრში არეკვლა.....	21
2.3. სიმეტრიის სიბრტყეში არეკვლა (საკუთრი სიბრტყე).....	22
2.4. ღერძის ირგვლივ შემოტრუნვა ან ღერძის აკრანდირებულ სიბრტყეში არეკვლით.....	23
2.5. ბრუნვით-ინვერსიული ღერძები.....	25
თავი მესამე.....	27
სიმეტრიის ჯეოსამი ოპერაციები და წერტილოვანი ჯგუფები.....	27
3.1. ჯგუფები, ოპერაციის გადასრავლება, სტრუქტურული პროექციები .....	27
3.2. წერტილოვანი ჯგუფები .....	34
3.3. წერტილოვანი ჯგუფისადმი მიკუთვნების ბანსაზღვრის წესი .....	45
თავი მეოთხე .....	48
კრისტალების სიმეტრია. კრისტალური სისტემები. ძირითადი გზა კრისტალურში.....	48
4.1. კრისტალური მდგომარეობა .....	48
4.2. სიბრტყივი ცხაურები და სიბრტყივი ჯგუფები.....	51
4.3. სივრცითი ცხაურები და სივრცითი ჯგუფები.....	57

4.4. ქიმიური ბმის ტიპები კრისტალებში .....	63
<i>თავი მეხუთე</i> .....	69
<i>აკრობატული და კოორდინაციული ნაერთების ძირითადი სტრუქტურული ტიპები</i> .....	69
<i>თავი მეექვსე</i> .....	85
<i>კოორდინაციული ნაერთების კრისტალოქიმია</i> .....	85
6. 1. მეტალების კოორდინაციული ნაერთები სხვადასხვა ლიგანდებთან.....	85
6. 2. მეტალების კოორდინაციული ნაერთები ჰიდრაზინკარბონემჟავასთან.....	101
6.3. მეტალების ჰიდრაზიდოკომპლექსები.....	113
<i>თავი მეშვიდე</i> .....	136
<i>სამეტროქიმია</i> .....	136
7.1. სიმეტრია რხევით სამეტროსკოპიაში .....	138
7.2. მრავალატომიანი მოლეკულების რხევები და სამეტრები.....	144
7.3. ქიმიაში რხევითი სამეტროსკოპიის გამოყენების ზოგიერთი ასპექტი.....	146
7.3.1. ხსნარებში კომპლექსწარმოქმნის შესწავლა .....	147
7.3.2. ოპტიკური იზომერიის კვლევა.....	151
7.3.3. ნაერთის მოლეკულური სტრუქტურის დადგენა.....	154