

მეცნიერულ-პოპულარული სერია

ვიქტორ კოკონაშვილი

მოლეკულების აღნაგობა

პროფ. ვ. ყოკოჩაშვილის წიგნი „მოლეკულების აღნაგობა ეძღვნება ფიზიკური ქიმიის ერთ-ერთ რთულ პრობლემას — ქიმიური ბმის თეორიისა და მოლეკულის აღნაგობის მეცნიერულ-პოპულარულ განხილვას.

ავტორი წიგნში იხილავს ატომის აღნაგობის საკითხებს, სახელდობრ, ელექტრონების განაწილებას ატომში, ელექტრონული ღრუბლების ფორმების თვალსაჩინო მოდელებს, იონურ ბმას, ატომთა ვალენტურ მდგომარეობას, კოვალენტურ ბმას, ორბიტების ჰიბრილიზაციას და ჯერად ბმებს, დონორ-აქცეპტორულ ბმას და სხვ.

თეორიული მასალა ილუსტრირებულია კონკრეტული მაგალითებით.

ავტორის წინასიტყვაობა

ეს წიგნი ავტორმა მიუძღვნა ფიზიკური ქიმიის ერთ-ერთი რთული პრობლემის — ქიმიური ბმის თეორიისა და მოლეკულის აღნაგობის — მეცნიერულ-პოპულარულ განხილვას.

პირველ ნაწილში ავტორი იხილავს ატომის აღნაგობის საკითხებს, სახელდობრ ელექტრონების განაწილებას ქვანტური უჯრედების მიხედვით, ელექტრონული ღრუბლების ფორმების თვალსაჩინო მოდელებს და სხვ.

მეორე ნაწილში ავტორი იხილავს იონურ ბმას, ატომთა ვალენტურ მდგომარეობებს, კოვალენტურ ბმას, ორბიტების ჰიბრიდიზაციას და ჯერად ბმებს. წიგნში განხილულია აგრეთვე დონორ-აქცეპტორული ბმა და სხვ.

თეორიული მასალა ილუსტრირებულია კონკრეტული მაგალითებით.

მიუხედავად იმისა, რომ ავტორი შეეხო მოლეკულის აღნაგობის მრავალ საკითხს, წიგნი არ ამოწურავს განსახილველ საკითხებს.

ნაწილი პირველი

ატომის აღნაგობა

1. შესავალი

„მატერია არის ფილოსოფიური კატეგორია იმ ობიექტური რეალობის აღსანიშნავად, რომელიც ადამიანს მოცემული აქვს მის შეგრძნებებში, რომლის ასლს, ფოტოგრაფიას, ანარეკლს ჩვენი შეგრძნებები იძლევა, რომელიც არსებობს მათ დამოუკიდებლად“¹.

სამყაროში მარადი არაფერია, გარდა მარად ცვალებადი, მარად მოძრავი მატერიისა და იმ კანონებისა, რომლებიც ასახავენ მატერიის განუწყვეტელ ცვლილებას და განვითარებას.

მატერიის კონკრეტული გამოვლენა ნივთიერებაა, რომლის მრავალფეროვან თვისებებს მისი აღნაგობის სირთულე განაპირობებს. მოძღვრება ნივთიერების აღნაგობაზე მოცემულ მომენტში არის მხოლოდ მიახლოება ობიექტურ სინამდვილესთან, არის მეცნიერების განვითარების ერთ-ერთი საფეხური, მისი განვითარების ერთ-ერთი ეტაპი.

ნივთიერების თვისებები გამუდმებით იცვლება არა მარტო ერთმანეთთან და გარემოსთან ურთიერთმოქმედების გამო, არამედ სპონტანურადაც². კერძოდ, ქიმიური ელე-

¹ ვ. ი. ლენინი, თხზულებანი, ტ. 14, გვ. 155.

² ე. ი. გარემოს გავლენის გარეშე.

მენტების ამგვარ ცკლილებებს საფუძვლად უძევს ატომგულის აღნაგობისა და შემადგენლობის ცვლილება.

ბუნების იმ მოვლენებიდან, რომლებშიც თავს იჩენენ ატომგულის თვისებები, თავდაპირველად აღმოჩენილ იქნა რადიაქტივობა.

მეცხრამეტე-მეოცე საუკუნეთა მიჯნაზე ცნებამ ატომის შესახებ მნიშვნელოვანი ცვლილება განიცადა. ამჟამად მეცნიერება აღარ იხილავს ატომს როგორც ნივთიერების დაყოფის ზღვარს, როგორც განუყოფელსა და უსტრუქტურო ნაწილას, რომელიც ნივთიერების სხვადასხვაგვარი გარდაქმნის დროსაც კი უცვლელი რჩება.

აღნიშნულ პერიოდში აღმოჩენილი იყო რადიაქტიური ელემენტები, კათოდური და რენტგენული სხივები, შესწავლილ იქნა ელექტროლიზის მოვლენები და ფოტოეფექტი, რომელთა მექანიზმის გარკვევამ ნათელყო ატომის სირთულე და ამით ნივთიერების აღნაგობაზე ძველი წარმოდგენები შეცვალა.

მთელი რიგი ექსპერიმენტული მონაცემებიდან გამომდინარე შემუშავებულ იქნა ატომის აღნაგობის ნუკლეალური თეორია, რომელიც ამჟამად საყოველთაოდ მიღებულია.

ატომი შედგება მცირე სიდიდის ($r=10^{-13}$ სმ) დადებითად დამუხტული მძიმე ატომგულისაგან და მის ირგვლივ დიდი სიჩქარით მბრუნავი ელექტრონებისაგან. ატომგულის გარშემო მიმოქცევაში ბუფი ელექტრონები ქმნიან ელექტრონულ გარსს, რომლის დიამეტრი აღწევს დაახლოებით 10^{-8} სმ-ს. ატომგული და ელექტრონები ატომში შეკავშირებული არიან ელექტროსტატიკური მიზიდვის ძალებით, რომლებიც აწონასწორებენ ელექტრონების დიდი სიჩქარით მოძრაობის გამო აღძრულ ძალებს. სხვადასხვა ელემენტის ატომგულის მასა და მუხტი განისაზღვრება პროტონის მასისა და მუხტის ერთეულებით. თუ ელექტრონის მუხტს ($e=4,8 \cdot 10^{-10}$ ელ. სტ. ერთ.) ერთეულად მივიჩნევთ, რასაც ელემენტარულ მუხტს უწოდებენ, მაშინ ატომგულის მუხტი მთელი Z რიცხვით გამოისახება.

ატომი შედგება ნაწილაკებისაგან, რომლებსაც ელემენტარულს ვუწოდებთ.

ცნება „ელემენტარული ნაწილაკი“ შეესაბამება მარტივ ნაწილაკს. შეიძლება ითქვას, რომ ბუნებათმეცნიერებას თავისი განვითარების სხვადასხვა ეტაპზე ცნება ელემენტარული ნაწილაკი გადააქვს ისეთ ნაწილაკებზე, რომელთა აღნაგობა ჩვენთვის ჯერ კიდევ უცნობია. ამიტომ ელემენტარულს ვუწოდებთ ყველა ნაწილაკს, რომლებიც არ შედგებიან ჩვენთვის ცნობილი სხვა ნაწილაკებისაგან. აქედან ჩანს, რომ ეს ცნება დროებითად, ფარდობითად უნდა ჩითვალოს.

თუ მეცხრამეტე საუკუნის დამლევს ატომები წარმოდგენილი იყო როგორც უმარტივესი ნაწილაკები, როგორც „სამყაროს აგურაკები“, მეოცე საუკუნეში, როცა გაიჩნდა ატომების რთული აღნაგობა, ცნება ელემენტარული ნაწილაკი გადატანილ იქნა ელექტრონებზე და ატომგულებზე, ვინაიდან სხვადასხვა ელემენტის ატომგული იმ ხანებში უმარტივეს ნაწილაკად იყო მიჩნეული.

ამჟამად ცნობილია, რომ ატომგული შედგება პროტონებისა და ნეიტრონებისაგან, ამიტომ დღეს ამ უკანასკნელთ იხილავენ როგორც ელემენტარულ ნაწილაკებს. ელემენტარულ ნაწილაკებად მიჩნეულია აგრეთვე ელექტრონი, პოზიტრონი (დადებითი ელექტრონი), ფოტონი, ნეიტრინო, მეზონები, ჰიპერონები და სხვ. ჯერ-ჯერობით, სანამ არ მოგვეპოვება ცნობები მათი სირთულის შესახებ, ამ ნაწილაკებს ელემენტარულს ვუწოდებთ, თუმცა მათი ელემენტარულობა შეფარდებითია. აქედან ჩანს, რომ ცნება ელემენტარული ნაწილაკი ერთგვარად ჩვენი ცოდნის დონეს გამოხატავს.

„...დიალექტიკური მატერიალიზმი დაჟინებით ამტკიცებს, რომ ადამიანის წინმავალი მეცნიერების მიერ ბუნების შეცნობის ყველა ამ მიჯნას დროებითი, შედარებითი, დაახლოებითი ხასიათი აქვს. ელექტრონი ისევე ამოუწურავია როგორც ატომი, ბუნება უსასრულოა, მაგრამ იგი

დაუსრულებლად არსებობს...“¹ ლენინის ეს უდიდესი მნიშვნელობის თეზისი ელექტრონის ამოუწურავობის შესახებ ბრწყინვალედ დაადასტურა ფიზიკის განვითარებამ. ამჟამად აღმოჩენილია ელექტრონის მანამდე უცნობი თვისებები და აგრეთვე ახალი ელემენტარული ნაწილაკებიც.

ატომგულის უმნიშვნელოვანესი დამახასიათებელი სიდიდეა მისი მუხტი, რომელიც განსაზღვრავს მოცემული ატომის შესაბამისი ელემენტის ინდივიდუალობას. არანაკლები მნიშვნელობის პარამეტრია ატომგულის მასა. ატომგულის მუხტი და მასა ცალსახად განსაზღვრავს ატომგულის დანარჩენ თვისებებს. ატომგულის M მასა და Z მუხტი იცვლება მასისა და მუხტის შენახვის კანონების შესაბამისად.

ატომგული შედგება მხოლოდ მძიმე ნაწილაკებისაგან — პროტონებისა და ნეიტრონებისაგან, რომლებსაც ატომგულური ძალები აკავშირებს ერთმანეთთან. ამ ძალების მოქმედების სფერო განსაზღვრავს ატომგულის მოცულობას.

ატომგულის რადიუსი იზრდება ატომგულის მასის კუბური ფესვის მიხედვით.

ატომგულის თვისებები დამოკიდებულია მის აღნაგობაზე. ერთნაირი მუხტისა და მასის ატომგულები სხვადასხვაგვარი აღნაგობის გამო განსხვავებულ თვისებებს იჩენენ. თავის მხრივ, პროტონების მოცემული რიცხვის და ნეიტრონების სხვადასხვა რიცხვის შემცველობისას ატომგულის თვისებები მნიშვნელოვნად იცვლება.

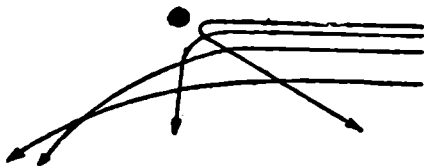
ატომის აღნაგობის მასპერიმენტული საფუძვლავი

ქიმიისა და ფიზიკის განვითარების შედეგად მეცხრამეტე-მეოცე საუკუნეთა მიჯნაზე დაგროვდა მნიშვნელოვანი ფაქტები, რომლებიც ატომის რთულ აღნაგობაზე მიუთითებენ. ასეთი იყო ელექტროლიზის, რადიაქტივობის, ფოტოეფექტის და სხვ. მოვლენები, რომელთა ახსნამ ატომის აღნაგობის გარკვევა მოითხოვა.

¹ ვ. ი. ლენინი, თბულებანი, ტ. 14, გვ. 332.

სხვადასხვა ნივთიერების ოპტიკური და ელექტრული თვისებებიდან გამომდინარეობს, რომ ატომების შემადგენლობაში შედიან ელექტრონები, რომელთა რიცხვის გარკვევა მოცემულ ატომში რამდენიმე მეთოდით შეიძლება. ერთ-ერთი მეთოდი აგებულია რენტგენის სხივების „განზნევაზე“ ანუ მეორადი სხივების აღძვრაზე, რომელთა ინტენსივობა ატომში შემავალი ელექტრონების რიცხვის პროპორციულია. მსუბუქ ელემენტებზე რენტგენის სხივების განზნევის გამოკვლევების დახმარებით ბარკლამ (1909) დაამტკიცა, რომ მოცემული ელემენტის ატომში შემავალი ელექტრონების რიცავი უდრის ელემენტის ნომერს პერიოდულ სისტემაში, რასაც შემდეგში ატომური ნომერი ანუ რიგობრივი რიცხვი უწოდა.

ატომის აღნაგობის თეორიას საფუძვლად დაედო რეზერფორდის გამოკვლევები, რომლებიც 'მედიუმში' მდგომარეობდა. რადიელემენტის დაშლის დროს გამოსხივებული α -ნა-



ნახ. 1. α -ნაწილაკების განზნევა

წილაკების ვიწრო კონა თავის გზაზე ხვდებოდა მეტალის თხელ ფურცელს. რეზერფორდის ცდების თანახმად, ნივთიერების თხელ ფენებში შეღწევისას α -ნაწილაკები იცვლიან თავიანთ სწორხაზოვან მიმართულებას (ნახ. 1). α -ნაწილაკების განზნევა იმით აიხსნება, რომ ნივთიერებაში შეღწევისას α -ნაწილაკი ურთიერთმოქმედებაში შედის დადებითად დამუხტულ, მცირე მოცულობის მქონე ატომგულთან, რომელსაც ატომის თითქმის მთელი მასა შეესაბამება.

რეზერფორდმა ექსპერიმენტულად განსაზღვრა სხვადასხვა ელემენტის ატომგულებზე განზნეული α -ნაწილაკების განაწილება კუთხეების მიხედვით. აქედან გამომდინარე მან

გამოთვალა რამდენივე ელემენტის ატომგულის Z' მუხტები (ელექტრონის მუხტის ერთეულებში), რომელიც ამ ელემენტების Z -რიგობრივ რიცხვთან კარგ თანამობაში აღმოჩნდა:

	Cu	Ag	Pt
Z'	29,3	46,3	77,4
Z	29	47	78

ამ გზით ექსპერიმენტულად იქნა დამტკიცებული, რომ ატომგულის მუხტის სიდიდე უდრის ელემენტის ნომერს პერიოდულ სისტემაში.

ელემენტის რიგობრივი რიცხვი Z გამოსახავს ატომგულის ელემენტარული მუხტების რიცხვს და ელექტრონულ გარსში ატომგულის ირგვლივ მიმოქცევაში მყოფ ელექტრონთა რიცხვს. მსუბუქი ელემენტების შემთხვევაში რიგობრივი რიცხვი დაახლოებით მათი ატომური წონის ნახევრის ტოლია.

განხილული ექსპერიმენტული მონაცემებიდან გამომდინარე, რეზერუორდმა ჩამოაყალიბა ატომის აღნაგობის ბირთვული თეორია, რომლის თანახმად, ატომი შედგება დადებითად დამუხტული მძიმე ატომგულისაგან და მის ირგვლივ მყოფი ელექტრონული გარსისაგან. ელექტრონულ გარსში ელექტრონების მიმოქცევას ატომგულის ირგვლივ განაპირობებს ელექტრული ძალები. ელექტრონთა მიმოქცევის ორბიტები, თავის მხრივ, განსაზღვრავენ ატომის რადიუსს. ატომგულის ირგვლივ Z ელექტრონი ბრუნავს როცა ატომი ელექტრონიტრალურია. ამრიგად, წყალბად-ატომში პროტონის (წყალბადის ატომის ბირთვის) ირგვლივ ერთი ელექტრონი ბრუნავს, ჰელიუმის ატომში ორბიტებზე ორი ელექტრონი მოქრაობს, ლითიუმის ატომში — სამი ელექტრონი, ვერცხლის ატომში 47 და ურანის ატომში 92 ელექტრონი.

ატომების ელექტრონული გარსები შრეობრივ აღნაგობას იჩენენ, რომელთაგან პირველი, ანუ K -შრე ორ ელექტრონს შეიცავს. მეორე, ანუ L -შრე — რვა ელექტრონს, მესამე, ანუ M -შრე — თვრამეტს და ა. შ.

ატომის ელექტრონული გარსი განაპირობებს ელემენტის ფიზიკურ და ქიმიურ თვისებებს.

ელექტრონის მიმოქცევა ორბიტზე შეიძლება განხილულ იქნეს როგორც წრიული დინი, რაც დაკავშირებულია ნივთიერების ელექტრულ და მაგნიტურ თვისებებთან. ელექტრონული გარსის ელექტრული ველი განსაზღვრავს ატომის ოპტიკურ თვისებებს.

ელექტრონების დაკარგვა-შეძენით აიხსნება დადებითი და უარყოფითი იონების წარმოქმნა. ვინაიდან ქიმიური რეაქციების დროს იცვლება ატომების გარეგარსის ელექტრონების მდგომარეობა, ამიტომ რეზერფორდის პლანეტური მოდელის დახმარებით შესაძლო აღმოჩნდა ელემენტების ქიმიური თვისებების ახსნა.

მეცნიერების შემდგომმა განვითარებამ ნათელყო, რომ რეზერფორდის ატომგულური წარმოდგენების პრინციპული მხარე მართებულია.

პლანეტური მოდელის ნაკლოვანება

ატომის აღნაგობის რეზერფორდის თეორია მეტად ნაყოფიერი იყო, რადგან ამ თეორიის დახმარებით შესაძლო გახდა ელემენტების ფიზიკური და ქიმიური თვისებების ახსნა. მაგრამ ასეთი წარმატების მიუხედავად, რეზერფორდის მოდელი კლასიკური ფიზიკის ძირითად დებულებებთან წინააღმდეგობაში აღმოჩნდა. სინათლის ელექტრომაგნიტური თეორიის თანახმად, პერიოდული მოძრაობის გამო ელექტრონი სინათლეს უნდა ასხივებდეს. ამიტომ, ატომში ორბიტზე ელექტრონის მიმოქცევის დროს ადგილი უნდა ჰქონდეს გამოსხივებას, რის გამო ატომის სრული ენერგია უნდა შემცირდეს. ამის შედეგად ელექტრონი თანდათანობით უნდა მიუახლოვდეს ატომგულს და, ბოლოს, მას უნდა დაეცეს. მაშასადამე, გამოდის, რომ ატომი უმდგრად სისტემას უნდა წარმოადგენდეს. მაგრამ, როგორც ამას დაკვირვება გვიჩვენებს, ატომები მდგრადია, მაშასადამე, ატომში ელექტრონები არ ეცემიან ატომგულზე.

აღნიშნულის გარდა, კლასიკური ელექტროდინამიკიდან გამომდინარეობს, რომ რადგან ელექტრონი ორბიტზე მიმოქცევისას თანდათან უნდა უახლოვდებოდეს ატომგულს, იგი უწყვეტად უნდა ასხივებდეს ცვალებადი სიგრძის ტალღებს.

თუ დავუშვებთ, რომ გამოსხივებული სინათლის რხევის სიხშირე ელექტრონის მიმოქცევის სიხშირის ტოლი ან მისი ჯერადია, მივიღებთ, რომ ატომგულთან მიახლოებისას უნდა გამოსხივდეს უწყვეტი სპექტრი. სინამდვილეში ატომთა სპექტრი წყვეტილია და ცალკეული ხაზებისაგან შედგება.

ჯერ კიდევ 1885 წელს ბალმერმა ემპირიული ფორმულის დახმარებით დაუკავშირა ერთმანეთს ატომური წყალბადის სპექტრული ხაზები. თუ ბალმერის ფორმულაში ტალღის სიგრძის ნაცვლად რხევის ν -სიხშირეებს შევიტანთ, მივიღებთ:

$$\nu = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right),$$

სადაც $n=2$, $p=3, 4, 5, \dots$, ხოლო $R=3,29 \cdot 10^{15}$ წარმოადგენს რიდბერგის მუდმივას. აქ ν გამოსახავს რხევის სიხშირეს, რომელიც უდრის სინათლის c სიჩქარისა და ტალღის λ სიგრძის ფარდობას

$$\nu = \frac{c}{\lambda}.$$

რეზერფორდის მოდელისა და კლასიკური ელექტროდინამიკის აღწერილი წინააღმდეგობანი ამოხსნა ბორმა თავის თეორიაში, რომელმაც მოძღვრებაში ატომის აღნაგობის შესახებ არსებითი როლი შეასრულა.

ბორის თეორია

ბორმა თავის თეორიაში განიხილა უმარტივესი ატომის — წყალბად-ატომის აღნაგობა. თეორიის არსი შეიძლება სამი დებულების სახით ჩამოყალიბდეს, რომლებიც არ წარმოადგენენ უდავო კეშმარიტებებს. ამასთან ამ დებულებათა

დამტკიცება იმ ხანებში არ ხერხდებოდა (ამჟამად ისინი გამომდინარეობენ ტალღური მექანიკიდან), ამიტომაც მათ თავის დროზე პოსტულატები ეწოდა.

ატომის თეორიის აგებისას ბორი ექსპერიმენტული მონაცემებიდან გამომდინარეობდა და თავისი პოსტულატებით მნიშვნელოვანი კორექტივები შეიტანა რეზერფორდის მიერ შემუშავებულ თეორიაში.

რეზერფორდმა ატომის აღნაგობის თავის თეორიაში ელექტრონების ყოველგვარი სიდიდის ორბიტების არსებობა გაითვალისწინა.

ბორმა თავისი თეორიით გარკვეულობა შეიტანა ამ საკითხში.

პირველი პოსტულატით ელექტრონი ბრუნავს არა ნებისმიერზე, არამედ მხოლოდ გარკვეული მნიშვნელობის, ე. ი. ქვანტურ ორბიტზე. ქვანტურია ისეთი ორბიტი, რომელიც აკმაყოფილებს შემდეგ პირობას:

$$2\pi r m v = n h$$

სადაც r არის ორბიტის რადიუსი, რომელზედაც m მასის მქონე ელექტრონი v სიჩქარით მოძრაობს, n მთელი რიცხვია ($n=1, 2, 3, \dots$), ხოლო h მოქმედების ქვანტია.

მეორე პოსტულატის თანახმად, ქვანტურ ორბიტზე ელექტრონის მოძრაობა სტაციონარულია, ე. ი. ქვანტურ ორბიტზე მიმოქცევისას ელექტრონი, წინააღმდეგ კლასიკური ელექტროდინამიკისა, სინათლეს არ ასხივებს.

სტაციონარულ ორბიტზე მოძრაობისას ელექტრონის ცენტრიდანული ძალა $\frac{mv^2}{r}$ და მიზიდვის ძალა $\frac{e^2}{r^2}$ ერთმანეთის ტოლია:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}.$$

მიღებული ორი გამოსახულებიდან გამომდინარეობს, რომ ქვანტური ორბიტების რადიუსები აკმაყოფილებენ შემდეგ პირობას:

$$r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m e^2}.$$

თუ ამ ფორმულის მიხედვით გავიანგარიშებთ წყალბად-ატომში ელექტრონის შესაძლო ორბიტების რადიუსებს, სადაც n -ისათვის ავიღებთ მთელი რიცხვების სხვადასხვა მნიშვნელობებს ($n=1, 2, 3$ და ა. შ.), მივიღებთ:

$$r_1 = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ სმ}$$

$$r_2 = 2,12 \cdot 10^{-8} \text{ სმ}$$

$$r_3 = 4,77 \cdot 10^{-8} \text{ სმ და ა. შ.}$$

ე. ი. $r_2 = 4r_1$, $r_3 = 9r_1$, $r_4 = 16r_1$ და ა. შ.

აქედან ჩანს, რომ შესაძლო ქვანტური ორბიტებას რადიუსები ეფარდებიან ერთმანეთს, როგორც რიცხვების ნატურალური მწკრივის წევრთა კვადრატები:

$$r_1 : r_2 : r_3 = 1^2 : 2^2 : 3^2 : \dots$$

როცა ელექტრონი r_1 ორბიტზე მოძრაობს, წყალბად-ატომი ნორმალურ მდგომარეობაშია. დანარჩენ შემთხვევებს შეესაბამება ატომის აგზნებული მდგომარეობა.

სხვა ელემენტების ატომების შემთხვევაში ორბიტის რადიუსები

$$r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 Z m e^2},$$

ე. ი. შესაბამისი ორბიტების რადიუსები რიგობრივი რიცხვების უკუპროპორციულია.

წყალბად-ატომის პირველ ორბიტზე ელექტრონის მოძრაობის სიჩქარე $v = 2,19 \cdot 10^8$ სმ/სეკ $= 2190$ კილომეტრს სეკუნდში.

მომდევნო ორბიტებზე ელექტრონების მოძრაობის სიჩქარეები ორბიტების ნომრების პროპორციულად მცირდება.

=

ბაზოსხიმიების პირობა

ბორის მესამე პოსტულატი იხილავს გამოსხივების პირობას: როცა მოცემული ორბიტიდან ელექტრონი

გადადის ატომგულთან უფრო ახლო ორბიტზე, ატომი ასხივებს სხივურ ენერგიას ერთი ქვანტის სახით, ე. ი.

$$E_p - E_n = h\nu$$

სადაც E_p და E_n გამოსახავენ ელექტრონის სრულ ენერგიას შესაბამისად p -ურ და n -ურ ორბიტზე ($p > n$). თავის მარტივ ელექტრონის სრული ენერგია მოცემულ ორბიტზე შედგება კინეტიკური და პოტენციალური ენერგიისაგან. ორბიტის რადიუსის გადიდებისას ელექტრონის კინეტიკური ენერგია მცირდება, პოტენციალური კი იზრდება.

ელექტრონის პოტენციალური ენერგია

$$E_{\text{pot}} = C - \frac{e^2}{r},$$

სადაც C მუდმივი სიდიდეა.

ელექტრონის კინეტიკური ენერგია

$$E_{\text{kin}} = \frac{e^2}{2r}.$$

ამრიგად, ელექტრონის სრული ენერგია

$$E = E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} = C - \frac{e^2}{2r}.$$

ბორის მესამე პოსტულატს გამოსახულებაში ელექტრონის სრული ენერგიის მნიშვნელობის ჩასმით მიიღება

$$\begin{aligned} h\nu = E_p - E_n &= \left(C - \frac{e^2}{2r_p} \right) - \left(C - \frac{e^2}{2r_n} \right) = \\ &= \frac{e^2}{2r_n} - \frac{e^2}{2r_p}. \end{aligned}$$

თუ მიღებულ გამოსახულებაში ჩავსვამთ r -ის მნიშვნელობას (გვ. 14), გვექნება:

$$h\nu = \frac{2\pi^2 me^4}{n^3 h^3} = \frac{2\pi^2 me^4}{p^3 h^3},$$

საიდანაც გამოსხივებული ტალღის რხევის სიხშირე

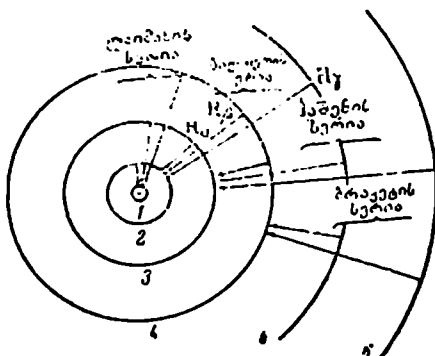
$$\nu = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right).$$

რადგან ფრჩხილებს გარეთა წევრები მუდმივებს წარმოადგენენ, მათ ერთი მუდმივას სახით გავაერთიანებთ

$$\nu = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right)$$

სადაც $R = 3,27 \cdot 10^{18}$ რიდბერგის მუდმივაა. მიღებული გამოსახულება წარმოადგენს ბალმერის ფორმულას, რომლის არსი ბორის თეორიის ჩამოყალიბებამდე გაურკვეველი რჩებოდა.

მიღებული ფორმულა აგვიწერს მოცემული ორბიტიდან სხვა ორბიტებზე ელექტრონის გადასვლებს და საშუალებას



ნახ. 2. წყალბად-ატომების ორბიტები ბორის მიხედვით

გვაძლევს გავიანგარიშოთ წყალბადის სპექტრის ხაზების სიხშირეები.

ახლა წყალბად-ატომში ატომგულთან უახლოეს ორბიტს შიგნით პირველი ნომერი, მის მომდევნოს მეორე, შემდგომს მესამე და ა. შ. (იხ. ნახ. 2). როცა ატომი აგზნებულ მდგომარეობაშია, მაგალითად, მისი ელექტრონი მეორე ორბიტზეა, პირველზე გადასვლისას იგი გამოასხივებს გარკვე-

ული ენერგიის ქვანტს. თუ ელექტრონი მესამე ორბიტიდან გადავა პირველზე, გამოსხივებული ქვანტის სიხშირე და, ამის შესაბამისად, მისი ენერგია უფრო მეტია, ვიდრე წინა შემთხვევაში და ა. შ. მიღებული ხაზების ურთობლიობა წარმოადგენს სპექტრულ სერიას, რომელსაც ლაიმანის სერია ეწოდება. ამ სპექტრის ხაზები ძევს წყალბადის სპექტრის ულტრაიისფერ ნაწილში.

$$\nu = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{p^2} \right), \quad \text{სადაც } p=2, 3, 4 \text{ და ა. შ.}$$

ბალმერის სერია ძევს სპექტრის ხილულ ნაწილში, ხოლო დანარჩენი სერიები — ინფრაწითელ არეში. ამრიგად ბალმერის სერიისათვის

$$\nu = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{p^2} \right), \quad \text{სადაც } p=3, 4, 5 \text{ და ა. შ.}$$

პაშენის სერიისათვის

$$\nu = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{p^2} \right), \quad \text{სადაც } p=4, 5, 6 \text{ და ა. შ.}$$

ბრაკეტის სერიისათვის

$$\nu = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{p^2} \right), \quad \text{სადაც } p=5, 6.$$

პფუნდის სერიისათვის

$$\nu = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{p^2} \right), \quad \text{სადაც } p=6, 7.$$

აღსანიშნავია, რომ ამ გზით განოთვლილი და ექსპერიმენტულად გაზომილი სიხშირეები ზუსტად დაემთხვა ერთმანეთს.

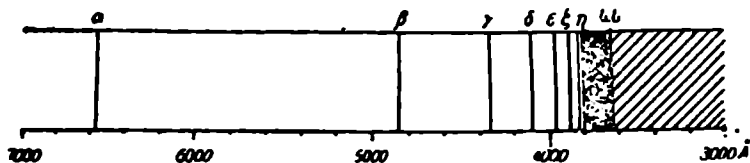
სპექტრების წარმოშობა

მარტივი მოდელის მიხედვით წყალბად-ატომში ელექტრონი პირველ ორბიტზე მოძრაობს ($p=1$) იმისათვის

რომ ატომმა გამოსახივოს, საჭიროა ატომის წინასწარი აგზნება, ე. ი. მისი ელექტრონის მაღალ ენერგეტიკულ დონეზე ატანა. ატომების აგზნება შეიძლება მოხდეს ელექტრონების დაჯახებით, სინათლის შთანთქმით, თერმული ზემოქმედებით, ქიმიური რეაქციით და სხვ. აგზნებული მდგომარეობის ხანგრძლიობა მცირეა (10^{-6} — 10^{-8} სეკ) და ამა თუ იმ მიზეზის გამო ელექტრონი დაბალ დონეზე გადადის. ატომის აგზნებაზე დახარჯული ენერგია ერთი ქვანტის სახით გამოსხივდება.

როცა ელექტრონი $p=3$ ორბიტიდან გადადის $n=2$ ორბიტზე, გამოსხივდება ბალმერის სერიის წითელი H_α ხაზი. $p=4$ ორბიტიდან იმავე $n=2$ ორბიტზე გადასვლისას გამოსხივდება მწვანე-ლურჯი H_β -ხაზი, $p=5$ ორბიტიდან $n=2$ -ზე გადასვლისას სიილება ლურჯი H_γ -ხაზი და ა. შ.

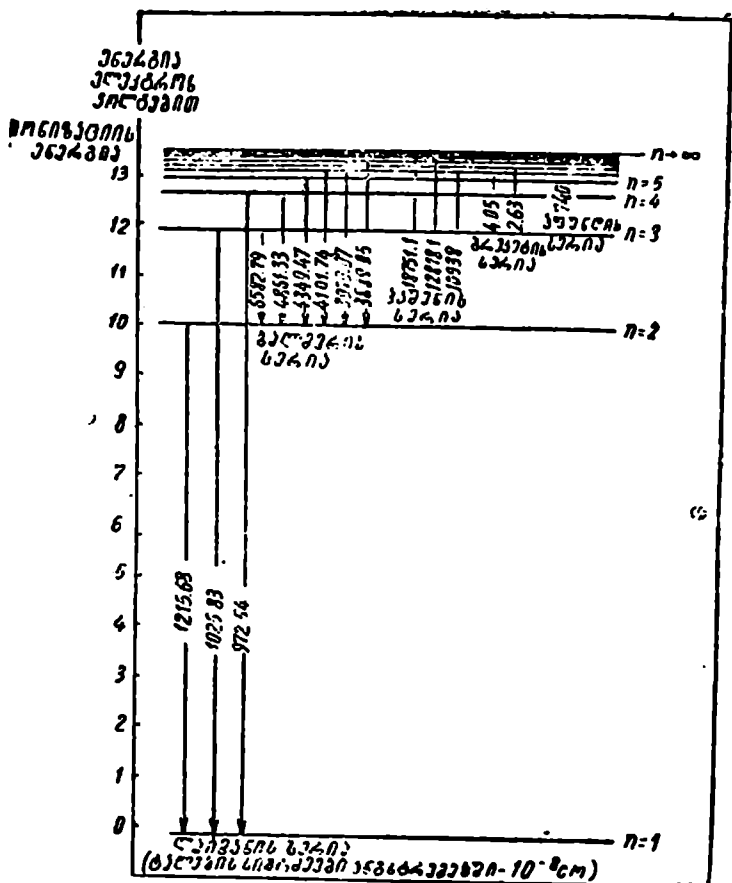
ამრიგად, ბორის თეორია გვაძლევს სპექტრების წარმოშობის უშუალო ახსნას. ამავე თეორიით ახსნილ იქნა არა



ნახ. 3. წყალბადის სპექტრი (ბალმერის სერია)

მარტო ბალმერის სერიის ხაზების წარმოშობა, არამედ გათვალისწინებულ იქნა რიგი სერიების არსებობაც (ლაიმანის, პაშენის და სხვ.), რომლებიც ბორის თეორიის ჩამოყალიბების შემდგომ იქნა აღმოჩენილი. ლაიმანის სერიაში ელექტრონი გადადის $p=2$, $p=3$ და უფრო მაღალი ორბიტებიდან $n=1$ ორბიტზე, პაშენის სერიაში $p=4, 5, 6 \dots$ ორბიტებიდან გადადის $n=3$ ორბიტზე და ა. შ. სპექტრების წარმოშობის და ელექტრონული ორბიტების სქემა გამოსახულია მე-2 ნახაზზე, მაგრამ ეს სქემა არ წარმოადგენს ატომის აღნაგობის ქვეშეობით ახსნას, არამედ — მის ერთგვარ მიახლოებას სპექტრების წარმოქმნა შექცევად პრო-

ცეს წარმოადგენს. ენერგიის შენახვის კანონის თანახმად, ატომი ასხივებს ენერგიის იმ რაოდენობას, რომელიც მის აგზნებაზე დაიხარჯა.



ნახ. 4 წყალბად-ატომის ენერგეტიკული დონეების სქემა

ტალღური მექანიკის თანახმად, ელექტრონების მდგომარეობა ხასიათდება გარკვეული ენერგეტიკული დონეებით. ამიტომ სპექტრების წარმოქმნის განხილვისას მიმართავენ

ენერგეტიკულ დონეთა სხვაობებს, რაც დიაგრამის სახით მე-4 ნახაზზეა გამოსახული. ვერტიკალური ხაზებით აღნიშნულია ენერგეტიკული დონეების ცვლილებები და შესაბამისი სპექტრული სერიები.

მრავალელექტრონიანი ატომების აგზნებისას გარეგარსის ელექტრონები უფრო მაღალ ენერგეტიკულ დონეზე გადადიან და უკან დაბრუნებისას ასხივებენ სპექტრულ ხაზებს. ასეთ ელექტრონებს ოპტიკური ელექტრონები ეწოდება. ვინაიდან იგივე ელექტრონები ქიმიურ რეაქციებშიც მონაწილეობენ, ამიტომ ისინი სავალენტო ელექტრონებს წარმოადგენენ. მაგრამ სავალენტო ელექტრონი ყოველთვის არ წარმოადგენს ოპტიკურ ელექტრონს.

ელემენტების ოპტიკური თვისებები განპირობებულია ატომების გარეგარსის ელექტრონებით, რომელთა ენერგეტიკული დონეების ცვლილებით წარმოიქმნება სპექტრი. მაგრამ სპექტრის ხასიათზე დიდ გავლენას ახდენენ ის ელექტრონებიც, რომლებიც ატომის გამოსხივების დროს თავიანთ ადგილებზე რჩებიან. ამ ელექტრონებს, რომლებიც უშუალოდ და შუალობითად იღებენ მონაწილეობას სპექტრების წარმოქმნაში, აგრეთვე ოპტიკური ელექტრონები ეწოდათ.

ოპტიკური ელექტრონების მსგავსად, სავალენტო ელექტრონებიც, რომლებზედაც არსებითად არის დამოკიდებული ქიმიური თვისებები, ატომის გარეგარსში იმყოფებიან. ხშირად ოპტიკური და ქიმიური თვისებები ერთსა და იმავე ელექტრონებზეა დამოკიდებული (H, Na, K, Ca და ა. შ.), მაგრამ ოპტიკური და სავალენტო ელექტრონების გაიგივება ყოველთვის არ შეიძლება, ვინაიდან, მაგალითად, Al-ს აქვს ერთი ოპტიკური და სამი სავალენტო ელექტრონი, He-ს აქვს ერთი ოპტიკური და არც ერთი სავალენტო ელექტრონი არა აქვს. ასევე, დანარჩენი ენერგეტიკული გაზების ატომებს არ გააჩნიათ სავალენტო ელექტრონები; მიუხედავად ამისა ისინი იძლევიან სპექტრებს.

აღსანიშნავია, რომ სპექტრის სირთულე და ვალენტობა მჭიდრო კავშირშია ერთმანეთთან. კალიუმი იძლევა დუბლე-

ტებს, კალციუმი ტრიპლეტებს, სკანდიუმი — კვარტეტებს, ტიტანი — კვინტეტებს და ა. შ. სპექტრის მულტიპლეტობისა და ელემენტის ვალენტობის შედარებიდან ჩანს, რომ ვალენტობა უდრის მულტიპლეტობას მინუს ერთი.

რენტგენის სხივები

რენტგენის მილაკში კათოდიდან გამოსხივებული სწრაფად მოძრავი ელექტრონები ეჯახება მეტალურ ანტიკათოდს, რის შედეგადაც წარმოიქმნება რენტგენის სხივები. ელექტრონების ენერგია რენტგენის მილაკებში 200 კილოვოლტს აღწევს, ხოლო გამოსხივებული რენტგენის სხივების ტალღის სიგრძე ძვეს $20-0,05 \text{ \AA}$ -ის ინტერვალში. ამჟამად ფართო გამოყენებას პოულობს ბეტატრონი, რომლის დახმარებით მიიღება 100 MeV^* და უფრო მეტი ენერგიის ქვანტები.

ელექტრონების ენერგიის მიხედვით, რენტგენის მილაკში წარმოიქმნება ორი ტიპის გამოსხივება 1) თეთრი და 2) დამახასიათებელი სპექტრი.

თეთრი სპექტრი წარმოადგენს რენტგენის მილაკის უწყვეტ სპექტრს, რომელიც სხვადასხვა სიგრძის ტალღებისაგან შედგება და მიიღება ელექტრონების შეკავებისას ანტიკათოდზე. მათი ერთ-ერთი თავისებურება იმაში მდგომარეობს, რომ სპექტრის ყველაზე მოკლე ტალღა, ე. ი. სპექტრის საზღვარი დამოკიდებულია რენტგენის მილაკზე მოდებული ძაბვაზე. ამ უკანასკნელი ხაზის სიხშირე $\nu_{\text{აკ}}$ შეიძლება ეინშტეინის ფორმულით გამოვსახოთ:

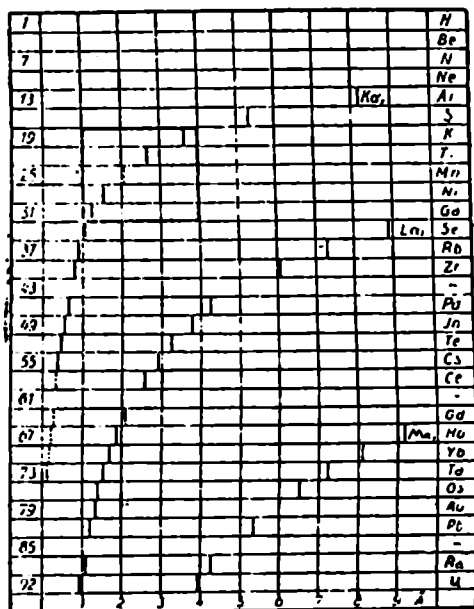
$$eV = h\nu_{\text{აკ}}$$

სადაც V არის მილაკზე მოდებული ძაბვა. ძაბვის ერთიორად გადიდება იწვევს ტალღის სიგრძის ერთიორად შემცირებას, თეთრი სპექტრის ხასიათი, როგორც ეს ზემო-

* eV = ელექტრონვოლტი. მისი ენერგია $= 1,602 \cdot 10^{-19}$ ერგს.
 MeV = მეგაელექტრონვოლტი $= 10^6 \text{ eV}$.

ნათქვამიდან გამომდინარეობს, დამოკიდებულია არა ანტიკათოდის გვარობაზე, არამედ მოდებულ ძაბვაზე.

როცა რენტგენის მილაკში ელექტრონების ენერგია კრიტიკულ მნიშვნელობას მიაღწევს, წარმოიქმნება ხაზოვანი სპექტრი, რომელიც დამახასიათებელია ანტიკათოდის ნივთიერებისათვის, ეინადან ის დამოკიდებულია ანტიკათოდში შემაჯალი ელემენტის რიგობრივ Z -რიცხვზე.



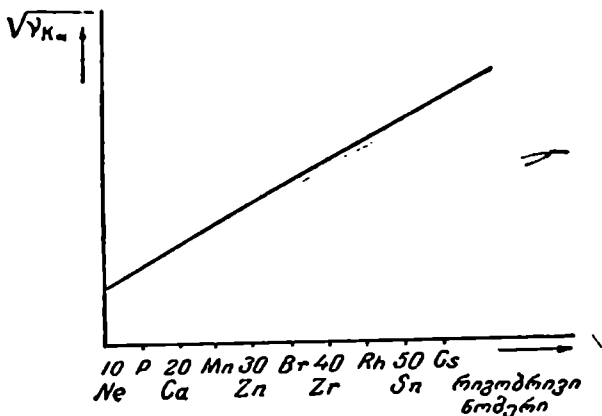
ნახ. 5. ზოგიერთი ელემენტის რენტგენული სპექტრი

ელემენტიდან ელემენტზე მიმდევრულად გადასვლისას ოპტიკური სპექტრის სტრუქტურა პერიოდულად იცვლება. რენტგენის სპექტრები, მათგან განსხვავებით, არ იჩენენ პერიოდულობას და ელემენტიდან ელემენტზე მიმდევრულად გადასვლისას მათი ტალღის სიგრძეები მონოტონურად, არა-პერიოდულად იცვლება, ხოლო სტრუქტურა იგივე რჩება (ნახ. 5).

დამახასიათებელი სპექტრი ოთხი სერიისაგან შედგება. ამათგან K -სერია ყველაზე მოკლელტალღიანია. მისი მომდევნოა უფრო გრძელტალღიანი L -სერია და შემდეგ M -სერია. უკანასკნელია N -სერია.

კონტინუის სპექტრების თეორია

დამახასიათებელი სპექტრების შესწავლის შედეგად მოზლიმ 1913—14 წლებში აღმოაჩინა, რომ სპექტრული ხაზების რხევის სიხშირეები ელემენტის რიგობრივ ნომერზეა დამოკიდებული. ელემენტიდან ელემენტზე მიმდევრულად



ნახ. 6. მოზლის კანონის გრაფიკული გამოსახვა

გადასვლისას ამა თუ იმ სერიის გადანაცვლება მკაფიოდ იჩენს თავს გრაფიკზე, სადაც აბსცისათა ღერძზე გადაზომილია ელემენტის რიგობრივი ნომერი, ხოლო ორდინატთა ღერძზე — რხევის სიხშირის კვადრატული ფესვი. მათი დამოკიდებულება წრფე ხაზით გამოისახება (ნახ. 6). ე. ი. რხევის სიხშირის კვადრატული ფესვი ელემენტის რიგობრივი რიცხვის წრფივ ფუნქციას წარმოადგენს:

$$\sqrt{\nu} = a(Z - b),$$

სადაც a და b მუდმივები ყველა ელემენტისათვის ერთნაირია და დამოკიდებულია სპექტრების სერიებზე.

რიგობრივ Z -ნომერსა და მისი დამახასიათებელი სპექტრის K -სერიის ხაზების რხევის სიხშირეებს შორის კავშირი შეიძლება შემდეგი განტოლებით გამოვსახოთ:

$$\nu = R(Z-1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{p^2} \right), \text{ სადაც } p > 1.$$

მოზლის კანონის დახმარებით განსაზღვრულ იქნა ელემენტების რიგობრივი ნომრები, რამაც დაადასტურა მენდელეევის მიერ შექმნილ პერიოდულ სისტემაში ელემენტების არსებული მიმდევრობის სისწორე. გარდა ამისა, დამახასიათებელი სპექტრების დახმარებით აღმოჩენილ იქნა კიმიური ელემენტები ჰაფნიუმი ($Z=72$) ცირკონიუმის მადნებში და რენიუმი ($Z=75$) პლატინის ოჯახის მეტალებში.

დამახასიათებელი სპექტრები წარმოიქმნება ბორის მესამე პოსტულატის შესაბამისად, როცა ელექტრონები ატომის შიგა შრეების ორბიტებიდან უფრო დაბალი შრეების ორბიტებზე გადადიან.

რენტგენის სპექტრები წარმოიქმნება არა სავალენტო ელექტრონების ადგილმდებარეობის მიმოცვლით, არამედ ღრმად მდებარე შრეების ორბიტებიდან ელექტრონების უფრო დაბალი შრეების ორბიტებზე გადასვლით.

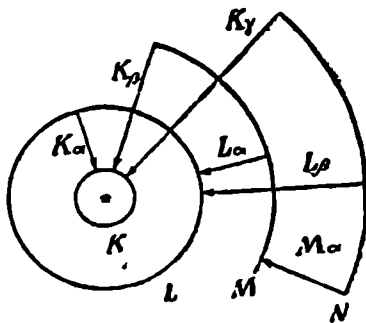
ყველაზე მოკლესალნიანი სერია ძირითადად შედგება K_{α} , K_{β} და K_{γ} ხაზებისაგან.

თუ რენტგენის მილაკში კათოდიდან გამოსული ელექტრონი გამოიწვევს ანტიკათოდის ნივთიერებაში მყოფი ატომის K -შრის ელექტრონის ამოკეცვას, მაშინ K -შრეზე მანამდე მყოფი ორი ელექტრონიდან დარჩება ერთი ელექტრონი. განთავისუფლებული ადგილი შეივსება L -შრიდან K -შრეზე ელექტრონის გადასვლით. ამ დროს გამოსხივდება K_{α} -ხაზი. თუ K -შრეზე M -შრიდან გადავა ელექტრონი, გამოსხივდება K_{β} -ხაზი. L -დან M -შრის განთავისუფლებულ ადგილზე უფრო დაშორებული შრეებიდან გადავა ელექტრონი

ქტრონები. ელექტრონების ასეთი გადასვლით წარმოიქმნება დამახასიათებელი სპექტრი.

ნათქვამიდან ჩანს, რომ K -შრე წარმოადგენს პირველ დონეს, რომლის $n=1$, L -შრე — მეორეს, მისი $n=2$. მათი მომდევნო შრეები M -, N - O - და ა. შ. წარმოადგენენ დონეებს, რომელთა $n=3, 4, 5$ და ა. შ. (ნახ. 7).

რენტგენის სპექტრების აღნაგობის სიმარტივე იმით



ნახ. 7. რენტგენის დამახასიათებელი სპექტრის წარმოქმნის სქემა

აიხსნება, რომ ატომში ელექტრონების ენერგეტიკული დონეების მეტი წილი დაკავებულია, რის გამო ელექტრონების ენერგეტიკული დონეების ცვლილება შეზღუდულია.

სხვადასხვა ელემენტების რენტგენის სპექტრების მსგავსი აღნაგობა განპირობებულია მათი ატომების შიგა შრეების ერთნაირი აღნაგობით. ე. ი. ყველა ატომების K -, L -, M -, N - და ა. შ. შრეები შეიცავენ ელექტრონთა ერთნაირ რიცხვს.

ბორის თეორიის შეზღუდულობა

ბორის თეორიამ მნიშვნელოვანი როლი შეასრულა ფიზიკისა და ქიმიის განვითარებაში. ამ თეორიამ ნათელყო კლასიკური ფიზიკის არასაკმარისობა ატომური პროცესების

მიმართ და ქვანტური კანონების მნიშვნელობა მიკროსისტემების განხილვისას. ბორის თეორიამ სისტემაში მოიყვანა სპექტროსკოპიული გამოკვლევების შედეგად დაგროვილი მდიდარი ექსპერიმენტული მასალა და ხელი შეუწყო მრავალ ახალ გამოკვლევას.

მაგრამ ბორის თეორიამ ვერ მისცა სათანადო ახსნა სპექტრების სირთულეს, ვერ გადალახა მრავალელექტრონიან ატომთა განხილვასთან დაკავშირებული სიძნელეები. მთელი რიგი საკითხების უფრო დეტალური შესწავლისას გამოიჩინა, რომ ბორის თეორია არ აღმოჩნდა საკმარისი, რათა ატომის აღნაგობის თეორიის დახმარებით გაეთვალისწინებინა ვალენტობა და მოლეკულის სტრუქტურა, თუნდაც ისეთი მარტივი მოლეკულისა, როგორიც წყალბადის მოლეკულაა. არადამაკმაყოფილებელი აღმოჩნდა აგრეთვე წარმოდგენები ორბიტების შესახებ. ამრიგად, ბორის ატომი ვერ უპასუხებს ფიზიკურ რეალობას, იგი ვერ ასახავს ატომის აღნაგობის სირთულეს.

ბორის თეორიის შეზღუდულობის მიზეზი იყო მისი არათანმიმდევრული ხასიათი, ვინაიდან მასში ხელოვნურად იყო შეხამებული კლასიკური და ქვანტური წარმოდგენები.

ნივთიერების ტალღური თვისებების აღმოჩენის შემდეგ ნათელი გახდა, რომ ბორის თეორია წარმოადგენდა კლასიკური და ქვანტური წარმოდგენების გარდამავალ საფეხურს, რომელმაც თავის დროზე პროგრესული როლი შეასრულა.

ბორის თეორიის სიძნელეები მოხსნილია ტალღურ მექანიკაში, რომელიც იძლევა ბორის პოსტულატების დასაბუთებას, მრავალელექტრონიანი ატომების აღნაგობის სურათს, ვალენტობისა და მოლეკულის აღნაგობის თეორიას.

ქვანტური თეორია

აბსოლუტურად შავი ეწოდება სხეულს, რომელიც ყოველგვარ ტემპერატურაზე მასზე დაცემულ ყველა სივრცის ტალღებს შთანთქავს. შავი სხეულის გამოსხივების სპექტრში აღვილია ენერგიის განაწილების განსაზღვრა, მაგრამ ცდით

მიღებული ენერგიის განაწილების თეორიულად გათვალისწინება არ ხერხდებოდა.

ეს ამოცანა 1900 წელს ამოხსნა პლანკმა, რომელმაც ამისათვის სინათლის ქვანტური თეორია ჩამოაყალიბა. ამ თეორიამ დიდი როლი შეასრულა მეოცე საუკუნის ფიზიკის განვითარებაში. სინათლის ქვანტური თეორიის ძირითადი აზრი იმაში მდგომარეობს, რომ სინათლის განსხივება ხდება არა უწყვეტად, არამედ წყვეტილ, ნაწილაკებით, სინათლის ქვანტებით ანუ ფოტონებით, რომლებიც მატერიალურ ნაწილაკებს წარმოადგენენ. ამ თეორიის თანახმად, სინათლის ქვანტის ენერგია

$$\varepsilon = h\nu,$$

სადაც h მუდმივი სიდიდეა (პლანკის მუდმივა), ხოლო ν სინათლის ტალღის რხევის სიხშირეა. ეს უკანასკნელი დამოკიდებულია ტალღის სიგრძეზე: $\nu = \frac{c}{\lambda}$, სადაც c არის სინათლის გავრცელების სიჩქარე.

რაც უფრო ნაკლებია ტალღის სიგრძე, მით მეტია მისი შესაბამისი რხევის სიხშირე და მით უფრო მეტია სინათლის ქვანტის მასაც და ენერგიაც. მაშასადამე, რადიოტალღებს მინიმალური ენერგია აქვთ, უფრო მეტია ხილული სინათლის ქვანტების ენერგია, შემდეგ მოდის ულტრაიისფერი, რენტგენისა და გამა-სხივების ქვანტები, რომელთა ენერგია და მასა სულ უფრო და უფრო მზარდ სიდიდეებს შეადგენენ.

სინათლის ქვანტის ანუ ფოტონის მასა, ფარდობითობის თეორიის თანახმად, განისაზღვრება ფორმულით:

$$\varepsilon = mc^2,$$

სადაც m არის ε -ენერგიის მქონე ქვანტის მასა.

აქვე შევნიშნავთ, რომ ფოტონის „მოსვენებითი“ მასანულის ტოლია. ზემო ფორმულაში m გამოსახავს ქვანტის მასას მოძრაობის დროს.

ქვანტური თეორია განავითარა ეინშტეინმა (1905) და ბორმა (1913). ამ თეორიის განვითარების შედეგად ჩამო-

ყალიბდა ტალღური მექანიკა, რომლის მნიშვნელობა ძალიან დიდია.

სინათლის ქვანტურმა თეორიამ მრავალი დადასტურება პოვა. ასეთია, მაგალითად, ფოტოეფექტი, მოლეკულური სპექტრები და სხვა, რომელთა ახსნა სინათლის ტალღური თეორიით შეუძლებელი აღმოჩნდა.

ფოტოელექტრული ეფექტი

ფოტონების დაცემისას მეტალის ზედაპირიდან სხვადასხვა მიმართულებით გამოქროლდებიან ელექტრონები. ფოტონების მოქმედებით ნივთიერებიდან ელექტრონების გამოსხივების ამ მოვლენას ფოტოეფექტი ეწოდა. ფოტოეფექტის შებრუნებისას რენტგენის სხივები მიიღება.

ფოტოეფექტი აღმოჩენილი იყო ჰერცის მიერ 1887 წელს, ხოლო შესწავლილ იქნა სტოლეტოვის მიერ 1888 წელს, რის შედეგადაც მან მნიშვნელოვანი კანონზომიერებები აღგინა.

ფოტოეფექტი მიიღება არა მარტო მეტალებიდან, არამედ ყოველი ნივთიერებიდან. ამასთანავე, ნივთიერების აგრეგატულ მდგომარეობას ან მის ტემპერატურას არავითარი მნიშვნელობა არა აქვს.

ტუტე მეტალებიდან ფოტოეფექტი ხილული სინათლის მოქმედებით მიიღება. პლატინიდან ფოტოეფექტის მისაღებად საჭიროა ულტრაიისფერი სხივების მოქმედება, ხოლო არაგამტარების შემთხვევაში საჭიროა რენტგენის სხივები.

ფოტოეფექტის მოვლენის ახსნა ქვანტური თეორიით შეიძლება. ეინშტეინის კანონის თანახმად, თითო ფოტოელექტრონზე ერთი ფოტონის ენერგია იხარჯება. ამიტომაც ფოტოელექტრონების რიცხვი შთანთქმული ფოტონების რიცხვის პროპორციულად იცვლება. ნივთიერებიდან გამოტყორცნილი ფოტოელექტრონის კინეტიკური ენერგია და მოკიდებულია ფოტონების ენერგიაზე და არა მათ რიცხვზე. ფოტონის ენერგიის $h \cdot \nu$ -შილი იხარჯება ელექტრონის გა-

მოსვლაზე ნივთიერებიდან, ხოლო ფოტონის დარჩენილი ნაწილი ანიკებს ელექტრონს კინეტიკურ ენერგიას:

$$h\nu = p + \frac{1}{2}mv^2.$$

ელექტრონის გამოსვლაზე დახარჯული ენერგია p დამოკიდებულია ნივთიერების გვარობაზე. აქედან ჩანს, რომ ფოტოელექტრონის კინეტიკური ენერგიის გადიდებისათვის საჭიროა მეტი ენერგიის მქონე ფოტონის გამოყენება.

ნაწილაკები და ტალღები

ტალღური მექანიკის ერთ-ერთ ძირითად დებულებას წარმოადგენს სინათლის ტალღური და კორპუსკულური* თვისებების ერთიანობის აღიარება. სინათლის ტალღური თვისებები გამომდინარეობს ინტერფერენციის მოვლენებიდან, ხოლო კორპუსკულური — ფოტოეფექტიდან და სხვა მოვლენებიდან, სადაც თითოეული ფოტონი ელექტრონთან ან მოლეკულთან ურთიერთმოქმედებაში შედის როგორც განსაზღვრული ენერგიისა და იმპულსის მქონე ერთი ნაწილაკი. ამრიგად, სინათლე ერთმანეთისადმი საპირისპირო თვისებებს იჩენს. ფოტონებისათვის დამახასიათებელია კორპუსკულური თვისებები: ენერგია, იმპულსი. ამას გარდა მათ ახასიათებთ ტალღური თვისებებიც, როგორიცაა ტალღის სიგრძე და რხევის სიხშირე. მიუხედავად იმისა, რომ გამოსხივებას ორივე სახის თვისებები აქვს, ისინი თავს არც ერთ ცდაში არ იჩენენ ერთდროულად. ყოველ ცდაში ფოტონი იჩენს ან ტალღურს, ან კორპუსკულურ თვისებებს.

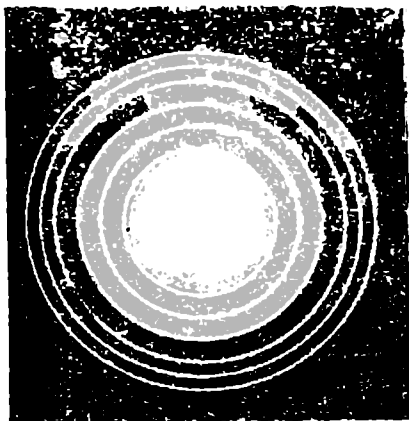
დე-ბროილის თეორიით (1924), რომელიც საფუძვლად დაედო ტალღურ მექანიკას, ორივე სახის (ტალღური და კორპუსკულური) თვისება ახასიათებს არა მარტო ფოტონებს, არამედ სხვა მატერიალურ ნაწილაკებსაც, ე. ი. ყოველ მოძრავ მატერიალურ ნაწილაკთან დაკავშირებულია ტალ-

* კორპუსკულა ლათ. მცირე ნაწილაკია.

ღური პროცესი. ამ ტალღების სიგრძე განისაზღვრება ფორმულით:

$$\lambda = \frac{h}{mv},$$

სადაც m არის v სიჩქარით მოძრაი ნაწილაკის მასა. მაშასადამე, ნაწილაკთან დაკავშირებული ტალღის სიგრძე და-



ნახ. 8. მეტალის ფოლგის ელექტრონოგრაფია

მოკიდებულია ამ ნაწილაკის მოძრაობის რაოდენობაზე (mv -ზე).

დე-ბროილის თეორიის ძირითადი დებულება ექსპერიმენტულად დასაბუთებულ იქნა ელექტრონთა დიფრაქციის დახმარებით, რომელიც აღმოჩენილი იყო 1928 წ. ლითონების თხელ ფენებზე ელექტრონების დაჯახებით დიფრაქციული რგოლები მიიღება, რომელიც პრინციპულად არ განხვავდება იმ დიფრაქციული სურათიდან, რომელიც რენტგენის სხივების გავლით მიიღება (ნახ. 8 და 9). დე-ბროილის თეორიის თანახმად, ელექტრონს მხოლოდ ისეთ ორბიტზე შეუძლია მოძრაობა, რომელზედაც ლაგდება ტალღების მთელი რიცხვი, ე. ი. ადგილი უნდა ჰქონდეს შემდეგ თანა-

ფარდობას: $2\pi r = n\lambda$. ვინაიდან $\lambda = \frac{h}{mv}$, ამიტომ სტაციო-

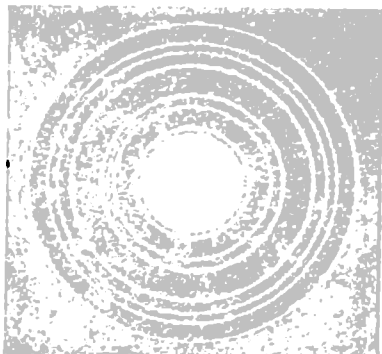
ნარული ორბიტისათვის მივიღებთ:

$$2\pi r = \frac{nh}{mv}$$

ანუ

$$2\pi r mv = nh,$$

ე. ი. მივიღებთ სტაციონარული ორბიტისათვის შემოტანილ ბორის ქვანტურ პირობას.



ნახ. 9. წყნარ ზომის კრისტალის დიფრაქციონი

ჰენრი რიკტონი

ტალღური მექანიკის თანახმად, ატომის სხვადასხვა დისკრეტულ მდგომარეობას განაპირობებს ელექტრონის ენერგიის სხვადასხვა მნიშვნელობა, ბოლო ელექტრონის თითოეულ მდგომარეობას შეესაბამება გარკვეული ჟუნიქციები, რომლებიც განსაზღვრავენ ელექტრონის მდგომარეობას ატომში. ეს სხვადასხვა მდგომარეობა შეიძლება დავახასიათოთ ქვანტური რიცხეების დახმარებით.

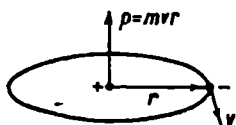
ატომგულის ირგვლივ ზემოქცევაში მყოფი ელექტრონის მდგომარეობა ძირითადად ხასიათდება მთავარი ქვანტური n რიცხით, რომლითაც განისაზღვრება ამ ელექტრონის ენერგია. მთავარი ქვანტური რიცხი ლეზონის ნატურალური მწკრივის წევრთა მნიშვნელობებს: $n=1, 2, 3, \dots$ და ა. შ. მთავარი ქვანტური რიცხი გამოსახავს მანძილს ელექტრონსა და ატომგულს შორის. ვინაიდან ელექტრონის ენერგია მით მეტია, რაც უფრო მეტია მანძილი ატომგულსა და ელექტრონს შორის, ამიტომ n -ით ელექტრონის ენერგია განისაზღვრება. ის ელექტრონები,

რომელთა მდგომარეობა ერთნაირი მთავარი ქვანტური რიცხვით ხასიათდება, შეადგენენ ელექტრონულ გარსს, ანუ შრეს, რასაც ხშირ შემთხვევაში ელექტრონთა ჯგუფს უწოდებენ. ელექტრონული ჯგუფები აღინიშნება K, L, M, N, O, P და Q სიმბოლოებით. ამათგან K -ჯგუფის $n=1$, L -ჯგუფის $n=2$ და ა. შ.

ჯგუფი	K	L	M	N
$n =$	1	2	3	4

მხოლოდ წყალბად-ატომშია დამოკიდებული ელექტრონის ენერგია მხოლოდ n -ის მნიშვნელობაზე.

მრავალელექტრონიანი ატომების ელექტრონთა ენერგია დამოკიდებულია n -ზე და l -ზე. ამისი მიზეზი ის არის, რომ



გარდა მანძილისა, ელექტრონის ენერგია დამოკიდებულია ელექტრონის ორბიტულ მომენტზე, ამიტომაც l -ს ვუწოდებთ ორბიტულ ქვანტურ რიცხვს.

ნახ. 10. ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტი

როცა ელექტრონი r -რადიუსის ორბიტაზე v სიჩქარით მოძრაობს,

მისი მოძრაობის რაოდენობა რიცხობრივად უდრის $mv \cdot r$ -ს, ელექტრონის მოძრაობის სიჩქარეს აქვს გარკვეული გეზი. ამიტომაც ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტი $p = mvr$ აგრეთვე გეზური სიდიდისაა (იხ. ნახ. 10). ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტი ორბიტის სიბრტყის მართობულად არის მიმართული. ტალღური მექანიკის თანახმად, ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტი აგრეთვე დისკრეტულ მნიშვნელობებს ღებულობს:

$$p = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}.$$

სპექტროსკოპიული გამოკვლევების შესაბამისად, ტალღური მექანიკა l -ისათვის გეაძლევეს მთელირიცხვა მნიშვნელობებს დაწყებულს 0-დან და დამთავრებულს $(n-1)$ -ით: $l=0, 1, 2, \dots, (n-1)$. ამრიგად, როცა $n=1$, მაშინ ორბიტული ქვანტური რიცხვი მხოლოდ ნულის ტოლია: $l=0$.

თუ $n=2$, მაშინ $l=0$ ან $l=1$. როცა $n=3$, მაშინ $l=0$, $l=1$ და $l=2$. ამის შესაბამისად, მოძრაობის რაოდენობის მომენტი უდრის $0, \sqrt{2} \frac{h}{2\pi}, \sqrt{6} \frac{h}{2\pi}$ და ა. შ. ორბიტული ქვანტური რიცხვის სხვადასხვა მნიშვნელობას უპასუხებს სიმბოლოები s, p, d და ა. შ., ე. ი.

ორბიტული ქვანტური რიცხვი $l=0 \quad 1 \quad 2 \quad 3$
 სიმბოლო $s \quad p \quad d \quad f$

ელექტრონის ორბიტულ მომენტთან დაკავშირებულია მაგნიტური ქვანტური რიცხვი, რომელსაც m -ით აღვნიშნავთ. ატომის მოთავსებისას მაგნიტურ ან ელექტრულ ველში ელექტრონთა ორბიტები გარკვეული მიმართულებებით ორიენტირდებიან. ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტის პროექცია მაგნიტური ველის მიმართ განისაზღვრება მაგნიტური ქვანტური რიცხვით, რომელიც იცვლება $+1$ და -1 -ის მნიშვნელობებს შორის, ე. ი.

როცა $l=0$, მაშინ $m=0$.

$l=1$, $m=1, 0, -1$

„ $l=2$, „ $m=2, 1, 0, -1, -2$.

ამრიგად, ორბიტული მომენტის ორიენტაციათა სიმრავლე არის $(2l+1)$, ე. ი. s — მდგომარეობისათვის ერთი,

p — სამი,

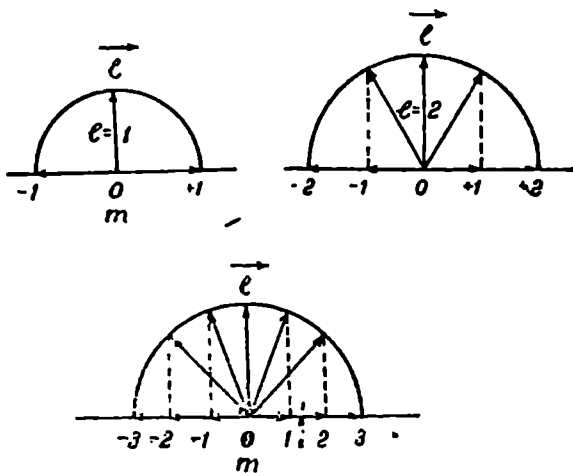
d — ხუთი და

f — „ შვიდი.

მაგნიტური ქვანტური რიცხვის უარყოფითი მნიშვნელობა იმით აიხსნება, რომ m -ის შესაბამისი ვექტორი ლაგდება მაგნიტური ველის საპირისპიროდ (ნახ. 11).

სპექტრების შესწავლიდან გამოიკვეა, რომ ელექტრონს ახასიათებს სპინი. ამ ცნებასთან დაკავშირებული წარმოდგენების თვალსაჩინოებისათვის უნდა დავუშვათ, რომ ელექ-

ქტრონი სფერული ფორმისაა, რის გამო მას საკუთარი ღერძის ირგვლივ შეუძლია ბრუნვა. მაშასადამე, მოძრაობის რაოდენობის ორბიტული მომენტის გარდა ელექტრონს



ნახ. 11. მაგნიტური ქვანტური რიცხვების მნიშვნელობები

საკუთარი ბრუნვის მომენტიც ახასიათებს. საკუთარი ღერძის ირგვლივ ბრუნვა ახასიათებს ელექტრონს ატომშიც და თავისუფალ მდგომარეობაშიც. ამ ბრუნვის მომენტს, რომელსაც სპინს ვუწოდებთ, შეიძლება ჰქონდეს $+\frac{1}{2}$, ან $-\frac{1}{2}$, მნიშვნელობები. ბრუნვა საკუთარი ღერძის ირგვლივ განაპირობებს ელექტრონის მაგნიტურ თვისებებს. როცა ორი ელექტრონის სპინი ერთნაირია, მაშინ მათი მაგნიტური ველი პარალელური იქნება, საპირისპირო სპინის შემთხვევაში ელექტრონების მაგნიტური ველი ანტიპარალელურ მიმართულებას მიიღებს (ნახ. 12).

ამრიგად, ელექტრონის მდგომარეობა ატომში ოთხი ქვანტური რიცხვით ხასიათდება. ასეთია:

1. მთავარი ქვანტური რიცხვი n , რომელიც ელექტრონის ენერგეტიკულ დონეს განსაზღვრავს და მთელრიცხვითა მნიშვნელობებს ღებულობს: $n = 1, 2, 3, \dots$

2. ობიტიული ქვანტური რიცხვი, რომელიც ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტს განსაზღვრავს, $l = 0, 1, 2, \dots (n-1)$. მრავალელექტრონიან ატომში l -ის სხვადასხვა მნიშვნელობას განსხვავებული ენერგია შეესაბამება.



3. მაგნიტური ქვანტური რიცხვი — m — ირყევა

ნახ. 12. პარალელური სპინი

ნახ. 13. ანტი-პარალელური სპინი

$\pm l$ -ის მნიშვნელობებს შორის და განსაზღვრავს ატომის მდგომარეობას მაგნიტურ და ელექტრულ ველში.

4. სპინი განსაზღვრავს ელექტრონის საკუთარი ბრუნვის მომენტს, რომლის მნიშვნელობა შეიძლება იყოს $+\frac{1}{2}$, ან $-\frac{1}{2}$.

აღწერილი ქვანტური რიცხვები ასახავს ელექტრონის მოძრაობის ფორმებს ატომში.

ელექტრონთა ენერგეტიკული დონეები

ატომის აღნაგობის საკითხების გარკვევისას სასარგებლოა განვიხილოთ შემდეგი პროცესი. დავუშვათ, რომ მრავალელექტრონიანი რაიმე ატომი თავის შემადგენელ ნაწილებად დავშალოთ, რის შედეგადაც მივიღეთ ატომგული და ცალკე ელექტრონები. როცა ატომგული და ელექტრონები დიდი მანძილით არიან დაცილებული ერთმანეთს, სისტემას მხოლოდ პოტენციალური ენერგია აქვს, კინეტიკურ ენერგიას კი მოკლებულია.

ახლა ერთი ელექტრონი მივუახლოვოთ ატომგულს. ატომგულთან შეკავშირებისას ეს ელექტრონი უმდაბლეს ენერგეტიკულ დონეს დაიკავებს. ამ დროს ელექტრონის პოტენციალური ენერგია შემცირდება. პოტენციალური

ენერგიის ნაწილი გადავა ორბიტზე მოძრავი ელექტრონის-
კინეტიკურ ენერგიაში, ხოლო დანარჩენი ენერგია ფოტონის
სახით გამოსხივდება. მეორე ელექტრონი თავისუფალი ენერ-
გეტიკული დონეებიდან აგრეთვე ყველაზე დაბალ დონეს
შეაფასებს, და ა. შ.

ატომგულის ირგვლივ ელექტრონული გარსები შეიძლება
გააზრებით დავყოთ ელექტრონულ უჯრედებად, ე. ი. ის
არე ატომგულის ირგვლივ, სადაც უნდა იყოს ელექტრო-
ნები, შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც ელექტრონული-
უჯრედების წყება. თუ გარსის ნომერი არის n , მაშინ ამ
გარსში უჯრედების რაოდენობა $Z_n = n^2$. ამრიგად, K -გარსი
შეიცავს ერთ უჯრედს, L -გარსი—ოთხს, M -გარსი—ცხრას-
და ა. შ.

თუ ორბიტულ ქვანტურ რიცხვებს მივიღებთ მხედველო-
ბაში, დავინახავთ, რომ K -გარსი ერთი s -უჯრედისაგან
შედგება ($l=0$), L -გარსი შედგება ერთი s -უჯრედისაგან და
სამი p -უჯრედისაგან ($l=0, 1$), M -გარსი მოიცავს ერთ
 s -უჯრედს, სამ p -უჯრედს და ხუთ d -უჯრედს.

აღსანიშნავია, რომ მოცემულ ატომში ყველა ელექტრონს
ერთმანეთისაგან განსხვავებული მოძრაობის ფორმა ახასი-
ათებს. სხვანაირად რომ ვთქვათ, ატომში არ არსე-
ბობს ორი ელექტრონი ოთხივე ქვანტური
რიცხვის ერთნაირი მნიშვნელობით. ეს დებუ-
ლება ცნობილია პაულის პრინციპის სახელწოდებით. თუ
ორი ელექტრონის n, l და m -ს ერთნაირი მნიშვნელობა
აქვთ, მათი სპინი განსხვავებული იქნება. აქედან ჩანს, რომ
თითოეულ ელექტრონულ უჯრედში შეიძლება არა უმეტეს
ორი ელექტრონისა მოთავსდეს, ისიც იმ პირობით, თუ
მათი ბრუნვის მიმართულება ერთმანეთის საპირისპიროა,
ე. ი. სპინი ანტიპარალელურია.

ამრიგად, K -გარსში განლაგდება ორი ელექტრონი,
 L -გარსში რვა ელექტრონი, M -ში თვრამეტი და ა. შ. შე-
დეგად მივიღებთ შემდეგ ცხრილს.

ელექტრონთა შესაძლო რაოდენობა სხვადასხვა გარსში

ელექტრონთა გარსი (ჯგუფი)	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>N</i>
მთავარი კვანტური რიცხვი <i>n</i>	1	2	3	4
ორბიტული რიცხვი <i>l</i>	0	0 1	0 1 2	0 1 2 3
ქვეჯგუფი	<i>s</i>	<i>s p</i>	<i>s p d</i>	<i>s p d f</i>
ელექტრონთა რიცხვი ქვეჯგუფში	2	2 6	2 6 10	2 6 10 14
ელექტრონთა რიცხვი გარსში	2	8	18	32

მაშასადამე, ელექტრონთა საერთო რიცხვი მოცემულ გარსში უდრის $2n^2$ -ს, სადაც $n=1, 2, 3, \dots$

გარსების შევსების მიმდევრობა გაცილებით უფრო რთულია, ვიდრე ეს აქ განხილულიდან გამომდინარეობს. ზემოთ აღვნიშნეთ, რომ გარსების შევსებისას ელექტრონი მინიმალურ ენერგეტიკულ დონეს იკავებს. ვინაიდან ენერგეტიკული დონეები დამოკიდებულია არა მარტო n -ზე, არამედ l -ზედაც, ამიტომ შევსების რეალური მიმდევრობის გარკვევა სპექტროსკოპიულ გამოკვლევებს მოითხოვს.

ატომის აღნაგობა და პერიოდულობის კანონი

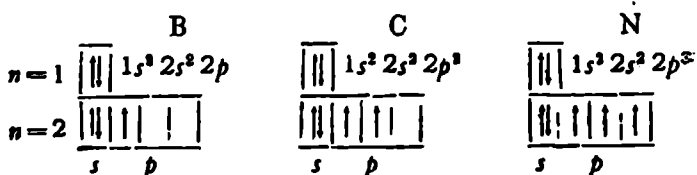
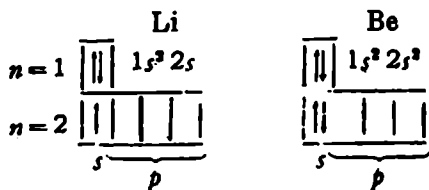
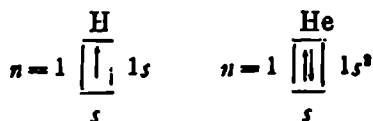
დ. მენდელეევი ნათელყო, რომ ქიმიური ელემენტის თვისებრივი დახასიათება დამოკიდებულია მის უმნიშვნელოვანეს რაოდენობრივ ნიშანზე — ატომურ წონაზე: ატომური წონის რაოდენობრივი ცვლილება იწვევს ელემენტის თვისებრივ ცვლილებას. ახლა კარგად არის ცნობილი, რომ პერიოდულობის კანონის თანახმად, ატომის გარსში ელექტრონების რიცხვის ზრდის მიხედვით იცვლება ელემენტების ფიზიკური და ქიმიური თვისებები.

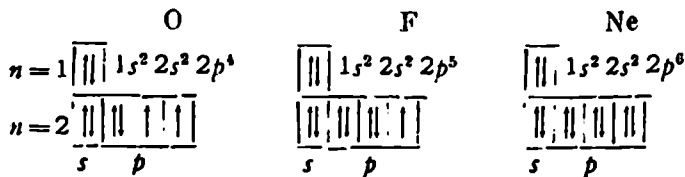
ატომში ელექტრონების რიცხვის ზრდის მიხედვით იცვლება ელექტრონების განაწილება ატომში, იცვლება ვალენტობა.

როცა ატომში ყოველი ელექტრონული უჯრედი შევსებულია ორ-ორი ელექტრონით, ხოლო უჯრედები თავის

მხრივ შეესებულება ენერგიის მატების მიმდევრობის მიხედვით, მაშინ ატომის ასეთ მდგომარეობას ძირითადს ვუწოდებთ.

ვალენტობის თანამედროვე თეორიის თანახმად, ელემენტის ვალენტობა განისაზღვრება ატომის არაგაწყვილებული ელექტრონების რიცხვით. ატომებში ელექტრონების განაწილების გარკვევის მიზნით განვიხილოთ ელემენტები მენდელეევის პერიოდული სისტემის მიხედვით. ელექტრონულ უჯრედებს კვადრატებით გამოვსახავთ, თითოეულ ელექტრონს კი — ისრით, ხოლო ისრების მიმართულება სპინის მიმართულებას შეესაბამება. ამგვარად გამოსახულია ქვემოთ ზოგიერთი ელემენტის ატომთა აღნაგობის სქემა ძირითად მდგომარეობაში. თითოეული სქემის გვერდით გამოსახულია შესატყვისი ფორმულა. მაგ. N-ის ელექტრონული ფორმულა ასეთია: $1s^2 2s^2 2p^3$. აქ დიდი ციფრი გამოსახავს მთავარი კვანტური რიცხვის მნიშვნელობას. $1s^2$ ნიშნავს, რომ გარსში, რომლის $n=1$, s -უჯრედში 2 ელექტრონია, $2s^2$ ნიშნავს, რომ გარსში რომლის $n=2$, s -უჯრედში 2 ელექტრონია, $2p^3$ კი იმას ნიშნავს, რომ იმავე გარსში, რომლის $n=2$, p -უჯრედებში 3 ელექტრონია.

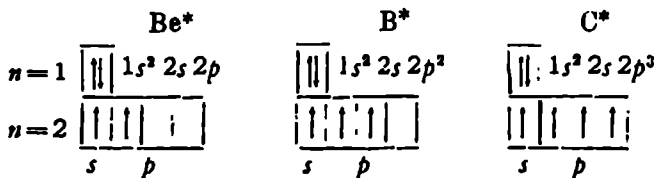




ამ სქემებიდან ჩანს, რომ ლითიუმს ერთი სავალენტო ელექტრონი აქვს. ბერილიუმის გარეგარსის ორივე ელექტრონი გაწყვილებულია, ამიტომაც ბერილიუმი ძირითად მდგომარეობაში ნულვალენტოვანია. მისი მომდევნო ელემენტის ბორის ატომის მეხუთე ელექტრონი ერთ-ერთ p -უჯრედშია (სულ შესაძლოა სამი p -უჯრედი). p -უჯრედების სრული შევსების შედეგად Ne მიიღება. განხილული ელექტრონული სქემებიდან ჩანს, რომ მეორე პერიოდში არაგაწყვილებული ელექტრონების რიცხვი, ე. ი. ვალენტობა შემდეგნაირად იცვლება:

Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
1	0	1	2	3	2	1	0

ბერილიუმის ატომის აგზნებით მისი $2s^2$ ელექტრონების მდგომარეობა შეიცვლება, ერთი დარჩება $2s$ -უჯრედში, მეორე კი გადავა $2p$ -უჯრედში, რის გამოც ბერილიუმის ვალენტობა ორის ტოლი გახდება. თუ ბორის $2s^2$ ელექტრონების მდგომარეობას ამავე გზით შევცვლით, მივიღებთ აგზნებულ მდგომარეობაში სამ არაგაწყვილებულ ელექტრონს. ნახშირბადის ატომის აგზნებისას s -უჯრედში და სამივე p -უჯრედში თითო არაგაწყვილებული ელექტრონი იქნება და მისი ვალენტობა ოთხი გახდება:



მიუხედავად იმისა, რომ ნახშირბადის ოთხი ვალენტობა 1s და 3p ელექტრონებისაგან წარმოსდგება, მისი ოთხივე ბმა თავიანთი თვისებებით ერთმანეთის ტოლფასია. ეს ვალენტობები მიმართული არიან ცენტრიდან ტეტრაედრის კუთხეების მიმართულლებით.

ამრიგად, მეორე პერიოდის ელემენტების ვალენტობა ატომთა აგზნებულ მდგომარეობაში შემდეგნაირად იცვლება:

Li	Be*	B*	C*	N	O	F	Ne
1	2	3	4	3	2	1	0

ამ სქემიდან გაუგებარი რჩება, თუ როგორ უნდა გამოიჩინოს აზოტმა სამზე მეტი ვალენტობა. ამას ქვემოთ გავარკვევთ.

ატომთა სტრუქტურის სქემებიდან, რომლებიც ქვემოთ არის გამოსახული ჩანს, რომ ნატრიუმიდან არგონის ჩათვლით ხდება ელექტრონებით *NI*-გარსის შევსება. *NI*-გარსში ელექტრონების შევსება თანდათან ხდება. ამასთანავე, სავალენტო ელექტრონების რიცხვი აქ იგივე მიიღება, რაც წინა პერიოდში:

	1s	2s	2p	3s	3p	3d
Na						
Mg						
Al						
Si						
P						
S						
Cl						
Ne						

მესამე პერიოდის შემთხვევაში არაგაწყვილებული ელექტრონების რიცხვი ატომის ძირითად მდგომარეობაში შემდეგია

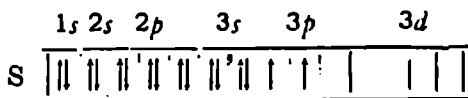
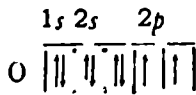
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
1	0	1	2	3	2	1	0

აგზნებულ მდგომარეობაში კი:

Na	Mg*	Al*	Si*	P	S	Cl	Ar
1	2	3	4	3	2	1	0

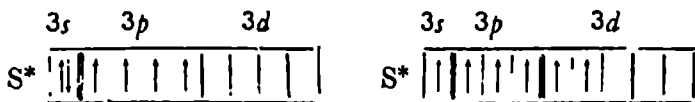
ე. ი. ისეთი, როგორიც მეორე პერიოდში.

დიდი ხანია ცნობილია, რომ ჯანგბადი ორვალენტოვანია, გოგირდის ვალენტობა კი არის 2, 4, 6, ე. ი. გოგირდის ვალენტობა ყოველთვის ლუწია. ფლორი მხოლოდ ერთვალენტოვანია, ქლორის ვალენტობა კი ცვალებადია, იგი ყოველთვის კენტია და შეიძლება იყოს 1, 3, 5, 7. ამ საკითხის ასახსნელად ერთმანეთს შევადაროთ, მაგალითად, ჯანგბადისა და გოგირდის ელექტრონული სტრუქტურები



იმისათვის, რომ გოგირდის ვალენტობა ოთხის ტოლი შეიქნეს, მასში არაგაწყვილებულ მდგომარეობაში ოთხი ელექტრონი უნდა იყოს. ეს ადვილად განხორციელდება, თუ ელექტრონი 3p-მდგომარეობიდან გადავა 3d-მდგომარეობაში. ჯანგბადის შემთხვევაში ეს გამორიცხულია, ვინაიდან ელექტრონის უფრო მაღალ დონეზე გადასვლა ($2p \rightarrow 3s$) დიდ ენერგიას მოითხოვს, და ვინაიდან ასეთ გადასვლას ადგილი არა აქვს, ამიტომ ჯანგბადი ორვალენტოვანი რჩება. გოგირდის შემთხვევაში კი ამ გადასვლისას ($3p \rightarrow 3d$) ელექტრონთა ჯვრული უცვლელი რჩება, ამიტომ ის

დიდ ენერგიას არ მოითხოვს. ელექტრონთა კიდევ ერთი წყვილის დაშლით ექვსვალენტოვანი გოგირდი მიიღება:



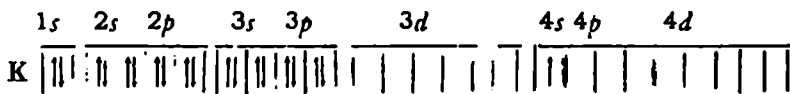
მესამე პერიოდის უკანასკნელი ელემენტი არგონია. მისი გარეგარსი, ნეონის მსგავსად, ოთხ წყვილ ელექტრონს შეიცავს, რის გამო მისი ვალენტობა ნულის ტოლია.

არგონის მომდევნო ელემენტი კალიუმია. ამ ელემენტით იწყება მენდელეევის პერიოდული სისტემის მეოთხე პერიოდი. ეს უკანასკნელი მეორე და მესამე პერიოდისაგან იმით განსხვავდება, რომ რვა ელემენტის ნაცვლად, იგი თვრამეტ ელემენტს შეიცავს.

კალიუმის სავალენტო ელექტრონი თითქოს $3d$ დონეზე უნდა განლაგებულიყო, რომელიც თანდათან უნდა შეივსოს. ელექტრონი განლაგდება იმ დონეზე, რომელზედაც მისი ენერგია მინიმალურია. ენერგეტიკული დონეები შემდეგი მიმდევრობით იცვლება:

$$3s < 3p < 4s < 3d < 4d$$

ამიტომაც კალიუმის სავალენტო ელექტრონი განლაგდება არა $3d$ -უჯრედში, არამედ $4s$ -უჯრედში, რის გამო მისი ელექტრონული აღნაგობის სქემა იქნება



მომდევნო ელემენტის Ca -ის ორი სავალენტო ელექტრონი შეაგებებს $4s^2$ დონეს. Sc -ის მომდევნო ელექტრონი $3d$ -უჯრედში განლაგდება, რის გამო მისი სქემა იქნება $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$. შემდგომი ელემენტის $3d$ -დონეს ელექტრონები 10-მდე შეავსებენ, ე. ი. M -გარსში 18 ელექტრონი განლაგდება. ამრიგად, მეოთხე პერიოდში ელემენტების ატომების მესამე ანუ M -გარსი შეიცავს $3s^2 3p^6 3d^{10}$ ელექტრონებს, რაც 18 ელექტრონს შეადგენს. მაგალითად სპილენძის

ატომის აღნაგობა შემდეგია $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s$. ეს არ ნიშნავს, რომ სპილენძი ტუტე მეტალებს უნდა ემსგავსებოდეს. მართლაც, ტუტე მეტალების ატომებში სავალენტო ელექტრონის ქვემოთ რვა ელექტრონიანი გარსია (რომელიც s და p უჯრედებისაგან შედგება), სპილენძის ატომში კი თვრამეტ ელექტრონიანი გარსია (რომელიც s , p , d უჯრედებისაგან შედგება). ეს უკანასკნელი გაცილებით უფრო ნაკლებად მდგრადია, ვიდრე რვა ელექტრონიანი გარსი. ამიტომაც მისი ელექტრონები სხვა ატომებთან ურთიერთმოქმედებენ, რის შედეგადაც ერთმუხტიანი იონის გარდა ორმუხტიანიც წარმოიქმნება.

ელემენტის რიგობრივი რიცხვის გადიდებისას 18-ელექტრონიანი გარსი უფრო მდგრადი ხდება. თუ ახლა, სპილენძის მომდევნო ელემენტებს Rn-მდე განვიხილავთ, დავინახავთ, რომ აქ ელექტრონთა გარსის შევსება ისევე ხდება, როგორც მესამე პერიოდში მიმდინარეობდა. ამ პერიოდის უკანასკნელი ელემენტის — ინერტული აირის — კრიპტონის გარეგარსი 8-ელექტრონს შეიცავს.

მეხუთე პერიოდი იწყება რუბიდიუმით და თავდება ინერტული გაზით — ქსენონით. იგი მოიცავს აგრეთვე 18 ელემენტს. მეოთხე პერიოდისაგან მცირე განსხვავებით, ელექტრონებით გარსების შევსების სურათი აქაც იგივეა.

მეექვსე პერიოდი იწყება ტუტე მეტალით — ცეზიუმით. მისი სავალენტო ელექტრონი 6s-უჯრედშია. ცეზიუმის მომდევნო ელემენტის — ბარიუმის ახალი ელექტრონი იმავე უჯრედს იკავებს, ხოლო მისი შემდგომი ლანთანის ახალი ელექტრონი 5d-უჯრედში ლაგდება. ამის შემდეგ მიდის მთელი წყება იშვიათ მიწათა მეტალები, რომელთა ვალენტობა ერთნაირია. ეს არის Ce, Pr, Nd, Sm, Eu და სხვ. 58-დან 71-ე ელემენტის ჩათვლით, ე. ი. ის 14 ელემენტი — იშვიათ მიწათა მეტალები — რომელთაც ლანთანიდები ეწოდათ. ლანთანიდების რიგობრივი რიცხვის ზრდის მიუხედავად, მათი ქიმიური თვისებები მეტად მსგავსია და ვალენტობა თითქმის ერთნაირი. ამის მიზეზი ის არის, რომ მათი რიგობრივი რიცხვის გადიდებისას ხდება N-გარსის f-უჯრე-

ელექტრონთა დონეები ატომში

n					n					n					n					
1	2	3	4		1	2	3	4		5	6		1	2	3	4		5	6	
I	0	0 1	0 1 2	0 1 2 3	I				0 1 2 3	0 1 2	0 1 2		I				0 1 2 3	0 1 2	0 1 2	
	K	L	M	N		K	L	M	N	O	P			K	L	M	N	O	P	
Z	1s	2s2p	3s3p3d	4s4p4d4f	Z				4s4p 4d4f	5s5p5d	6s6p6d									
1 H	1				37 Rb	2	8	18	2 6	1										
2 He	2				38 Sr	2	8	18	2 6	2										
3 Li	2	1			39 Y	2	8	18	2 6	1	2									
4 Be	2	2			40 Zr	2	8	18	2 6	2	2									
5 B	2	2 1			41 Nb	2	8	18	2 6	4	1									
6 C	2	2 2			42 Mo	2	8	18	2 6	5	1									
7 N	2	2 3			43 Tc	2	8	18	2 6	6	1									
8 O	2	2 4			44 Ru	2	8	18	2 6	7	1									
9 F	2	2 5			45 Rh	2	8	18	2 6	8	1									
10 Ne	2	2 6			46 Pd	2	8	18	2 6	10										
11 Na	2	2 6	1		47 Ag	2	8	18	2 6	10	1									
12 Mg	2	2 6	2		48 Cd	2	8	18	2 6	10	2									
13 Al	2	2 6	2 1		49 In	2	8	18	2 6	10	2 1									
14 Si	2	2 6	2 2		50 Sn	2	8	18	2 6	10	2 2									
15 P	2	2 6	2 3		51 Sb	2	8	18	2 6	10	2 3									
16 S	2	2 6	2 4		52 Te	2	8	18	2 6	10	2 4									
17 Cl	2	2 6	2 5		53 J	2	8	18	2 6	10	2 5									
18 Ar	2	2 6	2 6		54 Xe	2	8	18	2 6	10	2 6									
19 K	2	2 6	2 6	1	55 Cs	2	8	18	2 6 10	2 6		1								
20 Ca	2	2 6	2 6	2	56 Ba	2	8	18	2 6 10	2 6		2								
21 Sc	2	2 6	2 6 1	2	57 La	2	8	18	2 6 10	2 6	1	2								
22 Ti	2	2 6	2 6 2	2	58 Ce	2	8	18	2 6 10	3	2 6	2								
23 V	2	2 0	2 6 3	2	59 Pr	2	8	18	2 6 10	4	2 6	2								
24 Cr	2	2 0	2 6 4	1	60 Nd	2	8	18	2 6 10	4	2 6	2								
25 Mn	2	2 6	2 6 5	2	61 Pm	2	8	18	2 6 10	5	2 6	2								
26 Fe	2	2 6	2 6 6	2	62 Sm	2	8	18	2 6 10	6	2 6	2								
27 Co	2	2 6	2 6 7	2	63 Eu	2	8	18	2 6 10	7	2 6	2								
28 Ni	2	2 6	2 6 8	2	64 Gd	2	8	18	2 6 10	7	2 6	1	2							
29 Cu	2	2 6	2 6 10	1	65 Tb	2	8	18	2 6 10	9	2 6	2								
30 Zn	2	2 6	2 6 10	2	66 Dy	2	8	18	2 6 10	10	2 6	2								
31 Ga	2	2 6	2 6 10	2 1	67 Ho	2	8	18	2 9 10	11	2 6	2								
32 Ge	2	2 6	2 6 10	2 2	68 Er	2	8	18	2 6 10	12	2 6	2								
33 As	2	2 6	2 6 10	2 3	69 Tu	2	8	18	2 6 10	13	2 6	2								
34 Se	2	2 6	2 6 10	2 4	70 Yb	2	8	18	2 6 10	14	2 6	2								
35 Br	2	2 6	2 6 10	2 5	71 Lu	2	8	18	2 6 10	14	2 6	1	2							
36 Kr	2	2 6	2 6 10	2 6																

ელექტრონთა დონეები ატომში

Z	n	1	2	3	4	5				6				7
	I					0 1 2 3				0 1 2 3				0
		K	L	M	N	O				P				Q
						5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	6f	7s
72 Hf		2	8	18	32	2	6	2		2				
74 Ta		2	8	18	32	2	6	3		2				
74 W		2	8	18	32	2	6	4		2				
75 Re		2	8	18	32	2	6	5		2				
76 Os		2	8	18	32	2	6	6		2				
77 Ir		2	8	18	32	2	6	7		2				
78 Pt		2	8	18	32	2	6	9		1				
79 Au		2	8	18	32	2	6	10		1				
80 Hg		2	8	18	32	2	6	10		2				
81 Tl		2	8	18	32	2	6	10		2	1			
82 Pb		2	8	18	32	2	6	10		2	2			
83 Bi		2	8	18	32	2	6	10		2	3			
84 Po		2	8	18	32	2	6	10		2	4			
85 At		2	8	18	32	2	6	10		2	5			
86 Rn		2	8	18	32	2	6	10		2	6			
87 Fr		2	8	18	32	2	6	10		2	6			1
88 Ra		2	8	18	32	2	6	10		2	6			2
89 Ac		2	8	18	32	2	6	10		2	6	1		2
90 Th		2	8	18	32	2	6	10		2	6	2		2
91 Pa		2	8	18	32	2	6	10	2	2	6	1		2
92 U		2	8	18	32	2	6	10	3	2	6	1		2
93 Np		2	8	18	32	2	6	10	4	2	6	1		2
94 Pu		2	8	18	32	2	6	10	6	2	6			2
95 Am		2	8	18	32	2	6	10	7	2	6			2
96 Cm		2	8	18	32	2	6	10	7	2	6	1		2
97 Bk		2	8	18	32	2	6	10	8	2	6	1		2
98 Cf		2	8	18	32	2	6	10	10	2	6			2
99 Es		2	8	18	32	2	6	10	11	2	6			2
100 Fm		2	8	18	32	2	6	10	12	2	6			2
101 Mv		2	8	18	32	2	6	10	13	2	6			2
102 No		2	8	18	32	2	6	10	14	2	6			2
103 Eka Lu		2	8	18	32	2	6	19	14	2	6	1		2

დების შევსება (ვინაიდან f -მდგომარეობაში 7 უჯრედია, ხოლო თითოეულ უჯრედში ორ-ორი ელექტრონია, ამიტომ f -მდგომარეობაში ელექტრონების მაქსიმალური რიცხვი 14-ს აღწევს), რაც არსებით გავლენას არ ახდენს ელემენტების თვისებებზე.

იშვიათი მიწების მომდევნოა მეოთხე ჯგუფის ელემენტი ჰაფნიუმი, რომელიც მეოცე საუკუნის ოციან წლებში იქნა აღმოჩენილი. ეს პერიოდი 32 ელემენტს შეიცავს და თავდება რადონით.

უკანასკნელი, შეუვსებელი, მეშვიდე პერიოდი იწყება 87-ე ელემენტით—ფრანციუმით. ეს პერიოდი შეიცავს ტრანსურანულ ელემენტებს, აქტინიდებს, რომელთა ატომების O -გარსში 5 f -უჯრედების შევსება ხდება. ლანთანიდების მსგავსად, აქაც 14 ელემენტია მოსალოდნელი, ~~ხოლო ამ პერიოდში 32 ელემენტი უნდა იყოს.~~

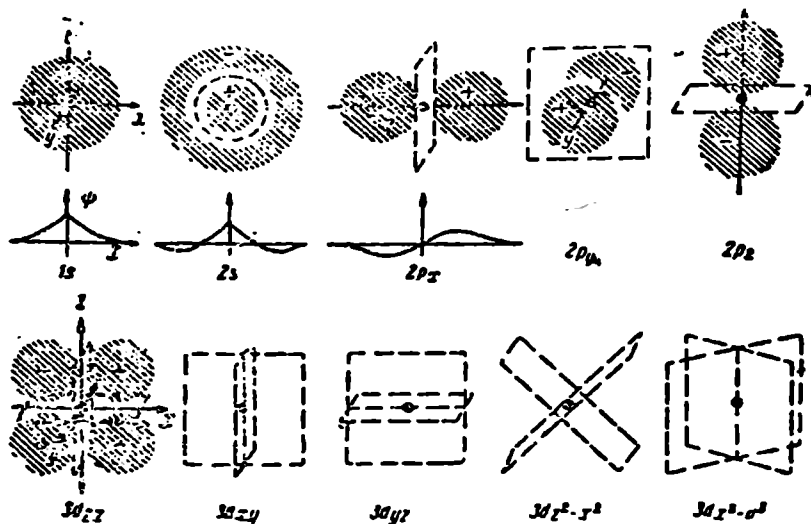
პერიოდული სისტემის ურანის იქით მდგომი ყველა ელემენტი ხელოვნურად არის მიღებული. სადღეისოდ ცნობილია $Z=103$ ელემენტიც.

დასასრულს აღვნიშნავთ, რომ იმ ელემენტებს, რომლებსაც გარეგარსში s - და p -ელექტრონები აქვთ, მენდელეევი ტიპური, ანუ მთავარი ქვეჯგუფის ელემენტები უწოდა. გრძელ პერიოდებში განლაგებულ თანაქვეჯგუფების ელემენტებს ახასიათებს d -ელექტრონები, ხოლო ლანთანიდებსა და აქტინიდებისათვის დამახასიათებელია f -ელექტრონები.

ელემენტარული ღრუბლები

ტალღური თვისებებიდან გამომდინარე, ელექტრონს ვერ მივაწერთ ატომში მოძრაობის გარკვეულ ტრაექტორიას. სამაგიეროდ შეიძლება განვიხილოთ საკითხი სივრცის მოცემულ წერტილში ელექტრონის პოვნის ალბათობის შესახებ, ანუ ელექტრონული ღრუბლის შესახებ. მოცულობის განსაზღვრულ ელემენტში ელექტრონის პოვნის ალბათობის გარკვევის შედეგად მივალთ დასკვნამდე, რომ მოცემული ელექტრონი შეიძლება მოცემული მოცულობის სხვადასხვა

წერტილში ვიპოვოთ, თითქოს ელექტრონი განთხეულია მოცემულ მოცულობაში. ამიტომაც მას ელექტრონულ ღრუბელს ვუწოდებთ. ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივე მაქსიმალურია იმ ადგილებში, სადაც გადის ბორის ორბიტი.



ნახ. 14. ელექტრონული ღრუბლის სხვადასხვა მდგომარეობა

ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივის განაწილება მოცემულ მოცულობაში შეიძლება ψ -ფუნქციით აღვწეროთ. მართლაც, ატომში მყოფი ელექტრონის საკუთარი ფუნქცია დამოკიდებულია ოთხივე კვანტური რიცხვის მნიშვნელობებზე.

ატომის შემთხვევაში $\psi^2 \Delta v$ გამოსახულება ნიშნავს ალბათობას იმისა, რომ ელექტრონი Δv მოცულობაშია. ყოველი ელექტრონი ატომში შეიძლება განვიხილოთ როგორც ელექტრონული ღრუბელი, რომლის ფორმა დამოკიდებულია კვანტური რიცხვების მნიშვნელობებზე. ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივე წერტილში, რომელიც x, y, z კოორდინატებით განისაზღვრება, გამოისახება ψ^2 -ის მნიშვნელობით. ზემოთ მე-14 ნახაზზე გამოსახულია s -, p - და d -ელექტრონების ელექტრონული ღრუბლები, სადაც $+$ და $-$ ნიშნები შესაბამის ψ -ფუნქციებს ეკუთვნის.

γ -ელექტრონების ელექტრონულ ღრუბლებს სფერული სიმეტრია ახასიათებს. ე. ი. ატომგული ირგვლივ გარსშემორტყმულია სფერული ფორმის ელექტრონული ღრუბლით. ელექტრონის ადგილსამყოფელის ალბათობა ატომგულიდან დაცილებისას იზრდება, $0,53 \text{ \AA}$ -ის მანძილზე, ე. ი. ბორის ორბიტზე აღწევს მაქსიმუმს და შემდეგ კი ეცემა. $1 \text{ \AA}$ და $2 \text{ \AA}$ -ელექტრონების ფუნქციები თუმცა განსხვავდებიან ერთი მეორისაგან, მაგრამ ვინაიდან ეს ფუნქციები დამოკიდებულია რადიუსზე და არა კუთხეებზე, ამიტომ მათ სფერული სიმეტრია ახასიათებთ.

p -ელექტრონების შესატყვისი ψ -ფუნქციების გრაფიკული გამოსახვიდან გამომდინარეობს, რომ ელექტრონულ ღრუბლებს p -მდგომარეობაში რვიანის ფორმა აქვს, ე. ი. მათ ახასიათებს სრულიად გარკვეული გეზი. სწორედ ეს გარემოება განაპირობებს გეზურ ვალენტობას.

არსებობს სამი p -მდგომარეობა. ერთნაირი l -ის და სხვადასხვა m -ის შესატყვისი ელექტრონულ ღრუბელს სხვადასხვაგვარი ორიენტაცია აქვს სივრცეში. სხვადასხვა m -ის მქონე p -ელექტრონების ღრუბლის „რვიანები“ ერთმანეთისადმი მართობულად არიან მიმართული.

p -ღრუბლებს მაქსიმალური სიმკვრივე x , y , z კოორდინატების ღერძების გასწვრივ ახასიათებთ. ისინი აღინიშნებიან p_x , p_y , p_z სიმბოლოებით.

ქვანტური რიცხვებიდან გამომდინარეობს, რომ არსებობს ხუთი d -მდგომარეობა. მართლაც, როცა $n=3$ და $l=2$, მაშინ $m=2, 1, 0, -1, -2$. ამ მდგომარეობებში ელექტრონული ღრუბლები ხასიათდებიან როზეტის ფორმით. ამ ხუთ მდგომარეობაში მყოფი ელექტრონული ღრუბლები თავიანთი სივრცობრივი ორიენტაციით განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან.

მე-14 ნახაზებზე დაშტრიხული არე შეესაბამება ელექტრონების ადგილსამყოფელის მაქსიმალურ ალბათობას. ხუთი d -მდგომარეობიდან ოთხისათვის გამოხატულია ელექტრონული უჯრედების სასაზღვრო სიბრტყეები.

ნაწილი მეორე

მოლეკულების აღნაგობა

შ ე ს ა ვ ა ლ ი

მოლეკულა არის დამოუკიდებელი არსებობის უნარის მქონე, ქიმიური ძალებით შეკავშირებული ატომების ერთობლივობა, რომელიც წარმოადგენს მოცემული ნივთიერების უმცირეს ნაწილას და მის ყველა თვისებას ატარებს.

წარმოდგენები იმის შესახებ, რომ ნივთიერება მოძრავი ნაწილაკებისაგან შედგება, ჯერ კიდევ ძველთაგანვე აღმოცენდა, მაგრამ ცნება მოლეკულის შესახებ, რომელიც თვისებრივად განსხვავდება ატომისაგან, ჩამოაყალიბა საჟრანგეთის ფილოსოფოს-მატერიალისტმა პიერ გასსენდიმ (1592—1655). მეთვრამეტე საუკუნეში ცნება მოლეკულის შესახებ განავითარა დიდმა რუსმა მეცნიერმა ლომონოსოვმა. 1741—60 წლებში ლომონოსოვმა შეიმუშავა მოლეკულურ-კინეტიკური თეორია, რომლის დახმარებითაც ნივთიერების მრავალ ფიზიკურ და ქიმიურ თვისებებს სათანადო ახსნა მისცა.

დალტონმა მეცხრამეტე საუკუნის დასაწყისში შეიმუშავა ატომისტური თეორია, რის შედეგადაც მან ჯერად-შეფარდებათა კანონი აღმოაჩინა.

მოლეკულური თეორიის შემდგომი განვითარებისათვის დიდი მნიშვნელობა ჰქონდა ავოგადროს ჰიპოთეზს, რომლის

თანახმად, აირების ტოლი მოცულობები ერთნაირ ფიზიკურ პირობებში მოლეკულების ერთნაირ რიცხვს შეიცავენ. აქ მკაფიოდ იყო განსაზღვრული ატომი როგორც ქიმიური ელემენტის უმცირესი ნაწილაკი და მოლეკულა როგორც მარტივი ან რთული ნივთიერების უმცირესი რაოდენობა, რომელიც ქიმიურ ურთიერთმოქმედებაში შედის. მაგრამ, ქიმიისათვის დიდი მნიშვნელობის მიუხედავად, ავოგადროს გამოკვლევებმა ვერ პოვა საყოველთაო აღიარება.

მხოლოდ ჟერარასა და ლორანის და, განსაკუთრებით, კანიცაროს (1860) გამოკვლევების შედეგად დაზუსტებული ფორმულირება მიეცა ატომსა და მოლეკულს. ჟერარასა და ლორანის მიერ განვითარებულ წარმოდგენებში ნავარაუდევია იყო, რომ ქიმიური თვისებები მხოლოდ მაშინ იჩენენ თავს, როცა მიმდინარეობს რეაქცია.

/ ორგანული ნაერთების შესწავლის შედეგად, ინგლისელი ქიმიკოსი ფრანკლანდი 1852 წ. ნივიდა დასკვნამდე, რომ მოცემული ქიმიური ელემენტის ერთი ატომი ნეორე ელემენტის ატომთან ზუსტად განსაზღვრულ რიცხვს იკავშირებს. ქიმიური ელემენტის ამ თვისებას ვალენტობა ეწოდა. ტერმინი ვალენტობა მეცნიერებაში ჩამოყალიბდა 1868 წელს, მაგრამ ხმაურებაში იგი მეოცე საუკუნეში შემოვიდა. |

მენდელეევი პერიოდულობის კანონის აღმოჩენისთანავე ნათელყო, რომ ელემენტის ვალენტობა ცვლადია და დამოკიდებულია ელემენტის ადგილმდებარეობაზე პერიოდულ სისტემაში: 1) ჯგუფის ნომერი უდრის ელემენტის ვალენტობას მის მარილწარმოქმნელ უმაღლეს ქანგეულში, 2) უმაღლეს წყალბად-ნაერთებში IV ჯგუფიდან VII-ს ჩათვლით ვალენტობა 4-დან 1-მდე ეცემა (CH_4 , NH_3 , H_2O , HCl), 3) ელემენტის ვალენტობათა ჯამი ქანგბადისა და წყალბადის მიმართ 8-ს უდრის.

ვალენტობის ელექტროქიმიური თეორია ჩამოაყალიბა ბერცელიუსმა (1811). ამ თეორიის მიხედვით ყოველი ატომი აბათანატოლი რაოდენობით შეიცავს დადებით და უარყოფით ელექტრობას, რის გამო ზოგ ატომს დადებითი მუხტი აქვს, ზოგს კი — უარყოფითი. ნაერთის წარმოქმნისას ელე-

ქტროდადებითი ელემენტი ელექტროუარყოფითს უკავშირდება, რის შედეგადაც ელექტრონეიტრალური მოლეკულა წარმოიქმნება. მაგალითად, ამ თეორიით მეტალები და წყალბადი ელექტროდადებითია, არამეტალები კი ელექტროუარყოფითია. ამიტომაც HCl-ში H-ის ადგილს იკაფებს Na, K, Ca, Fe და სხვ. მაგრამ შემდეგში დიუნას ზიერ აღმოჩენილ იქნა, რომ ელექტროდადებითი წყალბადი შეიძლება ელექტროუარყოფითმა კლორმა შეცვალოს. მაგ., CH_3COOH , CH_2ClCOOH , CHCl_2COOH , CCl_3COOH . ამან გამოიწვია ბერცელიუსის თეორიის დამსობა.

ბერცელიუსის თეორიის უარყოფის შემდეგ კეკულემ და კუპერმა ჩამოაყალიბეს ვალენტობის თეორია, რომლის თანახმად, საკმარისია წყალბადს მივაწეროთ ერთი სავალენტო ხაზი, ეანგბადს — ორი, აზოტს — სამი და ნახშირბადს — ოთხი, რომ აგებულ სქემაში მოთავსდეს ორგანული ქიმიის მთელი ფაქტობრივი მასალა. მაგრამ კეკულე ძველი წარმოდგენების რყევობაში დარჩა და თითოეული ნაერთის გამოსახვის მიზნით მიმართავდა იმდენ ფორმულას, რამდენგვარი გარდაქმნაც იყო ცნობილი მოცემული ნაერთისათვის. ვალენტობის ამ ფორმალურ თეორიაში საკითხი ქიმიური ძალებისა და ვალენტობის ბუნების შესახებ და, რაც მთავარია, მოლეკულის აღნაგობის შესახებ, ღიად დარჩა.

ა. ბუტლეროვმა (1867) ჩამოაყალიბა ორგანული ნაერთების აღნაგობის ქიმიური თეორია, რომლის ძირითადი აზრის თანახმად „რთული მოლეკულის ქიმიური ბუნება განისაზღვრება მისი ელემენტარული ქიმიური შემადგენლობით, ბუნებით და აღნაგობით“. თითოეულ ნაერთს ამ თეორიით ერთი გარკვეული ფორმულა ახასიათებს.

ა. ბუტლეროვის თეორიის თანახმად, მოლეკულში ატომები ვალენტობის გარკვეული წესების მიხედვით არიან შეკავშირებული. სტრუქტურული ფორმულებიდან არ გამომდინარეობს, რომ არაუშუალოდ შეკავშირებული ატომები მოცემულ მოლეკულში ურთიერთმოქმედებაში იმყოფებიან ერთმანეთთან. ა. ბუტლეროვის თეორიამ ახსნა იზომერია,

ნაერთების აღნაგობა და ახალ ნივთიერებათა ზომზადების გზები დასახა.

მენდელეევი და ვანტ-ჰოფი ატომების ურთიერთმოქმედებას შექიდიულობის ძალებით ხსნიდნენ.

უფრო მოგვიანებით ვერნერმა გამოთქვა აზრი, რომ მოცემული ატომის ირგვლივ გეომეტრიული თავისებურებების გამო შეიძლება ატომების, ან ატომთა ჯგუფების ნხოლოდ გარკვეული რაოდენობა განლაგდეს. ეს იდეა საფუძვლად დაედო ვერნერის კოორდინაციულ თეორიას, რომელიც შემდეგში ლ. ჩუგაევმა განავითარა.

მეოცე საუკუნის დასაწყისში მრავალი მეცნიერი შეეცადა დაეკავშირებინა ვალენტობა ატომის შიგა აღნაგობასთან. ამ მხრივ საინტერესო ცდები ჩაატარა ნ. მოროზოვმა, ჯ. ტომსონმა, შუარკმა და სხვ. „დღითი-დღე უფრო ცხადი ხდება, რომ ქიმიური თვისობა ელექტრულ პროცესებს ეთანაბრება“, წერდა 1908 წ. ვ. ი. ლენინი (თხზულებანი, გამოცემა მეოთხე, მე-14 ტომი, გვ. 317).

ბორის თეორიის ჩამოყალიბების შემდეგ ლ. პისარევესკიმ „დანერგა რა ელექტრონი ქიმიაში“, მრავალი რეაქციის მიმდინარეობა დაუკავშირა ატომის აღნაგობას (1914).

ატომის აღნაგობა და ვალენტობა დაკავშირებულ იქნა ერთმანეთთან კოსელის (1915) და ლუისის (1916) აღნაგობის თეორიაში.

1927 წ. ჰაიტლერისა და ლონდონის მიერ ჩამოყალიბებულ იქნა ვალენტობის თანამედროვე თეორია, რომელსაც საფუძვლად ტალღური მექანიკის დებულებები უძევს. ამ უკანასკნელმა ახსნა მისცა ვალენტობის ნაჯერობას, გეზურ ვალენტობას, ცვლად ვალენტობას და სხვ.

ქიმიური ბმის ტიპები

ქიმიის ერთ-ერთ ძირითად ამოცანას წარმოადგენს ქიმიური გარდაქმნის შესწავლა. რადგან ქიმიური გარდაქმნის დროს ადგილი აქვს ქიმიური ბმების დაწყვეტას და ახალი ქიმიური ბმების წარმოქმნას მოლეკულაში, ამიტომ ნათე-

ლია, რომ ქიმიური ბმის ბუნების გარკვევა არსებითი მნიშვნელობის საკითხს წარმოადგენს.

ქიმიური ბმის წარმოქმნაში მონაწილეობას იღებენ ატომის გარეგარსის არაგაწყვილებული ელექტრონები, რომლებსაც სავალენტო ვუწოდეთ. იმ ბმათა რაოდენობას, რომლითაც მოცემული ატომი მეორეს უკავშირდება, ეწოდება ვალენტობა. ვალენტობას, როგორც ცნობილია, ხაზით გამოსახავენ. ბუნებრივია, რომ სავალენტო ხაზი არ ასახავს ქიმიური ბმის ბუნების სახესხვაობას.

მოლეკულის წარმოქმნაში დიდი როლი ეკუთვნის ატომების გარეგარსის სავალენტო ელექტრონების ურთიერთმოქმედებას. ატომთა შიგა ელექტრონები არ იღებენ უშუალო მონაწილეობას ქიმიური ბმის წარმოქმნაში. რადგან მოლეკულა წარმოადგენს ატომგულებისა და ელექტრონებისაგან შემდგარ მეტ-ნაკლებად რთულ სისტემას, ამიტომ პირველი შეხედვით შეიძლება გამოვიტანოთ დასკვნა, რომ ქიმიურ ძალებს, რომლებიც ქიმიურ ბმას განაპირობებენ, ელექტრული ბუნება ახასიათებთ. ეს არავითარ შემთხვევაში არ ნიშნავს იმას, რომ ქიმიური ურთიერთმოქმედება შეიძლება მხოლოდ ელექტროსტატიკურ ძალებამდე დავიყვანოთ. ატომებისა და მოლეკულების სამყაროში ელექტრული ძალები იძენენ ახალ თვისებებს, რას გამოც მათი ურთიერთმოქმედების ბუნება მეტად თავისებურია. ქიმიური ბმის წარმოქმნისას ადგილი აქვს ქიმიური ძალების გამოვლენას, რომლის ახსნა მარტოოდენ ელექტროსტატიკური ურთიერთმოქმედებით არ შეიძლება. მხოლოდ შედარებით იშვიათ შემთხვევაში შეიძლება ქიმიური ბმის ენერგიის მიახლოებით გაანგარიშება ელექტროსტატიკის კანონების დახმარებით. ასეთ ბმას ადგილი აქვს იონურ ნაერთებში, რომლებიც ჰაპირისპირო ნიშნის იონებისაგან წარმოსდგებიან. ამ ტიპის ბმის ენერგიის ზუსტი გაანგარიშება მოითხოვს ტალღური მექანიკის გამოყენებას.

ორი ატომის ერთმანეთთან მიახლოებისას აღიძვრება ურთაერთმოქმედება, რომლის ენერგია დამოკიდებულია მანძილზე. თუ ატომთა შორის აღძრული ურთიერთმოქმედ-

დება განზიდვის ძალებს წარმოადგენს, ატომები დაცილდებიან ერთმანეთს და მოლეკულა არ მიიღება. წინააღმდეგ შემთხვევაში წარმოიქმნება ქიმიური ბმა, რომელიც ატომებს ერთმანეთთან აკავშირებს მოლეკულის სახით.

მატერიის მოძრაობის ქიმიური ფორმა თვისებრივად განსხვავდება მოძრაობის სხვა ფორმებისაგან. მოძრაობის ქიმიური ფორმის ნიშანია ბმების გადანაწილება ატომებს შორის, რაც დაკავშირებულია ქიმიურ გარდაქმნასთან.

სხვადასხვა ტიპის ქიმიურ ბმათა შორის ძირითადია ერთმანეთისაგან არსებითად განსხვავებული იონური და კოვალენტური (ანუ ატომური) ბმა. იონურის მაგალითია NaCl და მისი მსგავსი ნაერთები, ატომურის მაგალითია H_2 , O_2 , CH_4 , C_6H_6 და ა. შ. ამას გარდა უნდა გავარჩიოთ კოორდინაციული, ბმა, რომელიც თავს იჩენს კომპლექსურ ნაერთებში, წყალბადური, რომელიც განაპირობებს ასოციაციის მოვლენას და, აგრეთვე, ვან-დერ-ვაალსის ძალებით აღძრული არამდგრადი ბმა (HgNe , $(\text{O}_2)_2$ და ა. შ.).

იონური ბმა

ქიმიურ ბმას, რომელსაც იონების ურთიერთმიზიდვა განაპირობებს, იონურს უწოდებენ. იონური ბმის თეორია კოსელის მიერ ჩამოყალიბებულ იქნა ტალღური მექანიკის განვითარებამდე. საფუძვლად მას ბორის თეორია დაედო. ბორის თეორიით ინერტული გაზების ატომთა ქიმიური უმოქმედობა ანუ ქიმიური ნაჯერობა ჩაკეტილი რვაელექტრონიანი გარეგარსის თვისებებით აიხსნება. იონური ბმის თეორიის ძირითადი აზრას თანახმად, ყოველი ელემენტის ატომი იჩენს სწრაფვას ელექტრონების დაკარგვის ან შეძენის გზით, ინერტული გაზის ატომის მსგავსად, გაიჩინოს რვაელექტრონიანი, ჩაკეტილი გარეგარსი.

როცა ერთი ელემენტის ელექტროუარყოფითობა მცირეა, ხოლო მეორე ელემენტისა დიდია, მაშინ, პირველი ელემენტის ატომი თავის ელექტრონს გადასცემს მეორე ელემენტის ატომს, რის შედეგადაც მიიღება დადებითი და

უარყოფითი იონები. მათი ურთიერთმიზიდვით წარმოიქმნება იონური ბმა. ამის ტიპურ მაგალითს წარმოადგენს NaCl და მისი მსგავსი ნაერთები, რომლებიც შედგება არა ატომებისა, არამედ იონებისაგან. ნატრიუმის იონიზაციის პოტენციალი შედარებით მცირე სიდიდისაა, ე. ი. ის ადვილად ჰკარგავს გარეგარსში მყოფ სავალენტო ელექტრონს, რის შედეგად მიღებულ დადებით ნატრიუმ-იონს რვაელექტრონიანი გარეგარსი ექნება. მეორე ნხრივ, ქლორ-ატომი ელექტრონისადმი დიდი სწრაფვის გამო ადვილად იძენს ელექტრონს და წარმოქმნის ქლორ-იონს, რომლის გარეგარსი აგრეთვე რვა ელექტრონს შეიცავს. ნატრიუმ-იონი თავისი ელექტრონული გარსის აღნაგობით Ne-ის ატომს ემსგავსება, ქლორ-იონისა კი — Ar-ისას. მიღებული მოპირდაპირე ნიშნის იონები მიიზიდავენ ერთმანეთს, რის შედეგად წარმოიქმნება იონური ნაერთი Na^+Cl^- .

იონური ნაერთების წარმოქმნის თითქმის ყველა შემთხვევაში მეტალის იონიზაციის პოტენციალი აღემატება მეტალოიდის სწრაფვას ელექტრონისადმი. ამიტომ ელექტრონების გადაცემასთან დაკავშირებული იონების წარმოქმნა მოითხოვს დამატებით ენერგიას, რის გამო ეს პროცესი თავისთავად თითქოს არ უნდა მიმდინარეობდეს. ასეთ შემთხვევაში ენერგიის შევსება ხდება იმ ენერგიის ხარჯზე, რომელიც იონების მიახლოებისას გამოიყოფა. მართლაც, იონიზაციის სითბოსა და ელექტრონისადმი სწრაფვის ჯამი უარყოფით სიდიდეს იძლევა:

$$\text{Na} = \text{Na}^+ + e - 117,8$$

$$\text{Cl} + e = \text{Cl}^- + 89,4$$

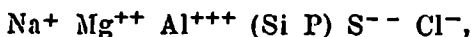
$$\text{Na} + \text{Cl} = \text{Na}^+ + \text{Cl}^- - 28,4.$$

ენერგიის ამ ნაკლებობას გადათარაფს ის ენერგია, რომელიც იონების ურთიერთშეკავშირებისას გამოიყოფა:

$$\text{Na}^+ + \text{Cl}^- = \text{Na}^+\text{Cl}^- + 98.$$

ნათქვამიდან გამომდინარეობს, რომ ელექტრონების გადაცემა მაშინ იქნება შესაძლებელი, როცა ატომები მცირე მანძილით მიუახლოვდებიან ერთმანეთს.

სხვა მსგავსი მაგალითების განხილვა იმავე სურათს გვაძლევს. ატომები მიისწრაფვიან მდგრად მდგომარეობაში გადასვლისაკენ. კალციუმი, მაგალითად, ჰალოგენებთან ურთიერთმოქმედებისას შედარებით ადვილად ჰკარგავს ორ სავალენტო ელექტრონს, რის გამო წარმოიქმნება ორმუხტიანი კალციუმ-იონი. თავისი კონფიგურაციით Ca^{++} ემსგავსება Ar -ის ატომისას. ორი ელექტრონის მოშორება მეტ მუშაობას მოითხოვს ვიდრე ერთისა. ამით აიხსნება, რომ კალციუმი ქიმიურად უფრო ნაკლებ აქტიურია, ვიდრე კალიუმი. ქლორი, ბრომი, იოდი, ჯანგბადი, გოგირდი და სხვ. ადვილად იძენენ ელექტრონებს, რადგან მათ დიდი სწრაფვა ახასიათებს ელექტრონის შეძენისადმი. ელექტრონების დაკარგვა-შეძენის გამო ნაერთებში — შემდეგი სახის იონები მიიღება:



რომელთა ელექტრონული კონფიგურაცია მათი უახლოესი ინერტული გაზის ატომების მსგავსია. ამ ატომების იონური მდგომარეობა მკაფიოდაა გამოხატული. შუა ელემენტებისათვის არ არის დამახასიათებელი მსგავსი იონური მდგომარეობა. ამჟამად B^{+++} , C^{+} , C^{--} , N^{--} , S^{+} , Sb^{+} , U^{+} და ა. შ. იონების არსებობა ნაერთებში გამორიცხულია კიდევ.

გადაცემული ან შეძენილი ელექტრონების რაოდენობა განსაზღვრავს იონის მუხტს ანუ მის იონურ ვალენტობას. მაგალითად, ნატრიუმისა და კალიუმის იონები ერთმუხტიანი დიდებითი იონებია, ხოლო ფტორისა და ქლორის იონები — ერთმუხტიანი უარყოფითი.

განხილული არაერთარ შემთხვევაში არ წარმოდგენს იონური ნაერთების სრულყოფილ თეორიას, არამედ — ერთგვარ მიახლოებას.

იონურ ნაერთებს განსაკუთრებული თვისებები ახასიათებს, რომლებითაც ისინი არსებითად განსხვავდებიან სხვა ტიპის ნაერთებისაგან. ასეთია მათი კრისტალური მესერის აღნაგობა, სადაც სიმეტრიის სიბრტყეთა გადაკვეთის წერტილებში მიმდევრულად არიან განლაგებული არა ატომები, ან მოლეკულები, არამედ იონები. ხსნარში გადასვლისას ხდება იონების ერთმანეთისაგან დაცილება, ამიტომ იონური ნაერთების წყალხსნარები ძლიერ ელექტროლიტებს წარმოადგენენ. ამ ტიპის ნაერთების იონური სტრუქტურა განაპირობებს აგრეთვე მათი დნობისა და დუღილის მაღალ ტემპერატურას.

კლასიკურ წარმოდგენებზე აგებული იონური ნაერთების აღნაგობის თეორია ჩამოაყალიბა ბორნმა და ი. ზერინკელმა.

იონური მესერის ენერგია

იონური ნაერთებისათვის მეტად დამახასიათებელია იონური მესერის ენერგიის სიდიდე. ეს უკანასკნელი წარმოადგენს ენერგიის იმ რაოდენობას, რომელიც საჭიროა ერთი მოლი კრისტალის იონების ერთმანეთისაგან უსასრულოდ დიდი მანძილით დასაშორებლად ან, სხვანაირად, ეს არის ენერგია, რომელიც გამოიყოფა, როცა აირადი იონებიდან ერთი მოლი კრისტალური ნივთიერება წარმოიქმნება.

კრისტალური მესერის ენერგიის გაანგარიშება ბორნის მიხედვით შეიძლება თეორიული გზით. თუ მხედველობაში მივიღებთ იონებს მიზიდვისა და განზიდვის ძალებს, მივაღწეოთ დასკვნამდე, რომ NaCl -ის ტიპის ნაერთებისათვის კრისტალური მესერის ენერგია

$$U = 545 \sqrt[3]{\frac{d}{M}} \text{ კკალ,}$$

სადაც d არის სიმკვრივე, ხოლო M — მოლეკულური წონა. კრისტალური მესერის ენერგია მით მეტია, რაც უფრო ნაკლებია იონის რადიუსი და რაც უფრო მეტია მისი მუხტი:

$$U_{\text{NaCl}} > U_{\text{KCl}} > U_{\text{KJ}}.$$

კრისტალური მესერის ენერგიის დახმარებით ადვილად შეიძლება გამოვთვალოთ ელემენტის სწრაფვა ელექტრონისადმი. ამისათვის საჭიროა გამოვიყენოთ ჰესის კანონი, რომლის თანახმად, რეაქციის სითბური ეფექტი დამოკიდებულია სისტემის საწყის და საბოლოო მდგომარეობაზე და არა რეაქციის მიმდინარეობის გზაზე.

კლორნატრიუმის წარმოქმნის სითბო

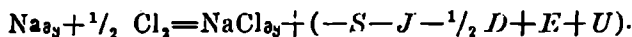


ეს რეაქცია შეიძლება შემდეგ ელემენტარულ პროცესებად დავშალოთ:

1. $\text{Na}_{\text{at}} = \text{Na}_{\text{ion}} - S \quad (25,9)$
2. $\text{Na}_{\text{ion}} = \text{Na}^+ + e - J \quad (117,5)$
3. $\frac{1}{2} \text{Cl}_2 = \text{Cl} - \frac{1}{2} D \quad (28,5)$
4. $\text{Cl} + e = \text{Cl}^- + E \quad (?)$
5. $\text{Na}^+ + \text{Cl}^- = \text{NaCl}_{\text{at}} + U \quad (184),$

სადაც S არის აქროლების, ანუ სუბლიმაციის სითბო, J — იონიზაციის სითბო, D — მოლეკულის ატომებად დისოციაციის სითბო, E — სწრაფვა ელექტრონისადმი და U — კრისტალური მესერის ენერგია.

ამ ელემენტარული რეაქციების შეჯამებით და მსგავსი წევრების შეკვეცით მივიღებთ:



ზემო განტოლებასთან შედარებიდან ჩანს, რომ

$$Q = -S - J - \frac{1}{2} D + E + U,$$

საიდანაც ადვილად გამოვთვლით უცნობი E რიცხვით სიდიდის მნიშვნელობას. აქედან მიღებული $E=87,7$ კკალ. ქვემო ცხრილში თავმოყრილია წარმოქმნის Q -სითბოს, იონიზაციის J -სითბოსა და კრისტალური მესერის U ენერგიების ზოგიერთი მნიშვნელობები.

ნაერთი	ცხრილი		
	Q	J	U
LiCl	97,6	123,5	201,1
NaCl	98,3	117,8	184
KCl	104,4	99,6	162,9
RbCl	105,1	95,9	162,1
CsCl	106,3	89,2	153,2

ცხრილის მონაცემებიდან ჩანს, რომ წარმოქმნის სითბო იზრდება მეტალის ატომის რადიუსის გადიდებისას. ამის შესაბამისად მცირდება მეტალის იონიზაციის პოტენციალი და მცირდება კრისტალური მესერის ენერგია.

ზემო ცხრილში მოცემულია ზოგიერთი ელემენტის სწრაფვა ელექტრონისადმი. აქედან ჩანს, რომ ჰალოგენების მწკრივში ატომის რადიუსის გადიდებისას სწრაფვა ელექტრონისადმი მცირდება.

ცალკეულ ატომებს თავისუფალ მდგომარეობაში არ შეიძლება ერთზე მეტი ქარიზი ელექტრონი ჰქონდეს, ვინაიდან ელექტრონები განზიდვენ ერთმანეთს. ამიტომაც მათი სწრაფვა ორი ელექტრონისადმი უარყოფითი სიდიდით გამოისახება. O^{--} , S^{--} , N^{--} და სხვა მსგავსი უარყოფითი იონები ფიქტიურ სისტემებს წარმოადგენენ და მათ არ შეუძლიათ დამოუკიდებლად არსებობა. ამ დასკვნას პრინციპული მნიშვნელობა აქვს.

გამომდინარე ელემენტარული რეაქციების სითბური ეფექტიდან შეიძლება ჰიპოთეზური რეაქციების წარმოქმნის

სითბოს გამოთვლა. მაგალითად, NeCl -ის წარმოქმნის სითბო იქნებოდა

$$Q_{\text{NeCl}} = -J_{\text{Ne}} - \frac{1}{2} D_{\text{Cl}_2} + E_{\text{Cl}} + U_{\text{NeCl}}.$$

ვინაიდან Ne -ის იონიზაციის სითბო დაახლოებით 500 კკალ-ს აღწევს, ამიტომ $Q_{\text{NeCl}} = -250$ კკალ. აქედან ჩანს, რომ ინერტული აირებიდან შეუძლებელია მარილმსგავსი ნაერთების მიღება. ამავე გზით გამოთვლილია ზოგიერთი ნაერთის წარმოქმნის სითბო

$$\text{NaF}_2 - 156, \quad \text{MgF}_2 - 111, \quad \text{AlF}_3 - 700 \text{ კკალ და ა. შ.}$$

ხაზგასმით უნდა აღენიშნოთ, რომ აქ განხილული იონური ნაერთების თეორია მიახლოებითი ხასიათისაა.

აღსანიშნავია, რომ ერთხანს კოსელის თეორიის მიმდევრები ცდილობდნენ ყველა ნაერთის აღნაგობა აეხსნათ ელექტროსტატიკური წარმოდგენების დახმარებით, ამიტომ ისინი იძულებული იყვნენ ელიარებინათ, რომ ნახშირბადი იჩენს ოთხი ელექტრონის დაკარგვის და, აგრეთვე, შეძენის უნარს, აზოტი ჰკარგავს ხუთ ელექტრონს, გოგირდი — ექვს ელექტრონს და ა. შ. როგორც ზემოთ დავინახეთ, ორი ელექტრონის მიმართ ეანგბადი უკვე უარყოფით სწრაფვას იჩენს.

პოლარულ გამხსნელში, მაგალითად, წყალში იონური ნაერთის მოთავსებისას ადგილი აქვს გამხსნელის მოლეკულების ორიენტაციას იონების მიმართ. ამ დროს ხდება იონის სილვატაცია (წყლის შემთხვევაში — ჰიდრატაცია), რასაც გარკვეული სიდიდის სითბური ეფექტი ახასიათებს.

ელექტროუარყოფითობა

A ატომის ელექტრონი რომ B ატომს გადაეცეთ, დაიხარჯება $J_A - E_B$ მუშაობა, სადაც J_A არის A ატომის იონიზაციის ენერგია და E_B არის B ატომის სწრაფვა ელექტრონისადმი.

B ატომიდან A ატომისადმი ელექტრონის გადასაცემად საჭიროა $J_B - E_A$ ენერგია. როცა ეს ორივე სიდიდე ერთმანეთის ტოლია:

$$J_A - E_B = J_B - E_A \text{ ან } J_A + E_A = J_B + E_B,$$

მაშინ პროცესი არ წავა, ვინაიდან ორივე ელემენტის $(J + E)$ ელექტროუარყოფითობა ერთნაირია.

ელემენტის ელექტროუარყოფითობის განსაზღვრას არსებითი მნიშვნელობა აქვს, ვინაიდან ქიმიური თვისებების დახასიათებისას ამ სიდიდის დახმარებით აღვილია გათვალისწინება ელემენტის ტენდენციისა დადებითი თუ უარყოფითი იონის წარმოქმნისადმი, რისთვისაც მხოლოდ სწრაფვა ელექტრონისადმი ან იონიზაციის ენერგია საკმარისი არ არის.

ბუნებრივია, რომ რაც უფრო მეტია $X = J + E$ ელექტროუარყოფითობა, მით უფრო ძნელია ატომიდან ელექტრონის მოშორება.

ქვემო ცხრილში მოცემულია ზოგიერთი ელემენტის ელექტროუარყოფითობა.

ცხრილი

ზოგიერთი ელემენტის ელექტროუარყოფითობა პირობით ერთეულებით 0,18 $(J + E)$ eV

H 2,1						
Li 1,0	Be 1,5	B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0
Na 0,9	Mg 1,2	Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0
K 0,8	Ca 1,0	Sc 1,3	Ti 1,6	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8
Rb 0,8	Sr 1,0	Y 1,3	Sa 1,7	Sb 1,8	Te 2,1	J 2,4

ცხრილიდან ჩანს, რომ ქლორის ელექტროუარყოფითობა იოდისას აღემატება. აქედან გამომდინარეობს, რომ JCl -ის მოლეკულაში სავალენტო ელექტრონები გადანაცვლებული

უნდა იყოს ქლორისაჲკენ. ეს არ ნიშნავს იმას, რომ იოდის ელექტრონი ქლორს გადაეცემა და NaCl -ის მსგავსი იონური მოლეკულა მიიღება, არამედ იმას ნიშნავს, რომ სავალენტო ელექტრონები უფრო ახლოს იქნება ქლორ-ატომთან ვიდრე იოდ-ატომთან. HCl -ის მოლეკულშიც სავალენტო ელექტრონები ქლორ-ატომისაჲკენ ინაცვლებს, რის გამო HCl წარმოადგენს არა იონურ მოლეკულს, არამედ პოლარულს. თუ HCl წყალში გახსნისას იონებად იშლება, ამის მთავარი მიზეზი არის HCl -ისა და წყლის მოლეკულების ურთიერთ-მოქმედება.

ელექტროუარყოფითობის რაოდენობრივი გამოსახულება არის $X = J + E$. იმ ატომისაგან უფრო ძნელია ელექტრონის მოწყვეტა, რომლის ელექტროუარყოფითობა უფრო მეტია. მაგალითად, $J_{\text{Cl}} + E_{\text{Cl}} > J_{\text{J}} + E_{\text{J}}$, მაშასადამე $E_{\text{Cl}} - J_{\text{J}} > E_{\text{J}} - J_{\text{Cl}}$, ამრიგად, უფრო ადვილია წავართვათ ელექტრონი იოდს და გადავცეთ ქლორს, ვიდრე პირუკუ. მაშასადამე, JCl მოლეკულში ქლორი უფრო უარყოფითია, ვიდრე იოდი.

წყალბადის ელექტროუარყოფითობა ლითიუმისაზე მეტია. ამით აიხსნება, რომ ლითიუმის ჰიდრიდის ელექტროლიზის დროს წყალბადი დადებით ელექტროდზე გამოიყოფა, ხოლო ლითიუმი — უარყოფითზე, ე. ი. ლითიუმის ჰიდრიდი იონებად შემდეგი სქემის მიხედვით იშლება:



(ხრილიდან ჩანს, რომ წყალბადი თავისი ელექტროუარყოფითობით უფრო ახლოა ჰალოგენებთან ვიდრე ტუტე მეტალებთან. ეს ერთ-ერთი მიზეზია იმისა, რომ წყალბადს ზოგიერთი ავტორი მენდელეევის პერიოდული სისტემის მეშვიდე ჯგუფში ათავსებს.

მენდელეევის პერიოდულ სისტემაში ელექტროუარყოფითობა იზრდება მარცხნიდან მარჯვნივ და ქვემოდან ზემოთ.

ნათქვამიდან გამომდინარეობს, რომ იონური ბმა მიიღება მაშინ, როცა ერთი ელემენტის ელექტროუარყოფითობა

დიდია, და მეორისა კი მცირეა. ასეთია K და F, Na და Cl, Rb და Br, Cs და J, Ca და Cl და ა. შ. ამ წყვილებში ელემენტების ელექტროუარყოფითობა დიდად განსხვავდება ერთმანეთისაგან, რაც განაპირობებს იონური ბმის წარმოქმნას.

როცა ორი ელემენტის ელექტროუარყოფითობა ახლოა ერთი მეორესთან, მიიღება ატომური ბმა.

მრავალი არაორგანული და, განსაკუთრებით, ორგანული ნაერთის მოლეკულების აღნაგობის განხილვა შეუქცეულია იმ წარმოდგენების მიხედვით, რომლებიც საფუძვლად დაედო იონური ბმის თეორიას. ასეთია, მაგალითად, წყალბადის, ენგბადის, აზოტის, მეთანის, ბენზოლის და სხვ. მოლეკულები. ამ არაიონურ ნაერთებში ქიმიური ბმა განპირობებულია ელექტრონების არა გადაცემით, არამედ გაწყვეტებით, მათი განხოგადოებით. ასეთი ტიპის ქიმიურ ბმას ატომური ანუ კოვალენტური ბმა ეწოდება.

ატომური ბმა

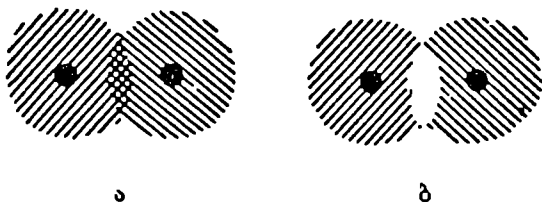
სავალენტო ელექტრონების ურთიერთმოქმედების ხასიათი დამოკიდებულია ელექტრონების მდგომარეობაზე ატომში. ორი წყალბად-ატომის მიახლოებისას, ელექტრონების ტალღური თვისებების თანახმად, ელექტრონებისა და ატომგულების ურთიერთმოქმედების გამო იცვლება ელექტრონული ღრუბლის განაწილება.

ატომური ბმის თეორიის არსი იმაში მდგომარეობს, რომ ორ ატომგულს შორის მიმოქცევაში მყოფი ელექტრონების ტალღური თვისებების გამო აღგილი აქვს ატომგულებისა და სავალენტო ელექტრონების ურთიერთმიხილვას.

ორი ატომგულს ველში ორი ელექტრონის ყოფნა საპირისპირო სპინით ენერგეტიკულად უფრო ხელსაყრელია, ვიდრე თვითეულისა თავისი ატომგულის ველში: ამიტომაც ქიმიური ბმის წარმოქმნა დაკავშირებულია სისტემის თავისუფალი ენერგიის მნიშვნელოვან შემცირებასთან. ეს ღებულება საფუძვლად უდევს ატომური ბმის თეორიას.

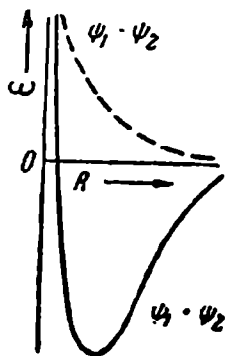
ატომური ბმის წარმოქმნა შემდეგნაირად შეიძლება წარმოვიდგინოთ. მივუახლოვოთ ორი წყალბად-ატომი ერთმა-

ნეთს. მათი ურთიერთმოქმედებით ატომგულებს შორის წარმოქმნილი ელექტრონული ღრუბლას სიმკვრივე იზრდება და მეტი ხდება, ვიდრე ორი ცალკეული ატომის ელექტრო-



ნახ. 15. ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივე

ნული ღრუბლების სიმკვრივეთა ჯამია (ნახ. 15 ა). ამ შემთხვევაში ორი სავალენტო ელექტრონის ელექტრონული ღრუბლები გადაფარავს ერთმანეთს. სხვანაირად რომ ვთქვათ, ასეთ პირობებში ორი ატომის ψ_1 -ფუნქციების დამთხვევა შეჯამებისას დაკავშირებულია ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივის გადიდებასთან. ორი ასეთი ატომის



ნახ. 16. H_2 მოლეკულის პოტენციალური მრუდი

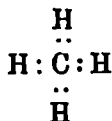
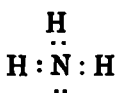
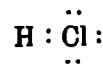
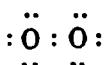
მის მიახლოებისას სისტემის პოტენციალური ენერგია მცირდება, შემდეგ კი იზრდება, ე. ი. პოტენციალურ მრუდზე მინიმუმი მიიღება (ნახ. 16, მრუდი 1). სავალენტო ელექტრონები გაწყვილებულ მდგომარეობაში, რომლებიც განახორციელებენ ქიმიურ ბმას, პაულის პრინციპის თანახმად, საპირისპირისო მიმართულების სპინს იჩენენ. ეს არის ორი ელექტრონით წარმოქმნილი ბმის ფრიალ მნიშვნელოვანი გარემოება, მაგრამ, არა მისი მიზეზი.

იმ შემთხვევაში, როცა ორი წყალბად-ატომის მიახლოებისას ატომგულებს შორის წარმოქმნილი ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივე უფრო ნაკლები შეიქმნება, ვიდრე ორი იზოლირებული ატომის ელექტრონულ სიმკვრივეთა ჯამია (ნახ.

15ბ), ორი ასეთი ატომის მიახლოებისას სისტემის ენერგია იზრდება, ე. ი. ატომები განიზიდებიან ერთმანეთისაგან და არ შეკავშირდებიან მოლეკულის სახით (ნახ. 16, მრუდი II). სავალენტო ძალები ახლო მანძილზე მოქმედი ძალებია. ეს ძალა სწრაფად ეცემა მანძილთან დაკავშირებით და ერთი ატომის დიამეტრის მანძილზე უკვე შეუმჩნეველი ხდება.

ამრიგად, ატომური ანუ კოვალენტური ბმის წარმოქმნისას ადგილი აქვს სავალენტო ელექტრონების გაწყვილებას, მათ ურთიერთგაზიარებას, ხოლო იონური ბმის წარმოქმნის დროს ხდება ელექტრონის გადაცემა ერთი ატომიდან მეორეზე.

რადგან ატომის ერთი ელექტრონი მეორე ატომის ელექტრონთან ერთ კოვალენტურ ბმას იძლევა, ამიტომ ელემენტის ვალენტობა მისი ატომის არაგაწყვილებული ელექტრონების რიცხვის ტოლია. მაშასადამე, კოვალენტური ბმის წარმომქმნელი წყვილი ელექტრონი შესაბამემა ჩვეულებრივი სტრუქტურული ფორმულების სავალენტო ხაზს. ორბმა და სამბმა შესაბამისად ორი და სამი წყვილი ელექტრონით მიიღება, ასეთია, მაგალითად, ჟანგბადი, აზოტი და ა. შ.



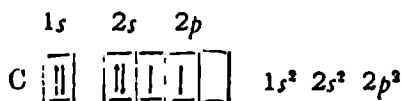
ქვანტური თეორიის გამოყენებამ ქიმიაში ხელი შეუწყო ბუტლეროვის ქიმიური აღნაგობის მოძღვრების განვითარე-

ბას. ქვანტური ქიმიის განვითარების შედეგად ჩამოყალიბდა ახალი შეხედულება ქიმიურ ბმაზე, ბმის ნაჯერობაზე და გეზურ ვალენტობაზე.

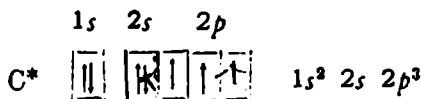
ატომების ვალენტური მდგომარეობა

ატომი თავისუფალ მდგომარეობაში ხასიათდება სტაციონარული მდგომარეობით, ე. ი. იზოლირებული ატომის ელექტრონული იმ მდგომარეობით, რომელსაც ძირითადს ეუწოდებთ.

ვალენტურ მდგომარეობაში ატომს აქვს ერთი ან რამდენიმე სავალენტო ელექტრონი, ე. ი. ერთი ან რამდენიმე ელექტრონი არაგაწყვილებულ მდგომარეობაში. ამ უკანასკნელთ მოძრაობის განსაკუთრებული ფორმა ახასიათებთ. არ შეიძლება მათ გარკვეული მიმართულების სპინი მივაწეროთ. მაგალითად, ნაშირბადის ატომებს ძირითად მდგომარეობაში ახასიათებთ ელექტრონების შემდეგი განლაგება



საიდანაც ჩანს, რომ მისი ვალენტობა ორია. აგზნებულ მდგომარეობაში მისი ოთხივე სავალენტო ელექტრონი არაგაწყვილებულ მდგომარეობაშია



აქედან ჩანს, რომ ვალენტურ მდგომარეობაში ყოველ სავალენტო ელექტრონს თითო უჯრედი უჭირავს.

ვინაიდან ქიმიურ ბმაში მონაწილეობენ s -, p - ან d -ელექტრონები, ამიტომ ბმის წარმოქმნის უნარის გარკვევისათვის საჭაროა სავალენტო ელექტრონების ψ -ფუნქციის, ე. ი. ელექტრონული ღრუბლის ფორმის ცოდნა. ბუნებრივია, რომ სავალენტო ელექტრონების ღრუბლების ფორმა ისეთი-

ვეა, როგორიც აქვთ ელექტრონებს s -, p -, d -მდგომარეობაში. ამას გარდა შესაძლოა სხვა ფორმის ღრუბლების არსებობაც, რომელთაც ჰიბრიდული ვუწოდეთ.

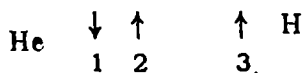
მოლეკულის წარმოქმნისას სხვადასხვა ატომების სავალენტო ელექტრონების ღრუბლების შერთვა ხდება, რის შედეგადაც მიიღება მოლეკულური ელექტრონული ღრუბელი. ქიმიური ბმა იმიტომ წარმოიქმნება, რომ სავალენტო ელექტრონების ღრუბლების გადაფარვისას იზრდება მუხტის სიმკვრივე. რაც უფრო მეტია ელექტრონული ღრუბლების ურთიერთშედწევა, მით უფრო მეტია ბმის მდგრადობა. მოლეკულა მით უფრო მდგრადია, რაც უფრო ნაკლებია მისი ენერგია, ე. ი. რაც უფრო მეტი ენერგია გამოიყოფა მისი წარმოქმნის დროს.

ვალენტობის ნაჯერობა

ქიმიაში დიდი ხანია ცნობილია ვალენტობის ნაჯერობა. ჯორმულაში თითოეული სავალენტო შტრიხი იწყება ერთ ატომთან და თავდება მეორე ატომთან, რომელსაც იმდენი შტრიხი აქვს, რამდენიცაა მისი ვალენტობა. ამის მაგალითია ნახშირორჟანგის მოლეკულა $O=C=O$, სადაც ოთხეულენტოვანი ნახშირბადი ორვალენტოვან ჟანგბადის ორ ატომთან არის შებმული, წყლის მოლეკულა $H-O-H$, სადაც ორვალენტოვანი ჟანგბადის ატომი ერთვალენტოვანი წყალბადის ორ ატომთან არის შებმული და ა. შ. ის ატომი, რომლის ყველა სავალენტო შტრიხები გამოყენებულია, ვალენტურად ნაჯერს წარმოადგენს, ე. ი. მისი სავალენტო ძალები ბოლომდეა გამოყენებული. ამიტომაც სხვა ჟანგბად-ატომები ველარ შეეებმება ნახშირორჟანგის მოლეკულს. ამავე ნაჯერობის მიზეზით წყლის მოლეკულა ველარ მიიკავშირებს წყალბადის სხვა ატომებს. უჩვეულო იქნებოდა CO_3 ან H_3O შემადგენლობის მოლეკულები.

ვალენტობის ნაჯერობა ასახავს არა იონურის, არამედ კოვალენტური ბმის ერთ-ერთ თვისებას. ამ უკანასკნელს ითვალისწინებს კოვალენტური ბმის თეორია.

ვალენტობის ნაჯერობის მიზეზის გარკვევის მიზნით განვიხილოთ ჰელიუმისა და წყალბადის ატომების ურთიერთმოქმედება. ჰელიუმის ატომის ელექტრონების სპინი პაულის პრინციპის თანახმად, ძირითად მდგომარეობაში ანტიპარალელურად არიან განლაგებული უმდაბლეს ენერგეტიკულ დონეზე. დავნომროთ ჰელიუმისა და წყალბადის ელექტრონები

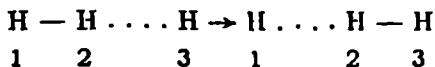


ამ ორ ატომს შორის მანძილის შემცირებისას მოსალოდნელია მხოლოდ ერთი სახის ურთიერთმოქმედება. პაულის პრინციპის თანახმად, წყალბად-ატომის (3) ელექტრონისა და ჰელიუმის (2) ელექტრონის ურთიერთმოქმედება მათ განზიდვას გამოიწვევს. მესამესა და პირველის მიმოცვლაც გამორიცხულია, ვინაიდან ჰელიუმის ორბიტზე დარჩება ორი ელექტრონი პარალელური სპინით, რაც პაულის პრინციპით აგოეთვე დაუშვებელია. ამიტომაც ამ ორ ატომს შორის არ წარმოიქმნება ქიმიური ბმა.

იგივე სურათი მიიღება სხვა ინერტული აირების შემთხვევაშიაც. ვინაიდან ინერტული აირების ატომების გარეგარსში ყველა ელექტრონი გაწყვილებულია, ამიტომ ისინი ქიმიურ უმოქმედებას იჩენენ.

წყალბად-ატომისა და წყალბად-მოლეკულის შემთხვევაში შემდეგი ურთიერთმოქმედება მიიღება. წყალბადის მოლეკულა უნდა განვიხილოთ როგორც ერთიანი სისტემა. მიახლოებისას წყალბად ატომის ელექტრონი მიმოცვლაში შეევა წყალბად-მოლეკულის მხოლოდ იმ ელექტრონთან, რომელსაც იმავე მიმართულების სპინი აქვს. ასეთი მიმოცვლა კი დაკავშირებულია განზიდვასთან. მაშასადამე, წყალბადის მოლეკულა ვერ მიიკავშირებს წყალბად-ატომს და მოლეკულა H_2 არ მიიღება, ე. ი. წყალბად-ატომს შეუძლია მხოლოდ ერთი წყალბად-ატომის მიკავშირება და არა ორისა ან სამისა. ამავე მიზეზით არ მიიღება H_2O , CO_2 , CH_4 და სხვა-ამაში მდგომარეობს კოვალენტური ბმის ნაჯერობა.

მანძილის შემცირებისას შესაძლო ხდება ატომების მიმო-
ცვლა



რაც აქტივაციის ენერგიას მოითხოვს.

იონურ ბმას არ ახასიათებს ნაჯერობის უნარი, მაგალი-
თად, ნატრიუმ-იონი ქვამარილის კრისტალურ მესერში შებ-
მულია არა ერთ, არამედ ექვს ქლორ-იონთან. ეს რიცხვი
არ არის დაკავშირებული სავალენტო ელექტრონების რიცხ-
ვთან.

ბეზური ვალენტობა

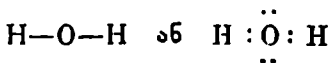
ექსპერიმენტული მონაცემებიდან გამომდინარეობს, რომ
ვალენტობას გარკვეული მიმართულება აქვს სივრცეში.
მოლეკულის გამოკვლევის თანაბედროვე ფიზიკური მეთოდე-
ბის დახმარებით აღვილია მოლეკულში ატომთა კონფიგურა-
ციისა და სავალენტო კუთხეების პოვნა.

კოვალენტური ბმის ტალღური მექანიკა სავსებით დამა-
ჯერებელ დასაბუთებას აძლევს გეზურ ვალენტობას, ე. ი.
ატომთა სივრცობრივ წყობას მოლეკულში. ამ თეორიას
საფუძვლად დაედო პოლინგის მიერ გამოთქმული იდეა
იმის შესახებ, რომ ელექტრონი იმ მიმართულებით წარმო-
ქმნის ქიმიურ ბმას, რა მიმართულებითაც განლაგებულია
მისი ღრუბლის მეტი ნაწილი. ასეთ პირობებში მიიღება
ორი შემაკავშირებელი ელექტრონის ღრუბლის მაქსიმალური
გადაფარვა, რაც ბმის მაქსიმალურ ენერგიას უპასუხებს.

ატომში ელექტრონები შეიძლება იყოს *s*-, *p*-, *d*- ან
f-მდგომარეობაში. ამის მიხედვით ელექტრონულ ღრუბელს
სხვადასხვა ფორმა ექნება. ზემოთ ჩვენ დავინახეთ, რომ
s-ელექტრონების ღრუბლებს სფერული სიმეტრია აქვთ. ამი-
ტომაც *s*-ელექტრონების მონაწილეობით წარმოქმნილ ბმებს
ყოველგვარი მიმართულება შეიძლება ჰქონდეს. *p*-ელექტრო-
ნების ღრუბლებს რვიანის ფორმა აქვთ. მოცემულ ელე-
ქტრონულ ჯგუფში შესაძლოა მაქსიმუმ სამი *p*-ელექტრო-

ნის არსებობა. მათი ღრუბლების ღერძები ერთმანეთისადმი მართობულად არიან განლაგებული. ამრიგად p -ელექტრონები წარმოქმნიან ქიმიურ ბმებს მაქსიმალური გადაფარვის მიმართულებით, ე. ი. 90° -ის კუთხით.

მაგალითისათვის განვიხილოთ წყლის მოლეკულის აღნაგობა, რომელიც გამოისახება შემდეგი სტრუქტურული ფორმულებით:



ქანგბადის სავალენტო მდგომარეობა არც თუ ისე მნიშვნელოვნად განსხვავდება ძირითადი მდგომარეობისაგან. სავალენტო მდგომარეობაში ელექტრონებს, რომლებიც ქიმიურ ბმას წარმოქმნიან, შეიძლება ჰქონდეთ პარალელური ან ანტიპარალელური მიმართულების სპინები. ძირითად მდგომარეობაში კი მათი სპინის მიმართულება ყოველთვის პარალელურია. ორივე შეკთხვევაში თითოეული p -უჯრედი თითო ელქტრონით არის დაკავებული.

ქანგბადისა და წყალბადის ატომებს შორის ქიმიური ბმა შემდეგი გზით წარმოიქმნება.

ქანგბად-ატომის ორი p -ელექტრონი და ორი წყალბად-ატომის თითო s -ელექტრონი გადაფარვის შედეგად ორ მოლეკულურ ორბიტს ანუ ორ ბმას წარმოქმნის. ქანგბადის დანარჩენი ელექტრონები არაფრითაა მონაწილეობას არ იღებენ ქიმიური ბმების წარმოქმნაში.

ვინაიდან p -ელექტრონების ღრუბლების ღერძები მართობულად არიან განლაგებული ერთი მეორის მიმართ, ამიტომ სავალენტო კუთხე $\text{H}-\text{O}$ ბმებს შორის უნდა იყოს 90° . მხოლოდ ასეთ პირობებში მიიღება ელექტრონული ღრუბლების მაქსიმალური გადაფარვა, წყალბადის s -ელექტრონებისა და ქანგბადის p -ელექტრონების ღრუბლების ერთი მეორეში შეღწევა.

ამეამად წყლის მოლეკულის აღნაგობა ზედმიწევნით კარგად არის შესწავლილი. $\text{O}-\text{H}$ ბმის სიგრძე არის $0,98 \cdot 10^{-8}$ სმ, ხოლო ბმებს შორის კუთხე შეადგენს $104^\circ 40'$, რაც

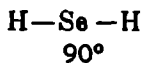
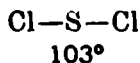
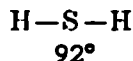
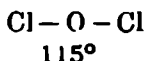
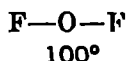
აღმატება 90° -ს დაახლოებით 15° -ით. ეს იმით აიხსნება, რომ $O-H$ ბმებს ერთგვარი პოლარობა აქვთ. ვინაიდან H -ატომებს რამდენადმე დადებითი მუხტი აქვთ წყლის მოლეკულაში, ისინი განიზიდებიან ერთმეორისაგან, რის გამო სავალენტო კუთხე იზრდება.



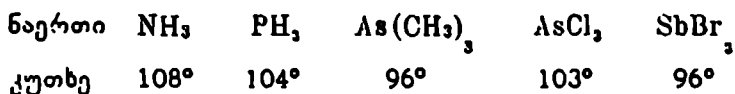
ამრიგად მტკიცდება, რომ წყლის მოლეკულს სამკუთხი ფორმა ახასიათებს (ნახ. 17). წყლის სამკუთხი ფორმის დამტკიცება სხვა გზითაც შეიძლება.

ნახ. 17. წყლის მოლეკულის სქემა

როცა O , S , Se , Te ატომის ორივე p -ელექტრონი მონაწილეობს ბმის წარმოქმნაში, მაშინ p -ელექტრონული ღრუბლების მართობული მიმართულების გამო სავალენტო კუთხე ახლოა 90° -თან:



აზოტის ატომს სავალენტო მდგომარეობაში აქვს სამი p -ელექტრონი, რომლებსაც ქიმიური ბმის წარმოქმნის უნარი ახასიათებთ. მათი ღრუბლების ერთმანეთისადმი მართობული მიმართულების გამო p -ელექტრონების ღრუბლებთან ურთიერთგადაფარვის გამო პირამიდული აღნაგობის მოლეკულა მიიღება. მაგალითად, NH_3 -ის მოლეკულაში პირამიდის წვეროში განლაგებულია აზოტის ატომი, რომელიც ფუძეზე განლაგებულ წყალბად-ატომებთან სწორ კუთხეს ქმნის.



ჰალოგენწყალბადების შემთხვევაში s - და p -ღრუბლების გადაფარვით თითო ბმა მიიღება, ხოლო ჰალოგენების მო-

მლეკულებში ბმა მიიღება ორ-ორი p -ელექტრონის ღრუბლების ურთიერთგადაფარვით.

პოლარული ატომური ბმა

მოლეკულის ელექტრული თვისებები დამოკიდებულია მასში ელექტრული მუხტების განაწილებაზე და მუხტების ურთიერთმოქმედებაზე. მუხტების განაწილების თვალსაზრისით მოლეკულის აღნაგობის განხილვა ფრიად მნიშვნელოვან შედეგებს გვაძლევს, ვინაიდან მოლეკულის ელექტრული თვისებები განაპირობებენ ნაერთის თვისებებს, მათ რეაქციაში შესვლის უნარს, ზედაპირულ დაქიმულობას, აირების გათხევადებას და სხვ.

ყოველი მოლეკულა დადებით და უარყოფით მუხტებს ტოლი რაოდენობით შეიცავს, რის გამოც მოლეკულა ელექტრონიტრალურ სისტემას წარმოადგენს. ამ მუხტების განაწილება მოლეკულაში სხვადასხვანაირია. ამის მიხედვით ნაერთებს განსხვავებული თვისებები ახასიათებს.

ელექტრული მუხტების სიმეტრიული განლაგების შემთხვევაში მოლეკულის დადებითი და უარყოფითი ელექტრობის სიმძიმის ცენტრები ერთ წერტილში ძევს. ამის გამო მოლეკულა არაპოლარულია (მაგალითად, H_2 , N_2 , O_2 , CH_4 , C_6H_6 და ა. შ.). თუ დადებითი და უარყოფითი ელექტრობის სიმძიმის ცენტრები დაცილებულია ერთიმეორეს, მოლეკულა პოლარულია (მაგალითად, $NaCl$, H_2O , $CHCl_3$ და ა. შ.).

წყალბადის მოლეკულს ახასიათებს ტიპიური ატომური ბმა, ხოლო ქლორნატრიუმის მოლეკულს — ტიპიური იონური ბმა. ეს არის ქიმიური ბმის ძირითადი ტიპები. ამ ორი ტიპის ბმის შორის მრავალი გარდამავალი ფორმა არსებობს. მწკრივში $LiCl$, $BeCl_2$, BCl_3 , CCl_4 , NCl_3 , OCl_2 , FCl მხოლოდ $LiCl$ -ს აქვს წმინდა იონური ბმა და NCl_3 -ს აქვს წმინდა ატომური ბმა. დანარჩენ ნაერთებს მეტ-ნაკლები ხარისხის პოლარობის ბმები ახასიათებს.

პოლარობის ხარისხის სახომს წარმოადგენს დიპოლური მომენტი. ელექტრული დიპოლი წარმოადგენს გარკვეული მანძილით დაშორებული ორი ერთნაირი სიდიდის საპირისპირო მუხტისაგან შედგენილ სისტემას. დიპოლის სიდიდე განისაზღვრება დიპოლური მომენტით, რომელიც ამ შემთხვევაში უდრის მანძილისა და მუხტის ნამრავლს: $\mu = l \cdot e$.

ზოგად შემთხვევაში დიპოლური მომენტი წარმოადგენს დადებითი და უარყოფითი ელექტრობის სიმძიმის ცენტრთა შორის მანძილს. გამრავლებულს მუხტზე.

პოლარული ნაერთების განხილვისას, რომლებიც ატომურისა და იონურის გარდამავალ საფეხურებს წარმოადგენს, საჭიროა სავალენტო ელექტრონების ψ -ფუნქციების შეჯამება. თუ პოლარული ბმა A და B ატომებს შორის მიიღება, სადაც მონაწილეობს ორი სავალენტო ელექტრონი ფუნქციებით ψ_A და ψ_B , მაშინ ქიმიური ბმისათვის გვექნება

$$\psi = \alpha \psi_A + \beta \psi_B,$$

სადაც α და β კოეფიციენტებია, რომელთა რიცხვითი მნიშვნელობა ერთზე ნაკლებია.

როცა $\alpha = \beta$ და ψ_A დაახლოებით მაინც უდრის ψ_B -ს, მაშინ ორივე შემაკავშირებელი ელექტრონი ერთნაირი ალბათობით იქნება როგორც A, აგრეთვე B ატომის ჩონჩხთან, ე. ი. მოლეკულა არაპოლარული იქნება.

როცა $\alpha > \beta$, მაშინ სავალენტო ელექტრონებისაგან წარმოქმნილი წყვილი უფრო ახლოს იქნება A ატომის ჩონჩხთან, ვიდრე B-სთან, ე. ი. A-ჩონჩხი უფრო უარყოფითად იქნება დამუხტული, ვიდრე B-ჩონჩხი. ამ შემთხვევაში მიიღება

პოლარული მოლეკულა $\overset{\beta-}{A} : \overset{\alpha+}{B}$, რომელშიც ატომთა ჩონჩხები პოლარული ატომური ბმით არიან შებმული ერთიმეორესთან.

პოლარული ატომური ბმა მიიღება მაშინ, როცა შებმული ატომების ელექტროუარყოფითობა არ არის ერთნაირი.

ასეთი მოლეკულის გახლეჩისას ელექტრონები იმ ატომთან რჩება, რომელსაც მეტი ელექტროუარყოფითობა აქვს. მეტი წილი მოლეკულებისა პოლარული ბმით ხასიათდება.

განვიხილოთ ჰალოგენწყალბად-ნაერთები HF, HCl, HBr, HJ. ელექტროუარყოფითობათა სხვაობა ამ სტრიქონში მცირდება:

$$\text{HF} - 1,9$$

$$\text{HCl} - 0,9$$

$$\text{HBr} - 0,7$$

$$\text{HJ} - 0,3$$

აქედან ჩანს, რომ HF-ის მოლეკულში ბმა უფრო იონურია, ვიდრე HJ-ის მოლეკულში, ე. ი. დადებითი და უარყოფითი ელექტრობის სიმძიმის ცენტრები უფრო მეტად არის დაცილებული HF-ის მოლეკულში, ვიდრე HJ-ის შემთხვევაში. მართლაც მათი დიპოლური მომენტები დეზაის ერთეულებში ($D = 10^{-18}$) ტოლია:

$$\text{HF} \quad 1,91$$

$$\text{HCl} \quad 1,04$$

$$\text{HBr} \quad 0,79$$

$$\text{HJ} \quad 0,38.$$

როცა $\beta = 0$, მაშინ შემაკავშირებელი წყვილი ელექტრონი A-ჩონჩხთან ინაცვლებს, რის შედეგადაც მიიღება NaCl-ის ტიპის იონური მოლეკულა $A^- : B^+$.

ამრიგად A—B ბმის პოლარიზაციის ყველა შემთხვევები შეიძლება შემდეგი სქემით გამოვსახოთ:



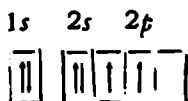
აქედან ჩანს, რომ ტიპიურ პოლარულ და ტიპიურ არაპოლარულ მოლეკულებს შორის მრავალი გარდამავალი საფეხური არსებობს.

სიმეტრიულად აგებულ მოლეკულებს, როგორცაა H_2 , N_2 , CO_2 , CH_4 და სხვ. დიპოლური მომენტი არა აქვს. ის გარემოება, რომ CO_2 -ის და CS_2 -ის მოლეკულებს დიპოლური მომენტი არ გააჩნია, ხოლო H_2O -ს მოლეკულს მნიშვნელოვანი სიდიდის დიპოლური მომენტი ახასიათებს ($\mu_{H_2O} = 1,84D$), იმით აიხსნება, რომ CO_2 და CS_2 სიმეტრიული აღნაგობის წრფივი მოლეკულებია $O=C=O$, $S=C=S$, წყლის მოლეკულა კი სამკუთხია, ვინაიდან ჟანგბადს გეზუროვალენტობა აქვს.

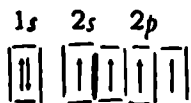
ამემაღ კარგად არის ცნობილი ცალკეული ბმების დიპოლური მომენტები. ამიტომ არ არის ძნელი შეჯამების წესით მოლეკულის დიპოლური მომენტის გამოთვლა. თუ ეს უკანასკნელი დაემთხვა გაზომილს, ჩვენი წარმოდგენები მოლეკულის აღნაგობის შესახებ სწორი ყოფილა.

ვალენტობის ჰიბრიდიზაცია

ნახშირბად-ატომს ძირითად მდგომარეობაში ორი ელექტრონი აქვს არაგაწყვილებულ p -მდგომარეობაში:



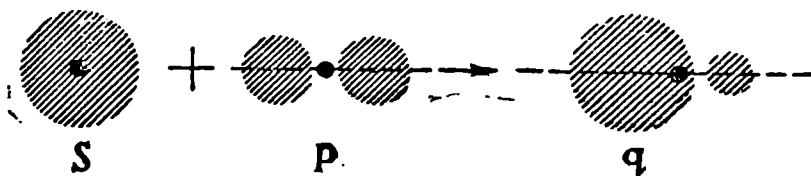
რასაც უპასუხებს „ორვალენტოვანი“ ნახშირბადი. როგორც ეს ცნობილია ქიმიიდან ნახშირბადი ყველა ნაერთებში, მცირე გამონაკლისით, ოთხვალენტოვანია. ნახშირბადის $2s^2$ -ელექტრონები არაგაწყვილებულ მდგომარეობაში გადადიან ამისათვის ერთ-ერთი ელექტრონი $2s$ -მდგომარეობიდან გადადის $2p$ -მდგომარეობაში, რის შედეგად მიიღება ოთხვალენტოვანი ნახშირბადი:



ასეთ მდგომარეობაში გადასვლა მოითხოვს 80 კკალ სითბოს, რაც ქიმიური ნაერთის წარმოქმნისას თავისუფლად ანაზღაურდება.

ამრიგად ოთხვალენტოვან ნახშირბად-ატომს არაგაწყვილებულ მდგომარეობაში აქვს ერთი s -და სამი p -ელექტრონი. ამიტომ, პირველი შეხედვით აქ ოთხი ერთმანეთის არატოლფასი ბმა უნდა წარმოიქმნას; რომელთაგან სამი ბმა მიიღება სამი p -ელექტრონის ხარჯზე ერთმანეთისადმი მართობული გეზით და მეოთხე — s -ელექტრონის ხარჯზე. მაგრამ გამოკვლევა გვიჩვენებს, რომ ნახშირბად-ატომის ოთხივე ვალენტობა ერთმანეთის ტოლფასია. მაგალითად, CH_4 მოლეკულაში ოთხივე წყალბად-ატომი, რომლებიც წესიერი ტეტრაედრის წვეროებში არიან განლაგებული, ერთნაირი მანძილით არიან დაცილებული ცენტრში განლაგებულ ნახშირბად-ატომისაგან, და ქმნიან ტეტრაედრულ კუთხეებს, რომელიც $109^\circ 28'$ -ის ტოლია. კოვალენტური ბმის თეორია ამ ფაქტებსაც აძლევს სათანადო ახსნას.

ნახშირბადის შემთხვევაში საქმე გვაქვს ახალი ტიპის სავალენტო ელექტრონებთან. აქ ერთი s - და სამი p -ელე-



ნახ. 18. ვალენტობის ჰიბრიდიზაცია

ქტრონი გადადიან ჰიბრიდულ მდგომარეობაში, რის გამოც d -ელექტრონებს ვუწოდებთ. ჰიბრიდულ მდგომარეობაში ელექტრონულ ღრუბელს ერთი გარკვეული გეზი აქვს, რის გამოც სხვა ელექტრონთან შებმის დროს მეტი გადაფარვა მიიღება, ვიდრე ამას s -, p - ან d -ელექტრონები იძლევიან. ოთხი ჰიბრიდული ფუნქცია, რომელიც ერთი s -და სამი p -ელექტრონის შეჯვარედინებით მიიღება ტეტრა-

ელდრულ ფორმას იძლევა. ჰიდრიდული მდგომარეობა მიიღება s -, p - და d -ელექტრონებიდან (ნახ. 18).

ვინაიდან d -ელექტრონები უფრო მდგრად ქიმიურ ბმებს იძლევა, ვიდრე სხვა მდგომარეობაში მყოფი ელექტრონები, ამიტომ ბუნებრივია, რომ თუკი არის საამისო გზა, s -, p - და d -ელექტრონები ადვილად უნდა გადადიოდნენ d -მდგომარეობაში, ე. ი. ადვილად უნდა ხდებოდეს ვალენტობის ჰიბრიდიზაცია. მართლაც, როცა ძირითადი მდგომარეობიდან s -, p - ან d -ელექტრონები ვალენტურ მდგომარეობაში გადადიან, ადგილი აქვს ვალენტობის ჰიბრიდიზაციას.

სამვალენტოვანი ბორი ხასიათდება ერთი s - და ორი p -ელექტრონით. ამიტომ პირველი შეხედვით აქაც მოსალოდნელი იყო სხვადასხვა ტიპის ვალენტობა. მაგრამ ექსპერიმენტი გვიჩვენებს, რომ ნაერთებში BF_3 , $B(CH_3)_3$, $B(OH)_3$ და ა. შ. ბორის სამივე ბმა ერთმანეთის ტოლფასია. ასევე $BeCl_2$, $Be(C_2H_5)_2$, $HgCl_2$, $HgBr_2$, HgJ_2 ერთმანეთის ტოლფას ბმებს იძლევა, ე. ი. ბორი, ბერილიუმი, ვერცხლისწყალი და სხვ. d -ვალენტობით ხასიათდებიან.

ბერილიუმის ჰიბრიდული ვალენტობა განპირობებულია ერთი s - და ერთი p -ელექტრონით, რომლებიც d -მდგომარეობაში გადადიან. ისინი განლაგებული არიან ერთ ლერძზე ერთმანეთის საპირისპიროდ. ამიტომაც ბერილიუმის ნაერთების მოლეკულებს წრფივი აღნაგობა აქვთ.

ვალენტობის ჰიბრიდიზაცია დამახასიათებელია აგრეთვე სილიციუმის ნაერთებისათვის SiH_4 , $SiCl_4$ და სხვ. დამახასიათებელია აგრეთვე ამონიუმ-იონის ნაერთებისათვისაც, როცა N^+ შეკავშირებულია ოთხ ატომ წყალბადთან. მართლაც, აზოტის კატიონს N^+ -ს იმდენივე ელექტრონი აქვს, რამდენიც ნახშირბად-ატომს.

ჯერადი ბმები

კოვალენტური თეორიის ძირითადი დებულების თანახმად, თითო ქიმიური ბმა ორი ელექტრონის გაწყვილებით მიიღება. მაგრამ ორ ატომს შორის ქიმიური ბმის წარმო-

ქმნისას შესაძლოა მონაწილეობა მიიღოს ორზე მეტმა ელექტრონმა. მაშინ, როგორც ამბობენ, წარმოიქმნება ჯერადი ბმა. თითოეული წყვილი ელექტრონი თითო ბმას იძლევა, ე. ი. ორი ელექტრონი წარმოქმნის მარტივ ბმას, ოთხი — ორბმას და ექვსი — სამბმას. ერთ ან სამელექტრონიანი ბმა შედარებით იშვიათია. ბმის ენერგიებიდან გამომდინარეობს, რომ

$C-C$ ბმის ენერგია არის 62,77 კკალ

$C=C$ „ „ 101,16

$C\equiv C$ „ „ 128,15

აქედან ჩანს, რომ $C\equiv C$ სამბმის ენერგია არ უდრის $C-C$ მარტივი ბმის ენერგიის გასამკეცებულ სიდიდეს. აქედან გამომდინარეობს, რომ ჯერადი ბმის ცალკეული ბნები განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან.

ჯერად ბმებში უნდა განვასხვაოთ ერთმანეთისაგან σ -და π -ბმები.

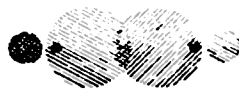
კოვალენტური ბმის თეორიის თანახმად, ელექტრონი იმ მიმართულებით წარმოქმნის ქიმიურ ბმას, სადაც შესაბამელი



H-H



H-C



C-C

ნახ. 19. მარტივი ბმების სქემები.

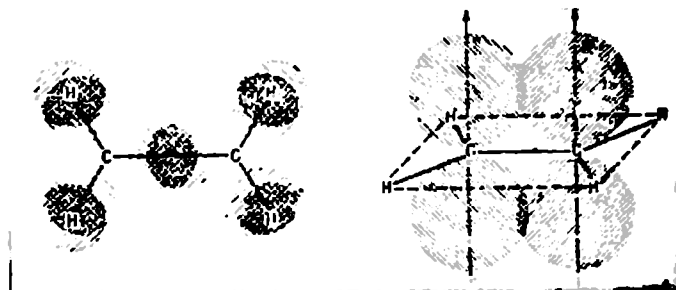
ელექტრონული ღრუბლების მაქსიმალური გადაფარვა მიიღება.

როცა ქიმიური ბმა ორი ატომის თითო σ -ელექტრონის გაწყვილებით წარმოსდგება, მიიღება σ -ბმა ანუ σ -ბმა, რომელიც ატომთა შერთების ხაზის გასწვრივ მაქსიმალურ გადაფარვას იძლევა (ასეთია H_2 , Li_2 და ა. შ.). ერთი ატომის σ -ელექტრონის და მეორე ატომის p -ელექტრონის ან d -ელექტრონის გაწყვილებით აგრეთვე σ -ბმა წარმოიქმნება.

($H-Cl$, $C-H$, $N-H$, $O-H$, $S-H$ და ა. შ.). ორი p ელექტრონის გაწყვილებაც σ -ბმას იძლევა (F_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2). σ -ბმა მიიღება აგრეთვე p -ელექტრონისა და d -ელექტრონის გაწყვილებით ($C-Cl$, $C-N$ და ა. შ.) ან d -და d -ელექტრონების გაწყვილებით ($C-C$). საერთოდ, ყოველი მარტივი ბმა σ -ბმას წარმოადგენს (ნახ. 19). ამრიგად, σ ბმა მიიღება $s-s$, $s-p$, $s-d$, $p-p$, $p-d$ და $d-d$ ელექტრონული ღრუბლების წერტილით.

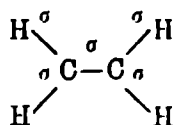
თავის ძირითად π ბმები წარმოიქმნება $p-p$ ან $p-d$ ელექტრონების გაწყვილებით.

ეთილენის მოლეკულის შემთხვევაში ჰიბრიდიზაციას განიცდის ნახშირბადის არა ოთხივე ელექტრონი, არამედ



ნახ. 20. ეთილენის მოლეკულის სქემა.

სამი: ერთი s - და ორი p -ელექტრონი, რომელთაგანაც სამ- d -ელექტრონი მიიღება. ამ სამი d -ელექტრონების ურთიი ერთმომკმედებით მიიღება შემდეგი ბმები

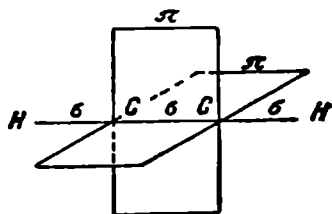


ე. ი. ოთხი $C-H$ ბმა და ერთი $C-C$ ბმა, რომელიც σ -ბმას წარმოადგენს. ნახშირბადის მეოთხე ელექტრონი, რომელიც p -მდგომარეოაშია, p -ელექტრონად რჩება. ორი ნახშირბად-

ატომის აღნიშნული p -ელექტრონებიდან მიიღება ორბიტის მეორე ბმა, რომელსაც π -ბმა ვუწოდეთ. შეიძლება მივიღოთ, რომ p_x და p_y ელექტრონები ჰიბრიდიზაციას განიცდიან, ხოლო p_z ელექტრონებიდან π -ბმა წარმოიქმნება.

ვინაიდან ჰიბრიდიზაციის შედეგად ბმები ერთ სიბრტყეში ლაგდება, ამიტომ ეთილენის მოლეკულა შეიძლება ქვემო სქემით გაიოსაზოთ (ნახ. 20), სადაც ყოველი სამი ვალენტობა იძლევა 120° -დან კუთხეს.

20-ა და 20-ბ ნახაზებიდან ჩანს, რომ p_x -ელექტრონების ღრუბლების გადაფარვა, რის შედეგადაც π -ბმა მიიღება, ბევრად უფრო ნაკლებია, ვიდრე ჰიბრიდიზებული ელექტრონების ღრუბლებისა, რომლებიც σ -ბმას იძლევა. ამიტომაც π -ბმა უფრო სუსტია, ვიდრე σ -ბმა.



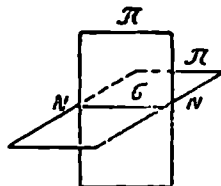
ნახ. 21. აცეტილენის მოლეკულის სქემა

აცეტილენის მოლეკულისათვის $H-C \equiv C-H$ დამახასიათებელია სამბმა — ერთი σ -ბმა და ორი π -ბმა.

ამ შემთხვევაში სამი σ -ბმა (ორი $C-H$ და ერთი $C-C$ ბმა) მიიღება ორი წყალბად-ატომის $1s$ -ელექტრონიდან და ნახშირბადის ორი d -ელექტრონიდან, რომელიც s - და p -ელექტრონების ჰიბრიდებს წარმოადგენს.

თითოეული ნახშირბად-ატომის ორი p -ელექტრონიდან ორი π -ბმა მიიღება, რაც სქემატურად გამოსახულია მე-21 ნახაზზე.

არსებითად ასეთივე აღწავლა ახასიათებს აზოტის მოლეკულს $N \equiv N$, სადაც აზოტის ატომებს შორის სამბმიდან ერთია σ -ბმა და ორი π -ბმა (ნახ. 22).

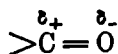


ნახ. 22. N_2 -ის მოლეკულის სქემა

π-ბმები ხშირად გვხვდება ორგანულ ნაერთებში. ამ ტიპის ბმებით შებმულია ნახშირბადი ქანგბადთან, აზოტთან, გოგირდთან და ა. შ.

როცა π-ბმა აკავშირებს სხვადასხვა ელექტროუარყოფითობის მქონე ატომებს, მიიღება უფრო ძლიერი პოლარიზაცია, ვიდრე — იმავე ატომებს შორის σ ბმის შემთხვევაში. მაგალითისათვის განვიხილოთ კარბონილის ჯგუფი $>C=O$, რომლის დიპოლური მომენტი უდრის 2,7 D. ცნობილია, რომ C—O ბმის დიპოლური მომენტი (მარტივ ეთერებში) უდრის 1,2 D-ს. π-ბმას ისეთივე სიდიდის პოლარიზაცია რომ ჰქონოდა, როგორიც σ-ბმას აქვს, მაშინ მოსალოდნელი იქნებოდა დიპოლური მომენტი $1,2 + 1,2 = 2,4$ D. მაგრამ კარბონილის ჯგუფის დიპოლური მომენტი 2,7 D აღემატება გამოთვლილ სიდიდეს, მაშასადამე, π-ბმების პოლარიზაცია უფრო ძლიერია, ვიდრე σ-ბმებისა.

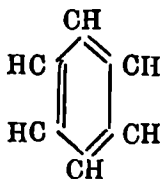
ნახშირბადთან შედარებით ქანგბადის მეტი ელექტროუარყოფითობის გამო, პოლარიზაციის შედეგად, ნახშირბადი არასრულ დადებით მუხტს შეიძენს, ქანგბადი კი — არასრულ უარყოფითს



მიღებული მუხტები განაპირობებს კარბონილის ჯგუფის რეაქციაში შესვლის უნარს.

ნახშირბად-ნახშირბადური ბმა არომატულ ნაერთებში

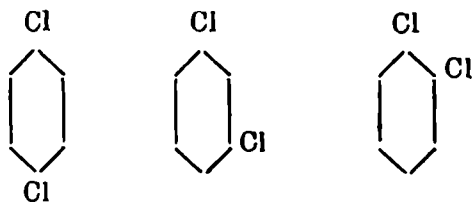
ამეამად კარგად ცნობილია, რომ ბენზოლის მთელი რიგი თვისებებისა და აღნაგობის აღწერისას მიმართავენ ე. წ. კეკულეს ფორმულას



რომელიც შედარებით კარგად გადმოგვცემს ცნობებს ბენ-
ზოლის მოლეკულის აღნაგობის შესახებ. მაგალითად, ცნო-
ბილია, რომ ბენზოლი შეიძლება სამი მოლეკულა აცეტილენ-
ნიდან მივიღოთ



სამი ორბმის არსებობას ბენზოლის მოლეკულში ადასტუ-
რებს მისი უნარი წყალბადის ექვსი ატომის ჰიეროთებისადმი.
ამის გარდა სამი დიჰალოგენბენზოლის იზომერის არსებობა



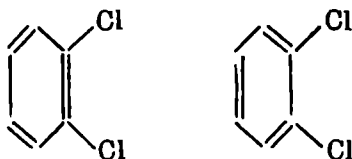
პარა

მეტა

ორთო

ამტყიცებს, რომ კეკულეს ფორმულა სწორად ასახავს ბენ-
ზოლის თვისებებს.

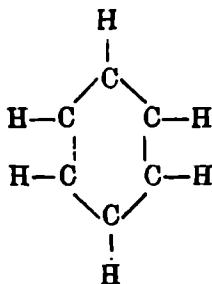
მაგრამ მეორე მხრივ, კეკულეს ფორმულას მრავალი ნაკლი
ახასიათებს, მაგალითად, კეკულეს ფორმულა სწორი რომ
ყოფილიყო, ორთოდინბენზოლს ორი იზომერი ექნებოდა:



რადგან ერთ შემთხვევაში ქლორ-ატომებს შორის იქნებოდა
ორბმა, მეორეში კი — მარტივი ბმა. მაგრამ ცნობილია დი-
ქლორბენზოლის ერთი იზომერი.

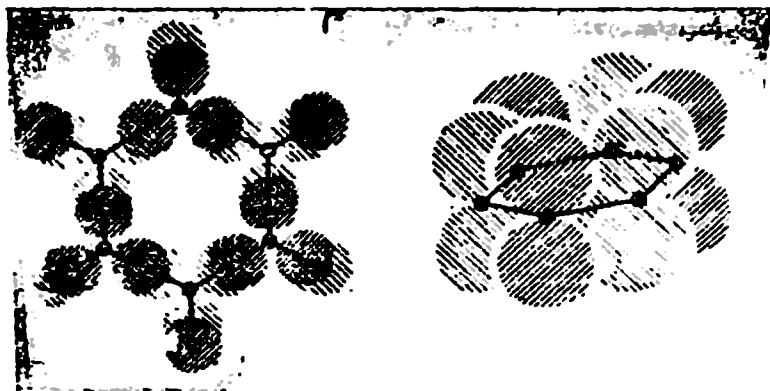
ქველეს ფორმულის უსრულობა თავს იჩენს აგრეთვე სხვა შემთხვევებშიც. მაგალითად, რენტგენო-და ელექტრონოგრაფიული გამოკვლევებიდან გამომდინარეობს, რომ ბენზოლის მოლეკულაში ექვსივე ბმას ერთნაირი სიგრძე აქვს, რომელიც $1,40 \text{ \AA}$ -ის ტოლია, ხოლო მარტივი $C-C$ ბმის სიგრძე არის $1,54 \text{ \AA}$, ორბმის $C=C$ სიგრძე კი $1,32 \text{ \AA}$.

ქიმიური ბმის თანამედროვე წარმოდგენების თანახმად, ბენზოლის მოლეკულის ექვსივე ნახშირბად-ატომი და მათთან შებმული ექვსი წყალბად-ატომი ერთ სიბრტყეშია განლაგებული. ბენზოლის მოლეკულა ბრტყელია. თითოეული ნახშირბად-ატომის sp^2 ელექტრონების ჰიბრიდიზაციის შედეგად წარმოქმნილი სამ-სამი σ -ელექტრონიდან ორ-ორი σ -ელექტრონი მეზობელ ნახშირბად-ატომების σ -ელექტრონებთან გადაფარვას მოგვცემს და წარმოქმნის $C-C$ ბმას, ხოლო მესამე σ -ელექტრონი და წყალბად-ატომის σ -ელექტრონი ურთიერთგადაფარვით წარმოქმნის $C-H$ ბმას. ყველა ეს ბმები σ -ბმებს წარმოადგენენ.



ამრიგად მიიღება ბრტყელი ციკლური სტრუქტურა, რომელიც გამოსახულია ნახ. 23-ზე.

თითოეული ნახშირბად-ატომის დარჩენილი თავისუფალი p -ელექტრონის ღრუბელი ორი მეზობელი ნახშირბად-ატომის p -ელექტრონების ღრუბლებთან გადაიფარება, რის შედეგად მიიღება ექვსი π -ბმა. ეს π -ელექტრონები გამოსახულია 24-ა ნახაზზე ისრებით. ისრების საპირისპირო მიმართულება ამას ნიშნავს, რომ მეზობელი ატომების π -ელექტრონების

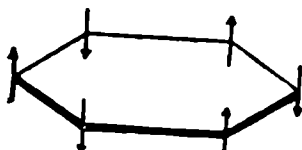


ა

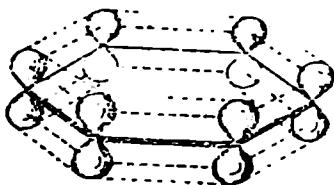
ბ

ნახ. 23. ბენზოლის მოლეკულის ელექტრონული მდგომარეობა.

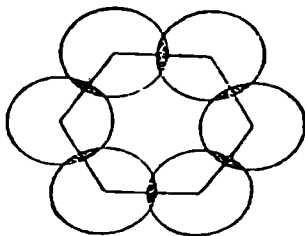
ა) ექვსი ნახშირბად-ატომის ვალენტური «სამკუთხედი»,
ბ) p-ელექტრონთა ღოუბლების განლაგება



ა



ბ



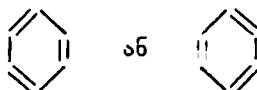
გ

ნახ. 24. ბენზოლის მოლეკულის π -ბმები.

ა) გამოსახული ისრებით, ბ) გამოსახული ელექტრონული ღრუბლებით.

გ) გამოსახულია ელექტრონული სქემის პროექცია სიბრტყეზე

სპინი მიმართულია ერთმანეთის საპირისპიროდ. მათი ღრუბლების გადაფარვით მიღებული ელექტრონული მოდელი გამოსახულია 24-ბ ნახაზზე. თუ გამოვსახავთ ამ ფორმულის პროექციას სიბრტყეზე მივიღებთ ნახ. მე-24 გ-ზე გამოსახულ სურათს, საიდანაც ჩანს, რომ π -ელექტრონების ღრუბლების ურთიერთგადაფარვით სფერული ელექტრონული ღრუბელი მიიღება. ზემონათქვამიდან ჩანს, რომ თითოეული ნახშირბად-ატომი ბენზოლის მოლეკულაში შებმულია მეზობელ ატომებთან სამი σ -ბმით და ერთი π -ბმით. ასეთ ბმას არომატული ბმა ეწოდება. აქედან გამომდინარეობს, რომ ბენზოლის მოლეკულის თვისებები არ შეიძლება ამომწურავად ავწეროთ

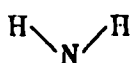
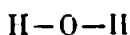


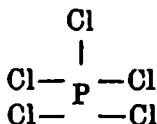
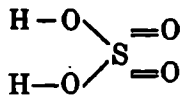
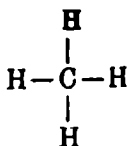
ფორმულებით.

ბენზოლი არ წარმოადგენს რაიმე გამონაკლისს. ასეთსავე თანაფარდობებს აქვს ადგილი საერთოდ არომატული ნაერთების და მრავალი ნახშირწყალბადის განხილვისას, რომლებსაც ე. წ. „შეუღლებული“ ბმები ახასიათებს.

სტრუქტურული ფორმულები

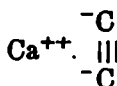
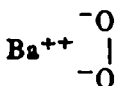
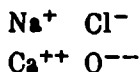
ვალენტობის თანამედროვე თეორიით სავალენტო ზაზს, მრავალ შემთხვევაში, მაგრამ არა ყოველთვის, უპასუხებს ერთი ატომური ბმა, რომელიც ერთ წყვილ ელექტრონს შეესაბამება. ქვემოთ სავალენტო ზაზების დახმარებით გამოსახულია ზოგიერთი ნაერთის სტრუქტურული ფორმულა, რომლებსაც ამჟამად „კლასიკურს“ ვუწოდებთ.



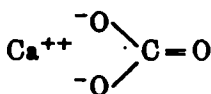
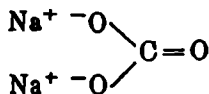
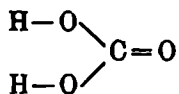


მაგრამ ვინაიდან მარილმსგავსი ნაერთების კრისტალური მესერი იონებისაგან შედგება, სადაც მესერის კვანძებში მიმდევრულად არიან განლაგებული კატიონები და ანიონები, ამიტომ ზემო სტრუქტურული ფორმულები ამ ჯგუფის ნაერთების მიმართ არ არის სწორი.

ამეამად ვალენტური ხაზით მხოლოდ ატომური ბმა აღინიშნება, იონური ბმა კი — მუხტებით. ჩვენც უნდა მივიღოთ ეს პირობა, ამიტომ სტრუქტურული ფორმულები შემდეგ სახეს მიიღებენ:



ნახშირმგავისათვის და მისი მარილებისათვის გვექნება

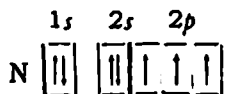


აქ მეთავეში წყალბადი ატომური ბმით არის შებმული, ხოლო ნატრიუმი, კალციუმი და სხვა კატიონები — იონურით. ასეთი ფორმულები უკეთ გადმოგვცემენ ელექტრონების განაწილებას მოლეკულაში.

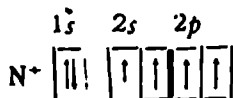
სასარგებლოა მხედველობიდან არ გამოვტოვოთ შემდეგი წესი: ელემენტების პირველ რვაწევრიან პერიოდში ატომში შეიძლება იქონიოს მაქსიმუმ ოთხი ატომური ბმა, ხოლო გარეგარსში არ შეიძლება რვაზე მეტი ელექტრონი განლაგდეს.

აქედან ჩანს, რომ აზოტს არ შეიძლება ოთხზე მეტი ვალენტობა ჰქონდეს. მართლაც, აზოტის ატომის ელექტრო-

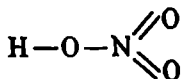
ნული სქემიდან ჩანს, რომ გარე გარსში მას სამი არაგა-
წყვილებული ელექტრონი აქვს:



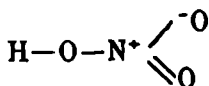
ასეთ მდგომარეობაში აზოტი სამვალენტოვანია. იმისათვის, რომ აზოტი ხუთვალენტოვანი გავხადოთ, საჭირო იქნებოდა $2s$ წყვილის დაშლა და ერთ-ერთი $2s$ ელექტრონის $3s$ დონეზე ატანა. მაგრამ ამას ბევრად მეტი ენერგია სჭირდება, ვიდრე ქიმიური რეაქციის დროს გამოიყოფა. ამიტომ ნაერთებში, რომლებშიც აზოტს ხუთვალენტოვნად სთვლიან, აზოტის ატომს დაკარგული აქვს ერთი $2s$ ელექტრონი, რის გამო მის ელექტრონულ სქემას აქვს სახე:



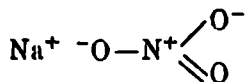
მაშასადამე, აზოტის კატიონს აქვს ერთი დადებითი მუხტი და ოთხი არაგაწყვილებული ელექტრონი, რომელთა მეშვეობითაც იგი ერთ იონურს და ოთხ ატომურ ბმას წარმოქმნის. ამრიგად უმაღლესი ვალენტობა აზოტის შემთხვევაში მიაღწევა მისი აგზნებითა და იონიზაციით. ამ მიზეზის გამო აზოტმეფას ფორმულას



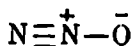
ვერ განვიხილავთ როგორც სტრუქტურულ ფორმულას. ეს ფორმულა სწორად შემდეგნაირად დაიწერება:



სადაც აზოტის კატიონი ოთხ ატომურ ბმას წარმოქმნის. ნატრიუმის აზოტმეფა მარილს კი ექნება სტრუქტურა:



აზოტის ქვეყანგის სტრუქტურაში აზოტის ასეთივე კატიონი მონაწილეობს:



კლასიკურ სტრუქტურულ ფორმულებში არ არის განსხვავებული იონური და ატომური ბმები, ამას გარდა, ისინი ხშირად არახწორად ასახავენ ელემენტების ვალენტობას.

ქვემო ცხრილი მოიცავს ოცზე მეტი ელემენტის ვალენტური მდგომარეობის სქემას. ნეიტრალური ატომების გარდა აქ გამოსახულია აგრეთვე ატომური იონების სქემებიც.

ცხრილში ატომებისა და ატომური იონების სიმბოლოების გარდა ნაჩვენებია ვალენტობა და ელექტრონების განაწილება, რომელიც ბმების წარმოქმნის შემდეგ რჩება. შემოღობ სვეტში ნაჩვენებია სავალენტო ელექტრონების ტიპი (s, p, d) და, უკანასკნელ სვეტში — გარე გარსში ელექტრონების რიცხვი, რომელიც ქიმიური ბმებას წარმოქმნის შემდეგად მიიღება. ეს არის სავალენტო ელექტრონების გაორკეცებული რაოდენობა პლუს გარეგარსის დაჩენილი ელექტრონები, რომლებსაც არ მიუღიათ მონაწილეობა ბმებში.

ცხრილში მოტანილია მუხტები შეიძლება განვიხილოთ როგორც ფორმალური მუხტები, რომელთა ჯამი უდრის მოლეკულური იონის მუხტს.

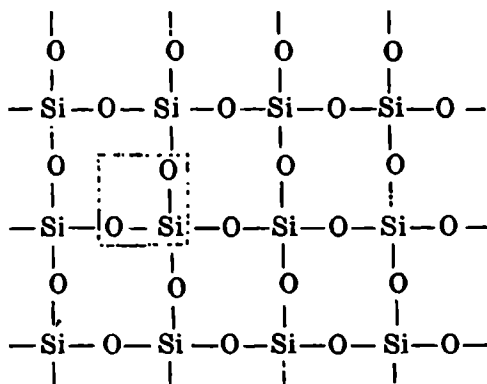
ორბიტის ზოგიერთი წესი

ნახშირბადის გარეგარსის $2s$ $2p^3$ ელექტრონების ჰიბრიდიზაციის შედეგად მიიღება ოთხი sp -ელექტრონი, რომლებსაც შეუძლიათ როგორც σ , აგრეთვე π -ბმების წარმოქმნა. მაგალითად, $\text{O}=\text{C}=\text{O}$ -ის მოლეკულაში თითო ატომი ეანგბადი შებმულია ერთი σ - და ერთი π -ბმით. ამის გამო მიაღება CO_2 -ის ცალკეული მოლეკულა, რომლებიც მყარ მდგომარეობაში

[illegible]

რეობაში მოლეკულურ მესერს იძლევა. ასეთი ტიპის მესერში განლაგებული მოლეკულები შებმულია ერთმანეთთან ვან-დერ-ვაალსის მიზიდვის სუსტი ძალებით, რის გამოც მყარი ნახშირორქანგიც ძალიან ადვილად ქრთლდება.

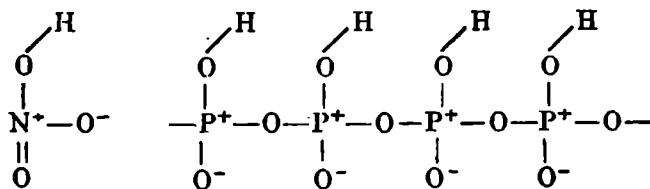
სილიციუმი ნახშირბადის მომდევნო ელემენტია მენდელეევის პერიოდული სისტემის მეოთხე ჯგუფში. მისი გარე-გარსის $3s^2 3p^2$ ელექტრონები აგრეთვე ჰიბრიდიზაციას განიცდის და, ნახშირბადის მსგავსად, გეზურ ვალენტობას იძლევა. SiO_2 -ში ნახშირბადის მსგავსად სილიციუმი ოთხ-ვალენტოვანია. მაგრამ CO_2 და SiO_2 თავისი თვისებებით და, მაშასადამე, აღნაგობით ღიდად განსხვავდება ერთი მეორისაგან. განსხვავება განპირობებულია იმით, რომ რვა-წევრიანი მეორე პერიოდის ელემენტები მოკლებული არიან π -ბმების წარმოქმნის უნარს. ამის გამო ეს ელემენტები არ იძლევიან ორბმას. ამიტომაც სილიციუმორქანგი არ იძლევა ნახშირორქანგის ანალოგიას, სახელდობრ $O=Si=O$ -ს, არამედ წარმოქმნის პოლიმერს, რომლის აღნაგობა შეიძლება შემდეგი სქემით გამოვსახოთ:



როგორც ჩანს, სილიციუმის ორქანგში არ არის SiO_2 -ის ცალკეული მოლეკულები, არამედ მთელი კრისტალი არის გიგანტური პოლიმერა, რომლის დნობის ტემპერატურა 1600 გრადუსს აღემატება. აქ სილიციუმი ოთხი კოვალენ-

ტური ბმით არის შეკავშირებული ჟანგბადის ატომებთან. აღსანიშნავია, რომ Si—O ბმის ენერგია 89 კკალორიას უდრის, რაც მნიშვნელოვნად აღემატება C—O-ს ბმის ენერგიას, რომელიც 75 კკალორიის ტოლია.

არსებითად ამავე მიზეზით აიხსნება HNO_3 -ის და HPO_3 -ის თვისებების თავისებურება. HNO_3 -ის მოლეკულში აზოტი ორბმით არის შებმული ჟანგბადთან, რის გამო იგი ცალკეულ მოლეკულებს იძლევა. ფოსფორი, როგორც რვაწევრიანი მეორე პერიოდის ელემენტი, არ იძლევა ორბმას, რის შედეგადაც ენერგეტიკულად უფრო ხელსაყრელია პოლიმერული ნაერთის წარმოქმნა, ვიდრე ცალკეული მოლეკულებისა



ამით აიხსნება თუნდაც ის, რომ HNO_3 ადვილად აქროლადია, ხოლო HPO_3 —ძნელად აქროლადი.

ჰიბრიდური ბმის ენერგია

ბმის ენერგიის თეორიული გამოთვლა მრავალ სიძნელეს ხვდება ისეთი მარტივი მოლეკულის შემთხვევაშიც კი, როგორიცაა წყალბადის მოლეკულა. ამიტომ გასაგებია, რომ ბმის ენერგიას ექსპერიმენტულად საზღვრავენ. მიუხედავად ამისა, დაახლოებით მაინც შეიძლება გამოვთვალოთ ბმის ენერგია სულ მარტივი გზით. პოლინგმა დაუშვა, რომ, მაგალითად, A—B მოლეკულის ბმის ენერგია უდრის A—A და B—B მოლეკულების საშუალო არითმეტიკულს:

$$E_{A-B} = \frac{1}{2} E_{A-A} + \frac{1}{2} E_{B-B}$$

უნდა აღვნიშნოთ, რომ ატომური ბმის შემთხვევებში ეს წესი შედარებით კარგად მართლდება. ამის მიზეზი შემდეგია.

მაგალითად, Cl_2 -ის მოლეკულში თითოეული ატომის სავალენტო ელექტრონზე მოდის $\text{Cl}-\text{Cl}$ ბმის ენერგიის ნახევარი. სწორედ ამ რაოდენობის ენერგიით შეუერთდება ქლორ-ატომი ბრომ-ატომს. მართლაც, Cl_2 , Br_2 , J_2 , Na_2 , K_2 მოლეკულების ენერგია შესაბამისად უდრის 57, 45, 35, 17, 12 კკალორიას. აქედან გამოვთვალოთ BrCl , JCl , JBr , NaK -ის მოლეკულების ენერგია და გაზომილს შევუდაროთ

ცხრილი		
მოლეკულების ენერგია		
მოლეკულა	გამოთვლილი	გაზომილი
BrCl	51	52
JCl	46	49
JBr	40	42
NaK	14,5	14,5

შედარებიდან ჩანს, რომ პოლინგის წესი კარგად მართლდება. მაგრამ თუ ამ მონაცემების დახმარებით მარილმსგავსი ნაერთების ბმის ენერგიას გამოვთვლით, დიდ აცდენას ნიშნავს, მაგალითად,

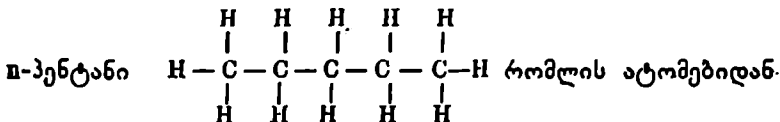
$$E_{\text{NaCl}} = \frac{1}{2} E_{\text{Na}_2} + \frac{1}{2} E_{\text{Cl}_2} = \frac{1}{2} 17 + \frac{1}{2} 57 = 37 \text{ კკალ}$$

სპექტროსკოპიული გზით კი ნაპოვნია, რომ NaCl -ის აირადი მოლეკულის ბმის ენერგია 98 კკალ-ს უდრის, რაც მნიშვნელოვნად აღემატება გამოთვლილ სიდიდეს. აქედან ჩანს, რომ პოლინგის წესი დაახლოებით მართებულ შედეგებს გვაძლევს მხოლოდ ატომური ბმის შემთხვევაში.

აღსანიშნავია, რომ მოლეკულების ზოგიერთი თვისებები პირობითად შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც სტრუქტურული ელემენტების თვისებათა ჯამი. ასეთ ელემენტებად შეიძლება მივიჩნიოთ ატომების ჩონჩხები და იონები თავისი ელექტრონული გარსებით ან, კიმიური ბმის განმაპირობე-

ბელი სავალენტო ელექტრონებით. ნაერთის წარმოქმნისა და დაშლის სითბოდან გამომდინარეობს, რომ თითოეულ ბმას შეიძლება მივაწეროთ გარკვეული ენერგია, რომელიც სხვადასხვა ნაერთში შედარებით უცვლელი რჩება.

ბმების ენერგიის გამოთვლა შემდეგნაირად შეიძლება. ატომებიდან მეთანის წარმოქმნის ენერგია უდრის 384 კკალ-ს. ვინაიდან მეთანის მოლეკულა ოთხ ატომ^მწყალბადს შეიცავს, ამიტომაც $C-H$ ბმის ენერგია უდრის $384:4 = 87,15$ კკალ-ს. ეს არის $C-H$ ბმის ენერგიის საშუალო მნიშვნელობა მეთანის მოლეკულისათვის. მრავალი ნაერთიდან გამოთვლილი $C-H$ ბმის საშუალო ენერგია უდრის 85,6 კკალორიას. $C-C$ ბმის ენერგიის გამოსათვლელად ავიღოთ



წარმოქმნის სითბო უდრის 1277,3 კკალ-ს.

ფორმულიდან ჩანს, რომ პენტანის მოლეკულა შეიცავს თორმეტ $C-H$ ბმას, რასაც შეესაბამება $12 \times 85,6 = 1027,2$ კკალ. დარჩენილი $1277,3 - 1027,2 = 250,1$ კკალ შეესაბამება ოთხ $C-C$ ბმას, რომელთაგან თითოეულზე მოდის $250,1:4 = 63,5$ კკალ.

ქვემო ცხრილში თავმოყრილია ზოგიერთი ბმის ენერგია, გამოსახული კილოკალორიებით.

ცხრილი

ზოგიერთი ბმის ენერგია

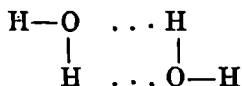
ბმა	კკალ	ბმა	კკალ
H-H	102,6	C-C	62,8
H-C	85,6	C=C	101,2
H-O	110	C≡C	128,2
H-F	147,5	C-O ეთერ.	75
H-Cl	102,6	C=O კეტ.	156
H-Br	87,9	C-N	84
H-J	71,4	C-F	70
		C-Cl	57

ამ მონაცემების დახმარებით აღდილია მთელი რიგი რეაქციების სითბური ეფექტების გამოთვლა.

წყალბადური ბოზირი

მოლეკულთშორისი ბმებიდან მეტად მნიშვნელოვანია წყალბადური ბმა, რომელიც წარმოადგენს მოლეკულების ურთიერთმოქმედების განსაკუთრებულ სახეს და განაპირობებს მოლეკულების ასოციაციას, ამ სახის ბმა აღმოჩენილ იქნა ილინსკის მიერ 1887 წ.

წყალბადატომი მხოლოდ ერთ კოვალენტურ ბმას იძლევა. ამის მიუხედავად ზოგ შემთხვევაში მას შეუძლია ორ ელექტროუარყოფით ატომს შორის ბოზირი წარმოქმნას. ამ ტიპის ბმა განპირობებულია ელექტროსტატიკური ძალებით. წყალბადური ბმა ისეთ ელექტროუარყოფით ატომებს შორის წარმოიქმნება, როგორიც არის F, O, N. ამ დროს კოვალენტურად შებმული პროტონი იკავშირებს მეორე ატომს, რისთვისაც მას თავისუფალი წყვილი ელექტრონი უნდა ჰქონდეს. ასეთი ბმის წარმოქმნისას პროტონი არ იკავებს შუა ადგილს იმ შემთხვევაშიც კი, როცა ორივე ატომი ერთნაირია, არამედ იგი უფრო ახლო რჩება იმ ატომთან, რომელთანაც კოვალენტურად არის შეკავშირებული. მაგალითად, წყლის შემთხვევაში



O—H ბმის სიგრძე არის 0,99 Å და O H ბმის სიგრძე—1,76 Å.

წყალბადური ბმით აიხსნება კარგად ცნობილი ასოციაციის მოვლენები.

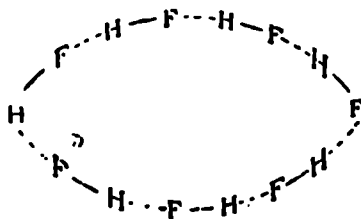
ცნობილია, რომ ჰომოლოგიურ მწკრივში მოლეკულური წონის შემცირებისას დუდილის ტემპერატურა ჩვეულებრივად იკლებს. მართლაც, მწკრივში H₂Te, H₂Se, H₂S-ის დუდილის წერტილი სულ უფრო დაბალი ხდება:

ნაერთი	დუღილის °K
H ₂ O	373
H ₂ S	213
H ₂ Se	232
H ₂ Te	271

ვინაიდან H₂O-ს მოლეკულური წონა ყველაზე მცირეა, ამიტომ მისი დუღილის ტემპერატურა ყველაზე დაბალი უნდა ყოფილიყო. მაგრამ წყლის დუღილის ტემპერატურა 160°-ით უფრო მაღალია, ვიდრე H₂S-ისა. ამას წყალბადური ბმა განაპირობებს. წყლის მოლეკულებს შორის წყალბადურ ბმას რომ არ

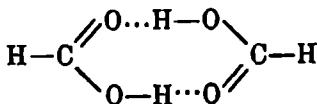
ჰქონოდა ადგილი, წყალი ჩვეულებრივ პირობებში აირად მდგომარეობაში იქნებოდა და ჩვენს დედამიწაზე სიცოცხლე შეუძლებელი გახდებოდა.

HF-ის მოლეკულაში ვალენტური ბმით შეკავშირებული პროტონი F-ის მეორე მოლეკულაში შებმულ ფტორს წყალბადური ბოგირით უკავშირდება:



HF-ის ასოცირებული მოლეკულები ძალიან უმნიშვნელოდ წარმოქმნის წყალბად-იონებს, რის გამო იგი სუსტ მჟავას წარმოადგენს.

წყალბადური ბოგირი დამახასიათებელია აგრეთვე კარბონმჟავებისათვის. მაგალითად, კიანჭველმჟავას მოლეკულები



ასოციაციას განიცდიან. წყალბადური ბოგირები კიანჭველმჟავას აორთქლების დროსაც არ იშლება, რის გამო აირად ფაზაში დიმერის სახით რჩება.

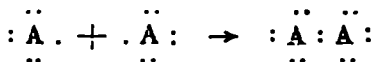
წყალბადური ბმის ენერგია მცირეა, მეტწილად 5—7 კკალორიას არ აღემატება, მაშინ როდესაც ჩვეულებრივი კოვალენტური ბმის ენერგია საშუალოდ 100 კკალ-ის ტოლია.

წყალბადური ბმა არა მარტო წყლის მოლეკულებს აკავშირებს ერთმანეთთან, არამედ წყლის მოლეკულებს აკავშირებს გახსნილ მოლეკულებთანაც. ასეთია ცილოვანი მოლეკულების კარბოქსილის ჯგუფები, ამინოჯგუფები, რომელთა ჰიდრატაცია წყალბადური ბმის მეშვეობით იდება.

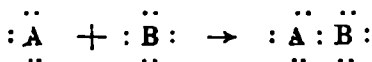
აღნიშნულის გარდა წყალბადური ბმა თავს იჩენს ყინულის სტრუქტურაში, სადაც მას არსებითი როლი ენიჭება. თითოეული ჟანგბად-ატომის ირგვლივ ოთხ-ოთხი წყალბად-ატომი განლაგებულია ტეტრაედრის კუთხეების მიხედვით. იმის გამო, რომ ყინულში მოლეკულები არ იჩენენ მკვერივ წყობას, მისი ხედრითი წონა წყლისაზე უფრო ნაკლებია. ყინულის დნობის დროს წყდება წყალბადური ბმების ნაწილი, ხოლო აორთქლების პროცესში კი ყველა ბმა წყდება და მიიღება წყლის ცალკეული მოლეკულები ორთქლის ფაზაში.

კოორდინაციული ბმა

კოვალენტური ბმა ჩვეულებრივად ორი ატომის საკვალენტო არაგაწყვილებული ელექტრონების გაწყვილებით მიიღება:

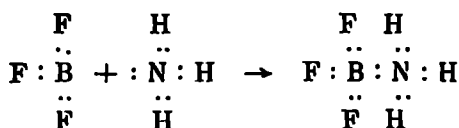


გარდა განხილულისა, ქიმიური ბმა მაშინაც მიიღება, როცა შემთავსებელი წყვილი ელექტრონი ერთ რომელიმე მოლეკულს ეკუთვნის:



აქ შემთხვევაში B არ წარმოადგენს თავისუფალ ატომს, წინააღმდეგ შემთხვევაში B ინერტული გაზის ატომი იქნებოდა. B არის მოლეკულში ან რადიკალში შემავალი ატომი,

რომლის გარეგარსი ოქტეტისაგან შედგება. ვინაიდან B-ს „თავისუფალი“ წყვილი ელექტრონი აქვს, რომლითაც ხდება ქიმიური ბმის განხორციელება, ამიტომ A-ს სექსტეტი უნდა ჰქონდეს გარეგარსში. ამ შემთხვევაში წარმოიქმნება დონორ-აქცეპტორული ბმა, რომელიც მიიღება ერთი ატომის — დონორის-წყვილი ელექტრონის და მეორე ატომის — აქცეპტორის — თავისუფალი უჯრედის ხარჯზე. ამ შემთხვევაში ორი ატომგულის ველში შემავალი მყოფი წყვილი ელექტრონის ყოფნა ენერგეტიკულად ხელსაყრელია, და ამის გამო წარმოიქმნება განსაკუთრებული სახის ქიმიური ბმა, რომელსაც კოორდინაციული ბმა ეწოდება, მაგალითად,

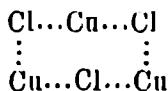


ვინაიდან კოორდინაციული ბმის წარმოქმნის შედეგად B-ატომის წყვილი ელექტრონი A და B ატომების საზიარო ხდება, ამიტომ დონორი დადებითად იმუხტება, ხოლო აქცეპტორი — უარყოფითად:

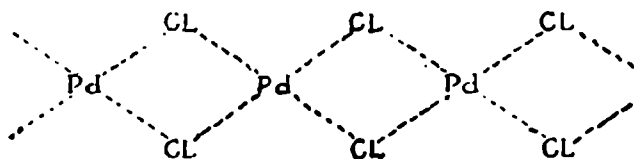


ამიტომაც ამ ტიპის ბმას აგრეთვე სემიბოლარულს უწოდებენ. ცნობილია დონორ-აქცეპტორული ბმის მრავალი მაგალითი. თავისი წყვილი ელექტრონებით ჰალოგენები წარმოქმნიან არა ერთს, არამედ ორს და სამ ბმას. ეს გარემოება განსაზღვრავს ბოგური ნაერთების აღნაგობას, სადაც, მაგალითად, ქლორ-ატომი ერთდროულად ორ მეზობელ ატომთან არის შებმული, რის შედეგადაც მიიღება დიმერი Fe_2Cl_6 , ტრიმერი Cu_3Cl_3 , პოლიმერი PdCl_2 , და ა. შ. ცნება „სამვალენტოვანი რკინის“ შესახებ უკვე მოძველებულია, ვინაიდან Fe_2Cl_6 -ში რკინა არ არის სამვალენტოვანი და არც ქლორია ერთვალენტოვანი. აქ მიიღება დონორ-აქცეპტორული ბმები, რისთვისაც მეტალის ატომი უთმობს თავის ცარიელ p -უჯრედებს.

Cu_2Cl_2 ციკლური ტრიმერია, სადაც სპილენძის ატომი შებმულია ორ ქლორ-ატომთან და ქლორ-ატომი სპილენძის ორ ატომთან:



ასევე, თითოეული ქლორ-ატომი პალადიუმის ორ ატომს შორის PdCl_2 -ის პოლიმერში იძლევა ბოგირს:



ამეამად კარგად არის ცნობილი Cu_2 , Ag_2 , Au_2 მოლეკულების ბმის ენერგია, რომელიც შესაბამისად უდრის 46,5; 37,5 და 50 კკალ. ეს ენერგია ბევრად უფრო მეტია, ვიდრე Na_2 , K_2 , Rb_2 მოლეკულების ბმის ენერგია. რომელიც საშუალოდ 10 კკალ-ას უდრის. აღნიშნული მოლეკულების ბმის ენერგიის ესოდენ დიდი სხვაობა იმით აიხსნება, რომ ტუტე მეტალების მოლეკულების ბმის წარმოქმნაში მონაწილეობას იღებენ s -ელექტრონები, ხოლო Cu_2 , Ag_2 , Au_2 მოლეკულების ბმა მიიღება ერთი ატომის d -ელექტრონებისა და მეორე ატომის ცარიელი p -უჯრედების ურთიერთმოქმედებით. ამ გზით მიღებული ბმის ენერგია აღემატება σ -ბმის ენერგიას.

დონორ აქცეპტორული ბმები განაპირობებს კომპლექსურ ნაერთების აღნაგობას, რომელთა შორის განსაკუთრებული ადგილი უჭირავს ატომების ნაერთებს ნულოვანი ვალენტობით. ასეთია $\text{Cr}(\text{RCN})_6$, სადაც RCN იზონიტრილის ჯგუფის შემცველ ნაერთს გამოსახავს, ასეთია $\text{Pt}(\text{NH}_3)_4$ და სხვ.

პლატინის ნულვალენტოვანი მდგომარეობა მიიღება ორი არგაწყვილებული (d^8s) ელექტრონის გაწყვილებით. ამ დროს ენერგიის საკმარისი რაოდენობა გამოიყოფა. სავალენტო ელექტრონების ასეთი გაწყვილების შედეგად თავისუფლდება

უჯრედები და ამ ცარიელი უჯრედებით იკავშირებს დონორებს.

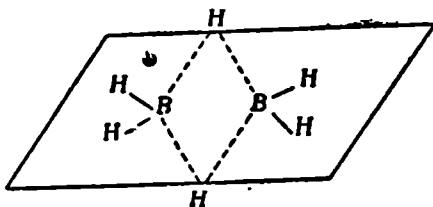
ნულვალენტოვანი ნაერთების განხილვიდან ჩანს, რომ ვალენტობა ყოველთვის არ განისაზღვრება არაგაწყვილებული ელექტრონების რიცხვით.

სამცენტრიანი ბმა

ელექტრონების დახმარებით ორი ატომგულის ურთიერთშეხებას ორცენტრიანი ბმა ეწოდება, ხოლო სამი ატომგულისას — სამცენტრიანი ბმა. ორცენტრიანი სისტემის შემთხვევაში ელექტრონები ორი ატომგულის ველში მოძრაობენ, სამცენტრიანში კი — სამი ატომგულის ველში.

განვიხილოთ სამცენტრიანი ბმის მაგალითი.

BH_3 -ის მოლეკულში ბორის სამივე ვალენტობა გაჯერებულია. მიუხედავად ამისა, ბორანი დიჰერიზაციას განიცდის, რის შედეგად დიბორანს B_2H_6 -ს წარმოქმნის, რომლის დროსაც 32 კკალ გამოიყოფა. დიბორანს ბოგური სტრუქტურა ახასიათებს:



აქ ერთ სიბრტყეში მოთავსებულ BH_2 -ის ორ ჯგუფს შორის განლაგებულია ორი წყალბად-ატომი, რომლებიც მართობულ სიბრტყეში არიან. თითოეული „ბოგური“ წყალბად-ატომი შებმულია ორ ბორ-ატომთან სამცენტრიანი ბმით. მიუხედავად ელექტრონების რიცხვის ნაკლებობისა, სამცენტრიანი ბმა საკმაოდ მდგრადია. მაგალითად, $Be(CH_3)_2$ -ის დიმერის მოლეკულში სამცენტრიანი ბმა ორცენტრიანისაზე უფრო მდგრადია. აღსანიშნავია, რომ B_2H_6 -ის არსებობის ფაქტიდან არ გამომდინარეობს N_2H_6 -ის არსებობის აუცილებლობა. ამას განაპირობებს ის გარემოება, რომ ბორისა-

გან განსხვავებით აზოტს არა აქვს ცარიელი ელექტრონული უჯრედები.

ამეამად დადგენილია მერვე ჯგუფის ელემენტების და არანაჯერი ორგანული პოლეკულების მეტალორგანული ნაერთების საინტერესო ჯგუფი, სადაც სამცენტრიან ბმას დიდი მნიშვნელობა ენიჭება. ამას გარდა სამცენტრიანი ბმის საკითხმა დიდი აქტუალობა მოიპოვა კატალიზის ზოგიერთი საკითხების ახსნისას.

ს ა რ ა მ ე ნ ი

წინასიტყვაობა	3
ნაწილი პირველი. ატომის აღნაგობა	
შესავალი	5
ატომის აღნაგობის ექსპერიმენტული საფუძვლები	8
პლანეტური მოდელის ნაკლოვანება	11
ბორის თეორია	12
გამოსხივების პირობა	14
სპექტრების წარმოშობა	17
რენტგენის სხივები	21
რენტგენის სპექტრების თეორია	23
ბორის თეორიის შეზღუდულობა	25
ქვანტური თეორია	26
ფოტოელექტრული ეფექტი	28
ნაწილაკები და ტალღები	29
ქვანტური რიცხვები	31
ელექტრონთა ენერგეტიკული დონეები	35
ატომის აღნაგობა და პერიოდულობის კანონი	37
ელექტრონული ღრუბლები	46
ნაწილი მეორე. მოლეკულების აღნაგობა	
შესავალი	49
კიმიური ბმის ტიპები	52
იონური ბმა	54
იონური მესერის ენერგია	57
ელექტროუარყოფითობა	60
ატომური ბმა	63
ატომების ვალენტური მდგომარეობა	66
ვალენტობის ნაჯერობა	67
გვხური ვალენტობა	69
პოლარული ატომური ბმა	72

ვალენტობის ჰიბრიდიზაცია	75
ჯერადი ბმები	77
ნახშირბად-ნახშირბადური ბმა არომატულ ნაერთებში	81
სტრუქტურული ფორმულები	85
ორბმის ზოგიერთი წესი .	88
ქიმიური ბმის ენერგია	91
წყალბადური ბოგირი .	94
კოორდინაციული ბმა .	96
სამცენტრიანი ბმა	99

დაიბეჭდა საქართველოს სსრ მეცნიერებათა აკადემიის
სარედ.-საგამომც. საბჭოს დადგენილებით

რედაქტორი კ. ჯ ა ფ ა რ ი ძ ე

*

გამომცემლობის რედაქტორი ნ. კონდრატენკო
ტექნორედაქტორი ნ. ბოკერია
კორექტორი ნ. ჯობაძე

გადაეცა წარმოებას 6/II 1952; ანაწყოების ზომა 5,5×9; ხელმოწერილია
დასაბეჭდად 4/VIII 1962; ქალაქის ზომა 60×92;
ქალაქის ფურცელი 3,2; საბეჭდი ფურცელი 5,2; საავტორო
ფურცელი 4,03; საალრიცხო-საგამომცემლო ფურცელი 4,13.

შეკვეთა 159 უე 02928 ტირაჟი 1000

ფასი 32 კაპ.

თბილისის უნივერსიტეტის გამომცემლობის სტამბა,
თბილისი, ი. ჭავჭავაძის პროსპექტი, 1.

Типография Издательства Тбилисского университета,
Тбилиси, проспект И. Чавчавадзе, 1.