ნათია არაბული

მოლეკულური ორბიტალების თეორია

(I ნაწილი)

რატომ აქვთ ნივთიერებებს განსხვავებული თვისებები? რატომ ატარებს დენს სუფრის მარილი გამლღვალ ან გახსნილ მდგომარეობაში? რატომ არის სანთელი რბილი და დაბალ ტემპერატურაზე ლღვება, მაშინ როდესაც ალმასს ლღობის მაღალი ტემპერატურა აქვს და ძალიან მტკიცეა? რატომ ახასიათებს სპილენძს და, საზოგადოდ, მეტალებს ბზინვარება, ღუნვადობა, გრეხადობა, დენის გამტარობა? ამ კითხვებზე პასუხის გასაცემად უნდა ვიცოდეთ, რომ ნივთიერების თვისებები მისი შემადგენელი ნაწილაკების (იონების, მოლეკულების, ატომების) ურთიერთქმედებაზეა დამოკიდებული.

ატომთა შორის ურთიერთქმედების ძალა შეიძლება იყოს *შიდამოლეკულური* და *მოლეკულათშორისი. შიდამოლეკულურ* ურთიერთქმედებას *ქიმიური ბმა* [1] ეწოდება.

ცნობილია *ქიმიური ბმის* :

1. ელექტრონული თეორიები

1.1 ლუისის თეორია

1.2. **VSEPR**[2] თეორია

2. კვანტურ-მექანიკური თეორიები

2.1 ვალენტური ბმების (**ვბ**[3]) თეორია

2.2 მოლეკულური ორბიტალების (**მო**[4]) თეორია

---

[1] ბეჭდურ თუ ელექტრონულ რესურსებში შეხვდებით ტერმინებს: ქიმიური ბმისათვის - *Primary Bonding / Intramolecular Force / Bonding Force/Interatomic Force,* ხოლო მოლეკულათშორისი ურთიერთქმედებისთვის - *Secondary Bonding / InterMolecular Force (IMF)/ Nonbonding Force.*

[2] VSEPR-Valence Shell Electron Pair Repulsion theory ბმული1 ბმული2

[3] თეორიის ინგლისური აბრევიატურაა VB(Valence Bond theory)

[4] Molecular Orbital (MO) theory

წინამდებარე სტატიის თემაა მოლეკულური ორბიტალების თეორია, რომლის ფუძემდებლები არიან ამერიკელი მეცნიერი მალიკენი და გერმანელი მეცნიერი ჰუნდი.

თეორიის განხილვისას უნდა გავითვალისწინოთ:

● საკვანძო სიტყვები: ატომური ორბიტალი, მაკავშირებელი და გამთიშავი მოლეკულური ორბიტალები, ბმის რიგი.

● თუ **ატომში** ელექტრონების მოძრაობა აღიწერება ტალღური ფუნქციით, რომელსაც **ატომური** ორბიტალი ეწოდება, **მოლეკულაში** შემავალი ყველა ატომის ელექტრონების მოძრაობა აღიწერება ტალღური ფუნქციით, რომელსაც **მოლეკულური** ორბიტალი ეწოდება.

● **ატომური** ორბიტალი ეხება ერთ ცალკეულ ატომს, **მოლეკულური ორბიტალი** საერთოა მოლეკულაში შემავალი ყველა ატომისათვის და ეკუთვნის მთელ მოლეკულას.

● ატომური ორბიტალის მსგავსად, მოლეკულურ ორბიტალზეც თავსდება საპირისპირო სპინის მქონე, სულ მცირე, ორი ელექტრონი.

● ატომური ორბიტალის მსგავსად, მოლეკულურ ორბიტალსაც აქვს განსაზღვრული ენერგია.

● **მ**ოლეკულური **ო**რბიტალების **(მო)** თეორია განიხილავს ელექტრონების **დ**ელოკალიზაციას მთელ მოლეკულაში (ან იონში). ამ თეორიის თანახმად, ატომური ორბიტალების გადაფარვით მიიღება მოლეკულური ორბიტალები. ამასთან, ატომური და მოლეკულური ორბიტალების რაოდენობა ერთმანეთის ტოლია. კერძოდ, **ორი ატომური** ორბიტალის გადაფარვით წარმოიქმნება **ორი მოლეკულური** ორბიტალი - *მაკავშირებელი* და *გამთიშავი.*

● *ატომური ორბიტალის ენერგია* მეტია *მაკავშირებელი მოლეკულური* ორბიტალის ენერგიაზე და ნაკლებია *გამთიშავი მოლეკულური ორბიტალის ენერგიაზე.*

● *მაკავშირებელი* მოლეკულური ორბიტალის ენერგია უფრო ნაკლებია, ვიდრე *გამთიშავისა,* რის გამოც ელექტრონები იკავებენ ჯერ *მაკავშირებელ* მოლეკულურ ორბიტალს, შემდეგ - *გამთიშავს.*

● ატომური ორბიტალების ენერგიებს შორის არსებული სხვაობის გამო, წესისამებრ, ერთი ატომის 1s ატომური ორბიტალი გადაფარავს მეორე ატომის ასევე 1s ორბიტალს, ერთი ატომის 2s ატომური ორბიტალი - მეორე ატომის 2s ატომურ ორბიტალს და ა.შ.

● მოლეკულური ორბიტალების თეორია გვეხმარება პირველი და მეორე პერიოდის ელემენტების მიერ ორატომიანი მოლეკულების წარმოქმნის ალბათობის დადგენაში. აქ უნდა გამოვყოთ სამი შემთხვევა:

ა) *პირველი* პერიოდის s-ელემენტები;

ბ) *მეორე* პერიოდის s-ელემენტები;

გ) *მეორე* პერიოდის p-ელემენტები.

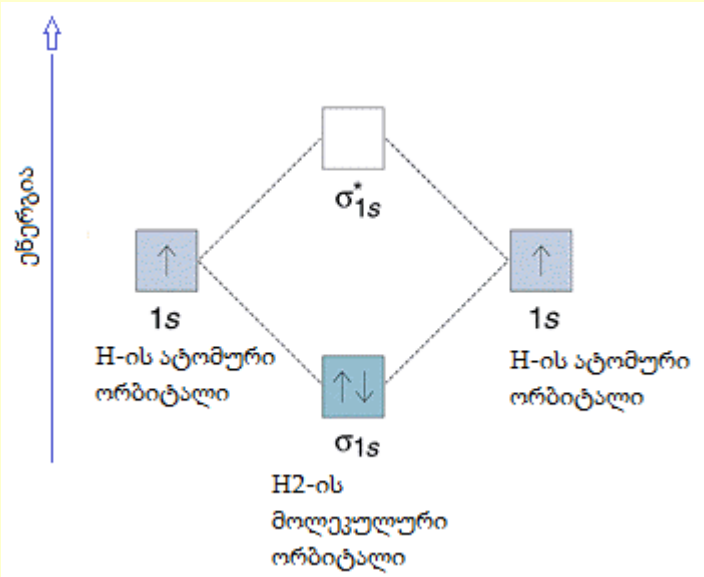
წინამდებარე სტატიაში განვიხილავთ პირველი და მეორე პერიოდის s-ელემენტებს.

ა) პირველი პერიოდის s-ელემენტების, წყალბადისა და ჰელიუმის ორატომიანი მოლეკულების წარმოქმნის ალბათობა; 1s ატომური ორბიტალების გადაფარვა

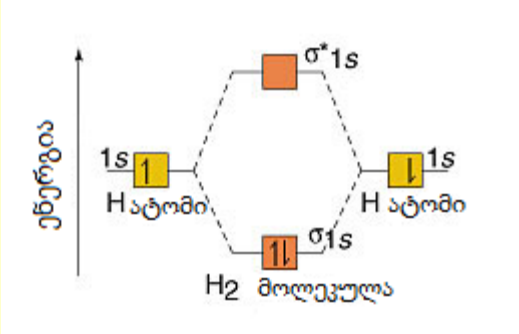
მო თეორიის შუქზე ვნახოთ, რატომ არის წყალბადის მოლეკულა ორატომიანი. წყალბადის თითოეულ ატომს აქვს ერთი s ელექტრონი. წყალბადის ორი ატომის 1s **ატომური** ორბიტალების გადაფარვით მიიღება წყალბადის **მოლეკულის** ორი **მოლეკულური** ორბიტალი - მაკავშირებელი (σ_{1s}) და გამთიშავი (σ^*_{1s}) .

ქვემოთ მოცემულია წყალბადის მოლეკულის წარმოქმნის ორი ერთმანეთის იდენტური ენერგეტიკული დიაგრამა. ვინაიდან მაკავშირებელი σ_{1s} მოლეკულური ორბიტალის ენერგია უფრო დაბალია, ვიდრე 1s ატომური ორბიტალისა, ხოლო გამთიშავი σ^*_{1s} მოლეკულური ორბიტალისა - უფრო მაღალი, ვიდრე 1s ატომური ორბიტალისა, ამიტომ წყალბადის ორი ატომის თითო გაუწყვილებელი ელექტრონი გაწყვილდება მაკავშირებელ მოლეკულურ ორბიტალზე, გამთიშავი მოლეკულური ორბიტალი კი თავისუფალი რჩება.

ა)



ბ)



სწორედ იმიტომ, რომ ორივე ელექტრონი მოთავსდა მაკავშირებელ მოლეკულურ ორბიტალზე, წყალბადის ორატომიანი მოლეკულა არის სტაბილური.
იგივე ავხსნათ ***ბმის რიგის*** დახმარებით.

ბმის რიგი ნაწილაკის სტაბილურობის, მდგრადობის საზომია. ის მაკავშირებელ და გამთიშავ მოლეკულურ ორბიტალებზე არსებული ელექტრონების სხვაობის ნახევრის ტოლია:

$$\textbf{ბმის რიგი} = \frac{(e-\text{ების რ-ბა მაკავ. ორბიტალზე}) - (e-\text{ების რ-ბა გამთიშავ ორბიტალზე})}{2}$$

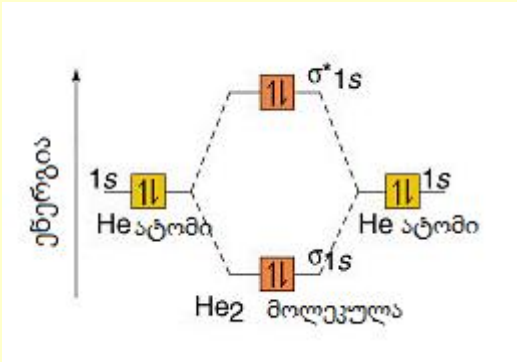
- თუ ბმის რიგი ნულის ტოლია, მოლეკულა **არ**ასტაბილურია.
- თუ ბმის რიგი მეტია ნულზე, მოლეკულა სტაბილურია.

ვიანგარიშოთ ბმის რიგი წყალბადის მოლეკულისთვის:

$$\text{ბმის რიგი } (H_2) = \frac{2-0}{2} = 1$$

ბმის რიგი ნულზე მეტია და ამიტომაა შესაძლებელი წყალბადის ორატომიანი მოლეკულის არსებობა.

რატომ **არ** არის შესაძლებელი, წყალბადისგან განსხვავებით, ჰელიუმის ორატომიანი მოლეკულის (He_2) არსებობა? სურათზე მოცემულია ჰელიუმის მოლეკულის წარმოქმნის ენერგეტიკული დიაგრამა. ჰელიუმის ორ ატომს ერთად აქვს ოთხი ელექტრონი, რომელთაგან ორი მაკავშირებელ მოლეკულურ ორბიტალზე გაწყვილდება, ორიც - გამთიშავზე:



ვიანგარიშოთ ბმის რიგი ჰელიუმის მოლეკულისათვის:

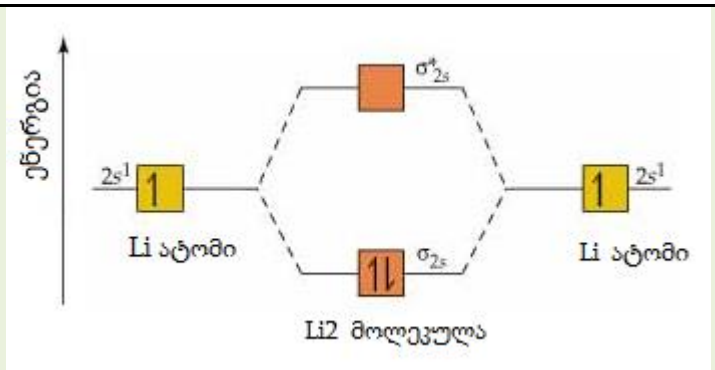
$$\text{ბმის რიგი } (He_2) = \frac{2-2}{2} = 0$$

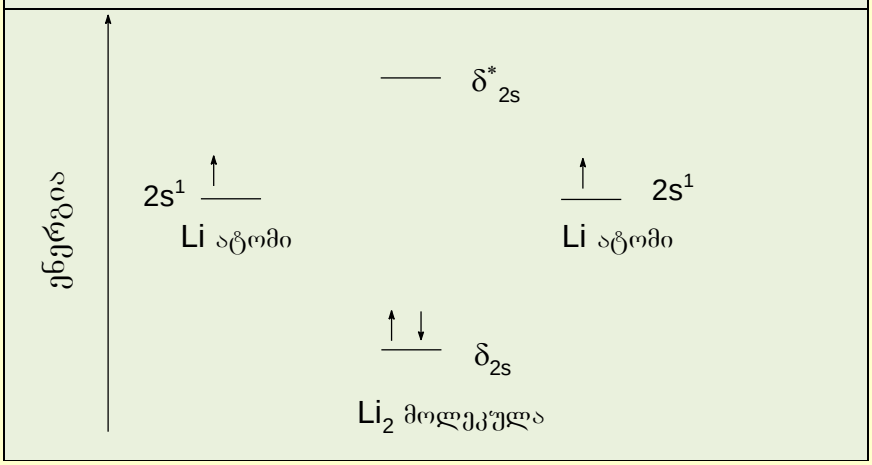
ბმის რიგი ნულის ტოლია, რაც იმას ნიშნავს, რომ ჰელიუმის ორატომიანი მოლეკულა ვერ იარსებებს.

ბ) მეორე პერიოდის s-ელემენტების, ლითიუმისა და ბერილიუმის, ორატომიანი მოლეკულების წარმოქმნის ალბათობა; 2s ატომური ორბიტალების გადაფარვა

ლითიუმი მე-**2** პერიოდის პირველი ელემენტია. მისი ატომის ელექტრონული ფორმულაა $1s^2 2s^1$. ცნობილია, რომ მარტივი ნივთიერება ლითიუმი მეტალია და მისი დუღილის ტემპერატურაა1342°C. ამ ტემპერატურაზე მეტალი გადადის აირად ფაზაში, რომელშიც არსებობს ორატომიანი მოლეკულების (Li_2) სახით. ლითიუმის მოლეკულის შესაბამისი ლუისის სტრუქტურული ფორმულაა Li — Li.

ახლა **მო** თეორიით ავხსნათ, რატომ არის შესაძლებელი ლითიუმის ორატომიანი მოლეკულების არსებობა.
როგორც ლითიუმის მოლეკულის ენერგეტიკული დიაგრამიდან ჩანს, ლითიუმის ორი ატომის თითო სავალენტო ელექტრონი გაწყვილდება მაკავშირებელ მოლეკულურ ორბიტალზე, გამთიშავი მოლეკულური ორბიტალი კი თავისუფალი რჩება.





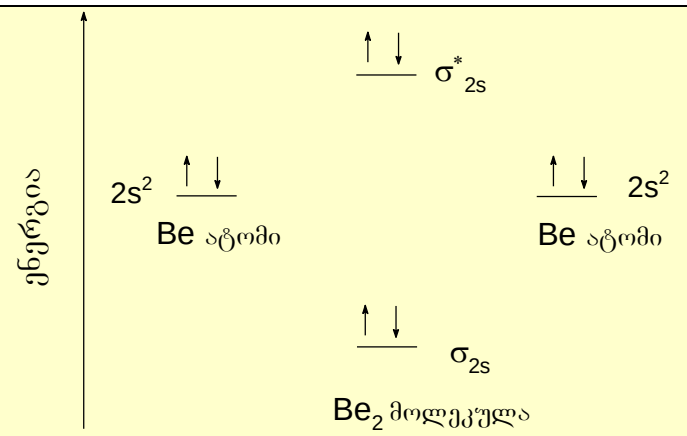
ვიანგარიშოთ ბმის რიგი ლითიუმის მოლეკულისთვის:

$$\text{ბმის რიგი } (Li_2) = \frac{2-0}{2} = 1$$

ვინაიდან ბმის რიგი ნულზე მეტია, შესაძლებელია ლითიუმის ორატომიანი მოლეკულის არსებობა.

არსებობს თუ არა ბერილიუმის მოლეკულა, Be_2?

ბერილიუმის ორი ატომის სავალენტო ელექტრონების ჯამური რაოდენობაა 2 + 2 = 4 ელექტრონი, რომელთაგან ორი მაკავშირებელ მოლეკულურ ორბიტალზე გაწყვილდება, ორიც - გამთიშავზე.



ვიანგარიშოთ ბმის რიგი ბერილიუმის მოლეკულისთვის:

$$\text{ბმის რიგი } (Be_2) = \frac{2-2}{2} = 0$$

ვინაიდან ბმის რიგი ნულის ტოლია, Be_2 მოლეკულა **ვერ** იარსებებს.

ამით ვამთავრებთ პირველი და მეორე პერიოდის s-ელემენტებისთვის ორატომიანი მოლეკულების არსებობის შესაძლებლობის განხილვას მოლეკულური ორბიტალების თეორიის შუქზე. მომდევნო სტატია დაეთმობა მეორე პერიოდის p-ელემენტების მონაწილეობით ორატომიანი მოლეკულებისა თუ იონების წარმოქმნის ალბათობის საკითხს.