

ატომთა შორის ურთიერთქმედების ძალები

მოამზადა ნათია არაბულმა

რატომ აქვთ ნივთიერებებს განსხვავებული თვისებები? რატომ არის სუფრის მარილი, სხვა იონური ნაერთების მსგავსად, მსხვრევადი, ახასიათებს ლღობის მაღალი ტემპერატურა და ატარებს დენს გამლღვალ ან გახსნილ მდგომარეობაში? რატომ აქვს სანთელს დაბალი ლღობის ტემპერატურა, არის რბილი და არ ატარებს დენს, მაშინ როდესაც ალმასს აქვს ლღობის მაღალი ტემპერატურა და ძალიან მტკიცეა. რატომ ახასიათებს სპილენძს და, საზოგადოდ, მეტალებს ბზინვარება, ღუნვადობა, გრეხადობა, ატარებენ დენს მყარ ან გამლღვალ მდგომარეობაში? ამ კითხვებზე პასუხის გასაცემად უნდა შევისწავლოთ ნივთიერების შემადგენელ ნაწილაკებს შორის არსებული ურთიერთქმედება, ვინაიდან ნივთიერებების თვისებები სწორედ ამ ურთიერთქმედების ბუნებაზეა დამოკიდებული.

➤ შიდამოლეკულური ურთიერთქმედების ძალები - ქიმიური ბმები

შიდამოლეკულური ურთიერთქმედების ძალების შესწავლის სხვადასხვა თეორია თუ მოდელია ცნობილი. ესენია:

- ❖ ქიმიური ბმის ელექტრონული თეორიები
 - ლუისის თეორია;
 - სავალენტო ელექტრონული წყვილების განზიდვის (VSEPR) თეორია.
- ❖ ქიმიური ბმის კვანტურ-მექანიკური თეორიები
 - ვალენტური ბმების (ვბ) თეორია / Valence Bond (VB) theory);
 - მოლეკულური ორბიტალების (მო) თეორია/ Molecular Orbital (MO) theory.

➤ მოლეკულათშორისი ურთიერთქმედების ძალები - IMF (InterMolecular Forces):

- იონ-დიპოლური ძალები;
- იონ-ინდუცირებულდიპოლური ძალები ;
- დიპოლ-დიპოლური ძალები;
- დისპერსიული (ინდუცირებულდიპოლური) ძალები;
- დიპოლ-ინდუცირებულდიპოლური ძალები;
- წყალბადური ბმა (თუმცა წყალბადური ბმა თუმცა დიპოლ-დიპოლური ურთიერთქმედების კერძო შემთხვევაა, თავისებურებიდან გამომდინარე, იგი ცალკე განიხილება).

ქიმიური ბმის ელექტრონული თეორიები

ლუისის თეორია

როგორ და რატომ უერთდებიან ატომები ერთმანეთს?

ატომები ერთმანეთს უერთდებიან **ქიმიური ბმის** წარმოქმნით. **ლუისის თეორიაში** (ზოგადად, ელექტრონულ თეორიებში) ამოსავალია სავალენტო ელექტრონების მონაწილეობა ქიმიური ბმის წარმოქმნაში. ქიმიური ბმის წარმოქმნას საფუძვლად უდევს **ოქტეტის წესი**, რომელიც გულისხმობს ატომების სწრაფვას შეივსონ ოქტეტამდე სავალენტო შრე (გამონაკლისია წყალბადი, რომელსაც 2 ელექტრონი სჭირდება), ვინაიდან ეს არის ყველაზე სტაბილური მდგომარეობა, რომელშიც ატომს აქვს მინიმალური ენერგია. ოქტეტის წარმოქმნა შეიძლება მოხდეს როგორც ელექტრონების გაცემა/შემენით, ისე გაუწყვილებელი ელექტრონების გაწყვილებით. ამის მიხედვით განასხვავებენ იონურ, კოვალენტურ და მეტალურ ბმებს.

ოქტეტის წესი ვრცელდება მე-2 პერიოდის ყველა ელემენტზე და დანარჩენი ელემენტების დიდ ნაწილზე.

ლუისის თეორია ამა თუ იმ ნაწილაკის მოლეკულური ფორმულიდან ორგანზომილებიანი სტრუქტურული ფორმულების შედგენაზე გადასვლის საშუალებას იძლევა. სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, ლუისის ფორმულა არის ნივთიერების მოლეკულური ფორმულის სტრუქტურული გამოსახვა სიბრტყეზე, სწორედ ამიტომ არის ის ორგანზომილებიანი.

ლუისის ფორმულაში ელემენტის სიმბოლოს გარშემო წერტილებით გამოსახავენ მხოლოდ სავალენტო ელექტრონებს.

რაც უფრო მტკიცეა ქიმიური ბმა, მით მეტი ენერგია იხარჯება მის გაწყვეტაზე.

სქემაზე გამოსახულია მოლეკულური ფორმულიდან ლუისის ფორმულაზე გადასვლის საფეხურები:



ლუისის ფორმულის შედგენისას უნდა დავიცვათ შემდეგი წესები:

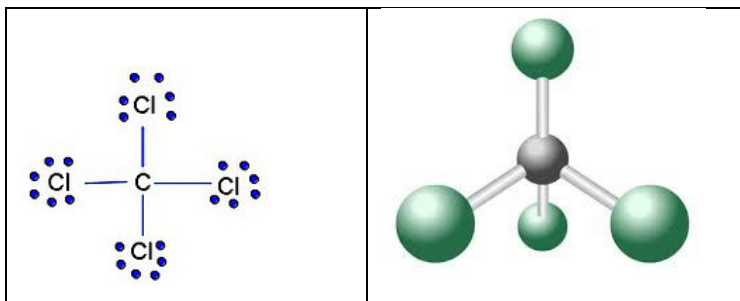
1. დავთვალოთ სავალენტო ელექტრონების ჯამური რაოდენობა.
2. თუ იონს აქვს უარყოფითი მუხტი, მუხტის სიდიდე ემატება ელექტრონების რაოდენობას, თუ დადებითი - აკლდება.
3. ნაწილაკში შემავალი ყველაზე ნაკლებად ელექტროუარყოფითი ელემენტი არის ცენტრალური ატომი, დანარჩენი ატომები - ლიგანდებია. გამონაკლისია წყალბადის ატომი, რომელიც ყოველთვის ლიგანდის როლშია.
4. დავწეროთ თითო ელექტრონული წყვილი ატომებს შორის.
5. დარჩენილი ელექტრონული წყვილები დავუწეროთ ცენტრალურ ატომს.
6. თუ ცენტრალურ ატომს:
 - არა აქვს სრული ოქტეტი, მაშინ რომელიმე ლიგანდიდან იმდენი ელექტრონული წყვილი უნდა გადმოვიტანოთ ცენტრალურ ატომსა და ლიგანდს შორის, რომ შეივსოს ოქტეტი.
 - აქვს ოქტეტი, ფორმულა დასრულებულია.
 - თუ ცენტრალურ ატომს აქვს 8-ზე მეტი ელექტრონი, ფორმულას არც ამ შემთხვევაში სჭირდება მოდიფიცირება.

სავალენტო ელექტრონების ელექტრონული წყვილების განზიდვის (VSEPR) თეორია

როგორც ვნახეთ, ლუისის თეორია გვაძლევს მოლეკულური ფორმულიდან ორგანზომილებიან სტრუქტურულ ფორმულაზე გადასვლის საშუალებას.

ლუისის ორგანზომილებიანი სტრუქტურული ფორმულა გვიჩვენებს ატომთა შეერთების თანმიმდევრობას და ბმების რაოდენობას, თუმცა ვერ გვაჩვენებს ინფორმაციას ნაწილაკის გეომეტრიულ ფორმაზე. ასე მაგ., ცხრილში მოცემულია ტეტრაქლორმეთანის მოლეკულის როგორც ლუისის ფორმულა, ისე სივრცითი აღწერა:

ლუისის ფორმულა	სივრცითი აღწერა
----------------	-----------------



როგორც ვხედავთ, ლუისის ფორმულის მიხედვით ტეტრაქლორმეთანის მოლეკულა არის ორგანოზომილებიანი, სინამდვილეში კი მას აქვს ტეტრაედრის ფორმა.

ლუისის ფორმულის შეუსაბამობამ ნაწილად რეალურ სივრცით აღნაგობასთან განაპირობა ორგანოზომილებიანი სტრუქტურული ფორმულიდან **სამგანოზომილებიანი** სივრცით ფორმაზე გადასვლის აუცილებლობა. ამაში კი გვეხმარება სავალენტო ელექტრონების განზიდვის თეორია, რომელსაც ლიტერატურაში შეხვდებით ინგლისური აბრევიატურით - **VSEPR** თეორია (გამოითქმის ასე: **ვი ეს ი პი არ**). აბრევიატურა სიტყვასიტყვით შემდეგნაირად ითარგმნება:

V alence	სავალენტო
S hell	შრის
E lectron	ელექტრონული
P air	წყვილების
R epulsion	განზიდვის
Theory	თეორია

VSEPR თეორია ერთმანეთთან აკავშირებს ნაწილად ზოგად ფორმულას და გეომეტრიულ ფორმას.

მოლეკულური ფორმულა → ლუისის ფორმულა → ზოგადი ფორმულა → გეომეტრიული ფორმა

ამა თუ იმ ნაწილად **კონკრეტულ** ლუისის ფორმულას შეიძლება შეესაბამებოდეს **AB_m** ან **AB_mE_n** ტიპის **ზოგადი** ფორმულა, სადაც **A** არის ცენტრალური ატომი, **B** - ლიგანდი, **m** - ლიგანდების რაოდენობა, **E** - ცენტრალური ატომის თავისუფალი ელექტრონული წყვილი (ასეთის არსებობის შემთხვევაში), **n** - თავისუფალი ელექტრონული წყვილების რაოდენობა.

აღნიშნული თეორია ძალაშია იმ ნაწილაკებისათვის, რომლებშიც ცენტრალური ატომი არის s და p ბლოკის A ჯგუფის ელემენტები.

VSEPR თეორიის თანახმად, ნაწილაკი იღებს ისეთ გეომეტრიულ ფორმას, რომ მასში შემავალი ცენტრალური ატომის ბმებში მონაწილე და თავისუფალი ელექტრონული წყვილები **მაქსიმალურად** იყვნენ დაცილებული ერთმანეთისაგან, რათა **მინიმუმამდე** იქნას დაყვანილი მათ შორის განზიდვა. მხოლოდ ასეთ შემთხვევაში იქნება მოლეკულა სტაბილური.

ცნობილია ნაწილაკის **5 ძირითადი** გეომეტრიული ფორმა (გამუქებულია ცხრილში) და მათგან წარმოებული ფორმები, რომლებიც თავისუფალ ელექტრონულ წყვილებს შეიცავენ. შეავსეთ ცხრილში მესამე სვეტი:

ზოგადი ფ-ლა	მოლეკულის გეომეტრია	ჰიბრიდიზაციის ტიპი
AB₂	ხაზოვანი	
AB₃	ბრტყელი სამკუთხა	
AB ₂ E	კუთხური	
AB₄	ტეტრაედრული	
AB ₃ E	სამკუთხა პირამიდული	
AB ₂ E ₂	გამრუდებული	
AB₅	სამკუთხა ბიპირამიდული	
AB ₄ E	საქანელასებრი	
AB ₃ E ₂	T-ფორმის	
AB ₂ E ₃	ხაზოვანი	
AB₆	ოქტაედრული	
AB ₅ E	მარტკუთხა პირამიდული	
AB ₄ E ₂	მარტკუთხა ბრტყელი	

ამ ძირითადი ფორმებიდან (ზოგადი ფორმულაა **AB_m**) მიიღება დამატებით სხვა ფორმები, რომლებშიც ცენტრალური ატომი ლიგანდებთან ერთად იკავშირებს თავისუფალ

ელექტრონულ წყვილებსაც (AB_mE_n). მაგ. ტეტრაედრულიდან (AB_4) მიიღება - სამკუთხა პირამიდული (AB_3E) და ამოზნექილი (AB_2E_2).

ახლა კონკრეტულ მაგალითებზე ვნახოთ, თუ როგორ შეიძლება **VSEPR** თეორიით ამა თუ იმ ნაწილაკის გეომეტრიული ფორმის დადგენა.

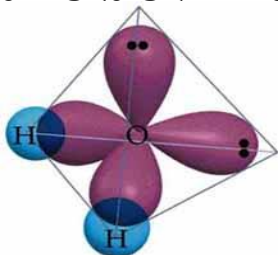
მიდგომა ასეთია: ნაწილაკის ლუისის სტრუქტურული ფორმულიდან გადავდივართ AB_mE_n ტიპის ზოგად ფორმულაზე, რომლის შესაბამის გეომეტრიულ ფორმას ვადგენთ ცხრილიდან.

ამისათვის ჯერ უნდა დავწეროთ მოცემული ნაწილაკისათვის ლუისის სტრუქტურული ფორმულა ზემოთ განხილული წესების დაცვით:

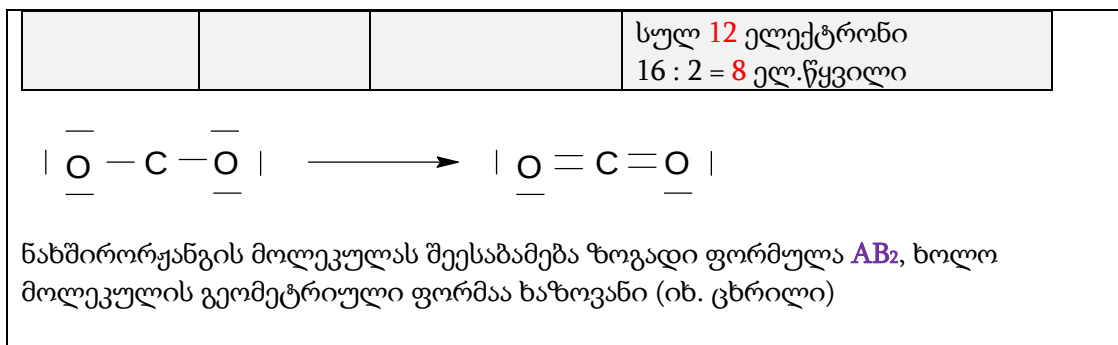
ატომის სიმბოლო	ატომების რ-ბა	სავალენტო ელექტრონების რ-ბა	სავალენტო ელექტრონების ჯამური რ-ბა
H	2	1	$2 \times 1 = 2$
O	1	6	$1 \times 6 = 6$
			სულ 8 ელექტრონი $8 : 2 = 4$ ელ.წყვილი

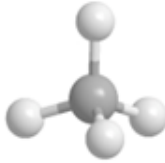
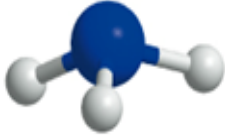
$$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \text{H} - \text{O} - \text{H} \\ \cdot\cdot \end{array}$$

როგორც ვხედავთ, ჟანგბადის ატომს ორი თავისუფალი ელექტრონული წყვილი აქვს, ამიტომ ზოგადი ფორმულა იქნება: AB_2E_2 , ხოლო გეომეტრიული ფორმა - გამრუდებული (იხ. ცხრილი)



ატომის სიმბოლო	ატომების რ-ბა	სავალენტო ელექტრონების რ-ბა	სავალენტო ელექტრონების ჯამური რ-ბა
C	1	4	$1 \times 4 = 4$
O	2	6	$2 \times 6 = 12$



ნივთ-ების სახელწოდება	მოლეკულური ფ-ლა	ზოგადი ფ-ლა	ბურთულდეროვანი მოდელი	ბმის კუთხე
მეთანი	CH ₄	AB ₄		109,5 °
ამიაკი	NH ₃	AB ₃ E		107 °
წყალი	H ₂ O	AB ₂ E ₂		104,5 °

როგორც ცხრილიდან ჩანს, თავისუფალი ელექტრონული წყვილების რიცხვის ზრდა იწვევს ბმის კუთხის შემცირებას. სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, თავისუფალ ელექტრონულ წყვილებს სჭირდებათ უფრო მეტი სივრცე, ვიდრე ბმაში მონაწილე წყვილებს, რის გამოც „ავიწროებენ“ ბმაში მონაწილე ელექტრონულ წყვილებს, რას იწვევს ბმის შემცირებას.

VSEPR მოდელი გამოთქვამს სწორ ვარაუდს არამეტალების ატომების შემცველი ნაწილაკების გეომეტრიულ ფორმაზე.

ყველა მეცნიერულ თეორიასა თუ მოდელს აქვს თავის შესაძლებლობის მაქსიმუმი, ძლიერი და სუსტი მხარეები. ამ მხრივ არც **VSEPR** თეორიაა გამონაკლისი. ეს თეორია, თუმცა, სწორად ვარაუდობს/საზღვრავს ნაწილაკის გეომეტრიულ ფორმას, მაგრამ ვერ ხსნის ამ ფორმის წარმომავლობას, თუ როგორ წარმოიქმნება ეს ფორმა, ასევე მოლეკულის მაგნიტურ და სპექტრულ თვისებებს.

მოლეკულური ფორმულა → ლუისის სტრუქტურული ფორმულა (ორგანოზომილეზიანი)
→ VSEPR თეორია - ორგანოზომილეზიანი სტრუქტურიდან გადასვლა
სამგანოზომილეზიანზე; განსაზღვრავს ნაწილაკის გეომეტრიულ ფორმას, მაგრამ ვერ ხსნის
ამ ფორმის წარმომავლობას → უშუალოდ ნაწილაკის გეომეტრიულ ფორმაზე
პასუხისმგებელია ორი თეორია - 1) ვალენტური ზემების (ვზ) და 2) მოლეკულური
ორბიტალების (მო).

ორივე თეორიისათვის საკვანძო ტერმინია „ორბიტალი“. რა განსხვავებაა „ორბიტასა“ და
„ორბიტალს“ შორის? ორბიტა არის ელექტრონის მოძრაობის ტრაექტორია, ხოლო
ორბიტალი სამცვლადიანი მათემატიკური ფუნქციაა, რომელიც განსაზღვრავს ელექტრონის
ადგილმდებარეობას/ ყოფნის ალბათობას ატომში.

წარმოდგენილი მასალის განხილვის შემდეგ და მისი გამოყენებით შეასრულეთ სამუშაო
ფურცელში [გადადით ბმულზე მოცემული აქტივობა](#).