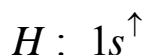
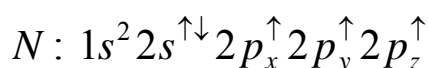


Mühazirə 6. KİMYƏVİ RABİTƏLƏRİN İSTİQAMƏTLƏNMƏSİ.

NH_3 VƏ H_2O MOLEKULLARI

H molekulu üçün Şredinger tənliyini həll etməklə Qaytler və London kovalent rabitənin təbiətini izah etdilər. Sonralar bu üsul çoxatomlu molekullar üçün ümumiləşdirilir və valent rabitələri metodu adlandırılır. Bu metoddan istifadə etməklə molekullarda kimyəvi rabitənin hansı istiqamətdə yaranmasını izah etmək olur. Başqa sözlə desək valent rabitələri metodu vasitəsilə molekulların fəza quruluşunu izah etmək olar. NH_3 molekuluna baxaq:



Yuxarıdakı konfigurasiyaya uyğun olaraq N atomu üç H -lə üç kovalent rabitə yaradır. $2s$ -dəki bölünməz cüt isə rabitənin yaranmasında iştirak etmir. Bu rabitələrin dalğa funksiyaları aşağıdakı kimi olacaqdır:

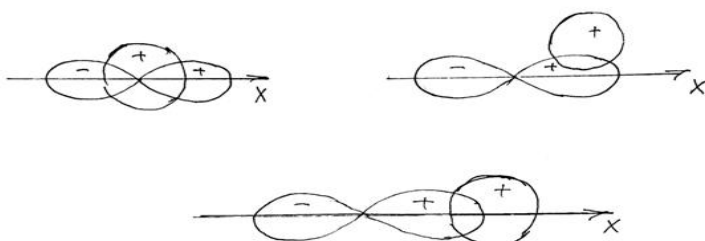
$$\psi_1 = \psi_{2p_x}(1)\psi_{1s}(2) + \psi_{2p_x}(2)\psi_{1s}(1)$$

$$\psi_2 = \psi_{2p_y}(3)\psi_{1s}(4) + \psi_{2p_y}(4)\psi_{1s}(3)$$

$$\psi_3 = \psi_{2p_z}(5)\psi_{1s}(6) + \psi_{2p_z}(6)\psi_{1s}(5)$$

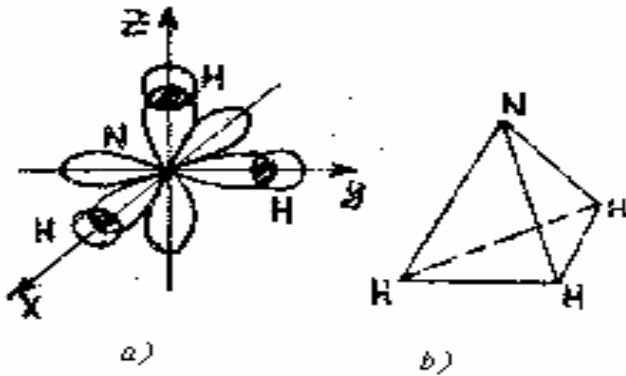
Bu rabitələrdən hər hansı birinin, məs: N -un $2p_x$ ilə H -in $1s$ -i arasındakı rabitənin hansı istiqamətdə yarana biləcəyini müəyyən edək.

Müəyyən edilmişdir ki, kimyəvi rabitələr elə istiqamətlərdə yaranır ki, həmin istiqamətdə elektron buludlarının bir-birini örtməsi maksimum olsun. Bu prinsipə maksimal örtmə prinsipi deyilir. $2p_x$ orbitalı ilə $1s$ orbitalının bir-birini örtməsinin aşağıdakı üç variantına baxaq:



Şəkil

Bu şəkillərdə S ilə elektron buludlarının bir-birini örtməsini xarakterizə edən örtmə inteqralları işarə edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, örtmə inteqralları böyük olduqda kimyəvi rabitə möhkəm olur. Şəkillərdən görüldüyü kimi 3-cü halda örtmə inteqralı ən böyük qiymət alır. Deməli, N -un $2p_x$ orbitalı ilə H -in $1s$ orbitalı arasında rabitə x oxunun «+» istiqamətdə yaranmalıdır. Eyni qayda ilə 2 və 3-cü rəbitələrin y və z oxlarının «+» istiqamətdə yarana biləcəyini söyləmək olar. Beləliklə, valent rəbitələri metoduna əsasən NH_3 molekulunun fəza quruluşu aşağıdakı kimi olmuşdur: N koordinat başlanğıcında yerləşir. H isə koordinat başlanğıcından bərabər məsafədə olmaqla x, y və z oxlarının «+» istiqamətində yerləşməlidir. Başqa sözlə desək, NH_3 molekulu piramida formasında olur. Piramidanın təpə nöqtəsində N , oturmaq təpələrində isə H atomları yerləşir.



Şəkil VR metoduna görə NH_3 molekulunun fəza quruluşu.

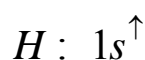
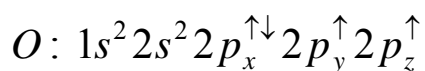
Şəkildən görüldüyü kimi NH_3 molekulunda rəbitə bucağının qiyməti 90° -dir. Təcrübədən isə bu bucağın $107,3^\circ$ olması məlumdur. Görüldüyü kimi valent bucağının nəzəri və təcrübi qiymətləri arasında kəskin fərq vardır. Bu fərqi yaranma səbəbləri valent rəbitələri metodunda aşağıdakı faktların nəzərə alınmaması ilə əlaqədardır:

1. $N - H$ rəbitələri polyardır. N -un elektromənfilii H -dən çox olduğundan rəbitənin elektron buludu N -a doğru sürüşür, nəticədə H «+» effektiv yükə malik olurlar. Yəni, protonlaşırlar, «+» effektiv yüklü H atomları arasında Kulon itələnməsi rəbitə bucağının qiymətini artırır.

2. $N - H$ rəbitələrini yaradan elektronların spinləri bir-birilə antiparaleldirlər.

Hər 3 kovalent rabitənin elektron cütü şəkildə təsvir olunduğu kimi bir-biri ilə paraleldirlər. Paralel spinli elektronlar arasında əlavə itələnmə yaranır, bu da rabitə bucağının qiymətini artırır. Müəyyən edilmişdir ki, oxşar strukturlu PH_3 , AsH_3 , SbH_3 molekullarında rabitə bucağının nəzəri və təcrübi qiymətləri arasında fərq NH_3 -dən azdır. $93,3^\circ$, $91,8^\circ$, $91,3^\circ$. Bu onunla əlaqədardır ki, qeyd olunan molekullarda atomların elektromənfilikləri bir-birindən kəskin fərqlənmir.

İndi də su molekulunun fəza quruluşuna baxaq:

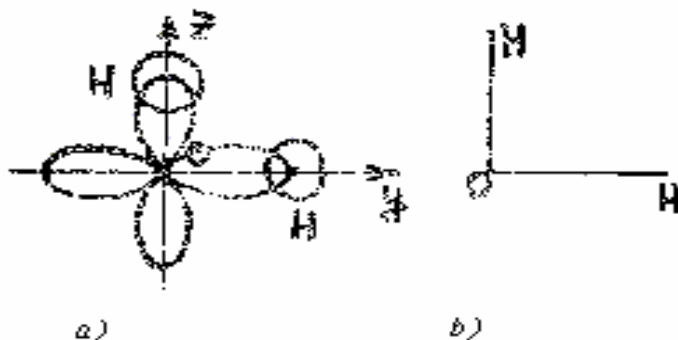


Bu konfigurasiyaya uyğun olaraq, O iki H atomu ilə iki kovalent rabitə yarada bilər. Bu rabitələrin dalğa funksiyaları aşağıdakı kimi olar:

$$\psi_1 = \psi_{2p_y}(1)\psi_{1s}(2) + \psi_{2p_y}(2)\psi_{1s}(1)$$

$$\psi_2 = \psi_{2p_z}(3)\psi_{1s}(4) + \psi_{2p_z}(4)\psi_{1s}(3)$$

Maksimum örtmə prinsipinə əsasən su molekulunda kovalent rabitələr y və z oxlarının «+» istiqamətində yaranmalıdır.



Şəkil VR metoduna görə H_2O molekulunun fəza quruluşu

Bu halda da rabitə bucağının nəzəri qiyməti 90° -dir. Təcrübədən isə su molekulunda rabitə bucağının $104,5^\circ$ olduğu məlumdur. Bu fərqi yaranma səbəbləri NH_3 molekulunda olduğu kimidir.

Müəyyən edilmişdir ki, oxşar strukturlu H_2S və H_2Cl molekullarında rabitə bucağının qiyməti 92° və 90° -dir. Bu da həmin molekullarda atomların elektromənfiliklərinin bir-birinə yaxın olması ilə əlaqədardır.