BAKI UNİVERSİTETİNİN XƏBƏRLƏRİ
№2 Təbiət elmləri seriyası 2008

MÜASİR KİMYANIN TƏŞƏKKÜL XÜSUSİYYƏTLƏRİ

A.M.MƏHƏRRƏMOV, K.N.HAQVERDİYEV
Bakı Dövlət Universiteti
kamilhaqverdiyev@yahoo.com

Məqalədə kimya və kimya elminin tarixi inkişafının metodoloji məsələləri öyrənilmişdir. Kimya üzrə materialların sistemləşdirilməsinə başqa elmlərin nailiyyətlərinin (biologiya, mineralogiya, fizika və s.) təsiri təyin edilmişdir.

Kimya nədir? Kimya nəyi öyrədir? Bu suala həmişə zaman-zaman cavab tapmağa çalışanlar: kimyaçılar, müəllimlər, tədqiqatçılar, kimya elminin tərifini indiyə qədər belə formada vermişlər-kimya maddələr və bu maddələr arasındakı qarşılıqlı çevrilmələri öyrənən elmə deyilir. Əslində bu tərifin düzgün olmadığını müasir elmin maddiliyini cihazlar vasitəsilə təyin ediləndə müəyyən oldu. Biz maddə adlandırdığımız maddi varlıqda plazma halı təyin olunub, ona görə də kimya, ümumiyyətlə, atom molekul sistemlərini öyrənir. Bütün bu deyilənləri nəzərə alaraq, kimya elminə aşağıdakı tərifi vermək olar:

Atom–molekulyar sistemləri (AMS) öyrənməyə yönəldilmiş nəzəri konsepsiyalara, nəzəriyyələrə, metodlara malik elmi biliklər sisteminə kimya deyilir. AMS-də əsas məsələ «quruluşdur».

1. Müasir kimyanın əsasını atom-molekulyar sistemin konsepsiyası, quruluş konsepsiyası, quruluş və elektron təsəvvürləri təşkil edir.
2. Kimya klassik və kvant mexanikasının, mürəkkəb fiziki metodların, riyazi və kompüter sistemlərinin geniş tətbiqini təşkil edir.
3. Nəzəri kimyanın öyrənilməsi əsasən kompüter modelləşməsi və kompüter təcrübələri ilə yerinə yetirilir, displeydə kimya və kağız üzərində kimya.
4. Kimyəvi elmi biliklərin öyrənilməsində, biokimya və ekoloji kimya üstünlük təşkil edir.

Kimyada kompüter modelləşməsinə xüsusi yer verilir.

I.1. Molekulun spektrinin quruluşu və atom-molekulyar sistemlərin kvant mexanikasının» və molekulyar spekroskopiya metodları ilə öyrənilməsi.
2. Potensial səthlərin qurulması.
3.«Molekulyar mexaniki» metodlar əsasında hesablamalarin aparılması.

II. 1. Molekulyar dinamika.
2. Monte-Karlo metodu – məhlulların, mayelərin, bərk cisimlərin quruluşu, şərh hadisələri, absorbsiya.
3. Kimyəvi reaksiyaların modelləşdirilməsi, kimyəvi tarazlıq makroginetik proseslər.

III. Quruluş və xassələrin korelyasiyalarının təyin edilməsi, eksperimentin planlaşdırılması materialşünaslığın

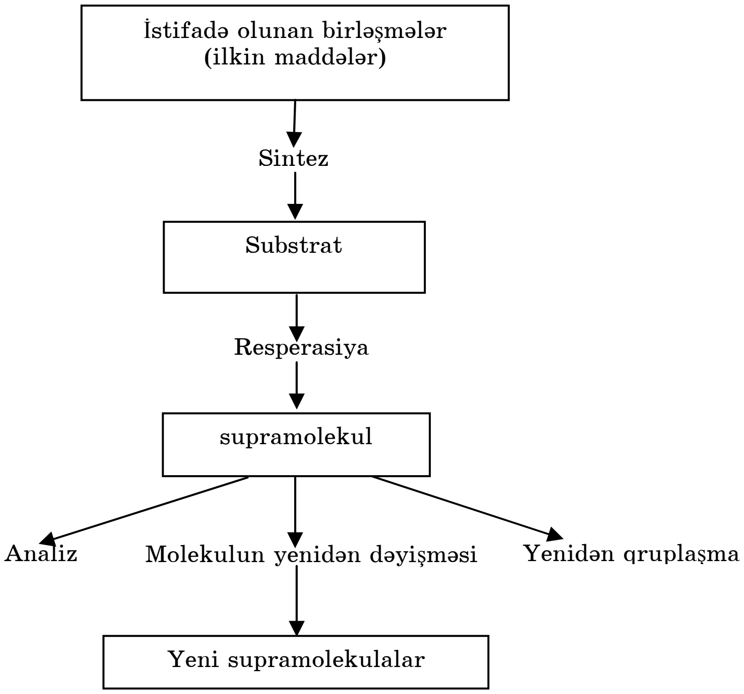
problemləri və s.

Müasir кimyanın inкişaf etdirilməsində supramoleкulyar кimyanın böyüк əhəmiyyəti vardır. Supramoleкulyar кimyanın əsasını Fransalı alim Jan-Mari Len qoymuşdur. O, Supramoleкulyar кimya sahəsində apardığı tədqiqatlara görə 1987-ci ildə (Pederson və C.C.Kramla birliкdə) Nobel müкafatı ilə təltif edilmişlər.

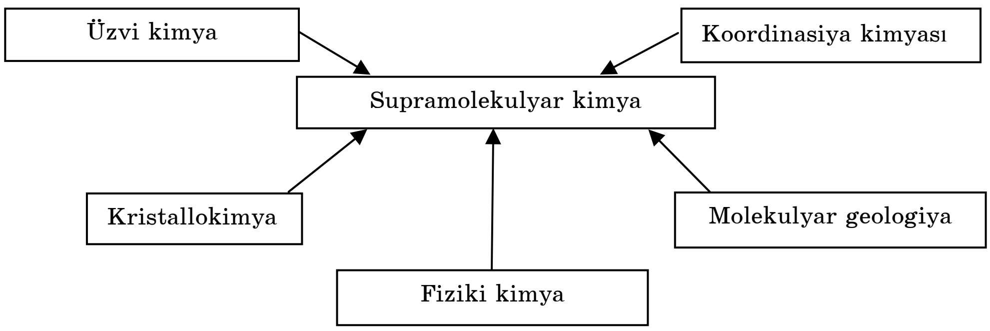
Supramoleкulyar кimya – moleкulun sərhədindən кənarda olan, moleкullararası qüvvə ilə bir-birini saxlaya bilən iкi və ya daha çox toplanmış кimyəvi zərrəciкlərin quruluşunu və funкsiyasını öyrənən кimyanın yeni sahəsidir.

Moleкulyar кimyadan supramoleкulyar кimyaya doğru sxem

Moleкulyar кimyadan supramoleкulyar кimyaya doğru



Supramoleкulyar кimyanın başlanğıcı



Supramolekulyar kimyanın inkişaf mərhələləri:

1. Ç. Pedersen 1963-cü ildə Kraun efiri kəşf etdi.
2. Ç.Pedersen 1967-ci ildə Kraun efirləri sintez edərək öyrənməyə nail oldu.
3. Jan-Mari Len 1968-ci ildə Kriptandları sintez etdi.
4. Jan-Mari Len 1973-cü ildə «supramolekula» termininin meydana gəlməsi.
5. Jan-Mari Len 1978-ci ildə «Supramolekulyar kimya» və onun əsas anlayışlarına giriş haqqında terminlər.
6. Oqni Oxota 1981-ci ildə Tsiklodekstrinlərdən istifadə etməklə rotaksanların sintezi.
7. C.S.Kram 1983-cü ildə sferandların və kavitandların sintezi
8. Jan-Mari Len «Özünütikmə», «Özünütəşkil» anlayışları haqqında giriş.
9. Jan-Mari Len.
10. S.Pedersen.
11. C.S.Kram - 1987-ci ildə kimya elmində qazandıqları nailiyyətlərinə görə Nobel mükafatı aldılar.
12. C.Stoddart 1992-ci ildə Tsiklodekstrinlərdən istifadə etməklə katenanları aldı.

Yuxarıda göstərilənləri nəzərə alsaq, qeyd etmək lazımdır ki, Materiyanın hər bir obyekti – istər ulduzlar aləmi, günəş sistemi, su damlası, atom və ya elementar hissəciklər, sonsuz sayda xassələrə malik olmaqla, onu əhatə edən təbiətlə qarşılıqlı əlaqədədir. Hər bir maddi obyekt tükənən deyil. Ona görə ki, yenisi əmələ gəlir. Tarixi sərhəd daxilində insan şüurunun gələcəkdə olan perspektivi hüdudsuzdur. İnsan qarşılaşdığı tədqiqat obyektlini dərhal axıra qədər dərk edə bilmir. Ayrılıqda fəaliyyət göstərən elm üçün obyekti qavramaq problemə çevrilir. Yalnız elmi şüurun birgə fəaliyyəti nəticəsində ümumi elmi bilikləri eyni istiqamətə yönəldikdə, elmi öyrənmək vasitələrinin imkanlarından düzgün istifadə edə bildikdə müəyyən nəticələr əldə etmək imkanı yaranır.

Məlum olduğu kimi müxtəlif növə və formaya malik olan bütün maddi varlıq qarşılıqlı əlaqədə və həmişə hər yerdə hərəkətdədir. Elmdə eksperimental metodun qərarlaşması uzun sürən mürəkkəb proses olmuşdur. İnsan onu əhatə edən aləmi öyrənmək üçün eksperimentdən lap qədim zamanlardan istifadə etməyə başlamışdır. İlk əvvəllər, təbiət hadisələrinin yalnız empirik müşahidəsi ilə kifayətlənən insan, daha sonralar toplanmış təcrübə və biliklər əsasında hadisələri öyrənirdilər. Eksperimenti elə qurmaq tələb olunur ki, öyrənilən obyekti daha da asan tədqiq etmək halına gətirmək olsun.

Kimyəvi obyektin öyrənilməsi zamanı əvvəlcə onun mühitlə əlaqəsini kəsmək ya da əlaqədə tədqiq edilməlidir. Bunların həyata keçirilməsi o qədər də asan deyildir. Materiyanın hərəkətdə olmasını müasir elm dəfələrlə isbat edərək göstərir ki, hərəkət materiyasız-materiya hərəkətsiz ola bilməz. Materiyanın aşağıdakı hərəkət formaları vardır: mexaniki, kimyəvi, istilik, elektromaqnit və başqaları. Göstərilən hərəkət formaları hər bir obyekt üçün ayrı-ayrı olur. Mexaniki hərəkət formaları elementar zərrəciklərdən tutmuş ulduzlara qədər aid edilir. Materiyanı təşkil edən obyektlərin tədqiqi zamanı göstərilən hərəkət formasını bilmək vacib olmaqla onları müşahidə etməyin forma və metodlarının təyin

edilməsi əsas şərtlərdən biridir. Müasir elm predmeti təyin edilərkən yalnız tədqiq edilən obyektin xassələri deyil, eyni zamanda obyektlərin arasında olan qarşılıqlı hərəkət formaları nəzərə alınır. Məsələn, elektronun nüvə ətrafında fırlanma hərəkəti tədqiq ediləndə elektronun nüvə ilə arasındakı məsafədən asılı olaraq, onun fırlanma momenti artar və azalar (məsafə yaxın olduqca fırlanma zəifləyir, uzaq olduqda fırlanmanın sürəti artır). Belə əks asılılıqları müşahidə etmək üçün cihazlardan istifadə edilir.

Molekulların dağılması və əmələ gəlməsi prosesində materiyanın kimyəvi hərəkət formaları iştirak edir. Molekulların əmələgəlmə və dağılması prosesləri zamanı bir-birinin əksi olan ziddiyyətlər yaranır. Belə fikirləşmək düzgün olmaz ki, kimyəvi hərəkətlərin daşıyıcıları yalnız molekullardır. Kimyəvi proseslər materiyanın bütün növlərində baş verir: Molekullarda, atomlarda, elektronlarda elektromaqnit şüalanmasında və s. Bu proseslərdə molekul əsas rol oynayır. Molekul və atom olan yerdə kimyəvi hərəkət olmaya bilər. Kimyəvi hərəkətin baş vermə şəraiti yaranmadıqda, yəni reaksiyanın getməsi üçün vacib şərtlər ödəməyəndə kimyəvi hərəkət baş verə bilməz. Məsələn, sadə bir kimyəvi reaksiyanın: hidrogenlə xlorun birləşməsi üçün adi səpələnmiş günəş işığının olması əsas şərtdir. Qaranlıq mühitdə reaksiya getmir. Bu reaksiyanın mexanizminin öyrənilməsi onu göstərir ki, mütləq xlor molekulu h√ miqdarda enerji udmalıdır. Bu halda kimyəvi hərəkətin baş verməsinə səbəb xlorun enerji udaraq, atomar hala keçməsidir.

$$Cl_2+h\surd \leftrightarrow Cl+Cl$$

Xlor atomu hidrogen molekulu ilə toqquşması nəticəsində hidrogenin bir atomu ilə birləşir, atomunun biri sərbəst ayrılır:

$$Cl+H_2 \leftrightarrow HCl+H$$

Ayrılan sərbəst hidrogen atomu xlor molekulu ilə birləşir, bu zaman HCl molekulu və Cl atomu əmələ gəlir:

$$H+Cl_2 \leftrightarrow HCl+Cl$$

Xlorun yeni atomu yenidən hidrogen molekulu ilə qarşılıqlı təsirdə yenə H atomu və HCl əmələ gəlir. Beləliklə, zəncirvarı reaksiya baş verir: burada zəncirin qırılma ehtimalı

$$H+H \rightarrow H_2$$
$$Cl+Cl \rightarrow Cl_2$$
$$Cl+H \rightarrow HCl$$

HCl-un əmələ gəlməsi reaksiyanın energetik cəhətdən davamlı olmasını təmin edir. Ancaq yadda saxlamaq lazımdır ki, prosesdə xlor molekulu yeni porsiya hy enerji udaraq, yenidən zəncirin əmələ gəlməsini sürətləndirir. Beləliklə, biz göstərilən sadə reaksiya nümunəsində dialektikanın əksikliklərin vəhdəti və mübarizəsi qanununun şahidi oluruq. Deməli, kimyəvi hərəkətin baş verməsi dialektik qanuna tabe olur. Bu zərrəciklər bir-birinə əks olur, ancaq antaqonist olmur. Cəmiyyətdə antaqonist münasibət iki düşmən qüvvənin bir-biri ilə mübarizə formasına aiddir. Kimyəvi hərəkət formasının alınması üçün xlor molekulunun hy-enerjiyə malik olan işıq enerjisini udmalı və H_2 molekulu ilə toqquşmalıdır. Əgər xlor atomu hy enerjisini udmazsa H_2 ilə reaksiyaya girə bilmir, deməli, əsas məsələ şəraitin yaradılmasıdır.

Son zamanlar müəyyən edilmişdir ki, kimyəvi elementlərin reaksiyaya girmə qabiliyyəti onların xarici təbəqədə yerləşən elektronların hərəkətindən, sayından və nüvədən olan məsafəsindən, atom radiusundan asılıdır. Molekulyar fizika molekullar arasındakı fəal toqquşmanın sayını öyrənməklə kimyəvi hərəkətin baş vermə mümkünlüyünü təyin edə bilir. Kimyəvi prosesdə əgər bir neçə molekul iştirak edirsə reaksiyanın getməsi temperatur və təzyiqdən asılı olur.

Lakin elə proseslər vardır ki, həmin proseslərin baş verməsi üçün temperatur və təzyiqin heç bir təsiri yoxdur. Məsələn, radioaktiv proseslərə yalnız milyondan yuxarı temperatur təsir edə bilir. Belə bir temperaturun alınması adi proseslərdə mümkün deyil. Kimyada baş verən termokimyəvi prosesləri termodinamikanın bazasında öyrənirlər. Buradan belə nəticəyə gəlmək olur, kimyəvi proseslər fizikanın qanunları əsasında öyrənilir. Atom və molekulların həm dağılması, həm yenisinin əmələ gəlməsində, həm fiziki, həm də kimyəvi üsullar tətbiq etməklə araşdırılır. Elmi biliklərin həqiqətə yaxın olanı o zaman araşdırıla bilir ki, elmlər bir-birinə inteqrasiya etmiş olsun.

Kvant mexanikasının təşəkkülü dövründə fizikada yaranmış metodoloji çətinlik materialist dialektikanın köməyi ilə aradan qaldırıldı. Elektron bəzi təcrübələrdə özünü zərrəcik kimi, digərində isə özünü dalğa kimi aparırdı. Məntiqi idrakın gücü ilə dialektikanın köməyi ilə müəyyən oldu ki, elektronun həm yükü, həm də kütləsi var.

Elmi idrakda fikri eksperimentin rolu böyükdür. İxtiyari fikri eksperimentin təhlili göstərir ki, o irəli sürülmüş prinsip və fərziyyələri izah edə bilir. Fikri eksperimentdən müasir fizikada da geniş istifadə olunur. A.Eynşteyn nisbilik nəzəriyyəsinin başlıca prinsiplərini əsaslandırmaq və onları izah etmək məqsədilə fikri eksperimentdən geniş istifadə etmişdir. V.Heyzenberq isə kvant təsəvvürləri əsasında formulə etdiyi «Qeyri-müəyyənlik münasibəti»ni əsaslandırmaq və izah etmək üçün elektronun vəziyyət və sürətinin fikrən ölçülməsindən istifadə etmişdir. Biz son illərin ədəbiyyatlarında «fikri eksperiment» termininə tez-tez rast gəlirik. Müasir sinergetikada fikri eksperimentə ideallaşdırılmış obyektlərlə əməliyyat aparmağa imkan verən metod kimi, fikri məsələləri həll etməyin üsulu kimi, bəzən nəzəri mülahizə kimi tərəflərinə rast gəlmək olur.

Kimyəvi hərəkət və fiziki hərəkət formalarının birgə tədqiqati dialektikanın qanunlarına tabe olan intensiv inkişafın təzahürüdür. Hərəkət yoxdursa, materiya da yoxdur, materiyanın varlığı hərəkəti nümayiş etdirmək imkanı yaradır. Bu gün bizə məlum olan hadisələrin öyrənilən tərəfindən çox öyrənilməyən hissəsinin üzərində onları aşkarlamağa çalışan elmlər toplusu məşğuldur.

Bu elmlərin mərkəzində kimya və fizikanın üsul, metod və metodologiyaları aparıcı rol oynayır.

Buradan belə nəticəyə gəlmək olur ki, təbiətin bir-birilə qarşılıqlı əlaqədə qərarlaşan bizə məlum olmayan sirlərini yalnız dialektikanın qanunlarını özündə əksetdirən təbiət elmlərinin metodologiyası ilə düzgün araşdırmaq mümkündür.

ƏDƏBİYYAT

1. Добротин Н.М.Диалектика и проблема развития химической формы движения материи. В книге «Материалистическая диалектика» М.: Т. 3, 1983г., с 17, 360 с.

2. Жданов Ю.А. Материалистическая диалектика и проблема химической эволюции. В книге «Проблема развития в современных науках» М.: 1983, с 16-17, 320 с.
3. Макареня А.А., Обухов В.Л. Методология химии. М.: 1985, с 12, 160 с.
4. Ə.V.Məmmədov. Dialektik idrak və ümum elmi tədqiqat metodları. Bakı, A.D.N. 1997, s. 11-12, 286 s.
5. Бутин К.П. Механизмы органических реакций: достижения и перспективы // Российский химический журнал. 2001, том X, сер 2, , № 2, с 20-21.
6. Саркисов О.М., Уманский С.Я. Фемтохимия // Успехи химии, т 7, № 6, 2001с. 515-538.
7. Шепелев И.И., Твердохлебов В.П. Электровзрывная обработка водных пульп и эмульсий // Химическая технология, № 2, 2001, с. 2-18.
8. Благутина В.В. Химия одиночных молекул. // Химия и жизнь, № 9, 2004, с. 14-19.
9. Ивановский А.Л. Фуллерены и нанотрубки. // Химия и жизнь, № 8, 2004, с. 20-25.
10. Бугаченко А.Л. Спиновая химия.// Химия и жизнь, № 3, 2004, с. 8-13.

ОСНОВНЫЕ ЧЕРТЫ СТАНОВЛЕНИЯ СОВРЕМЕННОЙ ХИМИИ

А.М.МАГЕРРАМОВ, К.Н.АХВЕРДИЕВ

РЕЗЮМЕ

Изучены этапы выделения химии как самостоятельной науки, прошедшее на базе атомно-молекулярной теории. Особенности связаны с развитием химических теорий. Расширением эксперимента в области органической химии, где молекулярная теория нашла великолепное поле применения. Определены этапы развития от молекулярной к супрамолекулярной химии.

THE BASIC FEATURES OF BECOMING OF MODERN CHEMISTRY

A.M.MAHARRAMOV, K.N.HAGVERDIYEV

SUMMARY

Allocation of chemistry as the independent science, past is investigated stages on the basis of the atom-molecular theory. Features it is connected to development of chemical theories. Expansion of experiment in the field of organic chemistry where the molecular theory has found a magnificent field of application. Stages development from molecular to supramoleculuary chemistry are determined.