

MÖVZU 3 KİMYƏVİ ƏLAQƏ

Kimyəvi əlaqə o zaman yaranır ki, atomlar yaxınlaşdıqda sistemin tam enerjisi azalır. Atomlar yaxınlaşdıqda iki tip elektrostatik qüvvələr yaranır: bir atomun nüvəsi ilə digər atomun elektronu arasında cazibə və itələmə qüvvələri (müxtəlif atomların nüvələri və elektronları arasında). Əvvəlcə cazibə qüvvəsi üstün olur, sonra isə itələmə qüvvəsi (şəkil 30 a, b.). bu zaman potensial enerjinin minimum qiymətində sistem davamlı olur. Məsələn, hidrogen atomlarının nüvələri arasında məsafə (əlaqənin uzunluğu) 0.074 nm olduqda H əmələ gəlir. Sərbəst hidrogen atomlarının radiusları cəmi isə 0.106 nm-dir. H₂ molekulunun əmələ gəlməsi atom elektron buludlarının örtülməsi nəticəsində molekulyar buludun əmələ gəlməsilə izah edilir. Başqa sözlə, elektron buludunun nüvələri arasında yerləşməsi ehtimalı daha çoxdur.

Elektron buludlarının ümumiləşməsi hesabına yaranan əlaqəyə kovalent əlaqə deyilir. Kvant mexanikasına görə, əlaqə spinləri əks olan elektronlu sistemdə yaranır, paralel spinli elektronların arasında ancaq itələmə qüvvəsi təsir etdiyindən molekula əmələ gəlmir (şəkil 30b-də n-əyrisi).

Şredinger tənliyini dəqiq həlli atom-molekulyar sistem üçün mümkün olmadığından dalğa funksiyasını hesablamaq üçün (yəni elektron sıxlığının paylanmasını hesablamaq üçün) müxtəlif üsullar meydana çıxdı. Bunlardan ən çox yayılanı: 1. Valent əlaqə üsulu (Heytler və London 1927, Sleter və Polinq); 2. Molekulyar orbital üsuludur (Malliken və Hund).

İon əlaqəsi – 1916-cı ildə V.Kossel (alman) ion əlaqəsinin əsasını vermiş və hal-hazırda da o öz qüvvəsində qalır. İon əlaqəsinin yaranması üçün bir atom asanlıqla valent elektronlarını verərək müsbət yüklənməli, digəri isə onları asanlıqla qəbul etməklə mənfi iona çevrilir. Əmələ gəlmiş əks ionlar Kulon elektrostatik cazibə qüvvəsinin təsiri ilə birləşərək ion birləşməsini yaradıblar. Yüklü hissəciklərin elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisi $E = \pm \frac{e^2}{R}$ ifadəsi ilə xarakterizə olunur: e – elementar yükün qiyməti, r –

hissəciklərin arasındakı məsafə, + və – cazibə və itələmənin işarəsidir. İon əlaqəsi zamanı əmələ gələn ionlar bütün hallarda elementin yerləşdiyi dövrdəki nəcib qaz konfigurasiyasını alır.

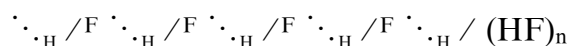
İon əlaqəsi elektrostatik təbiətli olduğundan və istiqamətlənmədiyi üçün fəza vəziyyətlərindən asılı olmayaraq əks yüklü ionlar bir-birini cəzb edir. əmələ gələn bərk ion birləşməsinin quruluşunu ionların sayı, ion radiuslarının nisbəti və s. həndəsi amillərə müəyyənləşir.

İon əlaqəsi elektrona hərisliyi olan (məsələn, qələvi və qələvi-torpaq metalları) və ən çox elektrona həris element atomları (məsələn, halogenlər) arasında yaranaraq çox məhdud miqdarda molekulara aiddir.

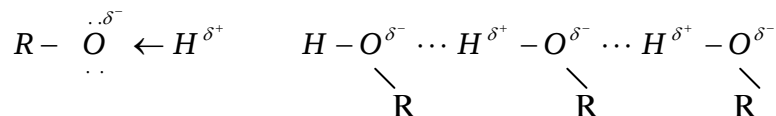
Kovalent əlaqə. Kovalent əlaqə 1916-cı ildə amerika kimyaçısı Lyuis tərəfindən irəli sürmüş, bu nəzəriyyə H. Sicvik tərəfindən inkişaf etdirilmiş və xüsusilə kompleks birləşmələrə tətbiq edilmiş, ona görə də C.Lyuis-Sicdvik nəzəriyyəsi adlanır. Bu geniş yayılan əlaqə növüdür. Atomlar arasında ümumi (ortaq) elektron buludları yaranması ilə əmələ gələn əlaqəyə kovalent əlaqə deyilir. «Ko» söz önlüyü «birlikdə iştirak» mənasını verir. İon əlaqəsində olduğu kimi molekulda iştirak edən atomlar nəcib qazların elektron quruluşunu alırlar. Məsələn, əks spinli hidrogen atomlarını elektrostatik cazibə qüvvəsi bir-birinə yaxınlaşdırır və hər iki atomun elektronlarının onların nüvələrarası sahəsində yerləşməsi enerji cəhətdən əlverişli olur (şəkil 30b).

Kovalent əlaqənin doyarlılığı -Valentlik ümumi halda elementin kimyəvi əlaqə yaranarkən istifadə etdiyi orbitalların sayı ilə müəyyən edilir.

2-ci dövrün elementləri s və p orbitallarından istifadə edərək maksimum 4 valentlik, 3-cü və sonrakı dövrlərin elementləri isə s, p və d orbitallarından istifadə edir və keçid



Karbohidrogenlərə nisbətən spirtlərin daha yüksək qaynama nöqtəsi olması da hidrogen əlaqəsi ilə izah olunur. Spirt molekulunda elektron sıxlığının paylanma xarakteri belə göstərilə bilər:

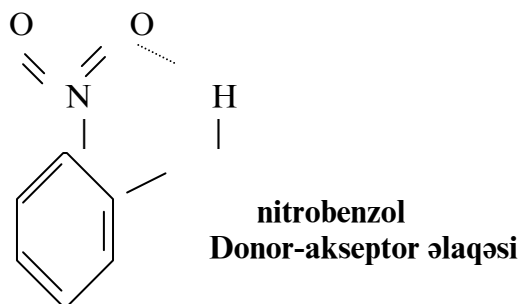


Hidrogen əlaqəsi 8-40 kCmol-dur, bu donor-akseptor əlaqəsindən çox kovalent əlaqədən (150-400 kC/mol) isə bir tərtib aşağıdır.

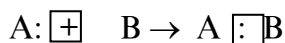
Bu misallar molekullar arası H əlaqəsinə aiddir. Lakin molekul daxildi də H əlaqəsi mövcuddur, məsələn: Eyni və ya müxtəlif molekullara daxil olan hidrogen atomu iki atomla eyni vaxtda birləşə bilər. $RA - H^{\delta+} \cdots B^{\delta-} R_1$

A atomu ilə hidrogen kovalent əlaqə ilə, B isə hidrogen əlaqəsi ilə birləşmişdir.

Hidrogen əlaqəsi əmələ gətirən proton ümumi halda $A - H \cdots B$ (A və B) atomları arasında qeyri simmetrik yerləşir. Molekullararası hidrogen əlaqəsindən başqa molekul daxili hidrogen rabitəsinə də rast gəlinir. Məs: Salisil aldehidi və nitrobenzol molekulunda.



Bir atomun iki elektronlu buludu ilə başqa atomun boş orbitalı arasında qarşılıqlı təsir qüvvələrinin əmələ gəlməsi mexanizminə donor-akseptor əlaqə deyilir. Bu sxematik belə göstərilə bilər:

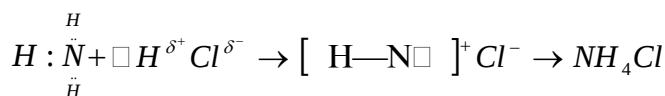
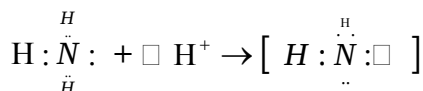


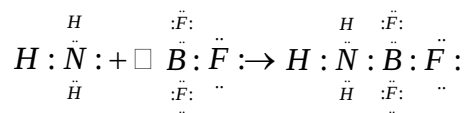
Bu əlaqə növü 1893-cü ildə kompleks birləşmələrin koordinasiya nəzəriyyəsini yaratmış A. Verner tərəfindən təklif edilmişdir.

Donor-akseptor əlaqəsi uyğun atomlarda «+» və «-» işarəsilə qeyd edilir.

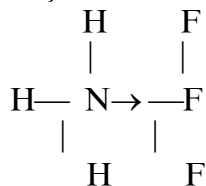
Məs: $\bar{C} \equiv \overset{+}{O}$ və yaxud elektron cütünü hansı atom verirsə, ondan boş orbitalı olan atom istiqamətində ox qoyulur. $C \equiv O$ (ox elektron buludunun sürüşmə istiqamətini göstərir). Donor-akseptor əlaqəsinin əmələ gəlməsini bir neçə ion və molekulun əmələ gəlməsində nəzərdən keçirək.

Donor-akseptor əlaqəsinin yaranmasını NH_4^+ ionunun və ya NH_4Cl əmələ gəlmə sxemində asan təsəvvür etmək olar:





Əmələ gələn birləşmədə N və B dörd valentli olur.



Donor-akseptor əlaqəsi özünü H_2SO_4 və H_3PO_4 molekullarında göstərir.

Kükürd və fosfor atomları azot atomundan fərqli olaraq xarici elektron səviyyəsində boş d-orbitalına malikdirlər və oksigenin istifadə olunmamış elektron cütləri ilə dolur. Bu baxımdan fosfat və sulfat turşusunun qrafiki quruluşunu aşağıdakı kimi göstərmək daha əlverişlidir.

Bütün kompleks birləşmələrdə donor-akseptor əlaqəsi mövcuddur.

Donor-akseptor əlaqəsi zamanı molekullar arasında qarşılıqlı təsirin enerjisi geniş intervalda $6 \div 12$ kC/mol dan 200 kC/mol dəyişir (yəni Van-der-Vaals qüvvələrindən adi atomlar arası kovalent əlaqəsinə kimi).