**V Mühazirə**

**Kimyəvi rabitənin təbiəti haqqında klassik və müasir nəzəriyyələr.**

Kimyəvi birləşmələrin əmələ gəlməsinə səbəb olan qüvvələrin təbiəti məsələsi hələ XIX əsrin əvvəllərində ortaya “çıxmışdır”.Lakin o dövrdə atomun quruluşu dəqiq məlum olmadığından uzun müddət aşağıdakı suallara cavab vermək mümkün olmamışdır:

1.Nə üçün və necə eyni və ya müxtəlif element atomları bir-biri ilə birləşərək müvafiq molekullar əmələ gətirir?

2.Nə üçün atomlar bir-biri ilə yalnız müəyyən çəki nisbətlərində birləşir?

3.Molekulların bu və ya digər simmetriyaya malik olmasına səbəb nədir?

4.Molekulların həndəsi forması ilə onları əmələ gətirən mərkəzi atomların elektron quruluşu arasında hansı əlaqə var və ya onlar bir-birindən necə asılıdır və s.

Nəhayət 1913-cü ildə danimarka alimi N.Bor, atomun quruluşu haqqında planetar təsəvvürlərə və kvant mexanikasına istinad edərək tam təsəvvür yaradan model irəli sürmüşdür. 1915-ci ildə isə alman alimi Kössel, atomun quruluşu haqqqında Bor modelinə istinad edərək kimyəvi rabitənin təbiəti və onu törədən səbəblər haqqında öz mülahizələrini söyləmişdir.O,göstərmişdir ki,müxtəlif elektron konfiqurasiyalarına malik elementlər arasında ən davamlı elektron konfiqurasiyasına kimyəvi cəhətdən təsirsiz hesab edilən qazlar, yəni təsirsiz qazlar malikdir; onların xarici elektron təbəqəsində isə 2 (ns2) və ya 8 (ns2np6) elektron var.Deməli, atomların birləşərək müvafiq molekullar əmələ gətirməsinə səbəb onların davamlı elektron konfiqurasiyalarına nail olmaları “cəhtidir”. Yüksək stabilliyə və minimal enerjiyə malik olan hallar isə atomların ya elektron verməsi,ya da elektron alması ilə reallaşır. Elektron mübadiləsi nəticəsində isə yüklü ionlar alınır ki,onlar arasında da, elektrostatik cazibə qüvvəsi yaranır.Bu isə atomların bir-birinə yaxınlaşaraq müvafiq molekullar əmələ gətirməsinə səbəb olur.Qeyd etmək lazımdır ki, əks yüklü ionlar arasında nəinki elektrostatik cazibə qüvvəsi, eyni zamanda,onların nüvələri arasındakı müəyyən məsafədən sonra eyni yüklü hissəciklər arasında dəfetmə qüvvəsi də yaranır.Odur ki, ionların bir-birinə yaxınlaşması cazibə qüvvəsinin Kulon itələmə qüvvəsinə bərabər olan hala qədər davam edir.

Kössel mülahizəsinin müsbət cəhəti onun sadəliyində və əyaniliyindədir.Çatışmayan cəhəti isə tətbiqinin məhdudluğundadır.Belə ki,üzvi birləşmələrin demək olar ki, hamısı, qeyri-üzvi birləşmələrin isə böyük əksəriyyəti qeyri-ion tipli birləşmələrdir ki,onların da əmələgəlmə səbəblərini Kössel mülahizəsinə əsasən izah etmək mümkün olmurdu. Buna görə də, 1916-cı ildə amerikan alimi Lyuis kimyəvi rabitənin təbiəti haqqında öz mülahizəsini irəli sürmüşdür.O,göstərmişdir ki,davamlı elektron konfiqurasiyasiyaları ümumi elektron cütü hesabına da yarana bilər.

Lakin nə Kössel ,nə də Lyuis mülahizələri atomların 2 və ya 8 elektron konfiqurasiyaları yaratmaq “meylinin” səbəblərini izah edə bilməmişdir.

Zaman keçdikcə elm də inkişaf edir və yeni – yeni nəzəriyyələrlə zənginləşir.Kimyəvi birləşmələrin əmələ gəlməsinə səbəb olan qüvvələrin təbiəti haqqında Kössel və Lyuis empirik nəzəriyyələrinin izah edə bilmədiyi səbəblərin kvant mexanikası tərəfindən əsaslı olaraq izah edilməsi buna parlaq misaldır.

Əgər kimyəvi rabitənin yaranması haqqqında Kössel və Lyuis nəzəriyyələri elektronun zərrə xassəsinə istinad edirdisə,kvant mexanikası onun ikili (zərrə və dalğa) təbiətinə istinad etmişdir.

De-Broyl hipotezi və Heyzenberqin qeyri-müəyyənlik prinsipi yeni bir elm sahəsinin – kvant mexanikasının əsasını “qoymuşdur”.

Bir halda ki, elektron ikili təbiətə malikdir, onda onun dalğavari hərəkətini xarakterizə edən dalğa tənliyi olmalıdır.Belə bir tənlik isə 1926-cı ildə alman alimi Şredinger tərəfindən verilmiş və sonralar bu tənlik onun şərəfinə Şredinger tənliyi adlandırılmışdır; klassik mexanika üçün Nyuton qanunları hansı əhəmiyyət kəsb edirsə, kvant mexanikası üçün də Şredinger tənliyi o qədər böyük əhəmiyyət kəsb edir.

Şredinger tənliyi elektronun stasionar halı (zərrə xassəsi) ilə dalğa xassəsi arasındakı əlaqəni və elektronun dalğavari hərəkətini xarakterizə edən tənlikdir.Daha doğrusu, bu tənlik mikrozərrəciyin (məs., elektronun) kütləsi (m), potensialı (U) və tam enerjiləri (E) və fəza koordinatlarından asılı olan dalğa funkisyası (Ψ) arasındakı asılılığı xarakterizə edir.

Birelektronlu sistemlərin tək elektronun üçölçülü fəzadakı halını xarakterizə edən Şredinger tənliyinin riyazi ifadəsi aşağıdakı kimidir:

d2Ψ/dx2+d2 Ψ/dy2+ d2 Ψ/dz2+8π2m/h2+(E-U)Ψ=0 (9.1)

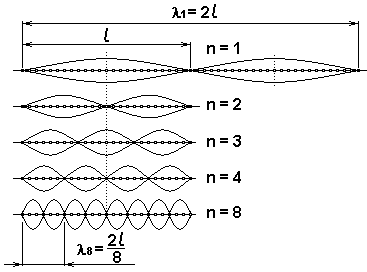
Şredinger bu tənliyin çıxarışında belə fərz etmişdir ki, de-Broyl dalğaları da elektromaqnit dalğalarının tabe olduğu tənliyə oxşar tənliklə təsvir olunmalıdır.

Əgər klassik mexanikada mikrohissəciklərin hərəkəti trayektoriyalarla xarakterizə olunursa, kvant mexanikasında funkisyalarla xarakterizə ( təsfir) olunur. Dalğa funkisyası nəinki mikrohissəciyin vəziyyətini,eyni zamanda onun bütün dinamik xarakteristikasını (enerjisini, impuls və impuls momentini və s.) müəyyən edir. Buna görə də, dalğa funkisyasının təyin edilməsi və onun mahiyyətinin düzgün dərk edilməsi kvant mexanikasının qarşısında duran əsas problemlərdən biridir.

**Ψ- dalğa funkisyası haqqında anlayış.** Elektronun fəza koordinatlarından asılı olan elə funkisyası var ki,onun müəyyən edilməsi ilə elektronun fəzanın bu və ya digər nöqtələrində olma ehtimalını xarakterizə etmək mümkün olur.Belə funkisyaya dalğa funkisyası deyilir ki,o da yuxarıda qeyd edildiyi kimi , yunan hərfi “psi” –Ψ ilə işarə olunur.**Aydındır ki, dalğa funkisyası müsbət və mənfi qiymətlər ala bilər.**Lakin ehtimal sıxlığı yalnız müsbət ədədlərlə xarakterizə edildiyindən elektronun fəzanın müəyyən nöqtəsində olma ehtimalı dalğa funkisyasının modulunun kvadratı - |Ψ|2 ilə xarakterizə olunur ki, o da, həmişə müsbət olur.

Fəza koordinatları isə zamandan asılıdır. Lakin sadəlik üçün Ψ-nin yalnız fəza koordinatlarından asılı olması ehtimal olunur. Yuxarıda qeyd edildiyi kimi, əgər klassik mexanikada görünən hissəciklərin hərəkəti vektorla xaraketrizə olunursa,kvant mexanikasında görünməyən hissəciklərin hərəkəti dalğa funkisyası ilə xarakterizə olunur.Bu funkisyanın isə ayrılıqda heç bir mənası yoxdur.

Ψ- dalğa funkisyasının formasının dəqiq məlum olmamasına baxmayaraq,onun qiymətinin fəza koordinatlarından asılı olaraq dəyişməsini ehtimal etmək olar; suyun səthində yayılan dalğaların rəqs amplitudasının dəyişməsi kimi.Bu ehtimalın anlaşılması üçün məhdud oblastdan hərəkət edən hissəciyin dalğavari hərəkətinə nəzər salaq.Məsələn,sazın siminin rəqsi zamanı yaranan durğun dalğalara.Fərz edək ki,simlərin bərkidildiyi nöqtələrdə durğun dalğaların rəqs amplitudası sıfra bərabərdir (şəkil 9.1).



*Şəkil 9.1 Sazın simində yaranan durğun dalğalar*

Şəkildən göründüyü kimi, bu şərti məhdud oblastda yaranan bir yox, bir-neçə dalğa ödəyir. Lakin bu dalğaları xarakterizə edən funksiyaların eyni məhdudiyyətli olmalarına baxmayaraq onlar bir-birindən fərqlənir; bu funkisyaların eyni məhdudiyyətliyi ondadır ki, onlar tam ədədlər alan n-dən asılı olan funkisyalardır.Başqa sözlə, məhdud oblastda yaranan yarım dalğaların sayı, n-in qiymətindən birmənalı şəkildə asılıdır.Deməli, durğun dalğaları xarakterizə edən funkisyaların qiyməti də,bu dalğaların sayından asılıdır və ya asılı olaraq dəyişəcəkdir.

Ψ- dalğa funkisyasının Şredinger tənliyinin həlli olması üçün fəza koordinatlarından asılı olan bu funksiya aşağıdakı şərtləri ödəməlidir. Başqa sözlə, bu funksiyaya aşağıdakı məhdudiyyətlər qoyulur:

1.Ψ birmənalı funksiya olmalıdır.Yəni fəzanın hər bir nöqtəsində o müəyyən bir qiymət almalıdır;bununla da o elektronun verilən nöqtələrdə olma ehtimalını birmənalı şəkildə müəyyən (təyin) edir.

2.Ψ normallaşma şərtini ödəməlidir; bu şərt riyazi olaraq belə ifadə olunur: dτ=1

3.Ψ kəsilməz və sonlu funkisya olmalıdır.Başqa sözlə, elektron olmayan yerdə Ψ=0, r→ ∞ yaxınlaşdıqda isə Ψ→0 yaxınlaşmalıdır (r=√x2+y2+z2).

Yuxarıda qeyd edildiyi kimi, Şredinger tənliyi stasionar hallara aiddir. Çünki tənliyə daxil olan funkisyanın (Ψ) zamandan asılı olmadığı , yalnız fəza koordinatlarından asılı olduğu fərz edilir.Deməli, bu tənlik üçölçülü fəzadakı durğun dalğaları xarakterizə edir.

Şredinger tənliyinə istinad edərək kimyəvi rabitənin təbiətini müəyyən etmək mümkündür. Bunun üçün o müvafiq molekullar üçün ifadə olunub həll olunmalıdır.Lakin çox elektronlu sistemlər üçün bu tənliyi dəqiq həll etmək mümkün deyil. Çünki elə bir riyazi əməliyyat yoxdur ki, ona istinad edərək elektronlar arasındakı qarşılıqlı təsirləri nəzərə alıb, bu tənliyi dəqiq həll etmək mümkün olsun. Məhz buna görə də,tənliyi həll etmək üçün müəyyən yaxınlaşmalardan istifadə olunur ki,onlardan da biri elektron cütü ( və ya valent rabitələr metodu- VRM) və molekulyar orbitallar metodudur ( və ya atom orbitallarının xətti kombinasiya metodu-AOXKM).

VRM-in nəzəri əsasları 1927-ci ildə alman alimləri Haytler və London tərəfindən yaradılmışdır; sonralar bu metod Polinq və Sleyter tərəfindən təkmilləşdirilərək daha mürəkkəb molekullara tətbiq edilmişdir.

VRM-ə əsasən H2 molekulu üçün Şredinger tənliyini aşağıdakı kimi ifadə etmək olar:

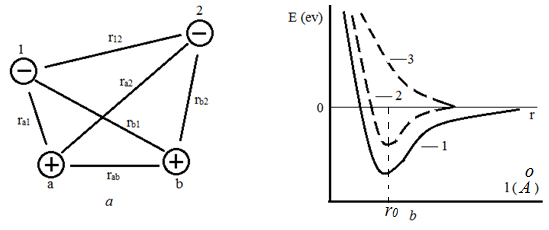
d2Ψ1/dx12 + d2Ψ1/dy12+d2Ψ1/dz12+d2 Ψ2/dx22+d2 Ψ2/dy22+d2 Ψ2/dz22+8π2m/h2 (E-U) Ψ1,2=0

Tənliyi sadələşdirmək üçün hər iki elektronun halının ümumi bir funksiya ilə xarakterizə edilməsinin mümkünlüyünü fərz etsək,onda H2 molekulu üçün Şredinger tənliyini aşağıdakı kimi ifadə etmək olar:

d2Ψ/dx12 + d2Ψ/dy12+d2Ψ/dz12+d2 Ψ/dx22+d2 Ψ/dy22+d2 Ψ/dz22+8π2m/h2 (E-U) Ψ=0 (9.2)

Şredinger tənliyinin həlli tədris proqramına daxil olmadığından biz yalnız onun hansı yaxınlaşmalar əsasında həll olunmasından və tənliyin həllindən alınan nəticələrin təhlili ilə kifayətlənəcəyik.Odur ki, ən sadə molekul olan H2 üçün Şredinger tənliyinin həlli olan dalğa funksiyasının necə ifadə olunmasını qısaca da olsa nəzərdən keçirək. Fərz edək ki,hidrogen molekulu Ha və Hb atomlarından təşkil olunub (şəkil 9.2, a):

Ha + Hb = Hab



*Şəkil 9.2. a – Hidrogen molekulunun sxematik görünüşü; b – nüvələr arasındakı məsafədn asılı olaraq sistemin potensial enerjisinin dəyişməsi; 1 – Təcrübədən alınan nəticə; 2 və 3 əyriləri Ψs və Ψas funksiyalarına əsasən nəzəri hesablanmış nəticələr*

Hər bir hidrogen atomuna mənsub olan elektronları fərqləndirmək üçün onları uyğun olaraq 1 və 2 rəqəmləri ilə,onların fəza koordinatlarını isə 1=x1 ,y1,z1  və 2=x2, y2 ,z2  ilə işarə edək. 1 elektronunun Ha atomu ətrafında olma ehtimalını Ψa(1) , 2 elektronunun Hb atomu ətrafında

olma ehtimalını Ψb(2) ilə işarə etsək, onda H2 molekulunun dalğa funksiyasını, ehtimal nəzəriyyəsinə görə,bu funksiyaların hasili kimi təsəvvür etmək olar:

Ψ1= Ψa(1) \* Ψb(2) (9.3)

Əgər 1 elektronunun Hb, 2 elektronunun Ha atomu ətrafında olması fərz edilərsə,onda H2 molekulunun dalğa funksiyasını aşağıdakı kimi ifadə etmək olar:

Ψ2= Ψa(2)\*Ψb(1) (9.4)

1 və 2 elektronları bir-birindən fərqlənmədiyindən bu (Ψ1 və Ψ2) funksiyaların hansının verilən anda sistemin real halını xarakterizə etdiyini söyləmək çətindir.Deməli, ayrı-ayrı halların ehtimalı eynidir:

Ψ1= Ψ2  (9.5)

Buradan belə məntiqi nəticəyə gəlmək olar ki, H2 molekulu verilən anın yarısında Ψ1,digər yarısında isə Ψ2 funksiyası ilə xarakterizə olunmalıdır.Məhz buna görə də, (9.5) ifadəsini nisbətən sadələşdirmək üçün hər iki elektronun halının eyni bir ümumi funksiya ilə xarakterizə olunması fərz edilməlidir. Haytler və London isə bu ümumi funksiyanı iki (Ψ1 vəΨ2) funksiyaların hasillərinin cəbri cəmi və fərqi kimi ifadə etməyi təklif etmişlər ki, onlardan da birini simmetrik (Ψs) digərini isə assimetrik (Ψas) funksiyalar adlandırmışlar:

Ψs=Ψa(1)\*Ψb(2)+Ψa(2)\*Ψb(1) (9.6)

Ψas=Ψa(1)\*Ψb(2)-Ψa(2)\*Ψb(1) (9.7)

Ψs – funksiyası simmetrik funksiya adlanır; çünki elektronların yerdəyişməsi ilə Ψ1 və Ψ2 funksiyaları işarəsini dəyişmir: Ψ1= Ψ2 .

Ψas – isə assimetrik funksiya adlanır, çünki elektronların yerdəyişməsi Ψ1 və Ψ2 funksiyalarının işarəsinin dəyişməsinə səbəb olur: Ψ1= - Ψ2 .Yəni Ψas = 0. Bu isə onu göstərir ki,hər iki elektron eyni zamanda bir atoma mənsub ola bilməz.

Beləliklə biz (9.2) dalğa tənliyinin həlli olan funksiyaların ifadələrini ( Ψs və Ψas ) tapdıq. Əgər Ψs-in (9.6)-kı ifadəsini (9.2)- də nəzərə alınıb tənlik həll edilərsə,onda H2 molekulunun potensial enerjisinin nüvələr arasındakı məsafədən asılılığını müəyyən etmək olar. Bu asılılığın qrafiki ifadəsi şəkil 9.2 b-də verilmişdir; 2 əyrisi şəkilindən görünür ki, antiparalel elektronlu atomlar arasında cəzbetmə qüvvəsi üstünlük təşkil edir. Odur ki, nüvələrarası məsafə ( r ) kiçildikcə sistemin potensial enerjisi monoton azalaraq nüvələrarası məsafənin müəyyən ( r0 ) qiymətində minimum həddə çatır. r-in sonrakı azalması dəfetmə qüvvəsinin kəskin artması ilə əlaqədar sistemin potensial enerjisi də kəskin artır.2 əyrisinin minimumuna müvafiq gələn enerjinin qiyməti və ona uyğun gələn r0 məsafəsi təcrübi nəticələrlə üst-üstə düşür ki,bu da VRM-in doğruluğunu təsdiq edir (cədvəl 9.1):

*Cədvəl 9.1*

*H2 molekulunda kimyəvi rabitənin uzunluğu və rabitə enerjisinin təcrübi və nəzəri qiymətləri*

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *Təyin metodu* | *Rabitə enerjisi, kc/mol* | *Rabitənin uzunluğu,* |
| *Spektroskopik metod* | *432,0* | *0,74* |
| *VRM* | *431,8 + 1,20*  *¯* | *0,74* |

Ψs – dalğa funksiyası hər iki elektron üçün ümumi bir funksiyadır ki, bu elektronlar da bir-birindən ( Pauli prinsipinə görə ) yalnız spin kvant ədədinə görə fərqlənirlər.Deməli, kimyəvi rabitənin yaranması üçün qarşılıqlı təsirdə olan elektronlar əks spinli olmalıdır.

Ψs- dən fərqli olaraq, Ψas funksiyası paralel spinli elektronları xarakterizə edir.Əgər Ψas-in

(9.7) bərabərkiyindəki ifadəsi (9.2) tənliyində nəzərə alınıb tənlik həll edilərsə və alınan nəticələrə əsasən sistemin tam enerjisinin nüvələr arasındakı məsafədən asılılıq qrafiki qurularsa, onda şəkil 9.2-nin 3 əyrisi alınacaqdır.Şəkildən göründüyü kimi bu əyri minimuma malik deyil.Bu isə onu göstərir ki, kimyəvi qarşılıqlı təsirdə olan atomlar arasında yalmız dəfetmə qüvvəsi yaranır ki, bu da nüvələr arasındakı məsafənin kiçilməsi ilə sistemin potensial enerjisinin daim artmasına səbəb olur.

Beləliklə, VRM-in yuxarıda qeyd olunan nəticələrini ümumiləşdirərək aşağıdakı nəticələri söyləmək olar:

1. İki atom arasında birqat kovalent rabitə ümumi elektron cütü hesabına yaranır ki, bu elektronlar da ümumi bir dalğa funksiyası ilə xarakterizə olunur; onlar yalnız spin kvant ədədlərinə görə fərqlənirlər.
2. Kimyəvi rabitənin əmələ gəlməsi üçün müvafiq atom orbitalları bir-birini örtməlidir.Atom orbitallarının örtməsi isə o zaman kimyəvi rabitənin yaranmasına səbəb olur ki,bu orbitalların dalğa funksiyalarının işarəsi uyğun gəlsin.Yəni eyni olsun.
3. Kimyəvi rabitənin davamlılıq dərəcəsi orbitalların örtmə dərəcəsindən asılıdır; örtmə dərəcəsi (sahəsi) nə qədər böyük olarsa,kimyəvi rabitənin davamlılığı da bir o qədər çox olar

Lakin VRM bu qeyd olunan müsbət cəhətləri ilə yanaşı müəyyən çatışmayan cəhətlərə də malikdir. Məsələn, o H2+, He2+ və s. molekulların əmələ gəlməsini, maddələrin rənginin və maqnit xassəsinin səbəblərini və s. izah edə bilməmişdir.