ფიზიკური ქიმია - PHYSICAL CHEMISTRY-
ФИЗИЧЕСКАЯХИМИЯ

ეთილენის და აცეტილენის მოლეკულების ელექტრონული აღნაგობა ანუ არსებობენ π-ბმები ეთილენში და აცეტილენში?

ხიდეშელი გივი
ქიმიურ მეცნიერებათა კანდიდატი

რეზიუმე

განხილულია ეთილენის და აცეტილენის მოლეკულების ელექტრონული აღნაგობა ვალენტური ბმების თეორიის გამოყენებით. დავუშვით, რომ ეთანში, ეთილენში და აცეტილენში ელექტრონული წყვილების მიზიდვის უნარი ერთნაირია და ბმების სიგრძეები ტოლია. გამოთვლილია ბმის ენერგიის დანაკარგი და მანძილები ელექტრონული წყვილებსა და ნახშირბადის ატომების შემაერთებელ ხაზს შორის, რომლებიც შესაბამისად, ეთილენში უდრის 15,01 კკალ -ს და 37,91 ნმ-ს, ხოლო აცეტილენში 28,5 კკალ-ს და 48,26 ნმ-ს. აცეტილენში მანძილი 48,26 ნმ აღვნიშნეთ X-ით და შევადგინეთ პროპორცია, რომლის ამოხსნით მიღებული რიცხვი X=48.00 ნმ-ს ახლო დგას მისაღებ რიცხვთან (48,26 ნმ). ეს საშუალებას გვაძლევს მრავალი დასკვნა გავაკეთოთ კვანტურ მექანიკაში, რომელთაგან აღვნიშნავთ მთავარს: ეთილენის და აცეტილენის მოლეკულების ელექტრონული აღნაგობის ახსნა ვალენტური ბმების თეორიით უფრო ბუნებრივია, ვიდრე SP^2 და SP ჰიბრიდიზაციით. ასეთი ახსნა გამორიცხავს π ბმების არსებობას ეთილენში და აცეტილენში.

საკვანძო სიტყვები: ეთილენი. აცეტილენი. მოლეკულა. ბმის ენერგიის დანაკარგი.

1. შესავალი

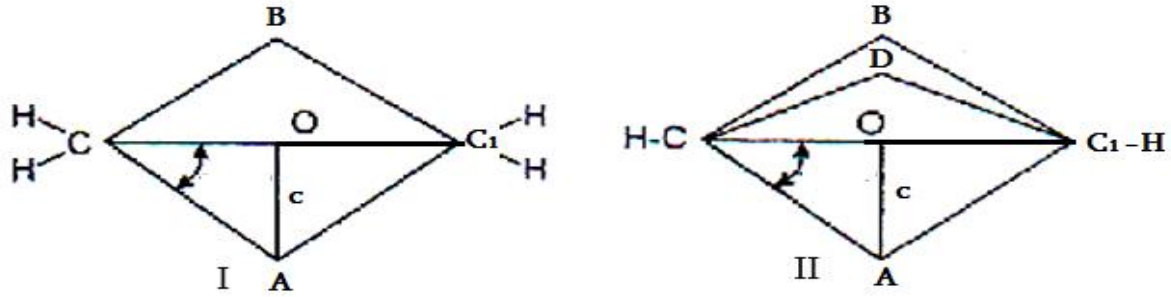
ეთილენში და აცეტილენში ნახშირბადის ატომები დაკავშირებული არიან, შესაბამისად, ორმაგი და სამმაგი ჯერედი ვალენტური ბმებით, რომელთა წარმოქმნა ახსნილია ორბიტალების SP^2 და SP ჰიბრიდიზაციით. ჩვენი შეხედულებით ვალენტური ბმის წარმოქმნა ბირთვის ირგვლივ ორბიტებზე ან ორბიტალებზე მბრუნავი ელექტრონებით შეუძლებელია; ამიტომ მიზნად დავისახეთ ეთილენის და აცეტილენის მოლეკულების ელექტრონული აღნაგობა ავხსნათ ვალენტური ბმების თეორიის დახმარებით. ამისათვის ვისარგებლეთ ჭეშმარიტებით, რომელიც ატომების არსებობის ქვაკუთხედს წარმოადენს: ,,ატომში ბირთვი იზიდავს ელექტრონებს და ელექტრონები განიზიდავენ ერთმანეთს".

ამ პრინციპის მიხედვით თავისუფალ მდგომარეობაში მყოფი ნახშირბადის ატომის გარეთა შრის ოთხი ელექტრონი, ელექტრონული განზიდვის გამო, ბირთვის ირგვლივ განლაგებული არიან სიმეტრიულად, $109{,}5^0$-იანი კუთხით, წესიერი ტეტრაედრის წვეროებზე. ისინი ნახშირბადის მეორე ატომის ელექტრონებთან ელექტრონული წყვილების წარმოქმნით ამყარებენ ერთმაგ, ორმაგ და სამმაგ ვალენტურ ბმებს, შესაბამისად, ეთანში, ეთილენში და აცეტილენში.

2. ძირითადი ნაწილი

ჩვენი აზრით ეთანში, ეთილენში და აცეტილენში ვალენტური ბმის წარმომქმნელი ელექტრონული წყვილების მიზიდვის უნარი ერთნაირია და ბმების სიგრძეები ტოლია. ე.ი. კოვალენტური რადიუსების სიგრძე არ იცვლება. აქედან გამომდინარე ნახშირბადის ორ ატომს შორის ერთმაგი, ორმაგი და სამმაგი ბმების წარმოქმნის დროს ეთანში, ეთილენში და აცეტილენში მიმდინარეობს ურთიერთგანზიდვა ცალკე ნახშირბადის ატომების ბირთვებსა და ცალკე ელექტრონულ წყვილებს შორის და ხდება მათ მოლეკულებში მდგრადი წონასწორული მდგომარეობის დამყარება ატომებს შორის. შედეგად, ეთანში,რომელშიც ერთი ელექტრონული წყვილია, ნახშირბადის ატომები და ელექტრონული წყვილი სწორ ხაზზე მდებარეობენ და კუთხე ელექტრონულ წყვილსა და ნახშირბადის ატომების შემაერთებელ სწორ ხაზს შორის 0^0-ის ტოლია; ეთილენში და აცეტილენში ელექტრონული წყვილების განზიდვის გამო წარმოიქმნება კუთხე ელექტრონულ წყვილსა და ნახშირბადის ატომების შემაერთებელ სწორ ხაზს შორის, რომლის შედეგად იცვლება მანძილები ნახშირბადის ატომებს შორის. წარმოქმნილი კუთხე და მანძილის შემცირება აცეტილენში უფრო დიდია, ვიდრე ეთილენში, რაც გამოწვეულია მათში ბმის წარმომქმნელი ელექტრონული წყვილების რაოდენობით.

ნათქვამიდან გამომდინარე, ეთილენის და აცეტილენის სტრუქტურული ფორმულები წარმოდგენილია 1-ელ ნახაზზე I და II სქემების სახით:



ნახ.1

ლიტერატურული მონაცემების მიხედვით [1], რომელიც მოტანილია 1-ელ ცხრილ-ში, I სქემაში (ეთილენი) მანძილი $C-C_1$=134 ნმ-ს; $CO=C_1O$=67 ნმ-ს; $AC=AC_1=BC=BC_1$=77 ნმ-ს; ბმის ენერგია ნახშირბადის ატომებს შორის უდრის 140,5კკალ-ს.

II სქემაში (აცეტილენი) მანძილი $C-C_1$=120 ნმ-ს; $CO=C_1O$=60 ნმ-ს; $AC=AC_1=BC=BC_1=$ $=DC=DC_1$=77 ნმ-ს; ბმის ენერგია ნახშირბადის ატომებს შორის უდრის 196,7 კკალ-ს.

ცხრილში მოტანილია ჩვენს მიერ შესრულებული გამოთვლები:

1) გამოთვლილია ეთანის, ეთილენის და აცეტილენის მოლეკულებში ნახშირბადის ატომებს შორის განზიდვის ენერგიები, რომლებიც შესაბამისად ტოლია 0,543; 2,41 და 7,92 კკალ-ის [2].

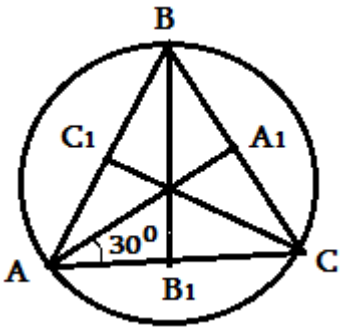
2) გამოთვლილია კუთხე და კუთხის შესაბამისი სინუსი ანუ მანძილი ელექტრონულ წყვილსა და ნახშირბადის ატომების შემაერთებელ ხაზს შორის ეთილენში და აცეტილენში. I სქემაში (ეთილენში), სამკუთხედ ACO-ში, კუთხე C და კუთხის შესაბამისი სინუსი c, შესაბამისად, უდრის $29^0 30'$ და 37,91 ნმ-ს, ხოლო II სქემაში (აცეტილენში) $C=38^0 48'$-ს და c=48,26 ნმ-ს.

ცხრ.1

ნივთიერება, ფორმულა / რიგი	ეთანი $H_3C - CH_3$	ეთილენი $H_2C = CH_2$	აცეტილენი $HC \equiv CH$
1. მანძილი ნახშირბადის ატომებს შორის,ნმ. ა) მოლეკულაში ბ) სხვაობა წინა და მომდევნო ნივთიერებების C--C ბმების სიგრძეებს შორის	 ა) 154 ბ) ---	 ა) 134 ბ) 20	 ა) 120 ბ) 14
2. ბმის სახეობა და ჯერადობა ნახშირბადის ატომებს შორის	ვალენტური 1	ვალენტური 2	ვალენტური 3
3. ბმის ენერგია ნახშირბადის ატომებს შორის, კკალ. ა)მოლეკულაში, ბ)ცალკეულ ბმებში, გ) თეორიულად, დ)ერთეულ მანძილზე მოლეკულაში, ე) ერთეულ მანზილზე ცალკეულ ბმებში.	ა) 79,3 ბ) 79,3 გ) 79,3 დ) 0,515 ე) 0,515	ა) 140,5 ბ) 70,25 გ) 158,6 დ) 1,048 ე) 0,524	ა) 196,7 ბ) 65,57 გ) 237,9 დ) 1,639 ე) 0,546
4. განზიდვის ენერგიები ნახშირბადის ატომებს შორის, კკალ. ა) მოლეკულაში. ბ) ცალკეულ ბმებში. გ) მოლეკულაში ერთეულ მანძილზე. დ) ცალკეულ ბმებში ერთეულ მანძილზე.	 ა) 0,543 ბ) 0,543 _____ _____	 ა) 2,41 ბ) 1,206 გ) 0,018 დ) 0,009	 ა) 7,92 ბ) 2,64 გ) 0,066 დ) 0,022
5. განზიდვის ენერგიები ელექტრონულ წყვილებს შორის, კკალ. ა) ეთილენში (ხაზოვანი განზიდვა), ბ) აცეტილენში (განზიდვა ტოლგვერდა სამკუთხედის სიბრტყეში)	-------	ა) 0,68	ბ) 4,78
6. ა)კუთხე და ბ) კუთხის შესაბამისი სინუსი ანუ მანძილი ბმის წარმომქმნელ ელექტრონულ წყვილსა და ნახშირბადის ატომების შემაერთებელ ხაზს შორის	--------	ა) $29^0 30'$ ბ) 37,91	ა) $38^0 48'$ ბ) 48,26
7. ბმის ენერგიების დანაკარგი, კკალ.		15,01	28,50

3) გამოთვლილია ეთილენში და აცეტილენში ელექტრონულ წყვილებს შორის განზიდვის ენერგიები. ისინი შესაბამისად ტოლია 0,68 და 4,78 კკალ-ის.

ეთილენის წონასწორულ მდგომარეობაში თითოეულ ბმაში ერთეულ მანძილზე განზიდვის ენერგია უდრის 0,009 კკალ-ს. ასეთივე განზიდვა იქნება ერთეულ მანძილზე ელექტრონულ წყვილებს შორის, რომელიც 2×37,91 ნმ მანძილზე უდრის 0,68 კკალ-ს. აცეტილენის წონასწორულ მდგომარეობაში ელექტრონულ წყვილებს შორის განზიდვა ხდება ABC ტოლგვერდა სამკუთხედის გვერდების მიმართულებით (ნახ.2). იგი ვექტორული ტოლობის $\overrightarrow{AB}=\overrightarrow{BB_1}+\overrightarrow{AB_1}$ თანახმად ტოლია A_1A, B_1B და C_1C სიმაღლეებში განზიდვის ენერგიების ჯამის. აცეტილენში განზიდვის ენერგია ცალკეული ბმის ერთეულ მანძილზე არის 0,022 კკალ, ხოლო სიმაღლეების ჯამური სიგრძე ტოლია 3×(48,26+24,13) ნმ-ის. მათი ნამრავლი უდრის 4,78 კკალ-ს.



ნახ.2

4) გამოთვლილია ბმების ენერგიის დანაკარგი,რომელიც ეთილენში ტოლია 15,01 კკალ-ის, აცეტილენში 28,50 კკალ-ის.

ბმების ენერგიის დანაკარგი ეთილენში = 158,6-140,5-2,41-0,68=15,01 კკალ.

ბმების ენერგის დანაკარგი აცეტილენში = 237,9-196,7-7,92-4,78=28,5 კკალ.

ცხრილში მოტანილი მონაცემებიდან შევადგინეთ პროპორცია ეთილენში და აცეტილენში ბმების ენერგიის დანაკარგსა და ელექტრონული წყვილებიდან ნახშირბადის ატომების შემაერტებელ ხაზამდე მანძილებს შორის. აცეტილენში ელექტრონულ წყვილსა და ნახშირბადის ატომების შემაერთებელ ხაზს შორის მანძილი (48,26 ნმ) აღვნიშნეთ X-ით:

15,01----------2×37,91

28,50----------3×X X=48,00 ნმ-ს.

მიღებული შედეგი (48,00 ნმ) ახლოს დგას მისაღებ რიცხვთან (48,26 ნმ). ეს იმას ნიშნავს, რომ ბმების ენერგიების დანაკარგი ეთილენში (15,01 კკალ) შეესაბამება ბმების ენერგიების დანაკარგს აცეტილენში (28,50 კკალ) ისე, როგორც ნახშირბადის ატომების შემაერთებელი სწორი ხაზიდან ეთილენის ორი ელექტრონული წყვილის დაშორების მანძილები (2×37,91 ნმ) შეესაბამება აცეტილენის სამი ელექტრონული წყვილის დაშორე-ბის მანძილებს (3×48,26 ნმ).

3. დასკვნა

შესრულებული გამოთვლიდან უამრავი დასკვნის გამოტანა შეიძლება კვანტურ მექანიკაში, რომელთაგან ჩვენ მოვიტანთ მხოლოდ სამს:

1) ეთილენის და აცეტილენის მოლეკულების ელექტრონული აღნაგობის ასახსნელად საჭირო არ არის გამოვიყენოთ ორბიტების ან ორბიტალების ცნებები, რომელთა არსებობის შემთხვევაში ვალენტური ბმის წარმოქმნა შეუძლებელია;

2) საჭირო არ არის ,,სასარგებლო მოდელის“ - ელექტრონების ბირთვის ირგვლივ ალბათური მდგომარეობით მიღებული ორბიტალების ჰიბრიდიზაციის ხელოვნური გამოყენება;

3) ეთილენის და აცეტილენის მოლეკულების ელექტრონული აღნაგობის ახსნა ვალენტური ბმების თეორიით უფრო ბუნებრივია ვიდრე ორბიტალების SP^2 და SP ჰიბრიდიზაციით. ასეთი ახსნა გამორიცხავს π ბმების არსებობას ეთილენში და აცეტილენში.

ლიტერატურა:

1. კარაპეტიანცი მ.ქ., დრაკინი ს.ი. (1977). ნივთიერების აღნაგობა. თსუ-ს გამომ-ცემლობა. თბილისი.

2. ხიდეშელი გ.ი. (2016). აცეტილენის, ეთილენის, ეთანის და ბენზოლის მოლეკულებში ნახშირბად ატომებს შორის განზიდვის ენერგიების გამოთვლა და მათი გამოყენება აცეტილენის ეთილენის და ბენზოლის ჰიდრირების დროს გამოყოფილი სითბოს რაოდენობის დადგენაში. სტუ-ს შრ.კრ. „მართვის ავტომატიზებული სისტემები“, N2(22). გვ.253-258.

3. ხიდეშელი გ.ი. (2017). ეთილენის და აცეტილენის მოლეკულების ელექტრონული აღნაგობა. საავტორო უფლების დეპონირების დამადასტურებელი მოწმობა 6882. 09.03.2017

ELECTRONIC STRUCTURES OF ETHYLENE AND ACETYLENE MOLECULES, IS THERE ANY π COMPOUNDS IN ETHYLENE AND ACETYLENE?

Khidesheli Givi

Summary

On the basis of the of valence bond theory, considered the electronic structure of the ethylene and acetylene molecules. It is assumed that the ability of the attraction of electron pairs in ethane, ethylene and acetylene is the same, and the length of their bonds is equal to each other. It calculated the level of loss of binding energies and the distance between electronic substances and the line connecting carbon atoms, which respectively in ethylene is 15.01 kcal and 37.91 nm, and in acetylene 28.5 kcal and 48.26 nm. We note the distance in acetylene 48.26 nm as "X" and made up the proportion and got (48.00 nm) , that stands next to the number that should be obtained (48.26 nm), which allows us to make many conclusions in quantum mechanics, from which the main is highlighted: the electronic structure of ethylene and acetylene molecules in the theory of valence bonds is more natural than in the theory of SP2 and SP hybridization. This explanation excludes the possibility of existence of π bonds in ethylene and acetylene.

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ ЭТИЛЕНА И АЦЕТИЛЕНА, ТО ЕСТЬ СУЩЕСТВУЮТ ЛИ π СВЯЗЕЙ В ЭТИЛЕНЕ И АЦЕТИЛЕНЕ?

Хидешели Гиви

Резюме

На основе теории валентных связей, рассмотрено электронное строение молекул этилена и ацетилена. Допускается, что способность притяжения электронных пар в этане, этилене и ацетилене одинаковое, а длина их связей равна между собой. Рассчитаны уровень потери энергий связи и расстояния между электронными веществами и линией, связывающей атомы углерода, которые соответственно, в этилене равны 15,01 ккал и 37,91 нм, а в ацетилене 28,5 ккал и 48,26 нм. Отметим расстояние в ацетилене 48,26 нм как «X» и составили пропорцию, в результате решения которой получилось число (48,00 нм) стоящее рядом с числом, которое должно получиться (48,26 нм), что дает нам возможность сделать множество выводов в квантовой механике, и выделить главное: объяснение электронного строения молекул этилена и ацетилена по теории валентных связей более естественно, чем по теории SP^2 и SP гибридизации. Такое объяснение исключает существование π связей в этилене и ацетилене.