

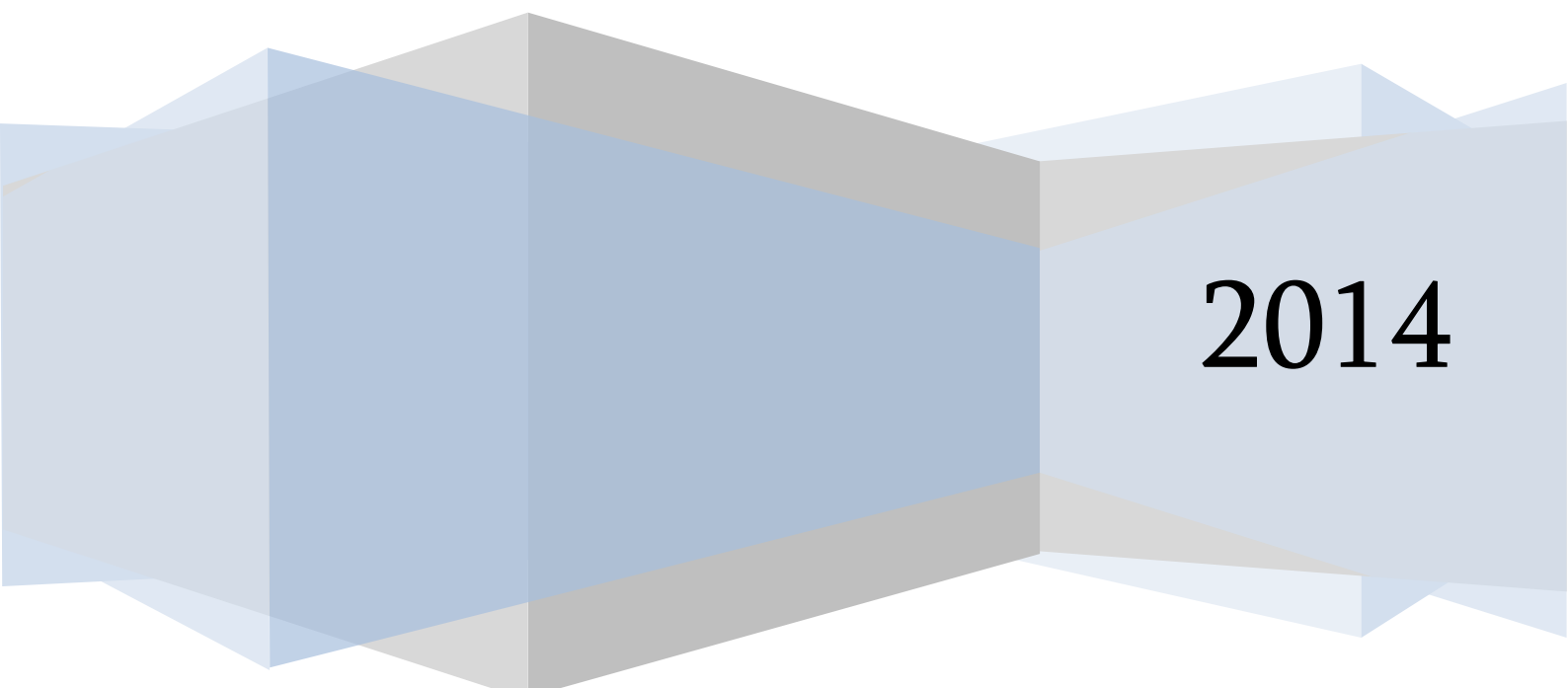
საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

ზოგადი ქიმია ინჟინრებისთვის

ლექციების კურსი „Brown. Chem
F/EngrsLooseleaf+Owl Card“ მიხედვით

(სტუ-ს ბიბლიოთეკა #54(02)/75)

I კურსის „ნიადაგისა და წყლის რესურსების
ინჟინერიის“ სპეციალობის სტუდენტებისათვის



2014

სარჩევი

1. ქიმიის შესავალი	7
1.1. ქიმიის შესწავლა	7
1.2. მაკროსკოპული დონე	7
1.3. მიკროსკოპული ან კორპუსკულური დონე	9
2. ატომები და მოლეკულები	10
2.1. ატომური სტრუქტურა და მასა	10
2.1.1. ატომის ფუნდამენტური ცნებები	10
2.2. ატომური რიცხვი და მასური რიცხვი	12
2.3. იზოტოპები	13
2.4. ატომური სიმბოლოები	13
2.5. ატომური მასები	14
2.6. ვალენტობა	15
2.7. იონები	15
2.8. იონები და მათი თვისებები	16
2.9. ნაერთები და ქიმიური ბმები	17
2.9.1. ქიმიური ფორმულები	17
2.9.2. ქიმიური შეკავშირება	18
2.10. პერიოდული სისტემა	20
2.10.1. პერიოდები და ჯგუფები	20
2.10.2. მეტალები, არამეტალები და მეტალოიდები	21
2.11. ქიმიური ნომენკლატურა	22
3. მოლეკულები, მოლეკი და ქიმიური განტოლობები	23
3.1. ქიმიური ფორმულები და განტოლებები	24
3.1.1. ქიმიური განტოლების ჩაწერა	24
3.1.2. ქიმიური განტოლებების გაწონასწორება	25
3.2. წყალხსნარები და ჯამური იონური განტოლებები	25
3.2.1. ხსნარები, გამხსნელები და გახსნილი ნივთიერებები	26
3.2.2. ქიმიური განტოლებები რეაქციებისთვის წყალხსნარებში	27
3.2.3. მჟავა-ფუძე რეაქციები	29

3.3.	განტოლებათა ინტერპრეტირება და მოლი	30
3.3.1.	ქიმიური განტოლებების ინტერპრეტირება	30
3.3.2.	ავოგადროს რიცხვი და მოლი	31
3.3.3.	მოლური მასის განსაზღვრა	32
3.4.	გამოთვლები მოლების და მოლური მასების გამოყენებით	33
3.4.1.	ელემენტური ანალიზი: ემპირიული და მოლეკულური ფორმულების დადგენა	33
3.4.2.	მოლარობა	34
3.4.3.	განზავება	35
4.	სტექიომეტრია	36
4.1.	სტექიომეტრიის საფუძვლები	36
4.1.1.	თანაფარდობების მიღება გაწონასწორებული ქიმიური განტოლებიდან	37
4.2.	ზღვრული რეაგენტები	39
4.3.	თეორიული და პროცენტული გამოსავლები	41
4.4.	ხსნარის სტექიომეტრია	41
5.	აირები	43
5.1.	აირების თვისებები	43
5.2.	წნევა 44	
5.2.1.	წნევის ერთეულები	44
5.3.	აირის კანონი	45
5.3.1.	ერთეულები და იდეალური აირის კანონი	47
5.4.	პარციალური წნევა	48
5.5.	რეაქციების სტექიომეტრია აირების მონაწილეობით	49
5.5.1.	სტანდარტული პირობები	50
5.6.	მოლეკულურ-კინეტიკური თეორია და იდეალური აირის რეალურთან შედარება 51	
5.6.1.	მოდელის პოსტულატები	51
5.6.2.	რეალური აირები და კინეტიკური თეორიის შეზღუდვები	53
5.6.3.	იდეალური აირის განტოლების კორექტირება	54
6.	პერიოდული სისტემა და ატომური სტრუქტურა	56
6.1.	სინათლის ტალღური ბუნება	56
6.2.	სინათლის კორპუსკულური ბუნება	57
6.3.	ბორის ატომი	58

6.4.	ატომის კვანტურ-მექანიკური მოდელი	59
6.4.1.	პოტენციური ენერგია და ორბიტალები.....	60
6.4.2.	კვანტური რიცხვები	61
6.4.3.	ორბიტალების ვიზუალიზება	63
6.4.4.	პაულის აკრძალვის პრინციპი და ელექტრონული კონფიგურაციები.....	65
6.4.5.	ორბიტალური ენერგიები და ელექტრონული კონფიგურაციები.....	66
6.4.6.	ჰუნდის წესი და შვესების პრინციპი	67
6.5.	პერიოდული სისტემა და ელექტრონული კონფიგურაციები	69
6.6.	პერიოდული ტენდენციები ატომურ თვისებებში	69
6.6.1.	ატომის ზომა.....	69
6.6.2.	იონიზაციის ენერგია.....	70
6.6.3.	სწრაფვა ელექტრონისადმი.....	71
7.	ქიმიური კავშირი და მოლეკულური სტრუქტურა.....	73
7.1.	იონური ბმა	74
7.1.1.	კათიონების წარმოქმნა	74
7.1.2.	ანიონების წარმოქმნა	75
7.2.	კოვალენტური ბმა	76
7.2.1.	ქიმიური ბმები და ენერგია.....	76
7.2.2.	ქიმიური ბმები და რეაქციები.....	78
7.2.3.	ქიმიური ბმები და მოლეკულების სტრუქტურა	78
7.2.4.	დონორულ-აქცეპტორული ბმა.....	80
7.3.	ელექტროუარყოფითობა და ბმის პოლარობა	80
7.3.1.	ელექტროუარყოფითობა	80
7.3.2.	ბმის პოლარობა	81
7.4.	ორბიტალების გადაფარვა და ქიმიური შეკავშირება	82
7.5.	ჰიბრიდული ორბიტალები.....	85
8.	მოლეკულები.....	88
8.1.	კრისტალური მესერის ტიპები.....	88
8.2.	შეკავშირება მყარ სხეულებში: მეტალები	89
8.3.	მოლეკულათაშორისი ძალები	90
8.3.1.	ძალები მოლეკულებს შორის	90
8.3.2.	დიპოლ-დიპოლური ძალები	91
8.3.3.	წყალბადური კავშირი.....	92

8.4.	კონდენსირებული ფაზები – სითხეები	93
9.	ენერგია და ქიმია	95
9.1.	ენერგიის ფორმები	95
9.2.	სითბო და მუშაობა	96
9.3.	ენერგიის ერთეულები	97
9.4.	ენერგიის გარდაქმნა და ენერგიის შენახვა	97
9.5.	სითბოტევადობა და კალორიმეტრია	99
9.6.	ენტალპია	100
9.6.1.	სითბური მოვლენები გახსნის დროს	101
9.7.	რეაქციის სითბო	101
9.8.	ბმები და ენერგია	102
9.9.	რეაქციების სითბო ზოგიერთი სპეციფიკური რეაქციისათვის	103
9.10.	ჰესის კანონი და რეაქციის სითბო	104
9.10.1.	ჰესის კანონი	104
9.10.2.	წარმოქმნის რეაქციები და ჰესის სითბო	104
10.	ენტროპია და თერმოდინამიკის მეორე კანონი	106
10.1.	თავისთავადობა	106
10.1.1.	ბუნების ისარი	106
10.1.2.	თავისთავად მიმდინარე პროცესები	107
10.1.3.	ენტალპია და თავისთავადობა	107
10.2.	ენტროპია	108
10.2.1.	ალბათობა და თავისთავადი ცვლილება	109
10.2.2.	ენტროპიის განსაზღვრა	110
10.2.3.	პროცესებში ენტროპიის ცვლილებების შეფასება	111
10.3.	თერმოდინამიკის მეორე კანონი	112
10.3.1.	შედეგები და გამოყენებები	113
10.4.	თერმოდინამიკის მესამე კანონი	113
10.5.	ჯიბსის თავისუფალი ენერგია	114
10.5.1.	თავისუფალი ენერგია და თავისუფალი ცვლილება	115
10.5.2.	თავისუფალი ენერგია და მუშაობა	116
10.6.	თავისუფალი ენერგია და ქიმიური რეაქციები	117
11.	ქიმიური კინეტიკა	119
11.1.	ქიმიური რეაქციის სიჩქარეები	119

11.1.1.	სიჩქარის და რეაქციის სიჩქარის ცნება.....	119
11.1.2.	საშუალო და მყისიერი სიჩქარე	121
11.2.	სიჩქარის კანონები და სიჩქარეების კონცენტრაციული დამოკიდებულება.....	121
11.2.1.	სიჩქარის კანონი.....	121
11.2.2.	სიჩქარის კანონის განსაზღვრა	122
11.3.	მთელრიცხვიანი სიჩქარის კანონები	123
11.4.	ტემპერატურა და კინეტიკა.....	126
11.4.1.	არენიუსის კანონი.....	127
11.5.	რეაქციის მექანიზმები	128
11.5.1.	ელემენტარული საფეხურები და რეაქციის მექანიზმები	128
11.6.	კატალიზი	129
11.6.1.	ჰომოგენური და ჰეტეროგენული კატალიზი.....	129
11.6.2.	კატალიზის მოლეკულური ასპექტი	130
12.	ქიმიური წონასწორობა	132
12.1.	ქიმიური წონასწორობა	132
12.1.1.	შექცევდი და შეუქცევადი რეაქციები	132
12.2.	წონასწორობის მუდმივები	135
12.2.1.	წონასწორობის გამოსახულება.....	135
12.2.2.	აირადი ფაზის წონასწორობა: $K_p - K_c$	136
12.2.3.	ჰომოგენური და ჰეტეროგენული წონასწორობა.....	137
12.2.4.	წონასწორობის გამოსახულების რიცხვითი მნიშვნელობა.....	138
12.2.5.	ქიმიური რეაქციის მიმართულების შეცვლა	138
12.3.	წონასწოვრული კონცენტრაციები.....	139
12.4.	ლე შატელიეს პრინციპი	139
12.5.	ხსნადობის წონასწორობა	141
12.5.1.	ხსნადობის ნამრავლის განსაზღვრა	142
12.5.2.	საერთო იონური ეფექტი	142
12.6.	მჟავები და ფუძეები	143
12.6.1.	მჟავებისა და ფუძეების ბრონსტედ-ლოურის თეორია	143
12.6.2.	სუსტი მჟავები და ფუძეები	144
12.7.	თავისუფალი ენერგია და ქიმიური წონასწორობა.....	145
12.7.1.	თავისუფალი ენერგია და არასტანდარტული პირობები	147
13.	ელექტროქიმია	148

13.1. ჟანგვა-აღდგენის რეაქციები და გალვანური ელემენტები	148
13.1.1. ჟანგვა-აღდგენა და ნახევრად რეაქცია.....	148
13.1.2. გალვანური ელემენტების აგება.....	150
13.1.3. გალვანური ელემენტების ტერმინოლოგია	151
13.1.4. გალვანური ელემენტების ატომური ასპექტი	152
13.2. ელემენტის პოტენციალები	153
13.2.1. ელემენტის პოტენციალის გაზომვა	153
13.2.2. სტანდარტული აღდგენის პოტენციალები.....	155
13.2.3. არასტანდარტული პირობები	157
13.3. ელემენტის პოტენციალები და წონასწორობა.....	157
13.3.1. ელემენტის პოტენციალები და თავისუფალი ენერგია	157
13.3.2. წონასწორობის მუდმივები	158
13.4. ელექტროლიზი.....	159
13.4.1. ელექტრული მემბრანის აღნაგობა.....	160
13.4.2. ელექტროლიზი და პოლარობა	162
13.5. ელექტროლიზი და სტეიომეტრია	162
13.5.1. დენი და მუხტი	162

1. ქიმიის შესავალი

ამ თავის შესწავლის შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

- ახსნას მაკროსკოპული, მიკროსკოპული და სიმბოლური ასპექტები ქიმიური სისტემის გააზრებისას;
- ააგოს ნახაზები მარტივი ქიმიური მოვლენების (როგორიცაა, მაგალითად, განსხვავება მყარ სხეულებს, სითხეებსა და აირებს შორის) საილუსტრაციოდ მოლეკულურ დონეზე;

1.1. ქიმიის შესწავლა

ქიმიას დაარქვეს „ცენტრალური მეცნიერება“, რადგანაც ის ძალიან მნიშვნელოვან როლს ასრულებს სამეცნიერო კვლევების მრავალ დარგში. ეს კურსი მოწოდებულია დაგეხმაროთ, რომ დააკავშიროთ ინფორმაციის ის ფრაგმენტები, რომლებსაც უკვე ფლობთ; უკეთ გაიაზროთ ქიმიური ცნებები და კონცეფციები და მიიღოთ უფრო სრულყოფილი და სისტემური სურათი. ასეთი სურათი კი მოიცავს ქიმიის ბუნების გაგებისა და მისი წვდომის ასპექტების სამ დონეს: მაკროსკოპულს, მიკროსკოპულს და სიმბოლურს.

1.2. მაკროსკოპული დონე

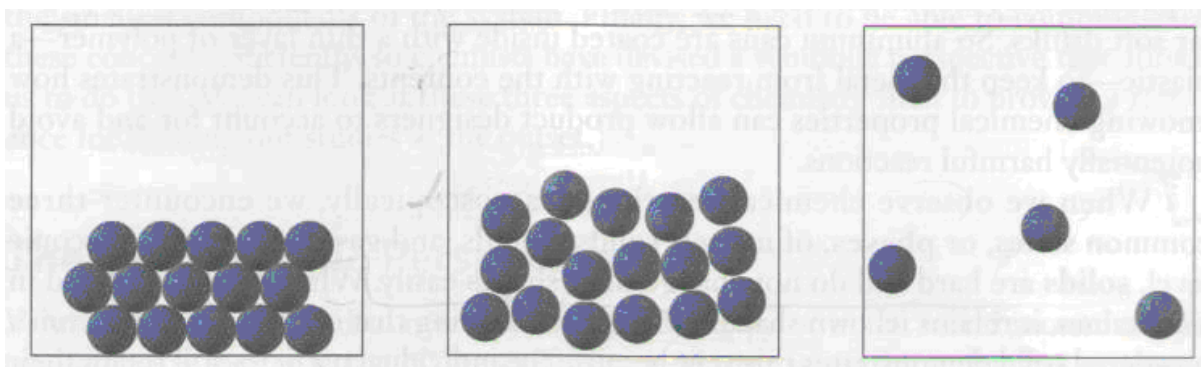
როდესაც ვაკვირდებით ქიმიურ რეაქციებს ლაბორატორიებში, ან ჩვენ გარშემო არსებულ სამყაროში, ვაკვირდებით მატერიას მაკროსკოპულ დონეზე. **მატერია** არის ყველაფერი, რასაც აქვს მასა და რისი დაკვირვებაც შესაძლებელია.

ერთ-ერთი ყველაზე ჩვეულებრივი გზა მატერიაზე დაკვირვებისა არის მისი შეცვლა გარკვეული გზით. ასხვავებენ ცვლილებათა ორ ტიპს: ფიზიკურ ცვლილებებს და ქიმიურ ცვლილებებს. ნივთიერებები, რომლებიც განიცდიან ფიზიკურ ცვლილებებს, არ კარგავენ თავიანთ ქიმიურ იდენტურობას. ფიზიკური

თვისებები ცვლადი სიდიდეებია, რომლებიც შეიძლება გავზომოთ ნივთიერების იდენტიურობის შეცვლის გარეშე. *მასა და სიმკვრივე* ცნობილი ფიზიკური თვისებებია. ასევეა *ფერი, სიბლანტე, სიმტკიცე და ტემპერატურა*. ზოგიერთი სხვა ფიზიკური თვისება (რომლებსაც განვსაზღვრავთ მოგვიანებით) არის *სითბო-ტევადობა, დუდილისა და ღღობის ტემპერატურები და აქროლადობა*.

ქიმიური თვისებები დაკავშირებულია იმ ქიმიურ ცვლილებათა ტიპთან, რომლებსაც ნივთიერება განიცდის. ქიმიური თვისებები შეიძლება განისაზღვროს მხოლოდ იმით, თუ როგორ იცვლება ნივთიერების იდენტიურობა ქიმიურ რეაქციებში.

როდესაც მაკროსკოპულად ვაკვირდებით ქიმიურ რეაქციას, ჩვენ საქმე გვაქვს მატერიის სამ მდგომარეობასთან ან ფ ა ზ ა ს თ ა ნ: მყარ სხეულებთან, სითხეებთან და აირებთან. მაკროსკოპულ დონეზე მყარი სხეულები მტკიცეა და არ იცვლიან თავიანთ ფორმას. სითხეები მაკროსკოპულად განსხვავდება მყარი სხეულებისგან, რადგან ისინი იღებენ იმ კონტეინერის ფორმას, რომელშიც არიან მოთავსებული. და ბოლოს, აირები, რომლებიც მაკროსკოპულად განსხვავდებიან როგორც მყარი სხეულებისაგან, ასევე სითხეებისგან, პირველ რიგში კი, იმით, რომ აირი ფართოვდება და იკავებს კონტეინერის მთელ მოცულობას (ნახ.1).



ნახ.1. ნივთიერებები მყარ, თხევად და აირად მდგომარეობაში

1.3. მიკროსკოპული ან კორპუსკულური დონე

ქიმიის ყველაზე ფუნდამენტური კონცეფცია მდგომარეობს იმაში, რომ მთელი მატერია შედგება ატომებისა და მოლეკულებისაგან. ეს განაპირობებს იმას, რომ ქიმიკოსები ყველაფერს განიხილავენ, როგორც ერთი ან რომელიმე სხვა სახის „ქიმიურ პროდუქტს“. მთელ რიგ შემთხვევებში მატერიას განვიხილავთ როგორც ქიმიური ნაერთების რთულ ნარევს და თითოეულ ინდივიდუალურ კომპონენტს ვუდგებით როგორც ქიმიურ ნივთიერებას. მთელი მატერია შედგება „სამშენებლო ბლოკების“ შეზღუდული რაოდენობისაგან. მათ ეწოდება **ელემენტები**. ატომები წარმოუდგენლად მცირე ნაწილაკებია (მათი კიდევ უფრო დაპატარავება შეუძლებელია), რომლებიც ჯერ კიდევ იქცევიან როგორც ქიმიური სისტემა. როდესაც ვსწავლობთ მატერიას ატომზე უფრო მცირე დონეზე, გადავდივართ ბირთვულ ანუ ელემენტარულ ნაწილაკთა ფიზიკაში. მაგრამ ატომები უმცირესი ნაწილაკებია, რომლებიც არსებობენ და ინარჩუნებენ ქიმიურ იდენტურობას, რომელ ელემენტშიც არ უნდა შედიოდნენ ისინი. **მოლეკულები** წარმოადგენენ ატომთა ჯგუფს, რომლებიც ისეა დაკავშირებული ერთმანეთთან, რომ ქმნიან ერთობლიობას, რომლის იდენტურობა მკვეთრად განსხვავდება ცალკეული ატომებისგან. და ბოლოს, ვნახავთ, რომ ძალები, რომლებიც ცნობილია როგორც „ქიმიური ბმები“, პასუხისმგებელია ატომების ამ მოლეკულებად გაერთიანებაში.

როგორ უნდა განვასხვავოთ ქიმიური და ფიზიკური ცვლილება ამ დონეზე? თუ პროცესი ფიზიკური ცვლილებაა, თავისთავად ატომები ან მოლეკულები საერთოდ არ იცვლება. ამის საილუსტრაციოდ განვიხილოთ „ცნობილი“ მოლეკულა – წყალი – H_2O . როდესაც წყალი დუღს, ინდივიდუალური მოლეკულების შემადგენლობა ერთი და იგივეა როგორც თხევად, ისე აირად ფაზაში. წყალი არ იცვლება. თუ წყლის დუღილს შევადარებთ ელექტროლიზს, რომელიც მიმდინარეობს წყალში ელექტრული დენის გავლისას, ვნახავთ, რომ ამ შემთხვევაში წყლის მოლეკულები იშლება წყალბადისა და ჟანგბადის მოლეკულებად. ასე რომ, ეს პროცესი ქიმიური ცვლილებაა.

2. ატომები და მოლეკულები

ამ თავის შესწავლის შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

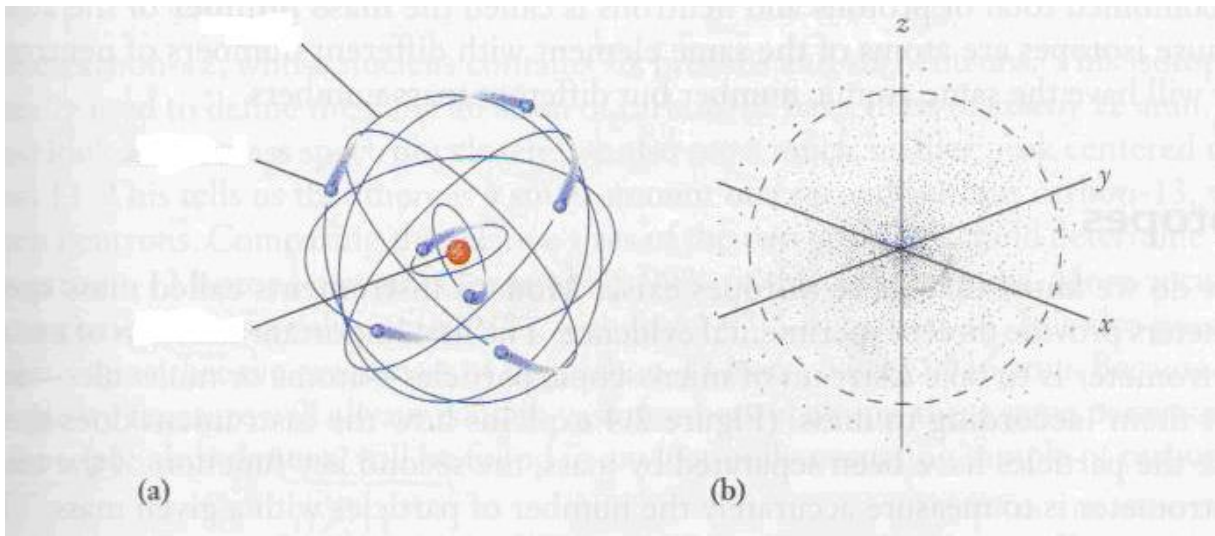
- განსაზღვროს ტერმინები: ატომი, მოლეკულა, იზოტოპი, იონი, ნაერთი და ფუნქციური ჯგუფი თავისი სიტყვებით.
- აღწეროს ატომის ბირთვული მოდელი და განსაზღვროს პროტონების, ელექტრონებისა და ნეიტრონების რიცხვი გარკვეულ იზოტოპში მისი ქიმიური სიმბოლოს მიხედვით.
- გამოთვალოს ელემენტის ატომური მასა მისი იზოტოპების მასებისა და შემცველობიდან გამომდინარე.
- ახსნას განსხვავება მოლეკულურ და ემპირიულ ფორმულებს შორის.
- განსაზღვროს ატომების რიცხვი მოლეკულაში მისი ქიმიური ფორმულის მიხედვით.
- აღწეროს ელემენტების განლაგება პერიოდულ სისტემაში და ახსნას ცხრილის გამოსადეგობა.
- გამოიყენოს სტანდარტული ქიმიური ნომენკლატურა, რათა მიიღოს მარტივი არაორგანული ნაერთების სახელი მისი ფორმულიდან ან პირიქით.

2.1. ატომური სტრუქტურა და მასა

2.1.1. ატომის ფუნდამენტური ცნებები

ატომის აგებულების თანამედროვე მოდელი თითქმის საუკუნეა რაც მიიღეს. მან დიდი კრეატიულობა შეიძინა და განვითარდა მრავალი ექსპერიმენტის შედეგად. ატომი შედგება პატარა კომპაქტური გულისგან, რომელსაც ბირთვი ეწოდება და მის გარშემო მყოფი ელექტრონების დისპერსიული ღრუბლისგან. ბირთვი შედგება ორი ტიპის ნაწილაკებისგან: პროტონებისა და ნეიტრონებისგან. ელექტრონებსა და ბირთვს შორის ისეთი პატარა სივრცეა, რომ მისი ჩვენება ილუსტრაციის მასშტაბში შეუძლებელია. განვიხილოთ ნახ. 2.ა, რომელიც გვიჩვენებს პროტონების, ნეიტრონების და ელექტრონების ფარდობით

მდებარეობას, მაგრამ თუ პროტონი და ნეიტრონი რეალურ ზომებშია ნაჩვენები, ელექტრონები იქნება რამდენიმე ასეული მეტრით დაშორებული. სხვა გაუგებრობა, გამოწვეული ილუსტრაციის ამ ტიპით, არის ელექტრონების სურათი, რომლებიც მოძრაობენ რეგულარულ ორბიტებზე ბირთვის გარშემო. ატომური სტრუქტურის უკეთესი მოდელი წარმოგვიდგენს ელექტრონებს, როგორც უარყოფითი მუხტის ღრუბლებებს, რომლებიც, ნაწილაკებისგან განსხვავებით, მოძრაობენ ბირთვის გარშემო მოწესრიგებულად (ნახ. 2.ბ).



ნახ.2. ატომის პლანეტარული მოდელი

ახლა ჩვენ ყურადღებას გავამახვილებთ ატომში პროტონების, ნეიტრონებისა და ელექტრონების რიცხვზე. ელექტრული მუხტი მნიშვნელოვანად ზღუდავს ამ რიცხვებს. პროტონები დადებითადაა დამუხტული, ელექტრონები – უარყოფითად და ნეიტრონები ნეიტრალურია. თავისთავად „ატომები ასევე ელექტრულად ნეიტრალურია. ასე რომ, პროტონებისა და ელექტრონების რიცხვი უნდა იყოს ისეთი, რომ მათმა მუხტებმა გააბათილოს ერთმანეთი. ცნობილია, მუხტის CI ერთეულია კულონი (კ). ცდებმა გვაჩვენა, რომ ელექტრული მუხტი პროტონსა და ელექტრონზე ტოლია და საწინააღმდეგო ნიშნისაა. ნებისმიერი ელექტრონის მუხტია $-1,602 \cdot 10^{-19}$ კ, მაშინ როცა ნებისმიერი პროტონისაა $+1,602 \cdot 10^{-19}$ კ. ასე რომ, ატომი რომ დარჩეს ნეიტრალური, მასში პროტონებისა და ნეიტრონების ტოლი რაოდენობა უნდა იყოს. რადგან ნეიტრონებს მუხტი არ აქვთ, არსებული ნეიტრონების რაოდენობა არ არის შეზღუდული

ელექტრონეიტრალობის მოთხოვნით. ელემენტთა უმრავლესობისთვის ნეიტრონების რიცხვი შეიძლება იცვლებოდეს ერთი ატომიდან მეორესკენ.

2.2. ატომური რიცხვი და მასური რიცხვი

პროტონების რიცხვი ცალკეულ ატომში, რომელსაც ეწოდება **ატომური რიცხვი**, განსაზღვრავს ელემენტს. მაგალითად, ნახშირბადის ატომური რიცხვია ექვსი, რაც გვეუბნება, რომ ნეიტრალური ნახშირბადის ატომში ექვსი პროტონია. ელექტრონეიტრალობა მოითხოვს, რომ ნახშირბადის ატომში ასევე უნდა იყოს ექვსი ელექტრონი. ნახშირბადის ატომების უმრავლესობა – დაახლოებით 99 % – ასევე შეიცავს ექვს ნეიტრონს. მაგრამ ნახშირბადის ზოგიერთი ატომი შეიცავს შვიდ ან რვა ნეიტრონსაც კი. ერთი და იმავე ელემენტის ატომებს, რომლებიც განსხვავდება ნეიტრონების რიცხვით, **იზოტოპები** ეწოდება. პროტონები და ელექტრონები განსაზღვრავენ ატომების, პრაქტიკულად ყველა მნიშვნელოვან ქიმიურ თვისებას, ასე რომ, ზოგადად, იზოტოპების ქიმიურად გამოცალკევება ძნელია. მაგრამ იზოტოპების არსებობა და მათი ფარდობითი შემცველობის დადგენა შეიძლება ატომების მასის ზუსტი განსაზღვრით.

პროტონებისა და ნეიტრონების მასა ერთნაირია; თითოეული მათგანი დაახლოებით 2000-ჯერ მძიმეა ელექტრონზე. ასე რომ, ნებისმიერი ატომის მასა კონცენტრირებულია მის ბირთვში. ცალკეული ატომები ისე პატარა და მსუბუქია, რომ მათი მასების გამოსახვა ჩვეულებრივ ერთეულებში, როგორიცაა კილოგრამი ან გრამი, მოუხერხებელია. ამის ნაცვლად ვიყენებთ ერთეულს, რომელიც შეესაბამება ატომურ მასშტაბს: მასის ატომური ერთეული ანუ **მაე**: $1 \text{ მაე} = 1,6605 \times 10^{-24} \text{ გ}$. როგორც ნეიტრონის, ასევე პროტონის მასა ძალიან ახლოსაა მაე-სთან. ნეიტრონის მასა ტოლია 1,009 მაე-ს; პროტონის – 1.007 მაე-ს. ამის საწინააღმდეგოდ, ელექტრონის მასაა 0,00055 მაე. რიგი პრაქტიკული მოსაზრებების გამო, ჩვენ ვსაზღვრავთ ატომის მასას პროტონებისა და ნეიტრონების მასების უბრალოდ შეკრებით. ეს რიცხვი იქნება მასა მაე-ში საკმაოდ დამაჯერებელი მიახლოებით. ამის გამო, პროტონებისა და ნეიტრონების ჯამს ეწოდება ატომის **მასური რიცხვი**. რადგან იზოტოპი არის იგივე

ელემენტის ატომები ნეიტრონების განსხვავებული რაოდენობით, მას აქვს იგივე ატომური რიცხვი, მაგრამ განსხვავებული მასური რიცხვი.

2.3. იზოტოპები

განვიხილოთ ნახშირბადის იზოტოპები. ძირითადი იზოტოპია ნახშირბადი-12, რომლის ბირთვიც შეიცავს ექვს პროტონს და ექვს ნეიტრონს. ეს იზოტოპი ჩვეულებრივ გამოიყენება მაე-ს განსაზღვრისათვის. ნახშირბად-12-ს ატომის მასა ზუსტად 12 მაე-ა. მაგრამ მას-სპექტრომეტრიის მეთოდით დადგენილია, რომ არის მცირე რაოდენობა მეორე იზოტოპისა: ნახშირბადი-13, რომელშიც შვიდი ნეიტრონია. დადგინდა, რომ იზოტოპში ნახშირბადი-12-ის შემცველობაა 99%, ანუ უფრო ზუსტად, 98,93%-ია და მხოლოდ 1,07% მოდის ნახშირბად-13-ზე. ასევე ზუსტად განსაზღვრეს ამ იზოტოპის მასა – 13,0036 მაე. ამ პროცენტულ მნიშვნელობას უწოდებენ იზოტოპურ შემცველობას.

2.4. ატომური სიმბოლოები

მთელი ინფორმაცია ატომის აგებულების შეიძლება მოკლედ გამოისახოს ატომური სიმბოლოების გამოყენებით. ზოგადი ატომური სიმბოლო ასე ჩაიწერება: ${}^A_Z E$, აქ E არის ელემენტის სიმბოლო, ზედა ინდექსი A მასური რიცხვია და ქვედა ინდექსი Z – ატომური რიცხვი. ნახშირბად-12-ის სიმბოლო იქნება ${}^{12}_6 C$.

ბევრი ატომური სიმბოლო ცხადად გამომდინარეობს ელემენტის დასახელებიდან, როგორც ნახშირბადი ჩვენს მაგალითში. სხვა ელემენტების სიმბოლო დაფუძნებულია ლათინურ სახელზე. მაგალითად, რკინის სიმბოლო – Fe გამომდინარეობს ლათინური სიტყვიდან *ferrum* და ატომი, რომელშიც 26 პროტონი და 30 ნეიტრონია, ასე გამოისახება ${}^{30}_{26} Fe$. ზოგიერთი ცნობილი ელემენტის ჩამონათვალი, რომელთა სიმბოლოები არ ეფუძნება მათ ინგლისურ დასახელებას, მოტანილია ცხრილში 1.

სახელი	სიმბოლო
ოქრო	<i>Au (aurum)</i>
რკინა	<i>Fe (ferrum)</i>
ტყვია	<i>Pb (plumbum)</i>
ვერცხლისწყალი	<i>Hg (hydrogenium)</i>
ვერცხლი	<i>Ag (argentum)</i>
ნატრიუმი	<i>Na (natrium)</i>

2.5. ატომური მასები

პერიოდულ სისტემაზე დაკვირვებისას აღმოაჩენთ ზოგიერთ ჩვენ მიერ უკვე განხილულ ინფორმაციას, კერძოდ, ატომურ სიმბოლოს და ატომურ რიცხვს. თითქმის ყოველთვის ამ ცხრილში მოცემულია აგრეთვე ატომური მასა. ეს რიცხვი გვიჩვენებს ელემენტის ატომის საშუალო მასას მ.ა.ე.-ში. მაგალითად, ნახშირბადის ატომური მასა მოთავსებულია სიმბოლოს ქვემოთ: 12,011. მაგრამ უკვე აღვნიშნეთ, რომ ნახშირბად-12-ის მასა შეადგენს ზუსტად 12 მაე-ს და ნახშირბად-13-ის 13.0036 მაე-ს. ასე რომ, სიდიდე 12,011 ვერ განიხილება, როგორც ნებისმიერი ცალკეული ნახშირბადის ატომის მასა. მაშ, როგორ ისაზღვრება ატომური მასა?

ატომის მასა განისაზღვრება როგორც კონკრეტული ელემენტის ატომის საშუალო მასა. ნახშირბადს აქვს ორი იზოტოპი მასებით 12.0000 და 13.0036 მ.ა.ე. რატომაც საშუალო მასა 12.011 და არ არის 12.5-ის მახლობლად? საქმე ისაა, რომ საშუალო მასის გამოთვლისას უნდა გავითვალისწინოთ თითოეული იზოტოპის ფარდობითი შემცველობა. ამისათვის კი უნდა მასა გავამრავლოთ მის შემცველობაზე:

$$\text{ნახშირბადი} - 12 : 12.0000 \cdot 0.893 = 11.87$$

$$\text{ნახშირბადი} - 13 : 13.0036 \cdot 0.0107 = 0.139$$

$$\text{საშუალო მასა} = 11.87 + 0.139 = 12.01$$

რიცხვი 12.011, ნაჩვენები პერიოდულ ცხრილში, მიღებულია დამატებითი მაჩვენებლების გათვალისწინებით.

2.6. ვალენტობა

ვალენტობა არის ელემენტის თვისება, შეიერთოს სხვა ელემენტის განსაზღვრული რაოდენობის ატომები. ვალენტობის ერთეულია წყალბადის ატომის ვალენტობა. იგი ერთვალენტიანია. ელემენტი, რომელიც 1 ატომ წყალბადს იერთებს ასევე ერთვალენტიანია (HCl , HI); ელემენტი, რომელიც 2 ატომ წყალბადს იერთებს ორვალენტიანია (H_2O , H_2S) და ა.შ.

არსებობს მუდმივი და ცვლადი ვალენტობის მქონე ელემენტები. მუდმივი ვალენტობა გააჩნია H , O და ძირითადად მეტალებს Li , Na , K , Cu , Ca , Al , Zn და ა.შ. , ცვლადი ვალენტობა გააჩნია S , N , C , Se , Cl , Fe და ა.შ.

2.7. იონები

უკვე აღინიშნა, რომ ელექტრონეიტრალურ ატომში პროტონებისა და ელექტრონების რიცხვი ტოლი უნდა იყოს. თუ ეს ასე არ არის, ვიღებთ ნაწილაკს ჯამური მუხტით, რომელსაც ეწოდება **იონი**. ასეთი ნაწილაკები უკვე აღარ წარმოადგენს ატომებს და მათი თვისებები მკვეთრად განსხვავდება ატომის თვისებებისგან.

როდესაც იონი წარმოიქმნება ცალკეული ატომიდან, მას ეწოდება **მონოატომური იონი**. როდესაც მუხტის მატარებელია ატომების ჯგუფი, მათ უწოდებენ **პოლიატომურ იონებს**. როგორც მონოატომური, ისე პოლიატომური იონები შეიძლება ატარებდნენ უარყოფით ან დადებით მუხტს. უარყოფითად დამუხტულ იონებს ეწოდებათ **ანიონები** და ისინი შეიცავენ მეტ ელექტრონს, ვიდრე პროტონს. ანალოგიურად, თუ იონს აქვს მეტი პროტონი, ვიდრე ელექტრონი, მას ეწოდება **კათიონი**.

ელექტრული მუხტების ქცევა და ურთიერთქმედება ფიზიკის მნიშვნელოვანი პრობლემაა, მაგრამ ისინი გვხვდება მრავალი ქიმიური მოვლენის გააზრებაშიც. ჩვენთვის მთავარია ორი ფუნდამენტური იდეა: პირველი: საწინააღმდეგო ნიშნის მუხტები მიიზიდავენ ერთმანეთს და ერთნაირი ნიშნისა –

განიზიდავენ, და მეორე: ელექტრული მუხტები ინახება. აქედან გამომდინარე, რადგანაც მუხტი ინახება, შეიძლება დავასკვნათ, რომ თუ ნეიტრალური ატომი ან მოლეკულა გარდაიქმნება იონად, ამავე დროს, სხვა საწინააღმდეგო ნიშნით დამუხტული ნაწილაკი – ელექტრონი ან სხვა იონი წარმოიქმნება. მეტიც, რადგანაც საწინააღმდეგო მუხტები იზიდავენ ერთმანეთს, საჭიროა გარკვეული ენერგიის მიწოდება, რათა ნეიტრალური ატომი ან მოლეკულა გარდაექმნათ საწინააღმდეგო ნიშნით დამუხტული ნაწილაკების წყვილად.

2.8. იონები და მათი თვისებები

არსებობს მრავალი მონოატომური კათიონი და ანიონი. ეს იონები აირად ფაზაშიც არიან და მნიშვნელოვან როლს თამაშობენ ატმოსფეროს ქიმიაში. მაგრამ უფრო ხშირად იონები გვხვდება წყალში გახსნილ ნივთიერებებში. მაგალითად, ნატრიუმის ატომი ადვილად კარგავს ელექტრონს და წარმოიქმნება იონი Na^+ . რადგანაც მას ისევ დარჩა 11 პროტონი, იონი ინარჩუნებს ნატრიუმის სიმბოლოს, მაგრამ ის უკვე აღარ იქცევა ისე, როგორც ნატრიუმის ატომი. მაგალითად, შემწვარ კარტოფილში (ფრი) არის ბევრი ნატრიუმი სუფრის მარილის სახით, მაგრამ იგი ვერ ააღდება როგორც მეტალური ნატრიუმი, რადგანაც მარილში ნატრიუმი იონის სახითაა. ასე რომ, ამ შემთხვევაში, დიდი განსხვავებაა იონსა და ატომს შორის.

ნატრიუმისგან განსხვავებით, ქლორი ადვილად იერთებს ზედმეტ ელექტრონს და წარმოიქმნება ქლორიდის იონი Cl^- . ამ შემთხვევაშიც დიდი განსხვავებაა ქლორის იონსა და ატომს შორის. ზემოთ ნახსენები სუფრის მარილი არის ნატრიუმის ქლორიდი, რომელიც შეიცავს ქლორიდ-ანიონებს. მეორე მხრივ, ქლორის ატომები წყვილდებიან და წარმოქმნიან მოყვითალო-მომწვანო აირს – Cl_2 , რომელიც აღიზიანებს ფილტვებს და ტოქსიკურია. აქაც, იონის ქცევა მკვეთრად განსხვავდება ნეიტრალური ატომის ან მოლეკულის ქცევისგან.

2.9. ნაერთები და ქიმიური ბმები

2.9.1. ქიმიური ფორმულები

ქიმიური ნაერთი – ეს არის სუფთა ნივთიერება, შედგენილი ორი ან რამდენიმე ელემენტისგან, რომლებიც დაკავშირებულია ქიმიური ბმებით. ნებისმიერ ნაერთში ატომები ერთდებიან ფიქსირებული მთელი რიცხვებით. ნებისმიერი კომბინაციისას საბოლოო ნაერთის ქცევა განსხვავებულია ცალკეული ატომების ქცევისგან. მთელ რიგ ნაერთებში ატომები ერთიანდება დისკრეტული ნაწილაკების, ე.წ. მოლეკულების სახით. მოლეკულები შეიძლება დაიშალოს შემადგენელ ატომებად, მაგრამ ატომების მიღებული ერთობლიობა არ იქცევა ისე, როგორც საწყისი მოლეკულა. არის სხვა მასალები, შედგენილი ატომებისგან და იონებისგან, მაგრამ ისინი არ წარმოქმნიან მოლეკულებს. ქიმიურ ნაერთთა ამ კატეგორიას განეკუთვნება შენადნობები, მეტალები და იონური მყარი სხეულები (შედგენილი იონ-წყვილებიდან). ჩვენ უკვე ვნახეთ, თუ როგორ გამოისახება ატომები ატომური სიმბოლოებით. იგივე იდეა ვრცელდება როგორც მოლეკულების, აგრეთვე ატომებისა და იონების გაფართოებულ სტრუქტურებზე.

ქიმიური ფორმულა აღწერს ნაერთს მისი შემადგენელი ელემენტების საფუძველზე. ჩვენ რეალურად საქმე გვაქვს ქიმიური ფორმულების ორ განსხვავებულ ტიპთან: მოლეკულური ფორმულები და ემპირიული ფორმულები. ნაერთის მოლეკულური ფორმულა – ეს არის კომპონენტების ჩამონათვალი, რომელიც ეფექტურად აღწერს მოლეკულის ატომურ შემადგენლობას. მაგალითად, ეთილენის მოლეკულური ფორმულაა C_2H_4 , რაც გვეუბნება, რომ მოლეკულაში შედის ორი ნახშირბადის ატომი და ოთხი წყალბადის ატომი. ემპირიული ფორმულა გვიჩვენებს მხოლოდ სხვადასახვა ელემენტების რაოდენობის ფარდობით მაჩვენებელს. ეთილენის შემთხვევაში ნახშირბადის ატომების ფარდობა წყალბადთან არის 1:2. ასე რომ, ემპირიული ფორმულაა CH_2 .

არის ოთხი წესი, რომლებიც საშუალებას გვაძლევს დავწეროთ ფორმულათა უმრავლესობა:

1. ატომების ტიპების აღნიშვნა ნივთიერებაში მათი ატომური სიმბოლოებით.

2. ნაერთში თითოეული ატომის რაოდენობის აღნიშვნა ქვედა ინდექსით ატომური სიმბოლოს მარჯვნივ. მაგალითად, ეთილენის ქიმიური ფორმულა – C_2H_4 გვეუბნება, რომ თითოეული მოლეკულა შეიცავს ორ ნახშირბადის ატომს ოთხ წყალბადის ატომს.

3. ატომთა ჯგუფების აღნიშვნა შეიძლება მრგვალი ფრჩხილებით. ინდექსები ამ ფრჩხილებს გარეთ ნიშნავს, რომ ყველა ატომი, მოთავსებული ამ ფრჩხილებში, მრავლდება ქვედა ინდექსით მითითებულ სიდიდეზე.

4. წყლის მოლეკულებს, შეერთებულს გარკვეულ ნაერთებთან, ეწოდება ჰიდრატები და ისინი აღინიშნება ცალკე დანარჩენი ნაერთისაგან.

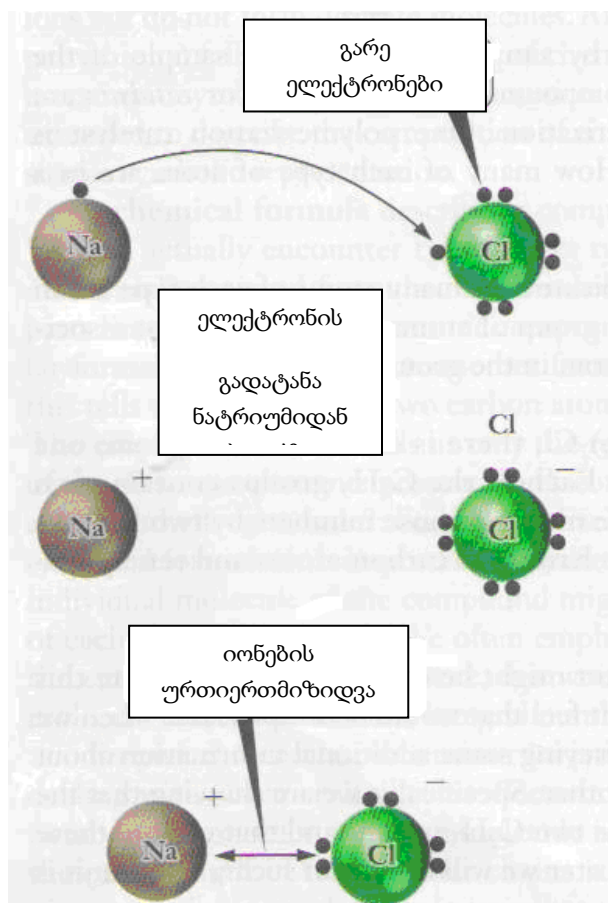
2.9.2. ქიმიური შეკავშირება

ნაერთები მიიღება ატომების გაერთიანებით. ქიმიური ბმების წარმოქმნის და ბმების სხვადასხვა ტიპების დადგენა გვიადვილებს მრავალი ნივთიერების ქიმიური თვისებების შესწავლას.

ყველა ქიმიური ბმა ორ მახასიათებელს მოიცავს. პირველი: ყველა ბმა შეიცავს ელექტრონების გაცვლას ან განაწილებას, მეორე: ელექტრონების ეს გაცვლა ან განაწილება იწვევს ნაერთის ენერგიის შემცირებას. ქიმიური ბმა არ წარმოიქმნება ან ადგილი აქვს სწრაფად გარდამავალ მდგომარეობას მანამ, სანამ არ შემცირდება ატომების ერთობლიობის მთლიანი ენერგია.

ქიმიური ბმები იყოფა სამ კატეგორიად: იონური, კოვალენტური და მეტალური. ზოგიერთი ნაერთი წარმოიქმნება საწინააღმდეგო ნიშნით დამუხტული იონებისგან, რომლებიც ქმნიან გავრცობილ მატრიცას, რომელსაც მესერი ეწოდება. ასეთი ნაერთების შეკავშირებას იონური ბმა ეწოდება. იონის წარმოსაქმნელად ერთ-ერთი ნივთიერება კარგავს ელექტრონს და ხდება კათიონი, მაშინ როცა მეორე შეიძენს ელექტრონს და ხდება ანიონი. მაგალითად, $NaCl$ -ის იონური ნაერთის წარმოქმნისას იონური ნაერთები ქმნიან გავრცობილ სისტემას ანუ მესერს დადებითი და უარყოფითი მუხტის მქონე ნაწილაკებიდან. თუმცა, ფორმულა $NaCl$ ზუსტად ასახავს იმას, რომ ნატრიუმი და ქლორი წარმოდგენილია

1:1 თანაფარდობით, მაგრამ რეალურად ჩვენ ვერ მოვახდენთ NaCl -ის, როგორც "მოლეკულის", იდენტიფიკაციას. ამ განსხვავების გასააზრებლად ზოგჯერ მივმართავთ ფორმულის ერთეულს მოლეკულის მაგივრად. ეს არის უმცირესი მთელი რიცხვი ატომების თანაფარდობისა იონურ ნაერთში (ნახ. 3).



ნახ.3. $\text{Na}^+ - \text{Cl}^-$ იონ-წყვილის წარმოქმნა

მეტალები წარმოადგენენ გავრცობილი სისტემის სხვა ტიპს, მაგრამ აქ ქიმიური ბმა მკვეთრად განსხვავებულია. მეტალებში ატომები განლაგებულია მატრიცაში, მაგრამ დადებითად და უარყოფითად დამუხტული ნაწილაკები არ მონაცვლეობენ. ამის ნაცვლად, ბირთვი და ელექტრონების გარკვეული ნაწილი შეადგენენ დადებითად დამუხტულ „გულს“, რომელიც ლოკალიზებულია ამ მატრიცის წერტილებში და დანარჩენი ელექტრონები ასე თუ ისე თავისუფლად მოძრაობენ მთელ სივრცეში, რაც იწვევს ელექტროგამტარობას, რადგანაც

ელექტრონები თავისუფლად მოძრაობენ ძირითად ნივთიერებაში. ამას ეწოდება **მეტალური კავშირი**.

როცა ელექტრონები განაწილებულია ორ ატომს შორის და არ გადადიან ერთი ატომიდან მეორეზე, საქმე გვაქვს **კოვალენტურ ბმასთან**. აქ ელექტრონები, ჩვეულებრივ, განაწილებულია წყვილებად. ორი ელექტრონი (ზოგჯერ ოთხი და ექვსიც კი) მოთავსებულია ორ ბირთვს შორის და ეს განაწილება იწვევს ბირთვების მიზიდვას. ამის მაგალითია პოლიმერები, სადაც ელექტრონები განაწილებულია მეზობელ ნახშირბადის ატომებს შორის. უფრო ცნობილი მოლეკულებია წყალი, ნახშირორჟანგი და პროპანი.

2.10. პერიოდული სისტემა

2.10.1. პერიოდები და ჯგუფები

თანამედროვე პერიოდულ სისტემაში ელემენტები განლაგებულია ორი მნიშვნელოვანი გზით: ცხრილის ჰორიზონტალურ რიგს ეწოდება **პერიოდი** და ვერტიკალურ სვეტს – **ჯგუფი**. ტერმინი „პერიოდი“ გამოიყენება, რადგანაც ელემენტის მრავალი მნიშვნელოვანი თვისება თანმიმდევრულად იცვლება რიგის გასწვრივ. რადგანაც ელემენტები ცხრილში განთავსებულია ატომური რიცხვის ზრდის მიხედვით, თვისებებიც, შესაბამისად, იცვლება პერიოდში მარცხნიდან მარჯვნივ, მაგალითად, სიმკვრივე და ა.შ. სულ ცხრილში არის 7 რიგი.

თუმცა ელემენტთა თვისებები მნიშვნელოვნად იცვლება პერიოდის გასწვრივ, თითოეული მწკრივი აერთიანებს ელემენტებს ანალოგიური ქიმიური თვისებებით. ელემენტთა უმრავლესობას შეუძლია შეუერთდეს წყალბადს შესაბამისი ნაერთის წარმოქმნით. ელემენტები ჯგუფში (მწკრივში) უერთდება წყალბადის ატომის ერთსა და იმავე რაოდენობას. ფტორი, ქლორი და ბრომი უერთდება წყალბადის ერთ ატომს და სამივე მათგანი ერთ ჯგუფშია.

ელემენტთა ჯგუფებს მიანიჭეს სახელები, რომლებიც დღემდე გამოიყენება. მაგალითად, ყველაზე მარცხენა მწკრივის ელემენტები (**Li, Na, K, Rb, Cs**) ცნობილია, როგორც **ტუტე მეტალები**. ანალოგიურად, **Be, Mg, Ca, Sr, Ba** – არიან **ტუტემიწები**,

F, Cl, Br და *I* განიხილება, როგორც ჰალოგენები. *He, Ne, Ar, Kr* და *Xe* აღმოაჩინეს ბევრად უფრო გვიან და მათ დაარქვეს იშვიათი აირები ან ინერტული აირები. სხვა ჯგუფებსაც აქვს თავიანთი სახელები, მაგრამ ისინი ნაკლებად გამოიყენება.

არსებობს აგრეთვე ცხრილის სხვადასხვა უბნის სახელებიც. ელემენტები ორ ჯგუფში ცხრილის მარცხენა მხარეს და ექვს ჯგუფში მარჯვენა მხარეს განიხილება როგორც წარმომადგენლობითი ელემენტები ან მთავარი ჯგუფის ელემენტები. ელემენტებს, რომლებიც ყოფენ ჯგუფების ამ ორ ნაწილს, ეწოდება გარდამავალი მეტალები. ამის მაგალითია რკინა. ელემენტებს პერიოდული ცხრილის ქვევით ეწოდებათ ლანთანოიდები (ელემენტ ლანთანის, $Z = 57$ შემდეგ) და აქტინოიდები (აქტინიუმის, $Z = 89$ შემდეგ).

გარდა ამ სახელებისა, გამოიყენება რამდენიმე რიცხვითი სისტემა, კერძოდ, სულ არის 18 ჯგუფი. მაგალითად, ჯგუფი, რომელიც შეიცავს *C, Si, Ge, Sn* და *Pb*, განიხილება როგორც ჯგუფი 14.

2.10.2. მეტალები, არამეტალები და მეტალოიდები

ელემენტების კლასიფიკაციის სხვა გზა არის მათი დაყოფა მეტალებად, არამეტალებად და მეტალოიდებად.

ელემენტთა უმრავლესობა მეტალია. პერიოდულ სისტემაში ისინი ძირითადად განლაგებულია მარცხნივ და ზევიდან ქვევით.

არამეტალებს უკავიათ ცხრილის ზედა მარჯვენა ნაწილი. ისინი უფრო მცირერიცხოვანია, ვიდრე მეტალები, მაგრამ არანაკლებ მნიშვნელოვანი. ადამიანის სხეული შეიცავს ისეთ არამეტალურ ელემენტებს, როგორებიცაა: ნახშირბადი, წყალბადი, ჟანგბადი, აზოტი, გოგირდი და ფოსფორი.

ზოგიერთი ელემენტის კლასიფიცირება შეიძლება როგორც მეტალის, ასევე არამეტალის. ასეთ ელემენტებს ეწოდება მეტალოიდები ანუ ნახევრად მეტალი. ცხრილში ისინი განთავსებულია დიაგონალურად.

2.11. ქიმიური ნომენკლატურა

თუმცა ცნობილია ელემენტების შეზღუდული რაოდენობა, მაგრამ ამ ელემენტებიდან შედგენილი ნაერთების რიცხვი განუსაზღვრელია. ამიტომ, აუცილებელია სისტემა, რომელიც ქიმიური ნაერთების სახელებს განსაზღვრავს. ასეთ სისტემას **ქიმიურ ნომენკლატურას** უწოდებენ.

ნაერთებს, რომლებიც შეიცავენ მხოლოდ ორ ელემენტს, **ბინარული ნივთიერებები** ეწოდება. მაგალითად, Fe_2O_3 -ბინარული ნაერთია. მნიშვნელოვანია, რომ ქიმიური ფორმულიდან განვსაზღვროთ, თუ როგორია ნაერთი – იონური თუ კოვალენტური. ამაში დაგვეხმარება ელემენტის განსაზღვრა – მეტალია ის თუ არა მეტალი. როცა ერთდება ორი არამეტალი, წარმოიქმნება კოვალენტური ნაერთი. მაგრამ როცა მეტალი და არამეტალი ერთიანდება, ხშირად მიიღება იონური ნაერთი.

კოვალენტური ნაერთების დასახელება

ბინარულ ნაერთში, ელემენტი, რომელიც ფორმულაში პირველია, ასევე პირველია მის დასახელებაში. პირველი ელემენტი ინარჩუნებს თავის სრულ სახელს, მაშინ როცა მეორე – აღიწერება იდ-სუფიქსით. ორივე ელემენტს ენიჭება რიცხვის აღმნიშვნელი პრეფიქსი, გარდა იმ შემთხვევისა, როცა პირველი ელემენტი მხოლოდ ერთი ატომითაა წარმოდგენილი. მაგალითად, NO_2 -აზოტის დიოქსიდი.

იონური ნაერთების დასახელება

ამ შემთხვევაში ნომენკლატურის წესები განსაზღვრავს, რომ დადებითად დამუხტული ნაწილაკები – კათიონები ისეა დახასიათებული მისი მუხტით, რომ გვიჩვენოს ერთიანი ფორმულა.

ცნობილია, რომ ელემენტების ნაწილი წარმოქმნის **მონოატომურ** ანიონებს, მაგალითად, ჰალოგენები ($NaCl$). ასევე მრავალი ნაერთი შეიცავს **პოლიატომურ** იონებს (მაგალითად, $BaCl_2$). ასევე არსებობს სისტემები, რომლებიც შეიცავენ ჟანგბადს და მეორე ელემენტს. მათ **ოქსიანიონებს** უწოდებენ (მაგალითად, ClO_2^-).

3. მოლეკულები, მოლები და ქიმიური განტოლობები

ამ თავის შესწავლის შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

- ახსნას ქიმიური განტოლების გაწონასწორება, როგორც მასის შენახვის კანონის გამოყენება.
- ჩამოთვალოს, სულ მცირე, სამი სიდიდე, რომლებიც უნდა ინახებოდეს ქიმიური რეაქციისას.
- დაწეროს გაწონასწორებული ქიმიური განტოლება მარტივი რეაქციისთვის, რომელიც მოცემულია გაუწონასწორებელი სახით ან სიტყვიერი აღწერით.
- ახსნას მოლის ცნება საკუთარი სიტყვებით.
- მოახდინოს ქიმიური განტოლების ინტერპრეტირება, როგორც მოლის, ასევე მოლეკულის ტერმინებით.
- ჩაატაროს მასის, მოლეკულათა რაოდენობის ან მოლების რიცხვის ურთიერთგარდაქმნა.
- განსაზღვროს ქიმიური ფორმულა ელემენტური ანალიზიდან (მაგალითად, %-ული შედგენილობიდან)
- განსაზღვროს ხსნარის კონცენტრაცია და გამოთვალოს ხსნარის მოლარობა შესაბამისი მონაცემებიდან.
- გამოთვალოს განზავებით მიღებული ხსნარის მოლარობა ან გამოთვალოს რაოდენობა, რომელიც საჭიროა განზავებისათვის გარკვეული კონცენტრაციის ხსნარის მისაღებად.
- განასხვავოს ერთმანეთისგან ელექტროლიტები და არაელექტროლიტები და ახსნას, თუ რატომაა განსხვავებული მათი ხსნარები.
- აღწეროს ფრაგმენტები (იონები, მოლეკულები და ა.შ) სხვადასხვა მარტივ ხსნარებში.
- დაწეროს მჟავა-ფუძე ნეიტრალიზაციის რეაქციის მოლეკულური და იონური განტოლობები.

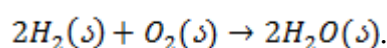
3.1. ქიმიური ფორმულები და განტოლებები

3.1.1. ქიმიური განტოლების ჩაწერა

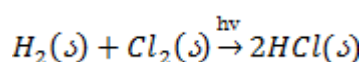
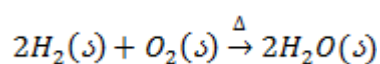
ქიმიური განტოლების მიზანია წარმოადგინოს ერთი ან რამდენიმე ქიმიური ნაწილაკის გარდაქმნა ახალ ნაერთებად. იმისათვის, რომ ნათელი იყოს მათი მნიშვნელობა, ქიმიური განტოლების დაწერისას ხელმძღვანელობენ რიგი შეთანხმებებით. ყოველ განტოლებას აქვს ორი მხარე და, ჩვეულებრივ, მიღებულია, რომ რეაქცია მიმდინარეობს მარცხნიდან მარჯვნივ. საწყის ნივთიერებებს ეწოდება **რეაგენტები** და ისინი განლაგებულია განტოლების მარცხენა მხარეს. რეაქციის შედეგად მიღებულ ნაერთებს ეწოდება **პროდუქტები** და ისინი განტოლების მარჯვენა მხარესაა. მთლიანობაში, ზოგადი ქიმიური განტოლება ასეთია:

რეაგენტები → პროდუქტები

ჩვენ ვიყენებთ ქიმიურ ფორმულას, რათა მოვახდინოთ ცალკეული რეაგენტებისა და პროდუქტების იდენტიფიცირება. ნაერთთა ფიზიკური მდგომარეობა ხშირად აღნიშნება შემდეგნაირად: **(g)** - აღნიშნავს მყარ სხეულს, **(l)** - სითხეს, **(a)** - აირს და **(s)** - ნივთიერებას, გახსნილს წყალში. მაგალითად, ჟანგბადსა და წყალბადს შორის რეაქცია ასე ჩაიწერება:



ყველა ნაერთი ამ რეაქციაში - აირია. ერთ-ერთი მახასიათებელი რეაქციისა არის ის, რომ იგი მიმდინარეობს მხოლოდ მაღალ ტემპერატურაზე. ამიტომ ჩაწერის სრულყოფისათვის საჭიროა რეაქციის პირობების მითითებაც. ჩვეულებრივ, ეს ხდება ისრის თავზე სიმბოლოს მოთავსებით. Δ - აღნიშნავს მაღალ ტემპერატურას, **h ν** - სინათლის ენერგიას.



მეორე განტოლებაში რეაქციის ინიცირება ხდება სინათლის ენერგიით. ასეთ პროცესს **ფოტოქიმიური რეაქცია** ეწოდება.

3.1.2. ქიმიური განტოლებების გაწონასწორება

ქიმიურ განტოლებებში, გარდა ნივთიერებათა ფორმულების და მდგომარეობისა, მოცემულია რიცხვითი ინფორმაცია. მაგალითად, $H_2(a)$ ან $H_2O(a)$. ეს კოეფიციენტები აუცილებელია ქიმიური განტოლების გაწონასწორებისთვის.

ბუნების ერთ-ერთი ფუნდამენტური კანონია ნივთიერების შენახვის კანონი. ნივთიერება არ შეიძლება წარმოიქმნას, არც დაიშალოს. თუ განხილვიდან გამოვრიცხავთ ბირთვულ რეაქციებს, შეიძლება ვთქვათ, რომ ატომები არც წარმოიქმნება, არც იშლება ქიმიური რეაქციისას. აქ უბრალოდ ხდება ატომების გადაწყობა ახალ ნაერთად. ანუ ჩვენ უნდა გვქონდეს ატომების ერთი და იგივე რაოდენობა განტოლების ორივე მხარეს. თუ ეს პირობა არ კმაყოფილდება, ამბობენ, რომ რეაქცია გაუწონასწორებელია.

ქიმიკოსები იყენებენ ტერმინს **სტექიომეტრია** სხვადასხვა რიცხვით დამოკიდებულებებთან მიმართებაში რეაგენტებსა და პროდუქტებს შორის. რიცხვებს, რომლებიც გამოიყენება ქიმიური განტოლების გასაწონასწორებლად ეწოდება **სტექიომეტრული კოეფიციენტები**. ამ სიდიდეებზე მრავლდება თითოეული ელემენტის ატომთა რიცხვი ნაერთის ფორმულის ერთეულში.

3.2. წყალხსნარები და ჯამური იონური განტოლებები

ქიმიური რეაქციისას რეაგენტებს უნდა შეეძლოთ ერთმანეთთან კონტაქტში შესვლა. აირად ან თხევად ფაზაში მოლეკულები უფრო ადვილად რეაგირებენ. მყარ ფაზაში ეს მოძრაობა არ არის ჩვეულებრივი მოვლენა და რეაქციები ძალიან ნელია, თუ ისინი საერთოდ მიდის. ერთ-ერთი გზა ამის დაძლევისა არის მყარი სხეულების გახსნა. წყალი არის ყველაზე გავრცელებული არე ასეთი ხსნარების მისაღებად. ასეთ დროს ამბობენ, რომ რეაქციას ადგილი აქვს **წყალხსნარში**.

ქიმიური რეაქციის ამ მნიშვნელოვანი ჯგუფის აღსაწერად საჭიროა განვსაზღვროთ რამდენიმე საკვანძო ტერმინი.

3.2.1. ხსნარები, გამხსნელები და გახსნილი ნივთიერებები

თუმცა წყალი შედის ყველა მოლეკულის დიდ უმრავლესობაში ის არ არის არც რეაგენტი, არც პროდუქტი ბევრი რეაქციისა. მთელ სიტხეს ეწოდება **ხსნარი**, რაც ნიშნავს, რომ ეს არის ორი ან მეტი ნივთიერების ჰომოგენური ნარევი. ნებისმიერ ხსნარში, კომპონენტს, რომელიც წარმოდგენილია ძალიან დიდი რაოდენობით, ეწოდება **გამხსნელი**. წყალხსნარში გამხსნელია წყალი. ხსნარში მცირე რაოდენობის კომპონენტს ეწოდება **გახსნილი ნივთიერება**. ხსნარის საკვანძო თვისებაა ის, რომ გახსნილი ნივთიერება იხსნება **გამხსნელში**. ამ პროცესის დროს მისი ნაწილაკები დისპერსირდება გამხსნელში და, ჩვეულებრივ, გამხსნელის ბევრი მოლეკულა გარშემორტყმულია გახსნილი ნივთიერების ნებისმიერი ინდივიდუალური მოლეკულით ან იონით. წყალი არ არის ერთადერთი გამხსნელი და ყველა ხსნარი არ არის მარტო სიტხე. იგივე ეხება აირების ან მყარი სხეულების ჰომოგენურ ნარევებს. აირადი ხსნარების კარგი მაგალითია ჰაერი. შენადნობები კი შეიძლება აღწეროთ როგორც მყარი ხსნარები.

ხსნარების შესწავლისას აუცილებელია ვიცოდეთ კომპონენტების შემცველობა: **კონცენტრაცია**. თუ ხსნარში არის გახსნილის დიდი რაოდენობით ნაწილაკები, ხსნარს ეწოდება **კონცენტრირებული**. თუ ნაწილაკები მცირე რაოდენობითაა, ხსნარი ითვლება **განზავებულად**.

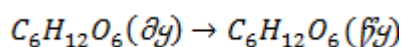
ზოგიერთი ნივთიერება შეიძლება გაიხსნას წყალში ძალიან დიდი კონცენტრაციით, მაშინ, როცა სხვა ნივთიერებები სუსტად იხსნება. ასე რომ, შეგვიძლია სხვადასხვა ნივთიერება დავახასიათოთ მათი წყალში **ხსნადობით**. ნაერთებს, რომლებიც ადვილად იხსნება ეწოდება **ხსნადი**, ხოლო, რომლებიც არ იხსნება – **უხსნადი**. ქიმიკოსები ხშირად იყენებენ **ხსნადობის ცხრილს** – იხსნება თუ არა ესა თუ ის ნაერთი წყალში.

მართალია, ეს კრიტერიუმი არსებობს, მაგრამ რეალობა გაცილებით რთულია. ის, რომ ნაერთი ხსნადია, არ ნიშნავს რომ შეიძლება მისი უსაზღვრო რაოდენობით გახსნა. თუ ჩვენ დავამატებთ მეტი და მეტი რაოდენობის ნივთიერებას, დადგება მომენტი, რომ დამატებული მასალა აღარ გაიხსნება. ამ დროს ამბობენ, რომ არის **ნაჯერი ხსნარი**. კონცენტრაცია, რომლის დროსაც მიიღწევა გაჯერება, დამოკიდებულია გახსნილის იდენტურობაზე. ასე რომ, სასარგებლოა გვეჩვენოს ხსნადობის რაოდენობრივი ზომა. ამ ასპექტში ერთეულები შეიძლება იცვლებოდეს, მაგრამ ჩვეულებრივ საზომად მიღებულია **გახსნილის მასა 100 გრ. გამხსნელზე**. მაგალითად, ოთახის ტემპერატურაზე სუფრის მარილის ხსნადობაა 35,7 გრ. **$NaCl$ 100 gr. H_2O -Si**.

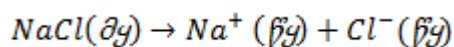
აღსანიშნავია, რომ წყალში გახსნისას მრავალი იონური ნაერთი დისოცირებს ცალკეულ იონებად. მაგალითად, იგივე სუფრის მარილი სინამდვილეში შეიცავს **Na^+** და **Cl^-** იონებს და არა **$NaCl$** -ის მოლეკულებს. ასეთ ხსნარებში მუხტის თავისუფალი მოძრაობა იწვევს ხსნარის ელექტროგამტარებლობას. ნებისმიერ ნივთიერებას, თუ მისი წყალში გახსნისას მიიღება ელექტრობის გამტარებელი ხსნარი, ეწოდება **ელექტროლიტი**. თუ ხსნარი ელექტრობას არ ატარებს, ის ითვლება **არაელექტროლიტად**. ელექტროლიტები შეიძლება დავყოთ ორ ჯგუფად. **ძლიერი ელექტროლიტები** მთლიანად დისოცირებენ, ამის საწინააღმდეგოდ, **სუსტი ელექტროლიტები** – მხოლოდ ნაწილობრივ. მათი ხსნარები შეიცავენ როგორც მოლეკულებს, ასევე ცალკეულ იონებს.

3.2.2. ქიმიური განტოლებები რეაქციებისთვის წყალხსნარებში

ნაერთის წყალში გახსნის პროცესი შეიძლება გამოვსახოთ განტოლებით. როდესაც კოვალენტურად ბმული ნივთიერება, მაგალითად, შაქარი იხსნება წყალში, მოლეკულები რჩება უცვლელი:

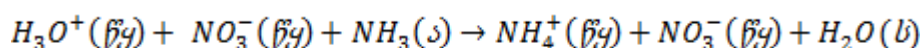


საწინააღმდეგოდ ამისა, როდესაც წყალში იხსნება იონური მყარი სხეული, ის იშლება შემადგენელ იონებად. ამას ეწოდება დისოციაციის რეაქცია. ამის ნათელი მაგალითია ნატრიუმის ქლორიდის გახსნა:

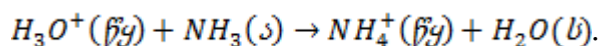
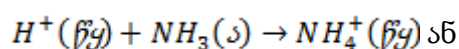


ამ ორივე შემთხვევაში წყლის მოლეკულები ცხადად არ ფიგურირებენ, თუმცა მათი არსებობა აღნიშნულია როგორც (წყ) პროდუქტის მხარეზე. ეს ასახავს გამხსნელის ზოგად ტენდენციას გახსნას ნივთიერება, მაგრამ თვითონ არ ირეაგიროს მასთან ქიმიურად. როდესაც განტოლებაში ჩნდება წყალი, ის გვევლინება როგორც რეაგენტი ან როგორც პროდუქტი.

ხშირად ნაერთები წყალხსნარების ქიმიაში არის იონური, მაგალითად, HNO_3 -ის ან NH_4NO_3 -ის შემთხვევაში. ეს ნაერთები წყალში გახსნისას იშლება იონებად. ეს დისოციაცია გამოიკვეთება, თუ ჩავწერთ ჯამურ იონურ განტოლებას და არა მოლეკულურს. კერძოდ, $H^+(წყ) + NO_3^-(წყ) + NH_3(ა) \rightarrow NH_4^+(წყ) + NO_3^-(წყ)$. H^+ -იონი მეტად სპეციფიკურია, რადგანაც ის არსებობს მჟავების ყველა წყალხსნარში. ბოლოს და ბოლოს H^+ -იონი მხოლოდ და მხოლოდ პროტონია. მაგრამ წყალხსნარებში ეს პროტონი გარემოცულია წყლის მოლეკულებით. ასე რომ, H^+ -იონს ხშირად წერენ როგორც H_3O^+ . ჯამური იონური განტოლება მიიღებს სახეს:



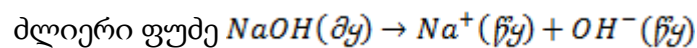
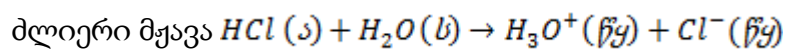
რეაქციიდან ჩანს, რომ $NO_3^-(წყ)$ იონი განტოლების ორივე მხარესაა. ე.ი. ის აქტიურად არ მონაწილეობს რეაქციაში. ასეთი იონები ქიმიაში განიხილება როგორც სპექტატორი (ნაწილაკ-დამკვირვებელი) იონები. როდესაც ასეთ იონებს გამოვრიცხავთ, მივიღებთ იონურ განტოლებას:



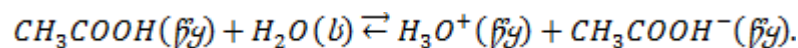
ასეთ შემთხვევაში ჩვენ გვაქვს $1+$ მუხტი ორივე მხარეს. ეს მიგვითითებს იმ ფაქტზე, რომ თუ რეაქცია სწორადაა გაწონასწორებული, მთლიანი მუხტი იქნება ერთი და იგივე ორივე მხარეს. ე.ი. ელექტრული მუხტი ინახება.

3.2.3. მჟავა-ფუძე რეაქციები

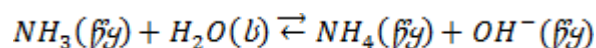
მჟავები და ფუძეები ორი განსაკუთრებით მნიშვნელოვანი კატეგორიაა წყალხსნარებისა. ჩვენ განვსაზღვრავთ ნებისმიერ ნივთიერებას, როგორც მჟავას, თუ ის იხსნება წყალში H^+ (ან H_3O^+) იონების წარმოქმნით და ფუძეს, რომლის წყალში გახსნისას წარმოიქმნება OH^- იონები. სხვა ნივთიერების მსგავსად, მჟავები და ფუძეები არის ძლიერი ან სუსტი ელექტროლიტები. ძლიერი მჟავა ან ფუძე მთლიანად დისოცირებს წყალში, ასე რომ, მიღებული ხსნარი არ შეიცავს დაუშლელ მოლეკულებს. მაგალითისათვის, ჩავწეროთ რეაქციები:



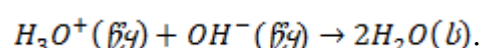
სუსტი მჟავა ან ფუძე განიცდის ნაწილობრივ იონიზაციას, ასე რომ, მათი ხსნარები შეიცავს როგორც უცვლელ მოლეკულებს, ასევე დისოცირებულ იონებს. ასეთი რეაქციის ჩაწერისას ვიყენებთ "ორმხრივ" ისარს, რაც ნიშნავს, რომ რეაქცია არ მიდის ბოლომდე მარცხნიდან მარჯვნივ. ძმარმჟავა სუსტი მჟავის კარგი მაგალითია:



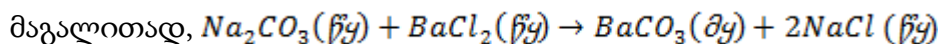
ყველაზე ცნობილი სუსტი ფუძეა ამიაკი (NH_3), რომელიც რეაგირებს წყალთან შემდეგი რეაქციით:



მნიშვნელოვანი ფაქტია ის, რომ ხსნარი არ შეიძლება ერთდროულად იყოს მჟავური ან ფუძოვანი. მჟავას და ფუძის შერევა იწვევს რეაქციას, რომელიც ცნობილია როგორც ნეიტრალიზაცია. ამ ფენომენის ასახსნელად უნდა განვსაზღვროთ მჟავა და ფუძე. მჟავა ხსნარები შეიცავს H_3O^+ იონებს, ფუძეები კი – OH^- იონებს. ჰიდრონიუმის იონები და ჰიდროქსიდის იონები ადვილად ერთდება წყლის წარმოქმნით:



ნეიტრალიზაციის რეაქცია ერთ-ერთია წყალხსნარების ქიმიის რეაქციებიდან. მეორე გავრცელებული ტიპი რეაქციისა არის დალექვის რეაქცია, რომელშიც მყარი ნაერთი (ნალექი) წარმოიქმნება.

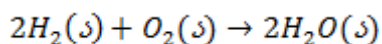


აღსანიშნავია, რომ დალექვის რეაქციის არც რეაგენტის და არც პროდუქტის მხარეს არ არის ჯამური მუხტი.

3.3. განტოლებათა ინტერპრეტირება და მოლი

3.3.1. ქიმიური განტოლებების ინტერპრეტირება

ქიმიური განტოლების დაწერისა და გაწონასწორებისას ვირჩევთ გზას, რომელიც, ჩვენი აზრით, უკეთ აღწერს რეაქციას. ჩვენ ვამბობთ, რომ ერთი მოლეკულა რეაგირებს მეორესთან და წარმოქმნის ახალ ნაერთს – პროდუქტს. რეალური ქიმიური რეაქცია იშვიათად შეიცავს ერთ ან ორ მოლეკულას. ასე რომ, უნდა ვიფიქროთ განტოლებაზე დიდი რაოდენობების ტერმინით, მაგალითად, მარტივი რეაქციის შემთხვევაში:



ვამბობთ, რომ წყალბადის ორი მოლეკულა რეაგირებს O_2 -თან და იძლევა ორ მოლეკულა H_2O -ს. მაგრამ, ვთქვათ, რომ იგივე რეაქციას იწყებს 20 მოლეკულა H_2 ორის მაგივრად. მაშინ უნდა ვთქვათ, რომ 20 მოლეკულა H_2 რეაგირებს 10 O_2 -თან და იძლევა 20 მოლეკულა H_2O -ს.

უნდა გავიაზროთ ამ დებულების ორი საკვანძო მომენტი. პირველი, ორივე დებულება სწორია, რადგანაც გამოყენებულია სტექიომეტრული კოეფიციენტებით მიღებული თანაფარდობა. მეორე - ორივე დებულება ეხება ნაწილაკთა რიცხვს. უნდა გვახსოვდეს, რომ სტექიომეტრული კოეფიციენტები ყოველთვის ეხება ნაწილაკთა რაოდენობას. თუ ჩვენ ვიყენებთ რიცხვებს, რომლებიც აკმაყოფილებენ სწორ სტექიომეტრულ თანაფარდობას, ჩვენ ყოველთვის გვექნება რეალური ქიმიური რეაქციის მისაღები აღწერა.

3.3.2. ავოგადროს რიცხვი და მოლი

როცა განვიხილავთ ქიმიურ რეაქციებს ნივთიერებათა მაკროსკოპული რაოდენობით, მოლეკულათა რიცხვი საოცრად ბევრია. ამიტომ გარდაუვალი გახდა აღქმადი რიცხვის შემოღება. გარკვეულ რაოდენობას, რომელიც ქიმიკოსებმა შემოიღეს, დაერქვა **მოლი**. ერთი მოლი განისაზღვრა როგორც ატომთა რიცხვი ზუსტად 12 გრამ ^{12}C -ში. ეს რიცხვი განიხილება როგორც **ავოგადროს რიცხვი** და იგი ტოლია $6,022 \times 10^{23}$. მოლეკულების დათვლისას ქიმიკოსები ითვლიან მოლეკს, რომლებითაც უფრო ადვილია ოპერირება.

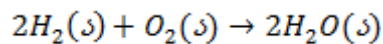
არის რამდენიმე მოსაზრება, თუ რატომ არის ეს სიდიდე სასარგებლო ქიმიაში. პირველი – ეს არის დიდი რიცხვი, რომელიც სასარგებლოა ისეთი მცირე ზომის ნაწილაკების დასათვლელად, როგორიც ატომებია. მეორე – ერთი მოლი არის ნაწილაკების ერთი და იგივე რაოდენობა, მიუხედავად იმისა, თუ რა სახის ნივთიერებასთან გვაქვს საქმე. ასე რომ, ერთი მოლი H_2 შეიცავს იმდენივე მოლეკულას, რამდენსაც 1 მოლი **TNT** (ტრინიტროტოლუოლი), ე.ი. $6,022 \times 10^{23}$ მოლეკულას.

რატომ აიღეს ეს რიცხვი და არა, მაგალითად, ზუსტად 10^{23} . საქმე იმაშია, რომ ავოგადროს რიცხვის შერჩეული სიდიდე ქმნის ძალზედ მოსახერხებელ კავშირს ატომის ან მოლეკულის მასასა და ამ ატომების და მოლეკულების მოლის მასას შორის. ჩვენ განვსაზღვრეთ, რომ 1 მოლი ^{12}C -ს მასა ზუსტად 12 გრამია. ადრე აღვნიშნეთ, რომ ^{12}C -ს ატომის მასა ზუსტად 12 მაე-ა. ეს არ არის უბრალო თანხედენა, არამედ კარგად მოფიქრებული გადაწყვეტილებაა. ადრე ჩვენ განვსაზღვრეთ მაე და გრამი დამოუკიდებლად. ავოგადროს რიცხვი დაფიქსირებულია როგორც მაე-ს რაოდენობა 1 გრამში.

$6,022 \times 10^{23}$ ატომთა მასა ნებისმიერი ელემენტისათვის არის ამ ელემენტის **მოლური მასა** (გრამი/მოლი). მაგალითად, სილიციუმის მოლური მასა მეტია ნახშირბადისაზე, რადგანაც სილიციუმის ატომი უფრო მძიმეა, ვიდრე ნახშირბადის. თითოეული ელემენტის მოლურ მასაში გათვალისწინებულია

ბუნებრივი იზოტოპების შემცველობა. ასე რომ, ^{12}C -ს მოლური მასა 12,011 გრ/მოლი, ასახავს საშუალოს ^{12}C -ს და ^{13}C -ს შორის.

მოლი საკვანძო როლს თამაშობს ქიმიური განტოლების მაკროსკოპულ ინტერპრეტაციაში. ავიღოთ ისევ რეაქცია:



მოლების ენაზე ვამბობთ: „ორი მოლი H_2 და ერთი მოლი O_2 რეაგირებენ ორი მოლი H_2O -ს წარმოქმნით“. რადგან თითოეული მოლი შეიცავს მოლეკულათა ერთსა და იმავე რიცხვს, მოლური თანაფარდობა 2:1 რეაგენტებს შორის იგივეა რაც 2:1 თანაფარდობა მოლეკულათა რიცხვს შორის. ქიმიური განტოლებები და მათი სტექიომეტრული კოეფიციენტები ყოველთვის აჩვენებენ თანაფარდობას ნაწილაკთა რიცხვებსა და არა მასებს შორის.

3.3.3. მოლური მასის განსაზღვრა

რადგანაც გაწონასწორებული ქიმიური რეაქცია ყოველთვის გამოსახულია ნაწილაკების რიცხვით, მოსახერხებელია იყოს რაიმე სხვა გზა, რათა განვსაზღვროთ ეს სიდიდე რაიმე ნაერთის მოცემულ ნიმუშში. რადგან არ არის ლაბორატორიული ხელსაწყო მოლების რიცხვის პირდაპირი განსაზღვრისათვის, ამას ახდენენ ირიბი გზით ნიმუშის მასიდან. კავშირი ნიმუშის მასასა და მოლების რიცხვს შორის არის ნივთიერების მოლური მასა. ამის დასადგენად ჩვენ ვიყენებთ მასის შენახვის იდეას. განვიხილოთ ერთი მოლი წყალი. ვიცით, რომ ნაერთის 1 მოლი შეიცავს H_2O -ს მოლეკულათა ავოგადროს რიცხვს. მეტიც, ვიცით, რომ ყოველი მოლეკულა შეიცავს ერთ O ატომს და ორ H ატომს. 1 მოლი O ატომის მასაა 16.0 გრ., ხოლო 2 მოლი H ატომის მასაა 2.0 გრ. რადგან O და H ატომების მასები უნდა იყოს იგივე, რაც ერთი მოლი H_2O -სი, უბრალო შეკრებით ვიღებთ 18.0 გრ, როგორც 1 მოლი H_2O -ს მასის. ე.ი. H_2O -ს მოლური მასაა 18.0 გრ/მოლი. ნებისმიერი სხვა ნაერთისათვის ყველა ატომის მოლური მასების ჯამი არის ნაერთის მოლური მასა.

3.4. გამოთვლები მოლეზის და მოლური მასეზის გამოყენებით

ჩვენ აღვნიშნეთ მოლის ცნეზის მნიშვნელობა ქიმიურ რეაქციებთან მიმართებაში, რომლებშიც ჩართულია ნივთიერების მაკროსკოპული რაოდენობები. მაგრამ ზოგადად შეუძლებელია მოლეზის რიცხვის პირდაპირი გაზომვა. მოლური მასა უზრუნველყოფს ძირითად კავშირს და მასაზე გადასვლის საშუალებას იძლევა, რაც ადვილი გასაზომია, მოლეზის რიცხვზე. მასა და მოლეზის რიცხვი ორი რეალურად განსხვავებული გზაა ერთი და იმავე ინფორმაციის გამოსახატავად – რეაქციის მონაწილე ნივთიერების რაოდენობისა. მოლური მასა საშუალებას გვაძლევს გადავიდეთ მასიდან მოლზე და პირიქით.

რიგ შემთხვევაში ჩვენ გვჭირდება დავთვალოთ მოლეზის რიცხვი გარკვეულ რეაქციაში მონაწილე ნაწილაკისათვის. თუ გვინდა ამ რეაქციის ჩატარება, უნდა ვიცოდეთ თუ რა მასის ნიმუში მოვამზადოთ. აქაც ჩვენ ადვილად ჩავატარებთ პროცესს, თუ გადავიყვანთ მოლეზის რიცხვს მასაში.

3.4.1. ელემენტური ანალიზი: ემპირიული და მოლეკულური ფორმულების დადგენა

როდესაც ვახდენთ ახალი მოლეკულის სინთეზს, ჩვეულებრივ ვატარებთ მის ელემენტურ ანალიზს, რათა დავრწმუნდეთ მის იდენტურობაში. ეს ტესტი, რომელშიც იზომება ნაერთში თითოეული ელემენტის მასური პროცენტი, ასევე ხშირად ტარდება ნებისმიერი ნივთიერების, რომლის შედგენილობა უცნობია, იდენტიფიკაციისთვის.

მასური პროცენტი გამოხატავს ნაერთის შემადგენლობას, ასე რომ, ის უკავშირდება ქიმიურ ფორმულას. მაგრამ ელემენტური ანალიზით მიღებული მონაცემები აღწერს შედგენილობას თითოეული ელემენტის მასის ტერმინებში, მაშინ როცა ფორმულა აღწერს შედგენილობას ელემენტის ატომთა რიცხვის ტერმინებში. ასე რომ, არის ერთი და იმავე ინფორმაციის ორი სხვადასხვა

წარმოდგენა და ელემენტების მოლური მასები უზრუნველყოფს მათ შორის კავშირს.

მასასა და მოლებს შორის კავშირი შეიძლება სხვანაირადაც გამოვიყენოთ. მაგალითად, ხშირად ნაერთის შედგენილობას აღწერენ ან წონითი (წ.%) ან მოლური პროცენტებით. ამ ორ ერთეულს შორის გადასვლა შესაძლებელია მოლური მასის გამოყენებით.

3.4.2. მოლარობა

მოლური მასა იძლევა კავშირს ადვილად გასაზომი სიდიდისა (მასა) და კონცეპტუალურად მნიშვნელოვან სიდიდეს (მოლი) შორის. მეორე ადვილად გასაზომი სიდიდეა მოცულობა. წყალხსნარებთან მუშაობისას გამოთვლებისათვის ხშირად ვიყენებთ მოცულობას და არა მასას. ამიტომ გასაკვირი არ არის, რომ გვჭირდება იმ სიდიდეების განსაზღვრა, რომლებიც დააკავშირებს მოცულობას და მოლების რიცხვს.

დამუშავებულია მთელი რიგი მეთოდებისა, რათა გამოიხატოს გახსნილის კონცენტრაცია გამხსნელში. კონცენტრაციის ნებისმიერი ერთეულის დასადგენად უნდა ვიცოდეთ ხსნარში როგორც გახსნილის, ასევე გამხსნელის რაოდენობა. ქიმიაში ყველაზე ფართოდ გამოიყენება კონცენტრაციის ერთეული **მოლარობა** ან **მოლური კონცენტრაცია**. მოლარობა – M განსაზღვრულია როგორც გახსნილის მოლების რიცხვი ხსნარის ერთ ლიტრში.

$$\text{მოლარობა } (M) = \frac{\text{გახსნილის მოლები}}{\text{ერთი ლიტრი ხსნარი}}$$

მოლარობის განსაზღვრა გვიჩვენებს მისი გამოყენების გზებს. ის ამყარებს დამოკიდებულებას სამ სიდიდეს შორის: მოლური კონცენტრაცია, გახსნილის მოლები და ხსნარის რაოდენობა (ლიტრებში). თუ ვიცით ამ სიდიდეებიდან ორი, ადვილად გავიგებთ მესამეს. ხსნარის მოცულობის გაზომვა შეიძლება ლაბორატორიაში. თუ ამ მოცულობას (ლიტრებში) გავამრავლებთ მოლარობაზე, ადვილად მივიღებთ მოლებს.

იმავე დამოკიდებულებით ადვილად შეიძლება ვიპოვოთ გახსნილის მოლების რიცხვი, თუ ვიცით ნებისმიერი ხსნარის მოცულობა და მოლარობა. თუ მოლების რიცხვს აღვნიშნავთ n -ით, მოცულობას V -ით და მოლარობას M -ით, მივიღებთ $n = M * V$

3.4.3. განზავება

ნებისმიერ ლაბორატორიაში ერთ-ერთი ყველაზე გავრცელებული პროცედურაა განზავება. ეს არის პროცესი, როდესაც ხსნარს ემატება გამხსნელი, რათა შემცირდეს გახსნილის კონცენტრაცია. განზავებისას გახსნილის რაოდენობა არ იცვლება. მოლების რიცხვი გახსნილში უცვლელია განზავებამდე და მის შემდეგ. რადგანაც გახსნილის მოლების რიცხვი ტოლია პროდუქტის მოლარობის და მოცულობისა, ჩვენ შეგვიძლია დავწეროთ განტოლება, სადაც ინდექსები აღნიშნავს ჩართული სიდიდეების საწყის (i) და საბოლოო (f) მნიშვნელობებს:

$$H_i * V_i = M_f * V_f.$$

4. სტექიომეტრია

ამ თავის შესწავლის შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

- გამოთვალოს იმ პროდუქტის რაოდენობა, რომლის წარმოქმნა ივარაუდება რეაქციით, რეაგენტების მოცემული რაოდენობის გათვალისწინებით.
- გამოთვალოს რეაგენტების რაოდენობა ქიმიური რეაქციისათვის, რათა წარმოიქმნას პროდუქტის გარკვეული რაოდენობა.
- მოახდინოს ზღვრული რეაგენტის იდენტიფიცირება და გამოთვალოს პროდუქტის რაოდენობა, რომელიც წარმოიქმნება რეაგენტების არასტექიომეტრული ნარევიდან.
- გამოთვალოს ქიმიური რეაქციის პროცენტული გამოსავალი.

4.1. სტექიომეტრიის საფუძვლები

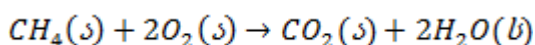
სტექიომეტრია არის ტერმინი, რომელიც გამოიყენება ქიმიაში რაოდენობრივი დამოკიდებულებების აღწერის მიზნით. ნებისმიერი შეკითხვა, თუ „რამდენი“ გარკვეული ნივთიერება დაიხარჯება ან მიიღება ქიმიური რეაქციით, არის სტექიომეტრიის პრობლემა და ნებისმიერი ასეთი სტექიომეტრული პრობლემების ცენტრში ყოველთვის არის გაწონასწორებული ქიმიური რეაქცია.

ჩვენ ვნახეთ, რომ ქიმიური რეაქციის ჩაწერა ასევე შეიძლება ნაწილაკების რიცხვის ტერმინებში. ვახდენთ ჩვენ მათ ინტერპრეტაციას ინდივიდუალური მოლეკულების ტერმინებით თუ მოლეკულათა მოლეზით, სტექიომეტრული კოეფიციენტები, რომლებიც აწონასწორებს განტოლებას, ეხება ნაწილაკთა რიცხვს და არა მათ მასებს. ჩვეულებრივ, ნაწილაკთა რიცხვის პირდაპირი გაზომვა ლაბორატორიაში შეუძლებელია. მასები და მოცულობები უფრო ადვილად იზომება. ასე რომ, თუ გვინდა ჩავატაროთ რაოდენობრივი გამოთვლები ქიმიური რეაქციისათვის, საჭიროა გადავიყვანოთ გაზომვადი სიდიდე – მასა ან მოცულობა მოლეზის რიცხვის საჭირო მნიშვნელობაში. რადგან ასეთი გამოთვლები

მნიშვნელოვანია, დაამუშავეს სტანდარტული მიდგომა, რათა დაეძლიათ ერთეულებს შორის შეუსაბამობა. თუმცა ეს მიდგომა შეგიძლიათ განიხილოთ როგორც ალგორითმი. გარკვეული კლასის ქიმიური პრობლემების გადასაჭრელად, აუცილებელია გავიგოთ მისი კონცეპტუალური საფუძველი. ძირითადი კონცეფცია ქიმიური განტოლების გაწონასწორებისა არის რეაქციაში სხვადასხვა ნივთიერებების მოლებს შორის თანაფარდობის დადგენა.

4.1.1. თანაფარდობების მიღება გაწონასწორებული ქიმიური განტოლებიდან

განვიხილოთ მარტივი ნახშირწყალბადი – მეთანი – CH_4 . მისი წვის პროცესი რეაქციის სტექიომეტრიის კარგი მაგალითია:



აქ აირადი მეთანის ერთი მოლეკულა რეაგირებს ჟანგბადის ორ მოლეკულასთან ანუ მეთანის მოლეკულის 1 მოლი რეაგირებს ჟანგბადის მოლეკულების 2 მოლთან. ე.ი. ჩვენ უნდა გვქონდეს თანაფარდობა 1:2 მეთანის მოლეკულებისა ჟანგბადის მოლეკულებთან, 1:1 მეთანი ნახშირბადის დიოქსიდთან, 1:2 მეთანი წყალთან და 2:2 (ან 1:1) ჟანგბადი წყალთან. როგორც ადრე აღვნიშნეთ, შეიძლება განტოლების კოეფიციენტის როგორც მოლური დამოკიდებულების, ასევე როგორც მოლეკულური დამოკიდებულების ინტერპრეტირება. ე.ი. აღნიშნული რეაქცია გვიჩვენებს, რომ მეთანის 1 მოლი რეაგირებს ჟანგბადის 2 მოლთან და წარმოქმნის 1 მოლ ნახშირბადის დიოქსიდს და 2 მოლ წყალს. განტოლებიდან შეიძლება დავწეროთ მოლურ თანაფარდობათა სისტემა:

1 მოლი H_4 : 2 მოლი O_2

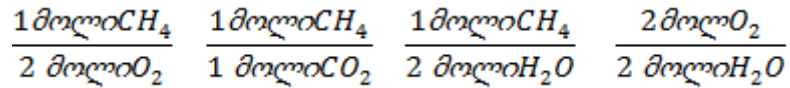
1 მოლი H_4 : 1 მოლი CO_2

1 მოლი H_4 : 2 მოლი H_2O

2 მოლი O_2 : 2 მოლი H_2O

უკანასკნელს ჩვენ ყოველთვის ვწერთ როგორც 1:1

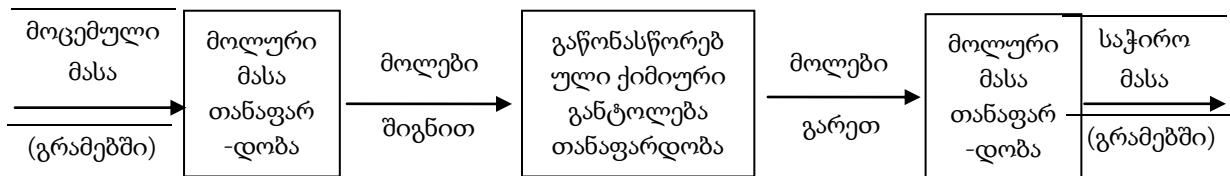
სტექიომეტრული გამოთვლებისას მოლური თანაფარდობები ძალიან ხშირად ჩაიწერება წილადების სახით. ისინი გამოიყენება ანალოგიურად ერთეულის გადაყვანის კოეფიციენტებისა, რაც აკავშირებს ერთი ნივთიერების რაოდენობას მეორესთან:



ანალოგიურად გადაყვანის ერთეულის კოეფიციენტებისა, ეს მოლური თანაფარდობები შეიძლება გადავაბრუნოთ გარკვეული გამოთვლების ჩასატარებლად.

გაწონასწორებული ქიმიური განტოლება იძლევა ყველა მოლურ თანაფარდობას, რომელიც აუცილებელია რეაქციაში მონაწილე ყველა ნაერთის რაოდენობისთვის, მაგრამ ლაბორატორიაში რეაქციის ჩასატარებლად ჩვენ ხშირად ვიყენებთ სასწორს მასალის ასაწონად, რაც გვამღევს მასას გრამებში. თანაფარდობები განტოლებიდან არის მოლეკულების ან მოლეზის რაოდენობა, ასე რომ, გვჭირდება გრამების მოლეზში (ან პირიქით) გადაყვანა. მოლური მასა უზრუნველყოფს ამ პროცესს.

თანაფარდობების გამოყენება ერთი ერთეულის მეორეში გადასაყვანად არ არის უფრო რთული სტექიომეტრიაში, ვიდრე მარტივი ფიზიკური გაზომვებისას. მაგრამ მნიშვნელოვანი განსხვავებაა ის, რომ მრავალი სტექიომეტრული პრობლემის შემთხვევაში თანაფარდობები გამოიყენება სამჯერ ან უფრო მეტჯერ. თანაფარდობის თითოეული ცალკეული გამოყენება ეფუძნება უკვე ცნობილ პრინციპებს და ამის გათვალისწინებით შეიძლება სწორი გზის პოვნა რთულ სტექიომეტრულ პრობლემებშიც კი. მთავარი პრობლემაა განსაზღვრა იმისა, თუ რომელი თანაფარდობა გამოვიყენოთ და როდის. ამის ერთ-ერთი გზაა, შევადგინოთ საფეხურების სქემა, გამოვიყენებთ რა ბლოკებს, რათა ვაჩვენოთ, თუ როდის გამოიყვანება ინფორმაცია ისეთი დამოკიდებულებიდან, როგორიცაა გაწონასწორებული განტოლება ან მოლური მასა



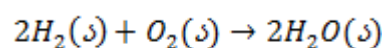
ეს სქემა ასახავს სხვადასხვა საფეხურებს ტიპური რეაქციის სტექიომეტრული პრობლემის ამოხსნისას.

სქემიდან ცხადია, რომ თუ ვიწყებთ ერთი ნაწილაკის მასით და გვინდა ვიცოდეთ სხვა ნაწილაკების მასა (დახარჯულის ან წარმოქმნილის) უნდა გამოვიყენოთ სამი თანაფარდობა: თანაფარდობა, რომელიც იყენებს მოცემული ნაერთის მოლურ მასას, მოლური თანაფარდობა გაწონასწორებული ქიმიური განტოლებიდან და თანაფარდობა, რომელიც იყენებს იმ ნაერთის მოლურ მასას, რომლის პოვნაც ჩვენ გვინდა. უმარტივესი და ყველა საიმედო გზა იმის დადგენისა, თუ რომელი თანაფარდობა გვჭირდება თითოეულ საფეხურზე, არის დავეწროთ ყველა სიდიდე მათი მთელი ერთეულებით. ჩვენს მაგალითში ვწერთ საწყის რაოდენობას როგორც „1 მოლი CH_4 ” და ეს გვეხმარება ვიპოვოთ სწორი ფორმა მოლური თანაფარდობის გამოთვლისათვის.

4.2. ზღვრული რეაგენტები

როდესაც ვატარებთ ქიმიურ რეაქციას ერთ-ერთი რეაგენტის შესაძლო მიწოდება ხშირად ამოიწურება სხვა რეაგენტებთან შედარებით. როგორც კი დაიხარჯება ერთ-ერთი რეაგენტი, რეაქცია ჩერდება. რეაგენტი, რომელიც მთლიანად იხარჯება, განისაზღვრება იმით, თუ რამდენად შორს მიდის რეაქცია, რაც ზღუდავს წარმოქმნილი პროდუქტის რაოდენობას. ვამბობთ, რომ რეაქციაში მთლიანად დახარჯული რეაგენტი არის **ზღვრული რეაგენტი**.

ამ მნიშვნელოვანი ცნების საილუსტრაციოდ განვიხილოთ ისევ მარტივი რეაქცია



ეს რეაქცია მიმდინარეობს მანამ, სანამ სახეზე იქნება ორივე რეაგენტი. მაგრამ როცა წარმოიქმნება ორი წყლის მოლეკულა, მთელი წყალბადი იქნება დახარჯული. მაშინაც კი, თუ დარჩება ჟანგბადის ერთ მოლეკულაზე მეტი. ასე რომ, წარმოქმნილი პროდუქტის რაოდენობა შეზღუდულია წყალბადის ხელმისაწვდომ რაოდენობასთან და ამდენად, წყალბადი არის ზღვრული რეაგენტი.

ხშირ შემთხვევაში საქმე გვაქვს რეაგენტების მეტ რაოდენობასთან, რათა დარწმუნებული ვიყოთ, რომ ერთი კომპონენტი არის ზღვრული რეაგენტი. თუ გარკვეული ნივთიერების სინთეზში ჩართულია იშვიათი ან ძვირადღირებული რეაგენტი, მაშინ მკვლევარი უფრო დარწმუნებული უნდა იყოს იმაში, რომ გამოიყენოს სხვა რეაგენტების ჭარბი რაოდენობა. მაგალითად, წვის პროცესში ჭარბი ჟანგბადი ყოველთვის ხელმისაწვდომია, რადგანაც მისი მიღება მარტივად შეიძლება ჰაერიდან.

ზღვრული რეაგენტის განსაზღვრა მოითხოვს თითოეული არსებული რეაგენტის რაოდენობის შედარებას. როგორც ყოველთვის, ვითვალისწინებთ იმას, რომ გაწონასწორებული ქიმიური განტოლება გვამლევს თანაფარდობას, რომელშიც ერთი ნაერთის მოლი რეაგირებს მეორის მოლთან. ასე რომ, ჩვენ ვერ შევადარებთ მასებს ზღვრული რეაგენტის დასადგენად. ჩვენ უნდა შევადაროთ შესაბამისი მოლური თანაფარდობები.

უმრავლეს სტექიომეტრულ პრობლემებში, რომლებიც ზღვრულ რეაგენტთანაა დაკავშირებული, რეალური მიზანია განისაზღვროს, თუ რამდენი პროდუქტი წარმოიქმნება გარკვეული სარეაგირო ნარევიდან. ალბათ პირველი კრიტიკული ნაბიჯი ამ პრობლემისა არის სწორად გააზრება იმისა, არის თუ არა ეს ზღვრული რეაგენტის სიტუაცია ყოველთვის, როცა ერთზე მეტი რეაგენტის გარკვეული რაოდენობა ჩართულია სტექიომეტრულ პრობლემაში, ეს გვიბიძგებს ვიპოვოთ ზღვრული რეაგენტი. როცა დავადგენთ, თუ რომელი ნაერთი იხარჯება პირველად, ჩვენ ვატარებთ ჩვეულებრივ სტექიომეტრულ გამოთვლას.

4.3. თეორიული და პროცენტული გამოსავლები

ქიმიური რეაქციებისათვის, კერძოდ, რეაქციებისათვის, სადაც წარმოიქმნება კომერციული პროდუქტები, ჩვენ, ძირითადად, ვარჩევთ რეაქციებს, რომლებიც ეფექტურია და სადაც წარმოიქმნება რაც შეიძლება მეტი პროდუქტი და მინიმიზებულია არასასურველი თანაპროდუქტები. რატომ არის ეს მნიშვნელოვანი? ერთ-ერთი მთავარი მიზეზი ეკონომიკურია. თუ სასურველი პროდუქტის რაოდენობა გაიზრდება რეაგენტების მოცემული რაოდენობის გამოყენებით, ეს იქნება უფრო მომგებიანი. მრავალ ფაქტორს, როგორიცაა ტემპერატურა, თანარეაქციების შესაძლებლობა ან პროდუქტის შემდგომი გარდაქმნა, შეუძლია შეამციროს სასურველი პროდუქტის რაოდენობა. ამ არასასურველი რეაქციების მინიმიზებას ასევე შეუძლია შეამციროს უსარგებლო პროდუქტის რაოდენობა და ამით შეასუსტოს ზეგავლენა გარემოზე და ამასთან დაკავშირებული ხარჯები.

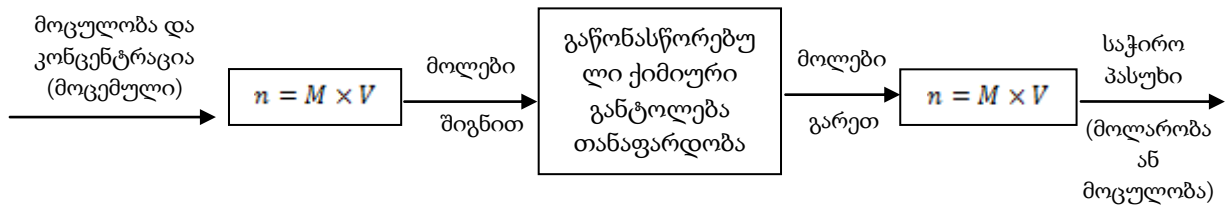
რეაქციის ეფექტურობის შეფასება შესაძლებელია იმის გამოთვლით, თუ რამდენი პროდუქტი წარმოიქმნება სრულყოფილ ან იდეალურ პირობებში და ამ სიდიდის შემდგომი შედარებით რეალურად მიღებულ შედეგთან. პროდუქტის იდეალურ რაოდენობას ეწოდება **თეორიული გამოსავალი** და ის მიიღება სტექიომეტრული პრობლემის გადაწყვეტით. წარმოქმნილი პროდუქტის რაოდენობის გაზომვა იძლევა **რეალურ გამოსავალს**, რომლის შეფარდება თეორიულთან გვაძლევს **პროცენტულ გამოსავალს**

$$\text{პროცენტული გამოსავალი} = \left(\frac{\text{რეალური გამოსავალი}}{\text{თეორიული გამოსავალი}} \right) \times 100\%.$$

4.4. ხსნარის სტექიომეტრია

აქამდე განხილულ სტექიომეტრულ პრობლემებში მოლეკულის რიცხვის მიღება ხდებოდა ნაერთთა მოლურ მასებს შორის დადგენილი თანაფარდობით. ახლა ჩვენ გავაფართოებთ პრობლემების დიაპაზონს, რომლებიც ადრე განვიხილეთ მოლეკულის

რიცხვის დასადგენად, როდესაც ვზომავადით მოცულობებს და არა მასებს. მაგრამ სტექიომეტრიის არსი არ იცვლება. აქაც გაწონასწორებული განტოლება უზრუნველყოფს რეაქციაში მონაწილე სხვადასხვა ნაწილაკების მოლეზის რიცხვებს შორის საჭირო თანაფარდობას. აქაც პრობლემის გადასაჭრელად ვიყენებთ სქემას:



ერთადერთი განსხვავებაა ის, რომ ხსნარში რეაქციის განხილვისას საქმე გვაქვს 3 ცვლადთან და არა ორთან, როცა ვიყენებთ მოლურ მასათა თანაფარდობას.

ჩვეულებრივი ლაბორატორიული მეთოდი – **გატიტვრა** მოითხოვს ხსნარის სტექიომეტრიის ცოდნას. რეაქცია: ხსნარი-ფაზა ტარდება კონტროლირებად პირობებში ისე, რომ ერთი რეაგენტის კონცენტრაცია შეიძლება დადგინდეს დიდი სიზუსტით. ერთ-ერთი რეაგენტის ზუსტად გაზომილ რაოდენობას ათავსებენ კოლბაში ან ჭურჭელში. ხსნარს ამატებენ საღებავს – **ინდიკატორს**. მეორე რეაგენტს ამატებენ ბიურეტით. როცა რეაქცია დასრულდება, ინდიკატორი იცვლის ფერს. როცა ინდიკატორი პირველი იცვლის ფერს, ადგილი აქვს რეაგენტის სტექიომეტრულ ნარევს. ჩვენ ვიცით პირველი რეაგენტის მოლეზის რიცხვი (ან მოლარობა და მოცულობა) და მეორე რეაგენტის მოცულობა. თუ ვიცით გაწონასწორებული განტოლება რეაქციისათვის, ადვილად გავიგებთ მეორე რეაგენტის კონცენტრაციას.

5. აირები

ამ თავის შესწავლის შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

- აღწეროს აირების ფიზიკური თვისებები;
- მოახდინოს რიგი აირადი ნაერთების ან ნაერთთა კლასების იდენტიფიცირება, რომლებიც მნიშვნელოვანია ქალაქის ჰაერის დაბინძურებაში;
- გამოიყენოს იდეალური აირის კანონი აირის მდგომარეობის ცვლილებების გამოსათვლელად;
- გამოიყენოს პარციალური წნევის ცნება აირების ნარევებთან მუშაობისას;
- ჩაატაროს სტექიომეტრული გამოთვლები რეაქციებისათვის, რომლებშიც აირები ჩართულია როგორც რეაგენტები და როგორც პროდუქტები;
- ჩამოაყალიბოს აირების კინეტიკური თეორიის პოსტულატები;
- აღწეროს თვისობრივად, თუ როგორ ხსნის კინეტიკური თეორიის პოსტულატები აირების ქცევას;
- აღწეროს მაქსველ-ბოლცმანის სიჩქარეების განაწილება და ტემპერატურის და მოლური მასის გავლენა მოლეკულურ სიჩქარეზე;
- მოახდინოს იმ პირობების ინდენტიფიცირება, როდესაც აირები ვერ იქცევიან იდეალურად;
- გამოიყენოს ვან-დერ-ვალსის განტოლება არაიდეალურ პირობებში აირებზე გამოთვლების ჩასატარებლად.

5.1. აირების თვისებები

ყველა აირი ხასიათდება რამდენიმე ძირითადი თვისებით, რაც მათ განასხვავებს მყარი სხეულებიდან და სითხეებიდან.

◦ აირები ფართოვდება კონტეინერის მთელი მოცულობის დაკავებით.

◦ აირებს აქვთ უფრო დაბალი სიმკვრივეები, ვიდრე მყარ სხეულებს ან სითხეებს.

აირების სიმკვრივები უფრო მკვეთრად იცვლება პირობებიდან დამოკიდებულებით.

აირები ირევა ერთმანეთში სწრაფად და სრულად.

აირების მოცულობა მკვეთრად იცვლება ტემპერატურის ცვლილებისას.

რადგანაც ვცდილობთ შევიმუშაოთ აირის ქცევის ზუსტი მოდელი, უნდა ვიყოთ დარწმუნებული, რომ ის გამოდგება ყველა დაკვირვებისათვის. ეს მოდელი დაფუძნებული უნდა იყოს აირის რაობის გააზრების მოლეკულურ დონეზე და ასევე უნდა შეგვეძლოს რიცხვითი წინასწარმეტყველება იმისა, თუ როგორ რეაგირებს აირი სხვადასხვა პირობებზე.

ცნობილია იდეალური აირის კანონი:

$$PV = nRT$$

P არის აირის წნევა, V – მოცულობა, n – აირში მოლეკულების რიცხვი და T – ტემპერატურა. R – აირების უნივერსალური მუდმივაა, რადგანაც მისი სიდიდე ($0,08206 \text{ ლ} \times \text{ატმ} \times \text{მოლ}^{-1} \text{K}^{-1}$) უცვლელია ყველა აირისათვის.

5.2. წნევა

წნევა განისაზღვრება როგორც ძალა, რომელიც მოქმედებს ფართის ერთეულზე

$$P = \frac{F}{A}$$

ისმის კითხვა: რა ძალა იწვევს აირის წნევას?

ატმოსფერული წნევისათვის, მაგალითად, ძალა შეიძლება დაუკავშირიდეს ჰაერის მოლეკულების წონას, რომლებიც მიეზიდება პლანეტის ზედაპირს გრავიტაციით.

5.2.1. წნევის ერთეულები

ერთეულთა **SI** სისტემაში წნევისათვის მიღებულია ერთეული, რომელიც ასახავს წნევის განსაზღვრას. **SI** სისტემაში ძალის ერთეულია ნიუტონი და

ფართობისა – კვადრატული მეტრი. ასე რომ, წნევის ერთეულია $5 \cdot 10^5 \text{ Pa}$. ამ ერთეულს ეწოდება პასკალი, Pa . ტიპური ატმოსფერული წნევები 10^5 Pa -ს რიგისაა. ამიტომ უფრო პრაქტიკულია კილოპასკალის – kPa გამოყენება.

კიდევ ერთი ერთეულია ტორი

$$1 \text{ ტორი} = 1 \text{ mmHg}$$

სხვა მნიშვნელოვანი ერთეულია ატმოსფერო. ზღვის დონეზე საშუალო წნევა დაახლოებით 760 ტორია. ამ სიდიდეს დაარქვენ ატმოსფერო: $1 \text{ ატმ} = 760 \text{ ტორ}$.

მაგრამ ატმოსფეროს ერთეულის განსაზღვრა შეიცვალა SI ერთეულების გამოყენებით.

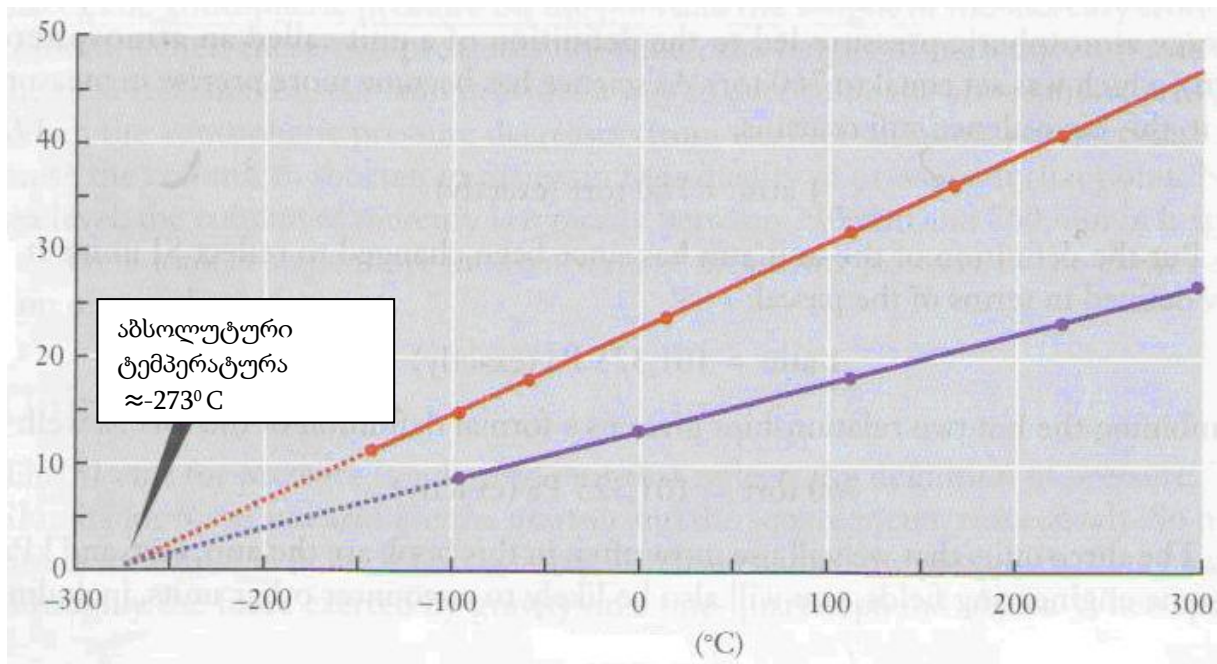
$$1 \text{ ატმ} = 101,325 \text{ kPa} \text{ ანუ } 760 \text{ ტორი} = 101,325 \text{ kPa}$$

ყველაზე ხშირად გამოიყენება სწორედ ეს სამი ერთეული: ატმ , ტორი და kPa .

5.3. აირის კანონი

განსხვავებით მყარი სხეულებისგან და სითხეებისგან აირები მნიშვნელოვნად იცვლება იმ პირობების შეცვლით, სადაც ისინი იმყოფებიან. აირის კონტეინერის ტემპერატურის, წნევის ან მოცულობის ცვლილება იწვევს აირის მკვეთრ რეაქციას. ყველა აირი რეაგირებს ამ ფიზიკურ ცვლილებებზე ერთნაირად, მიუხედავად მათი ქიმიური განსხვავებებისა. აირის კანონის განტოლება საშუალებას გვაძლევს გამოვთვალოთ გარკვეული ცვლილებების გავლენა.

შარლის კანონი მდგომარეობს იმაში, რომ წნევა და ტემპერატურა პირდაპირ პროპორციულია, თუ ტემპერატურა კელვინებშია (ნახ. 4).



ნახ.4. მოცულობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე აირის 2 სხვადასხვა ნიმუშისათვის

ბოილის კანონის მიხედვით, მუდმივ ტემპერატურაზე წნევა და მოცულობა უკუპროპორციული სიდიდეებია. ანალოგიურად, ავოგადროს კანონის თანახმად, აირის მოცულობა პროპორციულია ამ აირის მოლეკულათა (ან მოლეკულის) რიცხვისა.

ეს კანონები ხშირად გამოიყენება აირებზე ზოგიერთი პარამეტრის ცვლილების ზემოქმედების გამოსათვლელად. საბედნიეროდ, არ გვჭირდება ცალკეული კანონები სპეციფიკური განტოლებებისათვის, რადგანაც ესენი ყველა გაერთიანებულია **იდეალური აირის კანონში**. რადგან ვიცით ეს კანონი, ადვილად გადავჭრით ამ კანონთან დაკავშირებულ პრობლემებს. ამის გასაკეთებლად ჩავატაროთ ყველა იმ პარამეტრის იდენტიფიცირება, რომლებიც შედის აირის კანონში – P, V, T ან n , რომლებიც არ იცვლება (R -უნივერსალური მუდმივაა, რომელიც არასოდეს იცვლება!). შემდეგ გადავადგილოთ აირის კანონის განტოლება ისე, რომ ყველა ეს სიდიდე მოხვდეს ერთი და იმავე მხარეს და დავტოვოთ ისინი, რომლებიც შეიძლება შეიცვალოს, მეორე მხარეს. თუ წნევა და მოცულობა იცვლება, როდესაც მოლეკულის რიცხვი და ტემპერატურა უცვლელია, მივიღებთ

$$PV = nRT = \text{const}$$

რადგანაც ნამრავლი nRT უცვლელია, PV -ც აუცილებლად უნდა იყოს მუდმივი. ეს გვეუბნება, რომ ნამრავლი $P \times T$ უნდა იყოს ერთი და იგივე ცვლილებამდე და მის შემდეგ. ე.ი.

$$P_1V_1 = P_2V_2$$

აქ ინდექსები '1' და '2' აღნიშნავს პირობებს ცვლილებამდე და მის შემდეგ. ახლა, თუ ვიცით ამ ოთხი სიდიდიდან სამი, ვიპოვით მეოთხეს.

5.3.1. ერთეულები და იდეალური აირის კანონი

თავისთავად იდეალური აირის კანონი ვარგისია მხოლოდ მაშინ, როცა ვიყენებთ აბსოლუტური ტემპერატურის სკალას, სადაც $T = 0$ შეესაბამება აბსოლუტურ ნულს, თუ რატომ უნდა იყოს ასე, აღვნიშნავთ, რომ როცა $T = 0$, გამომდინარე აირის კანონიდან, ან P ან V უნდა ასევე იყოს ნულის ტოლი, რაც ნიშნავს, რომ აქ არ აირის ორი. ეს უბრალოდ არ იქნება სწორი $T = 0^\circ\text{C}$ ან $T = 0^\circ\text{F}$ -თვის.

ტემპერატურისგან განსხვავებით, რომელიც აუცილებლად უნდა გაიზომოს კელვინებში, წნევისა და მოცულობისთვის შეგვიძლია გამოვიყენოთ ნებისმიერი ერთეული. ჩვეულებრივი ტემპერატურული სკალები ძირეულად განსხვავდება ერთეულთა სხვა სახეობებიდან, რადგანაც მათი ერთმანეთში გადაყვანა მოიცავს არა მარტო გამრავლებას გადაყვანის კოეფიციენტებით, არამედ ან გამოკლებას, ან, თავის მხრივ, პირდაპირ გამომდინარეობს იმ ფაქტიდან, რომ სხვადასხვა ტემპერატურულ სკალას ($K, ^\circ\text{C}, ^\circ\text{F}$) აქვს სხვადასხვა ნულოვანი წერტილი. სხვა სიდიდეებისათვის „ნულის“ ცნება ერთი და იგივეა, მიუხედავად იმისა, თუ რომელ ერთეულებს ვიყენებთ. თუ ნიმუშის მასა ნულს უდრის, არ აქვს მნიშვნელობა, რა ერთეულებში იქნება ის გამოსახული. R -ს მნიშვნელობა სხვადასხვაა გამოყენებული ერთეულების მიხედვით

$$R = 0,0806 \text{ ლ ატმ მოლ}^{-1}\text{K}^{-1} = 8,314 \text{ ჯ მოლ}^{-1}\text{K}^{-1} = 62,37 \text{ ლ ტორი მოლი}^{-1}\text{K}^{-1}$$

5.4. პარციალური წნევა

იდეალური აირის კანონის გამოყენებით შეიძლება განვსაზღვროთ ცალკეული აირების მრავალი თვისება. მაგრამ ხშირად ვაწყდებით საინტერესო სიტუაციას, როცა ერთზე მეტ აირთან გვაქვს საქმე. თუ მხედველობაში მივიღებთ ქიმიურ რეაქციებს, როგორ შეიძლება დავაკვირდეთ აირთა ნარევის თვისებებს, რომლებიც განსხვავებულია ცალკეული აირების თვისებებიდან?

კერძოდ, აღვნიშნოთ, რომ აირის კანონის განტოლების არც ერთი წევრი არ არის დამოკიდებული აირის იდენტურობაზე. განვიხილოთ ჰაერის მაგალითი და სიმარტივისთვის დავუშვათ, რომ ის შეიცავს მხოლოდ N_2 და O_2 . ვუშვებთ რა, რომ ჰაერი იქცევა იდეალურად, წნევა შეიძლება ასე გამოვსახოთ

$$P = \frac{nRT}{V}$$

აქ n არის ჰაერის მოლების საერთო რიცხვი. მაგრამ ეს სიდიდე იქნება უბრალოდ ჯამი თითოეული კომპონენტის მოლებისა:

$$N_{\text{ჯამი}} = n_{N_2} + n_{O_2}$$

თუ ამას ჩავსვამთ წნევის გამოსახულებაში, მივიღებთ:

$$P = \frac{nRT}{V} = \frac{n_{N_2} + n_{O_2}}{V} RT = \frac{n_{N_2}}{V} RT + \frac{n_{O_2}}{V} RT$$

ორივე ამ უკანასკნელ nRT/V წევრს აქვს განსაკუთრებული მნიშვნელობა. ისინი გამოხატავენ აირთა ნარევის მხოლოდ ერთი კომპონენტის წნევას. თუ აირში აზოტია, $n_{O_2} = 0$ და $P = P_{N_2} = \frac{n_{N_2}RT}{V}$

თუ ნარევში მარტო ჟანგბადია, იმავეს მივიღებთ P_{O_2} -თვის. ნარევში წნევა არის ცალკეული აირების ჰიპოთეტური პარციალური წნევების ჯამი.

ეს ცნება შემოიღო დალტონმა და ცნობილია როგორც **პარციალური წნევების დალტონის კანონი**. ნარევის წნევა არის შემადგენელი აირების პარციალური წნევების ჯამი. მარტივად რომ ვთქვათ, პარციალური წნევა არის წნევა, როდესაც მხოლოდ ერთი კომპონენტია წარმოდგენილი. სანამ შემადგენელი აირები იქცევა

იდეალურად და არ რეაგირებენ ერთმანეთთან, ეს დამოკიდებულება სამართლიანია აირების ნებისმიერი ნარევისათვის.

ასეთი ნარევისათვის თითოეული კომპონენტის პარციალური წნევა შეიძლება ასე ჩაიწეროს: $P_i = \frac{n_i RT}{V}$, სადაც ინდექსი i აღნიშნავს აირის იდენტურობას (მაგალითად, ოთხი აირიდან შედგენილი ნარევისათვის იქნება P_1, P_2, P_3 და P_4 და n_i არის i – კომპონენტის მოლების რიცხვი. ნარევის მთლიანი წნევა იქნება

$$P = \sum P_i = \sum n_i \frac{RT}{V}$$

მოლების ჯამური რიცხვი არის ცალკეული კომპონენტების მოლების რიცხვის ჯამი: $P = n_{\text{ჯამ}} \frac{RT}{V}$.

ეს გამოსახულებები გვაძლევს სხვა გზას პარციალური წნევის გასააზრებლად. ჩვენ შეგვიძლია აირის თითოეული კომპონენტის კონცენტრაცია გამოვსახოთ მოლური წილით:

$$X_i = \frac{n_i}{n_{\text{ჯამ}}}$$

წმინდა აირისათვის $n_i = n_{\text{ჯამ}}$ და $X = 1$. ნებისმიერ ნარევში, $n_i < n_{\text{ჯამ}}$, ასე რომ მოლური წილის სიდიდე იცვლება ნულიდან ერთამდე. თუ შევაფარდებთ პარციალურ წნევას მთლიანთან:

$$\frac{P_i}{P} = \frac{n_i (RT/V)}{n_{\text{ჯამ}} (RT/V)} = \frac{n_i}{n_{\text{ჯამ}}} = X$$

ასე რომ, პარციალური წნევა არის მოლური წილი გამრავლებული მთლიან წნევაზე $P_i = X_i P$.

5.5. რეაქციების სტექიომეტრია აირების მონაწილეობით

ქიმიური რეაქციების რაოდენობრივი ასპექტების განხილვისას ჩვენ ხაზი გავუსვით მოლების თანაფარდობის მნიშვნელობას. იდეალური აირის კანონი იძლევა დამოკიდებულებას აირის მოლების რიცხვსა და ზოგიერთ ადვილად გასაზომ თვისებებს შორის: წნევა, მოცულობა და ტემპერატურა. ასე რომ, როცა

ქიმიურ რეაქციაში მონაწილეობს აირი, იდეალური აირის კანონი საუკეთესო საშუალებაა მოლეულის რიცხვის დასადგენად, რეალურად ამ კანონის გამოყენება სტექიომეტრიის პრობლემაში არ იძლევა რაიმე ახალ იდეას. ის მხოლოდ აერთიანებს გამოთვლების ორ სახეს. ჩვენ, ჩვეულებრივ, ვატარებთ სტექიომეტრულ გამოთვლებს მოლური თანაფარდობის ტერმინებში და ვიყენებთ აირის კანონს, რათა დავაკავშიროთ აირის მოლეულის რიცხვი ტემპერატურასთან, წნევასთან და მოცულობასთან.

5.5.1. სტანდარტული პირობები

ზემოთ აღნიშნულიდან ნათელია, რომ აირის რაოდენობის ზუსტი განსაზღვრისათვის საჭიროა ტემპერატურის, წნევის და მოცულობის ზუსტი დადგენა. თუ გვინდა აირების სხვადასხვა რაოდენობების შედარება, მოსახერხებელია გამოვიყენოთ პირობების რაღაც სტანდარტული სისტემა. იდეალური აირისათვის სტანდარტის დასადგენად უნდა განვსაზღვროთ ტემპერატურა და წნევა. ამ შემთხვევაში მოცულობა პირდაპირპროპორციული იქნება აირის მოლეულის რიცხვისა. ჩვეულებრივად აირის **სტანდარტულ ტემპერატურად და წნევად**, ირჩევენ 0°C ან $273,15\text{K}$ ტემპერატურას და 1 ატმ. წნევას. თუ ამ სიდიდეებს შევიტანთ იდეალური აირის განტოლებაში, ვიპოვით იდეალური აირის მოლურ მოცულობას (ერთი მოლის მოცულობა) სტანდარტულ პირობებში.

$$V = \frac{nRT}{P} = \frac{(1 \text{ მოლი})(0,08206 \text{ ლ ატმ მოლი}^{-1}\text{K}^{-1})(273,15\text{K})}{(1 \text{ ატმ})} = 22,41 \text{ ლ}$$

ეს რიცხვი არის გადაყვანის კოეფიციენტი იმ სტექიომეტრული პრობლემებისთვის, რომლებიც ეხება აირებს და ითვალისწინებს რომ სტანდარტული პირობები შენარჩუნებულია.

5.6. მოლეკულურ-კინეტიკური თეორია და იდეალური აირის რეალურთან შედარება

აირების რიცხოვრივი ქცევის მოდელირების შესაძლებლობა მნიშვნელოვანი მიღწევაა, რომელიც ფართოდ გამოიყენება მეცნიერების და ტექნიკის მრავალ დარგში. სხვადასხვა აირის ქცევის ანალოგიური ხასიათი საშუალებას იძლევა შეიქმნას ისეთი მოდელი, რომელიც აღწერს ატომების ქცევას. მაგრამ რიგ პრაქტიკულად მნიშვნელოვან შემთხვევებში აირები არ იქცევა იდეალურად. ამის მაგალითია აირების ქცევა ძალიან მაღალ წნევებზე, რასაც ადგილი აქვს მთელ რიგ სამრეწველო დანადგარებზე. აქ განვიხილავთ ძალიან სასარგებლო მოდელს – **მოლეკულურ-კინეტიკურ თეორიას**, რომელშიც დამყარებულია კავშირი აირების მაკროსკოპულ თვისებებს, იდეალური აირის განტოლებასა და მაკროსკოპულ მასშტაბში აირების ქცევას შორის.

5.6.1. მოდელის პოსტულატები

მოდელის ძირითადი საფუძველია შემდეგი დებულებები:

1. აირი შედგება ნაწილაკების ძალიან დიდი რაოდენობისგან და ეს ნაწილაკები მუდმივ ქაოტურ მოძრაობაშია.
2. ნაწილაკები აირში უსასრულოდ მცირე ზომისაა და ისინი არ იკავებენ მოცულობას.
3. ნაწილაკები აირში მოძრაობენ სწორხაზოვნად იმ შემთხვევების გარდა, როცა ისინი ეჯახებიან ერთმანეთს ან კონტეინერის კედლებს. ეს შეჯახებები დრეკადია, ასე რომ, ნაწილაკების მთლიანი კინეტიკური ენერგია უცვლელია.
4. შეჯახებისას აირის ნაწილაკები ურთიერთქმედებენ ერთმანეთთან.
5. ნაწილაკების საშუალო კინეტიკური ენერგია აირში პროპორციულია აირის აბსოლუტური ტემპერატურისა და არ არის დამოკიდებული აირის იდენტურობაზე.

ამ პოსტულატებზე დაყრდნობით ჩვენ რეალურად შეგვიძლია გამოვიყვანოთ იდეალური აირის კანონი. ეს არის მეცნიერულ თეორიასა და ექსპერიმენტს შორის სინერგიზმის მნიშვნელოვანი მაგალითი.

ეს პოსტულატები შესაბამისობაშია იმ ფაქტებთან, რაც ჩვენ ვიცით ექსპერიმენტიდან აირების ქცევის შესახებ. განვიხილოთ დაწვრილებით მე-5 პოსტულატი. ცნობილია, რომ კინეტიკური ენერგია კავშირშია სიჩქარესთან და მასასთან. $E_k = \frac{1}{2}mv^2$. ასე რომ, თუ კინეტიკური ენერგია, პოსტულატის მიხედვით, არის ტემპერატურის ფუნქცია, მაშინ მოლეკულების სიჩქარეც ტემპერატურის ფუნქციაა. როდესაც მოლეკულები უფრო სწრაფად მოძრაობენ, იზრდება მათი კედლებთან დაჯახების სიხშირე და ისინი კედელს ანიჭებენ უფრო მეტ ძალას თითოეული შეჯახებისას. ორივე ეს ეფექტი იწვევს აირის წნევის ზრდას ტემპერატურის მატებით, რასაც წინასწარმეტყველებს აირის კანონი.

პოსტულატ 5-ში სიტყვა „საშუალო“ ჩართულია იმიტომ, რომ ქაოტურად მოძრავი აირის მოლეკულების ნაკრებში ზოგიერთი მოლეკულა მოძრაობს ძალიან სწრაფად, მაშინ როცა სხვები ვირტუალურად უძრავია ნებისმიერ მოცემულ მომენტში. დაჯახების შედეგად სწრაფად და ნელა მოძრავი ნაწილაკების იდენტურობა შეიძლება შეიცვალოს, მაგრამ მაინც იქნება ორი ტიპის ნაწილაკები. ამიტომ არ იქნება სწორი ვიფიქროთ გარკვეული სიჩქარის მქონე მოლეკულებზე და რეალურად უნდა ვთქვათ, რომ საშუალო მოლეკულური სიჩქარე იზრდება ტემპერატურის მატებით. ეს სიტუაცია კარგად აიხსნება **განაწილების ფუნქციის** გამოყენებით სიჩქარეთა დიაპაზონის აღწერის მიზნით.

ეს ფუნქციები ჩვეულებრივი მათემატიკური აპარატია, რომელიც გამოიყენება როგორც მეცნიერებაში, ასევე ეკონომიკაში, სოციალურ სფეროში და განათლებაში.

განაწილების ფუნქციას, რომელიც აღწერს აირის ნაწილაკების ნაკრების სიჩქარეებს, ეწოდება **მაქსველ-ბოლცმანის განაწილება**. ეს ფუნქცია, რომელიც პირველად მიიღეს კინეტიკური თეორიის პოსტულატების დაწვრილებითი განხილვით, წინასწარმეტყველებს აირში მოლეკულების იმ ნაწილს, რომელიც მოძრაობს გარკვეული სიჩქარით. ეს დამტკიცდა მრავალი ექსპერიმენტით, რომელთა საშუალებითაც მოხერხდა სიჩქარეთა განაწილების გაზომვა.

5.6.2. რეალური აირები და კინეტიკური თეორიის შეზღუდვები

განვიხილოთ უფრო კრიტიკულად თეორიის ზოგიერთი პოსტულატი. მტკიცება იმისა, რომ აირის მოლეკულები არ იკავებენ მოცულობას, შეიძლება მოგვეჩვენოს რეალობიდან მოწყვეტილად, რადგანაც მთელი მატერია იკავებს სივრცეს. პოსტულატის ძირითადი იდეა არის ის, რომ ნაწილაკთა შორის ცარიელი სივრცის მოცულობასთან შედარებით, თავად ნაწილაკების მოცულობა უმნიშვნელოა. ამ დებულების ვარგისიანობის დამტკიცება შესაძლებელია ნაწილაკებს შორის საშუალო თავისუფალი ნაბიჯის განსაზღვრით. **საშუალო თავისუფალი ნაბიჯი** – ეს არის ნაწილაკის გადაადგილების საშუალო მანძილი სხვა ნაწილაკებთან დაჯახებებს შორის. ჰაერში ოთახის ტემპერატურაზე და ატმოსფერული წნევისას ეს სიდიდე ~ 70 ნანომეტრია, ეს 200-ჯერ მეტია, ვიდრე მცირე მოლეკულის, როგორიცაა N_2 ან O_2 , ტიპური რადიუსი. შედარებისათვის სითხის მოლეკულების საშუალო თავისუფალი ნაბიჯი დაახლოებით ტოლია მოლეკულური რადიუსისა.

როდის ირღვევა ეს მტკიცებულება? ძირითადად, ჩვენ არ ვზრდით მნიშვნელოვნად მოლეკულების ზომას პირობების შეცვლით; ასე რომ, ერთადერთი გზა, რათა მოცულობები გახდეს შედარებადი, არის მოლეკულების შემჭიდროვება მოცულობის შემცირებით. ამრიგად, მაღალ წნევებზე, როდესაც აირები შემჭიდროვებულია, ცალკეული მოლეკულების მოცულობა ხდება მნიშვნელოვანი და დებულება, რომ აირი იქცევა იდეალურად, ირღვევა. ეს გვაფიქრებინებს, რომ შეიძლება აირის კონდენსირება სითხედ და არ უნდა ველოდეთ, რომ იდეალური აირის კანონი სამართლიანი იქნება სითხისთვის.

პოსტულატები ასევე ამტკიცებს, რომ აირის მოლეკულები ყოველთვის მოძრაობენ სწორხაზობრივად და ურთიერთქმედებენ ერთმანეთთან მხოლოდ დრეკადი დაჯახებებით. ე.ი. მოლეკულები არც მიიზიდავენ ერთმანეთს და არც განიზიდავენ. ეს მართლაც სწორი რომ იყოს, მოლეკულები არასოდეს მიეკარება ერთმანეთს და შეუძლებელი იქნება აირის კონდენსირება სითხედ ან მყარ სხეულად. ცხადია, უნდა არსებობდეს გარკვეული მიზიდულობის ძალები

მოლეკულებს შორის. იდეალური აირის მოდელი მუშაობს, რადგან მთელი რიგი გარემოებებისას ეს მიზიდულობის ძალები უმნიშვნელოდ მცირეა თავად მოლეკულის კინეტიკურ ენერგიასთან შედარებით. ის ფაქტი, რომ ეს ძალები იწვევს სითხეების და მყარი სხეულების წარმოქმნას, მიგვითითებს იმ პირობებზე, რომლებშიც ეს ძალები მნიშვნელოვანია. ვიცით, რომ აირები კონდენსირდება ტემპერატურის მნიშვნელოვანი შემცირებისას, ამის საფუძველია ის ფაქტი, რომ დაბალ ტემპერატურაზე მოლეკულების კინეტიკური ენერგია მცირდება და საბოლოო ჯამში მოლეკულათა შორის მიზიდულობის ძალების სიდიდე შედარებადია კინეტიკურ ენერგიასთან. ამ თვალთახედვით, მოლეკულები იწყებენ დრეკად დაჯახებებს. ეს ნიშნავს, რომ მოლეკულების წყვილები ან მცირე კლასტერები შეიძლება მცირე ხნით იყვნენ კონტაქტში და არ განიცდიდნენ უბრალო ბურთულოვან დაჯახებებს. მოლეკულათა ეს ტენდენცია – მიეკვრან ერთმანეთს, თუნდაც წუთიერად, ამცირებს იმ დროს, როდესაც მოლეკულები ეჯახება კონტეინერის კედლებს. ასე რომ, აირის წნევა იქნება ნაკლები იმაზე, რასაც იწინასწარმეტყველებს იდეალური აირის განტოლება.

5.6.3. იდეალური აირის განტოლების კორექტირება

როცა კინეტიკური თეორიის პოსტულატები გამოუსადეგარია, აირი არ აკმაყოფილებს იდეალური აირის განტოლებას. მრავალი შემთხვევისათვის აირები უნდა განვიხილოთ როგორც არაიდეალური და უნდა მივიღოთ ემპირიული მათემატიკური აღწერა. აირის მრავალი განტოლება, რომელთა გამოყენება შეიძლება რეალური აირის ქცევის აღსაწერად. ყველაზე ხშირად იყენებენ ვან-დერ-ვალსის განტოლებას:

$$\left(P + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

აქ a და b ვან-დერ-ვალსის მუდმივებია; განსხვავებით აირების უნივერსალური მუდმივასაგან (R), ამ მუდმივების მნიშვნელობები უნდა დადგინდეს თითოეული ცალკეული აირისათვის. თუ აირი იქცევა იდეალურად,

როგორც a , ასევე b ნულის ტოლია და ვან-დერ-ვალსის განტოლება ხდება იდეალური აირის განტოლება. ამ განტოლების იდეალური აირის განტოლებასთან კავშირის შემდგომი კვლევით ვხედავთ, რომ წვერი რომელიც შეიცავს a -ს, ასახავს აირის ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედებას. b -ს შემცველი წვერი განსაზღვრავს აირის ნაწილაკების მიერ დაკავებულ მოცულობას. აღსანიშნავია, რომ უფრო დიდ მოლეკულებს აქვთ b -ს უფრო მაღალი მნიშვნელობები, რაც თანხვედრაშია მათ როლთან თავად მოლეკულების მოცულობის გამოთვლაში. HF -ს აქვს ყველაზე მაღალი a . ეს ნიშნავს, რომ სხვა აირებთან შედარებით, HF -ს მოლეკულები უფრო მეტად ურთიერთქმედებენ ერთმანეთთან, რაც მოითხოვს მეტ კორექციას იდეალურ ქცევასთან მიმართებაში.

6. პერიოდული სისტემა და ატომური სტრუქტურა

ამ თავის შესწავლის შემდეგ შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

- აღწეროს ანალოგიები და განსხვავებები ატომის აგებულების ბორის მოდელსა და კვანტურ-მექანიკურ მოდელს შორის;
- გააცნობიეროს, თუ როგორ მიიღება კვანტური რიცხვები, როგორც ტალღური მოდელის შედეგი;
- განსაზღვროს ტერმინი **ორბიტალი**;
- მოახდინოს ორბიტალის იდენტიფიცირება (**1s**, **3p** და ა.შ.) კვანტური რიცხვებიდან და პირიქით;
- ჩამოთვალოს ატომში ორბიტალების თითოეული ტიპი (**1s**, **3p** და ა.შ.);
- მოხაზოს **s** და **p** ორბიტალების ფორმები და განსაზღვროს ორბიტალები მათი ფორმის მიხედვით;
- გაამწკრივოს ორბიტალები ზომის და ენერგიის მიხედვით;
- გამოიყენოს პაულის აკრძალვის პრინციპი და ჰუნდის წესი, რათა ჩაწეროს ძირითადი ჯგუფის ელემენტების ატომების და იონების ელექტრონული კონფიგურაციები;
- ახსნას კავშირი სავალენტო ელექტრონების კონფიგურაციებსა და პერიოდულ სისტემას შორის;
- განსაზღვროს ატომთა შემდეგი თვისებები: ატომური რადიუსი, იონიზაციის ენერგია და სწრაფვა ელექტრონისადმი;
- ჩამოაყალიბოს, თუ როგორ იცვლება ეს თვისებები ელემენტის პოზიციასთან ერთად პერიოდულ სისტემაში.

6.1. სინათლის ტალღური ბუნება

სინათლის ბევრი თვისება შეიძლება აიხსნას როგორც თაღლის თვისება. ტალღის მთავარი მახასიათებლებია ოთხი ცვლადი: ტალღის სიგრძე – ეს არის მანძილი ორი მეზობელი ტალღის შესაბამის წერტილებს შორის. ამპლიტუდა – ეს

არის ტალღის სიდიდე ან სიმაღლე. სიხშირე – ეს არის იმ ტალღის სრული ციკლების რიცხვი, რომელიც გადის მოცემულ წერტილში ერთ წამში. ის აღინიშნება ასოთი ν და იზომება 1/წმ ერთეულებში. სინათლის სიჩქარე ვაკუუმში (აღინიშნება როგორც C და იზომება მანძილი/დრო ერთეულებში) არის ბუნების მუდმივა, რომელიც გაზომილია დიდი სიზუსტით და ტოლია

$$C = 2,99792458 * 10^8 \text{ მწმ}^{-1}$$

რადგან სინათლის სიჩქარე მუდმივაა, იმ ტალღების რიცხვი, რომლებიც გადის გარკვეულ წერტილში დროში უკუპროპორციულია ტალღის სიგრძისა. გრძელ ტალღებს ახასიათებთ ნაკლები ციკლები ერთ წამში, ასე რომ, მათი სიხშირეები დაბალია. ეს კავშირი მათემატიკურად ასე გამოიხატება:

$$c = \lambda \times \nu$$

6.2. სინათლის კორპუსკულური ბუნება

ელექტრომაგნიტური გამოსხივების ტალღურ მოდელში შეიძლება აიხსნას სინათლის მრავალი თვისება. მაგრამ ცნობილია ე. წ. **ფოტოელექტრული ეფექტი**, რომელიც ამ მოდელით ვერ აიხსნება. ერთადერთი გზა ამის ახსნისა აღმოჩნდა **ტალღურ-კორპუსკულური დუალიზმის** ცნების შემოტანა, რომელიც გვეუბნება, რომ გარკვეულ სიტუაციაში სინათლე შეიძლება აღიწეროს როგორც ტალღა, მაშინ როცა სხვა სიტუაციაში უმჯობესია მისი როგორც ნაწილაკის აღწერა. ეს არ ნიშნავს, რომ არსებობს სინათლის ორი განსხვავებული სახე. ეს ნიშნავს, რომ ცალ-ცალკე არც ტალღური მოდელი და არც კორპუსკულური მოდელი ვერ აღწერენ ზუსტად სინათლის თვისებას.

ასპექტი, რომელშიც ჩვეულებრივ განვიხილავთ სინათლეს, როგორც ნაწილაკს, არის ის მომენტი, როცა ის ანიჭებს ენერგიას მეორე ობიექტს. აინშტაინმა სინათლე განიხილა, როგორც ენერგიის პაკეტების ნაკრები და მას **ფოტონი** უწოდა. სინათლის ფოტონის ენერგია პროპორციულია მისი სიხშირისა:

$$E = h\nu$$

აქ E ფოტონის ენერგიაა, ν – სიხშირეა. h არის ე. წ. პლანკის მუდმივა

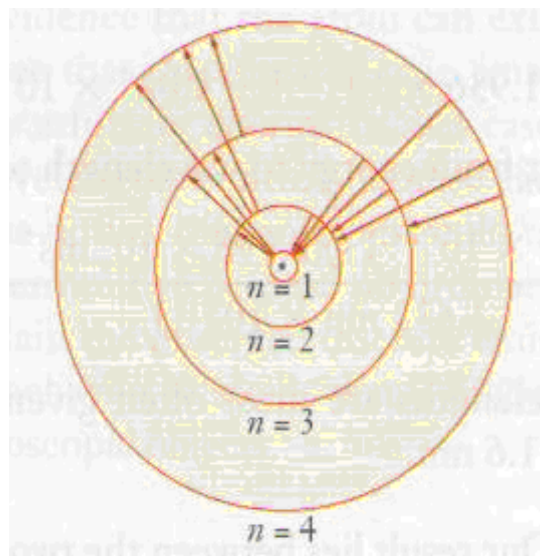
$h = 6,626 \times 10^{34}$ ჯ x წმ-ს შეტანით მივიღებთ

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

ამრიგად, თუ ცნობილია გამოსხივების ტალღის სიგრძე ან სიხშირე, შეიძლება ფოტონის ენერგიის განსაზღვრა.

6.3. ბორის ატომი

ექსპერიმენტებით დადგენილია, რომ ატომის ბირთვი დადებითად არის დამუხტული, მაშინ როცა მისი გარშემომყოფი ელექტრონები უარყოფითი მუხტის მატარებელია. იმ ფაქტმა, რომ სხვადასხვა ნიშნით დამუხტული ნაწილაკები მიიზიდავენ ერთმანეთს, უნდა გვაფიქრებინოს, რომ ელექტრონები უნდა დაეცეს დადებითად დამუხტულ ბირთვს. ეს თეზისი ბორმა საფუძვლად დაუდო ატომის თავის მოდელს (ნახ. 5).



ნახ.5. ატომის აღნაგობის ბორის მოდელის სქემატური გამოსახულება

მისი ყველაზე კრეატიული მოსაზრება იყო ის, რომ ელექტრონებს უკავიათ სტაბილური ორბიტები, საიდანაც გადაადგილება შეუძლებელია გარკვეული ენერგიის შთანთქმის ან სინათლის სახით მისი გამოსხივების გარეშე. ბორის მოდელის მნიშვნელობა თანამედროვე საზოგადოებისათვის ცხადია, რადგანაც

დღესაც ატომი ჩვეულებრივ განიხილება როგორც ბირთვის გარშემო მოძრავი ელექტრონების სტრუქტურა.

ახლა ვიცით, რომ ეს მოდელი ბოლომდე სწორი არ არის. ნებისმიერ ატომში ელექტრონები და პროტონები მიიზიდავს ერთმანეთს. ამიტომ, რაც უფრო ახლოს არიან ბირთვი და ელექტრონი, მით უფრო ძლიერია მიზიდვა და ნაკლებია ენერგია. იმისათვის, რომ ელექტრონი გადავიდეს შიდა ორბიტიდან გარეზე, აუცილებელია ენერგიის შთანთქმა. ახალი განაწილება ანუ ელექტრონების კონფიგურაცია მდგომარეობს დაჯგუფებაში, რომელსაც არა აქვს ყველაზე დაბალი ენერგია და ამიტომ მიეკუთვნება **აგზნებულ მდგომარეობას**. ბუნებაში ერთ-ერთი ყველაზე მძლავრი მამოძრავებელი ძალაა დაბალი ენერგეტიკული მდგომარეობისკენ ანუ **ძირითად მდგომარეობისკენ** მოძრაობისას ტენდენცია რადიაციის გამოსხივებით. როგორც აგზნების, ასევე მისი პროცესების გააზრება შესაძლებელია **ბორის მოდელის** ტერმინებით. ეს მოდელი გარკვეულწილად სასარგებლოა, თუმცა რეალურად ის არ არის ატომური სტრუქტურის ზუსტი წარმოდგენა.

6.4. ატომის კვანტურ-მექანიკური მოდელი

ბორის ატომის მოდელმა და მე-20 საუკუნის დასაწყისში გაკეთებულმა აღმოჩენებმა განაპირობეს მცდელობა ატომის უფრო საიმედო მოდელის დასადგენად. ასეთი გახდა **კვანტურ-მექანიკური მოდელი**, რამაც შესაძლებელი გახდა როგორც ახალი მიღწევების ახსნა, ისე ქიმიური კავშირის უფრო ზუსტი აღწერა.

რადგანაც ატომის კვანტურ-მექანიკური სურათი არის რთული და არათვალსაჩინო, ჩვენ მას შევადარებთ ბორის მოდელს. ამ უკანასკნელში ელექტრონები განიხილება როგორც ნაწილაკები, რომლებიც მოძრაობენ ფიქსირებული რადიუსის წრიულ ორბიტებზე. კვანტურ მოდელში ელექტრონები განიხილება როგორც ტალღები და არა როგორც ნაწილაკები, რომლებიც გავრცობილია ანუ დელოკალიზებულია სივრცეში. ამას ეწოდება **ორბიტალი**.

ყველაზე მნიშვნელოვანი ანალოგია ამ ორ მოდელს შორის არის ის ფაქტი, ორივე შემთხვევაში ელექტრონის ენერგია დაკვანტულია, ე. ი. შეზღუდულია გარკვეული დაშვებული სიდიდეებით.

ატომის კვანტურ-მექანიკური მოდელის არსებითი და განსაკუთრებული მახასიათებელი მდგომარეობს ელექტრონების, როგორც ტალღების აღწერაში. უფრო თვალსაჩინოა ვიფიქროთ, რომ ელექტრონები ნაწილაკებია და არა ტალღები. მაგრამ ექსპერიმენტებმა სინათლეზე აჩვენა, რომ ელექტრონები იქცევიან როგორც ტალღა. მაგალითად, დიფრაქცია კარგად აიხსნება ტალღური მიდგომით.

ტალღის მათემატიკური აღწერა, ძირითადად, იწყება პერიოდული ქცევის აღმწერი ფუნქციით, რომელსაც ტალღური ფუნქცია ეწოდება. უმარტივესი ასეთი ფუნქციებია $\sin x$ და $\cos x$. ე. შრედინგერმა შემოიტანა ე.წ. შრედინგერის განტოლება

$$H\Psi = E\Psi$$

მაგრამ ამ ფორმის სიმარტივე მაცდურია, რადგანაც H არის ოპერატორი, რომელიც გამოხატავს ჩასატარებელი მათემატიკური ოპერაციების სრულ სერიას. E – ენერგიაა და Ψ – ელექტრონის ტალღური ფუნქციაა. თუ ჩავწერთ მთლიან ოპერატორს H , მივიღებთ, რომ შრედინგერის განტოლება ფაქტობრივად არის მეორე რიგის დიფერენციალური განტოლება. აღმოჩნდა, რომ უმრავლეს შემთხვევაში ამ განტოლების ზუსტი ამოხსნა შეუძლებელია, ასე რომ, აუცილებელია გარკვეული მიახლოების შემოტანა. მაგრამ ტალღური ფუნქციის ცნება ცენტრალურია კვანტურ-მექანიკურ მოდელში და იგი შეიცავს ყველა ინფორმაციას, რომელიც ჩვენ ვიცით ელექტრონის შესახებ.

6.4.1. პოტენციური ენერგია და ორბიტალები

ტალღური განტოლება აღწერს ელექტრონების ენერგიას ნებისმიერი ობიექტის ან ნაწილაკის მთლიანი ენერგია შედგება კინეტიკური და პოტენციური ენერგიების ჯამისაგან. მაგრამ პოტენციური ენერგია ყველაზე მნიშვნელოვანია

ატომების სტრუქტურის აღწერისას. ელექტრონების პოტენციური ენერგია ატომში დაკავშირებულია კულონურ ურთიერთქმედებასთან დადებითად დამუხტულ ბირთვსა და უარყოფითად დამუხტულ ელექტრონებს შორის, ისევე როგორც ერთნაირი ნიშნით დამუხტული ელექტრონების განზიდვასთან. ტალღების პერიოდული ბუნება ტალღური ფუნქციის მრავალი ამოხსნის საშუალებას იძლევა ნებისმიერი პოტენციალური ურთიერთქმედებისას. შრედინგერის განტოლება შეიძლება ასეც ჩაიწეროს: $H\Psi_n = E_n \Psi_n$, რათა ხაზი გაესვას იმას, რომ შესაძლებელია მრავალი ამონახსნის არსებობა. ტალღური ფუნქციები Ψ_n უზრუნველყოფს განტოლების ამონახსნების ჩაწერას ორი კომპონენტის ტერმინებში: რადიალური კომპონენტი, რომელიც დამოკიდებულია მხოლოდ მანძილზე ელექტრონსა და ბირთვს შორის და კუთხოვანი კომპონენტი, რომელიც შეიძლება დამოკიდებული იყოს ელექტრონის მიმართულებაზე ან ორიენტაციაზე ბირთვის მიმართ. ტალღური ფუნქციის ფიზიკური არსისათვის ყველაზე მნიშვნელოვანია მისი კვადრატი – Ψ^2 , ეს სიდიდე ყოველთვის დადებითია და გამოხატავს ელექტრონის ყოფნის ალბათობას ნებისმიერ ცალკეულ წერტილში.

6.4.2. კვანტური რიცხვები

სახელები, მინიჭებული ატომური ორბიტალებისათვის, გამომდინარეობს იმ ფუნქციებიდან, რომელთა საშუალებით ამოიხსნება ტალღური ფუნქცია. საერთო ჯამში, მათ ეწოდება კვანტური რიცხვები.

ცალკეული კვანტური რიცხვის განხილვამდე საჭიროა ატომური ორბიტალების აღწერა.

ატომური ორბიტალების ტალღური ფუნქციებისათვის მათემატიკური განტოლებების დასაწერად აუცილებელია სამი კვანტური რიცხვის გამოყენება: მთავარი კვანტური რიცხვი (n), თანაური (ორბიტული) კვანტური რიცხვი (l) და მაგნიტური კვანტური რიცხვი (m_l). ეს კვანტური რიცხვები ბუნებრივი შედეგია ტალღური განტოლების მათემატიკისა. მეტიც, ატომური ორბიტალებისათვის ტალღური განტოლების ამოხსნისას ცხადი ხდება, რომ ეს სამი კვანტური რიცხვი

ურთიერთკავშირშია ერთმანეთთან. ეს მნიშვნელოვანია ორბიტალების ფორმისათვის.

მთავარი კვანტური რიცხვი განსაზღვრავს გარსს, რომელზეც კონკრეტული ორბიტალია და ის უნდა იყოს მთელი რიცხვი ($n = 1, 2, 3, 4 \dots$). როდესაც $n = 1$, აღწერს პირველ გარსს, თუ $n = 2$ – მეორეს და ა.შ. რადგანაც წყალბადის ატომში მხოლოდ ერთი ელექტრონია, ყველა ორბიტალს მოცემულ გარსში ექნება ერთნაირი ენერგია, რასაც წინასწარმეტყველებს ბორის მოდელი. მაგრამ როდესაც ატომში ერთზე მეტი ელექტრონია, ელექტრონების უარყოფითი მუხტები ერთმანეთს განიზიდავს, რაც იწვევს ენერგიათა განსხვავებას ორბიტალებს შორის გარსში. ეს სიძნელე იყო ერთ-ერთი, რის გამოც მოხდა ბორის მოდელის შეცვლა.

თანაური კვანტური რიცხვი ითვალისწინებს ორბიტებს შორის ენერგიათა განსხვავების ინდექსირებას ატომის ერთ და იმავე გარსში. მთავარი კვანტური რიცხვის მსგავსად, ისიც იღებს მთელ მნიშვნელობას, მაგრამ ის შეიძლება იყოს ნულის ტოლიც. ის შეზღუდულია მაქსიმალური მნიშვნელობით, რომელიც n -ზე ერთით ნაკლებია: $l = 0, 1, 2 \dots n - 1$. ეს რიცხვი განსაზღვრავს ქვეგარსებს, ორბიტალების ყველა პატარა ჯგუფებს გარსში. როცა $n = 1$, l -ს ერთადერთი შესაძლო მნიშვნელობაა ნული, ასე რომ, აქ არის მხოლოდ ერთი ქვეგარსი. თითოეული გარსი შეიცავს იმდენ ქვეგარსს, რამდენი მნიშვნელობაც აქვს n -ს.

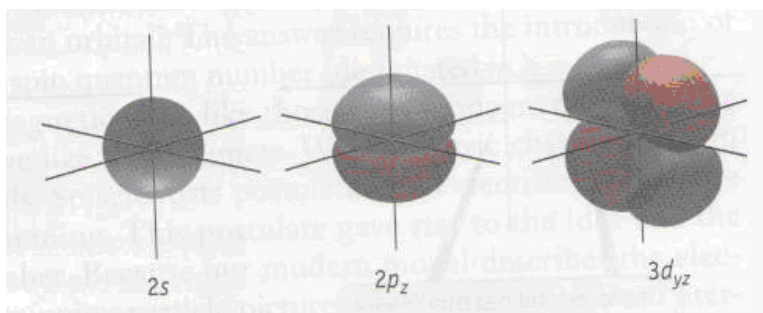
თანაური კვანტური რიცხვი ასევე იძლევა გასაღებს ორბიტალების ასოებით აღნიშვნისათვის – s, p, d, f, g . ნორმალურ პირობებში მყოფი ატომებისათვის ორბიტების ენერგიები მთლიანად განისაზღვრება მხოლოდ n და l კვანტური რიცხვებით. შესაძლებელია ატომების მოთავსება მაგნიტურ ველში და მათი სპექტრის დაკვირვება. ასეთ შემთხვევაში ზოგიერთი გამოსხივების ხაზი იხლიჩება სამ, ხუთ ან შვიდ კომპონენტად. ამ ფაქტმა აუცილებელი გახადა მესამე კვანტური რიცხვის შემოტანა, რომელსაც მაგნიტური კვანტური რიცხვი ეწოდა და აღინიშნება როგორც m_l და ასევე მთელი რიცხვია. ის შეიძლება იყოს როგორც დადებითი, ასევე უარყოფითი და მისი მნიშვნელობა ნაკლები ან ტოლი უნდა იყოს l -ის მნიშვნელობისა ამ ორბიტალებისათვის. ასე რომ, თუ $l = 0$, Z ასევე

ნულია. თუ $l = 1$, $m_l = -1, 0$ ან $+1$ და როცა $l = 2$, m_l შეიძლება იყოს $-2, -1, 0, +1$ ან $+2$.

6.4.3. ორბიტალების ვიზუალიზება

რადგანაც წყალბადის ატომს განიხილავენ როგორც სფეროს, ჩვეულებრივად ტალღურ ფუნქციებს ჩაწერენ სფერულ პოლარულ კოორდინატებში, სადაც ბირთვი მოთავსებულია თავში. ორგანოზომილებიან პოლარულ კოორდინატებში წერტილი სიბრტყეში განისაზღვრება რადიუსით (r) და კუთხით (θ). სფერული პოლარული კოორდინატები ამის სამგანზომილებიანი ეკვივალენტია. იმისათვის, რომ განვსაზღვროთ წერტილი სამგანზომილებიან სივრცეში, გვჭირდება რადიუსი (r) და ორი კუთხე (θ და φ). ასე რომ, წევრი, რომელიც შეიცავს θ ან φ , განსაზღვრავს ორბიტალის ფორმას.

ქიმიკოსები ხშირად განიხილავენ ორბიტალებს როგორც სურათებს და არა როგორც მათემატიკურ ფუნქციებს და კვანტურ რიცხვებს. ორბიტალების ნახატით წარმოდგენა მოითხოვს თავისუფალ გადაწყვეტას. ტალღური ფუნქცია იძლევა ინფორმაციას ორბიტალის პოვნის ალბათობისა სივრცის მოცემულ უბანში. თუ გვინდა გვეჩვენოს ელექტრონის პოვნის 100 %-იანი ალბათობა, აუცილებელი სივრცე ძალიან დიდია და, შესაბამისად, შეუძლებელია განვსაზღვროთ ელექტრონის ქიმიურ კავშირში ჩართვის ტენდენცია. ჩვეულებრივ, სივრცე, რომელშიც არის ელექტრონის პოვნის 90 %-იანი ალბათობა, არჩეულია, როგორც საზღვარი ორბიტალების გამოსახატავად. ამ შეთანხმების ფარგლებში ტალღური ფუნქციის კუთხოვანი ნაწილის გრაფიკი გვიჩვენებს შესაბამისი ორბიტალის ფორმას. ნახ. 6 მოცემულია s , p და d ორბიტალების ფორმები.



ნახ.6. $2s$, $2p$ და $3d$ ორბიტალების ფორმები

s – ორბიტალი სფერული და p – ორბიტალს აქვს ორი შვერილი და d – ორბიტალს – ოთხი შვერილი. p – ორბიტალის ორი შვერილი გაყოფილია სიბრტყით, რომელშიც ელექტრონის პოვნის ალბათობა ნულია. ამ სიბრტყეს ეწოდება კვანძი ან საკვანძო სიბრტყე. d – ორბიტალს აქვს ორი კვანძი. ისმის კითხვა: თუ ელექტრონი შეიძლება იყოს კვანძის ერთ ან მეორე მხარეს, მაგრამ არ არის საკვანძო სიბრტყეში, როგორ გადადის ის ერთი მხარიდან მეორეზე? გავიხსენოთ, რომ ელექტრონები იქცევა როგორც ტალღები. მეორე და უფრო ტექნიკური ვარიანტი პასუხისა არის კვანტური მექანიკის განსაკუთრებული ცნება – განუზღვრელობის პრინციპი. ამ ცნებით, რომელიც შემოღებულია ჰაიზენბერგის მიერ, აიხსნება ელექტრონზე დაკვირვების სიძნელე. ამ პრინციპის თანახმად, შეუძლებელია ერთდროულად და ზუსტად განვსაზღვროთ ელექტრონის მდებარეობა და მომენტი. ამ პრინციპის თანახმად, ორბიტალები სხვა არაფერია, თუ არა ელექტრონის პოვნის ალბათობა.

ორბიტალების ფორმები არაფერს ამბობს იმის შესახებ, რომ ელექტრონის პოვნის ალბათობა დამოკიდებულია ბირთვიდან მანძილზე. ამისათვის უნდა განვიხილოთ ტალღური ფუნქციის რადიალური ნაწილი. ამის გამოხატვით გარკვეულწილად გართულდება კუთხოვანი ნაწილიც. თუ განვიხილავთ განიკვვეთის "ნაჭერს" სამი განსხვავებული s ორბიტალისათვის, რომლებიც შეესაბამება $n = 1, 2, 3$, ვნახავთ, რომ ტალღური ფუნქციის რადიალურ ნაწილში კვანძები ზუსტად იმნაირია, როგორიც მრავალ კუთხოვან ფუნქციებში (p, d და f ორბიტალები). აქ არის კვანტური რიცხვის მნიშვნელობასთან შედარებით ერთით ნაკლები კვანძი. ამრიგად, $2s$ ორბიტალზე ერთი კვანძია, $3s$ ორბიტალზე – ორი და ა. შ. ზოგიერთ p და d ორბიტალს, როგორიცაა $3p$, $4p$ და $4d$, ასევე აქვს რადიალური კვანძები.

6.4.4. პაულის აკრძალვის პრინციპი და ელექტრონული კონფიგურაციები

ატომის სტრუქტურის კვანტურ-მექანიკური მოდელის თანახმად, თითოეული ელექტრონი ატომში იკავებს გარკვეულ ორბიტალს. სხვადასხვა ელემენტის ატომების ქიმიური ქცევის გასაგებად საჭიროა ორბიტალებში ელექტრონების განაწილების ცოდნა. რამდენმა ელექტრონმა შეიძლება დაიკავოს ორბიტალი? პასუხი მოითხოვს კიდევ ერთი კვანტური რიცხვის – **სპინური კვანტური რიცხვის m_s** შემოტანას.

როცა ელექტრონებს ვათავსებთ ძლიერ მაგნიტურ ველში, ისინი იქცევიან როგორც ძალიან პატარა მაგნიტები. ელექტრონების ჩაკეტილ კონტურში მოძრაობისას წარმოიქმნება მაგნიტური ველი. ამდენად, ელექტრონებმა უნდა შეასრულონ გრეხითი მოძრაობა. აქედან შემოვიდა იდეა და დასახელება სპინური კვანტური რიცხვისა. რადგანაც თანამედროვე მოდელი აღწერს ელექტრონს, როგორც დელოკალიზებულ ტალღას, გრეხით მოძრავი ნაწილაკის სურათი არასოდეს განიხილებოდა სარწმუნოდ, მაგრამ ელექტრონის მაგნიტური თვისებები თანხვედნაშია იმ ცნებასთან, რომ ისინი სწრაფად მოძრაობენ გრეხით ერთი ან ორი მიმართულებით და ელექტრონებს ხშირად განვიხილავთ როგორც „დაგრეხილს“. ჩვენ ვიყენებთ კვანტურ რიცხვს m_s , რათა განვასხვავოთ ეს ორი შესაძლო სპინი და შეიძლება განვიხილოთ მხოლოდ ორი შესაძლო მნიშვნელობა: $+1/2$ და $-1/2$. ამ კვანტური რიცხვის საშუალებით შეგვიძლია დავახასიათოთ ელექტრონი ატომში ოთხი კვანტური რიცხვით.

m, l და m_l სიდიდეები ემორჩილება გარკვეულ წესებს, რაც განსაზღვრავს ორბიტალს. m_s კვანტური რიცხვის შემოტანით შემოდის დამატებითი შეზღუდვა. **პაულის აკრძალვის პრინციპის** თანახმად, ორ ელექტრონს ატომში არ შეიძლება ჰქონდეს ოთხი ერთნაირი კვანტური რიცხვი. (მარტივად რომ ვთქვათ, ეს არის ტალღური ეკვივალენტი იმისა, რომ ორმა ნაწილაკმა არ შეიძლება დაიკავოს ერთი და იგივე სივრცე). თუ ორ ელექტრონს აქვს n, l და m_l -ს ერთნაირი მნიშვნელობა, მათი სპინური კვანტური რიცხვი აუცილებლად განსხვავებული უნდა იყოს. ამ პრინციპის მთავარი შედეგი არის ის, რომ ნებისმიერი ორბიტალი არ შეიძლება დაიკავოს ორზე მეტმა ელექტრონმა. თუ ორი ელექტრონი იკავებს ერთ

ორბიტალს, ისინი სპინით დაწყვილებული უნდა იყვნენ: ერთი დადებითი სპინით, მეორე – უარყოფითი სპინით.

6.4.5. ორბიტალური ენერგიები და ელექტრონული კონფიგურაციები

როგორც აღვნიშნეთ, ატომის ძირითად მდგომარეობაში ელექტრონები იკავებენ დაბალი ენერგიის მქონე ორბიტალებს. მაგრამ რომელ ორბიტალს აქვს დაბალი ენერგია და რა არის ამის მიზეზი? ეს შეიძლება განვიხილოთ ორ ასპექტში. პირველი ის, რომ დადებითად დამუხტული ბირთვი იზიდავს ელექტრონს. ელექტრონები დაბალ ორბიტალებზე უფრო ახლოსაა ბირთვთან, ასე რომ, მათ აქვთ ნაკლები ენერგია. ორბიტალების ზომა იზრდება n -ს სიდიდის ზრდით. ამ ორი იდეის გაერთიანებით შეიძლება დავასკვნათ, რომ ატომური ორბიტალების ენერგია იზრდება n -კვანტური რიცხვის სიდიდის ზრდით.

მრავალელექტრონიან ატომებში, წყალბადის ატომისგან განსხვავებით, გასათვალისწინებელია ურთიერთქმედებები. პირველი განსხვავებაა ბირთვის მუხტის სიდიდე. უფრო დიდი ბირთვი მოქმედებს ელექტრონზე უფრო ძლიერი მიზიდულობის ძალით, ასე რომ, ორბიტალების ზომა მცირდება უფრო მაღალი ატომური რიცხვებისაკენ. უფრო მნიშვნელოვანია, რომ ელექტრონები ურთიერთქმედებენ სხვა ელექტრონებთან და არა მარტო ბირთვთან. უფრო დიდ ორბიტალებზე მყოფი ელექტრონებისათვის მუხტი, რომელსაც ისინი „გრძნობენ“, არის ბირთვის რეალურ მუხტთან გარკვეული კომბინაცია და ელექტრონების კომპენსირებული მუხტი დაბალ ორბიტალებზე ახლოსაა ბირთვთან. ბირთვის მუხტის ასეთი შენიღბვა ელექტრონებით განიხილება როგორც ეკრანირება. ბირთვის მთლიან მუხტთან ურთიერთქმედების მაგივრად ელექტრონები მრავალელექტრონიან ატომში ურთიერთქმედებენ ბირთვის ეფექტურ მუხტთან, რომელიც ნაკლებია მთელ მუხტზე ეკრანირების გამო.

ეფექტური მუხტის კონცეფცია საშუალებას იძლევა დავადგინოთ ორბიტალების რიგი ენერგიის მიხედვით. ცხადია, რომ გარსებს შორის არის მნიშვნელოვანი განსხვავება მანძილში. ისეთი, რომ $1s$ მნიშვნელოვნად მცირეა ვიდრე $2s$ და $2p$, თავის მხრივ, ესენი მცირეა ვიდრე $3s, 3p$ და $3d$. ეს მთლიანად

ეთანხმება იმ არგუმენტს, რომ ორბიტალური ენერგია უნდა იზრდებოდეს n -ის ზრდით. მაგრამ ქვეგარსის განხილვისას განსხვავება ძნელად გასარჩევია. $2s$ და $2p$ ტალღური ფუნქციების შედარებისას, თუმცა მათი ორბიტალების მთლიანი ზომები ანალოგიურია, $2s$ ტალღური ფუნქცია აჩვენებს მცირე ლოკალურ მაქსიმუმს, რომელიც ახლოსაა ბირთვთან, რასაც ადგილი არ აქვს $2p$ ფუნქციის შემთხვევაში. ეს ნიშნავს, რომ $2s$ ელექტრონს აქვს უფრო დიდი ალბათობა იყოს ბირთვთან ძალიან ახლოს და ასეთი ელექტრონი განიცდის უფრო დიდი ეფექტური ბირთვის მუხტის გავლენას. ამის შედეგად $2s$ ორბიტალის ენერგია ნაკლებია ვიდრე $2p$ ორბიტალისა. ანალოგიურად, $3s$ ორბიტალი, საშუალოდ, ურთიერთქმედებს უფრო დიდ მუხტთან ბირთვთან ახლოს ყოფნის გამო. მაშინაც კი როცა რადიალური ტალღური ფუნქციის პირველი ორი შვერილი პატარაა, ისინი მაინც ქმნიან შესაძლებლობას იმისა, რომ ელექტრონებმა „შეაღწიონ“ $3s$ ორბიტალში სხვა დანარჩენი ელექტრონების ეკრანის გავლით. ამით $3s$ ორბიტალის ენერგია ნაკლებია ვიდრე $3p$ ან $3d$ ორბიტალებისა.

მიღებულია ორბიტალური ენერგიების შემდეგი რიგი: $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d$ და $7p$. არ არის ცნობილი ელემენტი, რომლის ძირითად მდგომარეობაში იქნება ელექტრონი, რომელიც იკავებს $7p$ -ზე მეტი ენერგიის ორბიტალს. ახლა უნდა დავადგინოთ, თუ რომელი ორბიტალები იქნება დაკავებული თითოეული ელემენტისთვის. ამისათვის განვიხილავთ წესებს ამ ელექტრონული კონფიგურაციის განსაზღვრისათვის.

6.4.6. ჰუნდის წესი და შევსების პრინციპი

იმის გადაწყვეტა, თუ რომელი ორბიტალები აკავებენ ელექტრონებს ატომში, მოითხოვს, რომ "შევავსოთ" ორბიტალები დაწყებული ყველაზე დაბალი ენერგიიდან და მაღალი ენერგიებისკენ. გარკვეულწილად ეს კონცეფცია წააგავს შენობის აშენებას ფუნდამენტიდან და ეს განიხილება როგორც შევსების პრინციპი.

წყალბადის ატომში ერთი ელექტრონია და მას უკავია $1s$ ორბიტალი. ჰელიუმში ორი ელექტრონია, ორივეს უკავია $1s$ ორბიტალი, რადგანაც მათი სპინები გაწყვილებულია. ლითიუმში სამი ელექტრონია, ორ მათგანს უკავია $1s$ ორბიტალი და შემდეგ ელექტრონს – $2s$. მთლიანად – $1s^2 2s^2 2p^1$.

ნახშირბადში სამი განსხვავებული $2p$ ორბიტალია, ყველას ენერგია ერთნაირია. აქ ორი ელემენტი წყვილდება და იკავებს ცალკე $2p$ ორბიტალს ან ორივე იკავებს ორ სხვადასხვა $2p$ ორბიტალს – თითოეულზე ერთი ელექტრონია. სწორი არჩევანი მოტივირებულია იმით, რომ ყველა ელექტრონი უარყოფითადაა დამუხტული. ისინი ერთმანეთს განიზიდავენ, ასე რომ, ენერგეტიკულად ყველაზე ხელსაყრელი კონფიგურაცია საშუალებას მისცემს მათ დაიკავონ ცალკეული ორბიტალები, სადაც ისინი დაშორებული არიან ერთმანეთისგან. ეს კონცეფცია გაერთიანებულია ჰუნდის წესში, რომლის თანახმად, ქვეგარსში ელექტრონები იკავებენ ორბიტალებს m_s და l -ის მაქსიმალური მნიშვნელობით.

ეს აღწერა ორ ამოცანას ასრულებს. პირველი, ცხადად იწერება ელექტრონული კონფიგურაციები და რაც უფრო მნიშვნელოვანია, შემოდის კონცეფცია, რომელიც აკავშირებს ელექტრონულ სტრუქტურას ქიმიურ კავშირთან. ელექტრონები, რომლებსაც უკავიათ გარე ქვეგარსი, განაპირობებენ ელემენტის ქიმიურ აქტივობას. დაბალ დონეებზე მყოფი ელექტრონები სუსტ გავლენას ახდენენ ქიმიურ თვისებებზე. შიდა ელექტრონები, რომლებიც ბირთვთან ახლოსაა, განიხილება როგორც ძირითადი ელემენტები. ისინი შეიძლება წარმოდგენილი იყოს იშვიათი აირის ელემენტის ატომური სიმბოლოთი, რომელსაც შესაბამისი ელექტრონული კონფიგურაცია აქვს. თუმცა კალიუმის მთლიანი ელექტრონული კონფიგურაცია ასეთია: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$, გარე $4s^1$ ელექტრონი განსაზღვრავს მის ქიმიურ თვისებებს. ასეთი ელექტრონები განიხილება როგორც სავალენტო ელექტრონები.

6.5. პერიოდული სისტემა და ელექტრონული კონფიგურაციები

დამოკიდებულებას ელექტრონულ კონფიგურაციასა, რომელიც პროგნოზირებულია ატომის კვანტურ-მექანიკური მოდელით, და პერიოდულ სისტემას შორის სასიცოხლო მნიშვნელობა ჰქონდა კვანტური მექანიკის, როგორც თეორიის აღიარებისათვის.

ჩვენ გამოვიყენებთ ამ მნიშვნელოვანი კორელაციის უპირატესობას, რათა შედარებით ადვილად დავიმახსოვროთ ნებისმიერი ელემენტის ძირითადი მდგომარეობის კონფიგურაციები.

თუ პერიოდულ სისტემაში ყველა ელემენტს მივუჩენთ თავის ადგილს, დავინახავთ, რომ ყველაზე მარცხნივ მდებარეობს s ელემენტები, შემდეგ d ელემენტები, $f... d$ და ბოლო ნაწილშია p ელემენტები, ასეთი სტრუქტურის გამოყენებით შეიძლება ელექტრონული კონფიგურაციის განსაზღვრა ელემენტთა უმრავლესობისათვის (გამონაკლისია გარდამავალი მეტალები).

პერიოდულ სისტემასა და ელექტრონულ კონფიგურაციას შორის კავშირი კიდევ უფრო მნიშვნელოვანია რეაქციის უნარიანობის განხილვისას, მაგალითად, ყველა ჰალოგენის ელექტრონული კონფიგურაცია მთავრდება np^5 , სადაც $n = 2$ ფტორისთვის, $n = 3$ ქლორისთვის, 4-ს ბრომისთვის, 5-ს იოდისთვის. ელექტრონული კონფიგურაციის მსგავსება განაპირობებს ამ ელემენტების ქიმიური ქცევის მსგავსებას. ყველა ჰალოგენი იქცევა ქიმიურად ერთნაირად.

6.6. პერიოდული ტენდენციები ატომურ თვისებებში

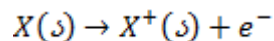
6.6.1. ატომის ზომა

ატომის ზომა მისი ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი მახასიათებელია. ხშირად ამის გაზომვა გართულებულია. არის ორი გზა ტენდენციების გამოხატვისა პერიოდულ სისტემაში – ჯგუფებში და პერიოდებში. როცა ჯგუფში ჩავდივართ ქვევით, ატომის ზომა იზრდება. პერიოდის გასწვრივ შეიმჩნევა შემცირება.

ატომის ზომა მნიშვნელოვანწილად განპირობებულია მისი სავალენტო ელექტრონებით, რადგანაც მათ უკავიათ გარე ორბიტალები. ორი ფაქტორი ძალზედ მნიშვნელოვანია: (1) გარსი, რომელზეც იმყოფება სავალენტო ელექტრონები და (2) ბირთვისა და სავალენტო ელექტრონებს შორის ურთიერთქმედების ძალა. თუ გავყვებით ჯგუფს ქვემოთ, მუშაობს პირველი ფაქტორი. სავალენტო ორბიტალების ზომა იზრდება n -ის მიხედვით; ასე რომ, ატომის ზომა იზრდება, როცა ჩავდივართ ქვევით. ნაკლებ თვალსაჩინოა ტენდენცია პერიოდის გასწვრივ. ჩვენ უკვე აღვნიშნეთ, რომ არის ტენდენცია იმისა, რომ მანძილი სავალენტო ელექტრონსა და ბირთვს შორის იცოს უფრო დიდი, თუ არის მცირე სიდიდის ეფექტური ბირთვული მუხტი. ეს ელექტრონები ვერ ეკრანირებენ კარგად ერთმანეთს და ეფექტური ბირთვული მუხტი იზრდება, რადგანაც ატომური რიცხვის ნებისმიერი გაზრდა ბირთვს უმატებს პროტონს. უფრო მაღალი ეფექტური ბირთვის მუხტი წარმოქმნის უფრო ძლიერ მიზიდულობას ელექტრონებსა და ბირთვს შორის. ასე რომ, სავალენტო ელექტრონები უფრო ახლოსაა ბირთვთან და ატომის ზომა მცირდება.

6.6.2. იონიზაციის ენერგია

იონიზაციის ენერგია მნიშვნელოვან როლს თამაშობს ქიმიურ ურთიერთქმედებაში. ის განისაზღვრება როგორც ენერგიის რაოდენობა, რომელიც უნდა დაეხარჯოს შემდეგი რეაქციის ინდუცირებისათვის.



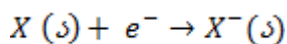
უფრო ზუსტად, ენერგია, რომელიც ჭირდება ამ რეაქციას, არის პირველი იონიზაციის ენერგია. X^+ კათიონიდან დამატებითი ელექტრონის მოსაცილებლად საჭირო ენერგია, X^{2+} -ს წარმოქმნით, არის მეორე იონიზაციის ენერგია. ძირითადად, ვიხმართ ტერმინს "იონიზაციის ენერგია" პირველი შემთხვევისათვის.

კავშირი პერიოდულობასა და ატომურ სტრუქტურას შორის ადვილად დასანახია იმის დაკვირვებით, თუ როგორ იცვლება იონიზაციის ენერგია, როცა

მივდივართ პერიოდის გასწვრივ და ჯგუფებს შიგნით. გავიხსენოთ, რომ პერიოდის გასწვრივ ეფექტური ბირთვული მუხტი იზრდება. იონიზაციის ენერგიაც ასევე, ძირითადად იზრდება პერიოდის გასწვრივ. როცა ჩავდივართ ჯგუფში ქვევით, სავალენტო ელექტრონები იკავებენ უფრო და უფრო დიდ ორბიტალებს. ე. ი. ეს ელექტრონები შორდება ბირთვს და მათი მოცილება უფრო ადვილია. ასე რომ, იონიზაციის ენერგია მცირდება ჯგუფში ზევით ქვევით.

6.6.3. სწრაფვა ელექტრონისადმი

ზოგიერთ ატომს შეუძლია შეიერთოს ელექტრონი ანიონის წარმოქმნით:



ამ თვისებას ეწოდება **სწრაფვა ელექტრონისადმი**. ის შეიძლება განისაზღვროს, როგორც ენერგიის რაოდენობა, რომელიც უნდა მივაწოდოთ ამ რეაქციის ინდუცირებისათვის. ელექტრონის მოცილება ნეიტრალური ატომიდან ყოველთვის მოითხოვს ენერგიის მიწოდებას, რადგან თავისთავად ელექტრონი ვერ ამოიტყორცნება. ასე რომ, იონიზაციის ენერგია ყოველთვის დადებითია. მაგრამ ელექტრონისადმი სწრაფვის მნიშვნელობები შეიძლება იყოს როგორც დადებითი, ასევე უარყოფითი. თუ მიღებული ანიონი სტაბილურია, მაშინ ელექტრონის მიერთებისას ენერგია გამოიყოფა. მაგრამ ჩვენი განმარტების თანახმად, სწრაფვა ელექტრონისადმი – ეს არის ენერგიის რაოდენობა, რომელიც უნდა მიეწოდოს ატომს ანიონის წარმოსაქმნელად. თუ ენერგია გამოიყოფა, შეიძლება ვთქვათ, რომ უნდა "მივაწოდოთ ნეგატიური ენერგიის რაოდენობა", ასე რომ, სწრაფვა ელექტრონისადმი იქნება უარყოფითი. თუ ეს სიდიდე დადებითია, წარმოქმნილი ანიონი იქნება არასტაბილური. ამ შემთხვევაში უნდა მივაწოდოთ ენერგია, რათა ვაიძულოთ ატომი მიიერთოს ელექტრონი. ელექტრონისადმი სწრაფვა უმეტეს შემთხვევაში უარყოფითია.

ელექტრონისადმი სწრაფვის მნიშვნელობები გვიჩვენებს პერიოდულ ტენდენციებს ელექტრონული კონფიგურაციის საფუძველზე, ისევე როგორც უკვე განხილული თვისებები. ეს სიდიდე იცვლება ბევრად არათანაბრად, ვიდრე იონიზაციის ენერგია. კერძოდ, სწრაფვა ელექტრონისადმი უფრო უარყოფითია

ატომური რიცხვის ზრდით, ანალოგიურად იონიზაციის ენერგიისა. ადვილია ვიფიქროთ ელექტრონისადმი სწრაფვის ასეთ ტენდენციაზე მაშინაც კი, როცა ეს სიდიდე რეალურად ხდება ალგებრულად უფრო მცირე, როცა ის უფრო უარყოფითია.

ამ სიდიდეების დაწვრილებითი განხილვა აჩვენებს, რომ არის გამონაკლისები ამ ტენდენციებში, რომლებიც დაკავშირებულია ელექტრონების დაწყვილებასთან. მაგალითად, აზოტი არ ხასიათდება უარყოფითი სწრაფვით ელექტრონისადმი, რადგანაც ელექტრონის მიერთება გამოიწვევს ელექტრონების დაწყვილებას p ორბიტალზე, რაც, თავის მხრივ, მნიშვნელოვნად გაზრდის ელექტრონ-ელექტრონის განზიდვას.

7. ქიმიური კავშირი და მოლეკულური სტრუქტურა

ამ თავის შესწავლის შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

- გამოიყენოს ელექტრონული კონფიგურაციები, რათა ახსნას ის ფაქტი, რომ მეტალებს აქვთ ტენდენცია წარმოქმნან კათიონები და არამეტალებს – ანიონები;
- აღწეროს ენერგიის ცვლილება იონური კავშირის წარმოქმნისას;
- განსაზღვროს ელექტროუარყოფითობა და დაასკვნას, თუ როგორ იცვლება ეს სიდიდე დამოკიდებულებით ელემენტის მდებარეობიდან პერიოდულ სისტემაში;
- მოახდინოს იდენტიფიცირება ან იწინისწარმეტყველოს პოლარული, არაპოლარული და იონური ბმები ელექტროუარყოფითობის შედარებით;
- დაწეროს ლუისის ელექტრონული სტრუქტურები მოლეკულების ან იონებისთვის;
- აღწეროს ქიმიური კავშირი იმ მოდელის გამოყენებით, რომელიც დაფუძნებულია ატომური ორბიტალების გადაფარვაზე და გაიაზროს ამ მარტივი მოდელის ზოგიერთი შეზღუდვები;
- ახსნას, თუ როგორ უთანხმებს ჰიბრიდიზაცია მოლეკულურ ფორმებს ორბიტალთა გადაფარვის მოდელს;
- იწინასწარმეტყველოს მოლეკულის გეომეტრია მისი ლუისის სტრუქტურის საფუძველზე;
- გამოიყენოს მოდელები (რეალური ან პროგრამული), რათა გააადვილოს ჩვეულებრივი მოლეკულური ფორმების ვიზუალიზება;
- ახსნას მრავალჯერადი ბმების წარმოქმნა ჰიბრიდული ან არაჰიბრიდული ატომური ორბიტალების გადაფარვის ტერმინებით;
- მოახდინოს მოლეკულაში სიგმა და პი ბმების იდენტიფიცირება და ახსნას მათ შორის განსხვავება.

7.1. იონური ზმა

ქიმიური ბმების უმრავლესობა წარმოიქმნება სხვადასხვა ნიშნით დამუხტული ნაწილაკების ურთიერთქმედებით. ამის უმარტივესი მაგალითია იონური ზმა, რომელიც წარმოიქმნება ორი საწინააღმდეგო ნიშნით დამუხტული იონის ელექტროსტატიკური მიზიდვით. ამ პროცესის გასააზრებლად უნდა განვიხილოთ ძალები, რომლებიც აიძულებს იონებს იურთიერთქმედონ ერთმანეთთან.

7.1.1. კათიონების წარმოქმნა

იონების წარმოქმნისას ადგილი აქვს ენერგიის ცვლილებას, რაც წარმოდგენილია იონიზაციის ენერგიით და სწრაფვით ელექტრონისადმი. ეს ტენდენციები კარგ კორელაციაშია მეტალების და არამეტალების მდებარეობასთან პერიოდულ სისტემაში და ეს კორელაცია კარგად ხსნის იმ ფაქტს, რომ მეტალები წარმოქმნიან კათიონებს და არამეტალები – ანიონებს.

პირველი იონიზაციის ენერგიის განხილვისას დავრწმუნდით, რომ ზოგიერთი მეტალი წარმოქმნის კათიონს $+1$, სხვები კი უფრო მაღალი მუხტის კათიონებს. ასევე ადგილი აქვს იონიზაციის ენერგიის მკვეთრ ნახტომს, როდესაც დამატებითი ელექტრონის მოცილება არღვევს ელექტრონულ კონფიგურაციას, რომელიც თავდება np^6 -ით. ამ მკვეთრი ნახტომით აიხსნება წარმოქმნილი კათიონის მუხტის სიდიდე: $+1, +2...$ ა. შ. მაგალითად, ნატრიუმი ბუნებრივად არსებობს, როგორც Na^+ . მისი პირველი, მეორე და მესამე იონიზაციის ენერგიები, შესაბამისად, ტოლია 496, 4562 და 6912 კჯ/მოლი, ე. ი. მეორე ან მესამე ელექტრონის მოცილება დაკავშირებულია დიდი ენერგიის დახარჯვასთან. ე. ი. ბუნება თავად განსაზღვრავს არჩევანს.

S და P ჯგუფის ელემენტების ყველაზე გავრცელებული კათიონია, ძირითადად, ისეთი, რომლის კონფიგურაციაა np^6 , მაგრამ ეს არ ეხება გარდამავალ მეტალებს. ასეთ მეტალებს აქვთ ერთზე მეტი სატაბილური კათიონი. ისინი ნაწილობრივ ავსებენ d – ქვეგარსებს, მაგრამ იონიზაცია ჩვეულებრივ იწყება

ელექტრონის დაკარგვით s ქვეგარსიდან. როდესაც რკინა წარმოქმნის Fe^{2+} -ს, ელექტრონული კონფიგურაცია იცვლება: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$ -დან ნეიტრალური ატომისათვის $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$ -მდე იონისათვის. ერთი დამატებითი ელექტრონის დაკარგვა d – ორბიტალიდან ტოვებს Fe^{3+} -ს ნახევრად შევსებული d – ქვეგარსით. ეს საკმაოდ სტაბილური განლაგებაა. ასე რომ, ორივე იონი: Fe^{2+} და Fe^{3+} სტაბილურია.

7.1.2. ანიონების წარმოქმნა

ცალკეული იონების წარმოქმნა, რასაკვირველია, არ აყალიბებს იონურ ბმას. მართლაც, დაწყებული ნეიტრალური მეტალის ატომით და ნეიტრალური არამეტალის ატომით, ჩვეულებრივ ენერგია იხარჯება იონ-წყვილის (ე. ი. კათიონისა და ანიონის) წარმოქმნით. იონიზაციის ენერგია ყოველთვის დადებითია და კათიონის წარმოსაქმნელად მიწოდებული ენერგია არ კომპენსირდება, როდესაც არამეტალიდან წარმოიქმნება ანიონი. მაგრამ უკვე წარმოქმნილი სხვადასხვა ნიშნის იონები იზიდავს ერთმანეთს, რაც მნიშვნელოვნად ამცირებს მათ მთლიან ენერგიას. კულონის კანონით

$$F = \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

სადაც F – ძალაა, q_1 და q_2 – მუხტები, r – მანძილია მათ შორის. (ამ შემთხვევაში მანძილი ორი იონის ბირთვებს შორის). სისტემის პოტენციური ენერგია ასეთია: $V = K \frac{q_1 q_2}{r}$, სადაც K პროპორციულობის მუდმივაა, ტოლია $1,389 \times 10^5$ კჯ კმ/მოლი, თუ მუხტები გამოხატულია ელექტრონის მუხტის ერთეულებით.

იონების ურთიერთქმედება იწვევს იონური მესერის მქონე ნაერთის წარმოქმნას, რომლის მაგალითია ნატრიუმის ფტორიდი. ელემენტური ნატრიუმის და ფტორის რეაქციისას საქმე გვაქვს არა აირადი ფაზის ცალკეულ ატომებთან, არამედ მყარ სხეულებთან. გარკვეულ პირობებში მეტალური ნატრიუმი და ფტორი წარმოქმნიან დიატომურ აირს. ასე რომ, საჭიროა ენერგიის გარკვეული რაოდენობა ცალკეული ატომების მისაღებად, მაგრამ თუ მართლა გვინდა

მივიღოთ ნატრიუმის ფტორიდი, ჩვენ უნდა შევქმნათ მოცულობითი კრისტალური მესერი, რომელიც შედგება მრავალი იონისგან. ასეთ მესერში იონები დაკავშირებულია ყველა სხვა დადებითად დამუხტულ იონთან. რაც უფრო შორს არის ერთი იონი მეორესგან, მით უფრო სუსტია მიზიდვა ან განზიდვა.

ბოლოს და ბოლოს, კრისტალის მესერის ენერგია შეიცავს ყველა მიზიდვას ან განზიდვას. NaF -ში თითოეული ნატრიუმის იონი გარშემორტყმულია ექვსი ფტორის იონით და თითოეული ფტორი-ექვსი მეზობელი ნატრიუმის იონით. კულონური ენერგიის ზუსტი დადგენისთვის უნდა გავითვალისწინოთ ყველა იონის ურთიერთქმედება მათ მეზობლებთან. ცალკეული იონ-წყვილის გამოყენება გავრცობილი მესერის ნაცვლად მნიშვნელოვნად ამცირებს ენერგიას.

შეიძლება დავასკვნათ, რომ პატარა, ძლიერად დამუხტულ იონებს აქვთ ტენდენცია შექმნან იონური ნაერთები მესერის მაღალი ენერგიით და დიდ იონებს მცირე მუხტებით – ტენდენცია შექმნან ნაერთები მესერის დაბალი ენერგიებით.

7.2. კოვალენტური ბმა

როგორც ადრე აღვნიშნეთ, კოვალენტური ბმები ეფუძნება ელექტრონების წყვილის განაწილებას ორ ატომს შორის. როგორ წარმოიქმნება ასეთი ბმა და რა გავლენას ახდენს ის ნაერთის ქცევაზე?

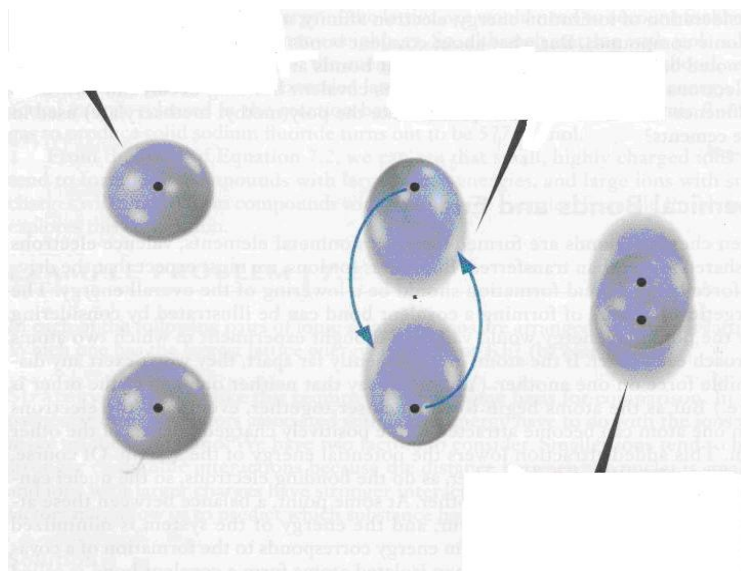
7.2.1. ქიმიური ბმები და ენერგია

როცა ქიმიური ბმა წარმოიქმნება არამეტალებს შორის, სავალენტო ელექტრონები ხდება საერთო. მაგრამ ისევე როგორც იონებში, სავარაუდოა, რომ ბმის წარმოქმნის წინ უნდა შემცირდეს მთლიანი ენერგია.

კოვალენტური ბმის წარმოქმნის ენერგეტიკული უპირატესობა შეიძლება წარმოვიდგინოთ იმის განხილვით, თუ როგორ იცვლება პოტენციური ენერგია. როდესაც ორი ატომი უახლოვდება ერთმანეთს, თუ ატომები საკმარისად არ არიან

დაშორებული ერთმანეთისგან, ისინი ერთმანეთზე ვერ იმოქმედებენ რაიმე მნიშვნელოვანი ძალით. მაგრამ როცა ატომები იწყებენ მოძრაობას ერთმანეთისკენ და დაახლოვდებიან, საბოლოოდ ელექტრონები ერთი ატომიდან მიიზიდება მეორე ატომის დადებითად დამუხტული ბირთვით. ეს მიიზიდვა ამცირებს სისტემის პოტენციურ ენერგიას. რასაკვირველია, ორი ბირთვი განიზიდვას ერთმანეთს, ასევე იქცევიან მაკავშირებელი ელექტრონები. გარკვეულ მომენტში მყარდება წონასწორობა ამ მიზიდვასა და განიზიდვას შორის და სისტემის ენერგია ხდება მინიმალური. მინიმალური ეს ენერგიის მნიშვნელობა შეესაბამება **კოვალენტური ბმის წარმოქმნას**. ენერგიას, რომელიც თავისუფლდება, როცა ცალკეული ატომები წარმოქმნიან კოვალენტურ კავშირს, ეწოდება **ბმის ენერგია** და მანძილს დაკავშირებული ატომების ბირთვებს შორის – **ბმის სიგრძე**.

ატომების ერთმანეთთან მიახლოებისას იცვლება მათი ელექტრონული ღრუბლების ფორმა (ნახ. 7). კოვალენტურად ბმულ მოლეკულაში არის ელექტრონული სიმკვრივის, ანუ უარყოფითი მუხტის კონცენტრაციის ზრდა უბანში, რომელიც ორ დაკავშირებულ ატომს შორის არის. ელექტრონული სიმკვრივის ზრდა არ არის განსაკუთრებით დიდი. ამ უბანში ნეგატიური მუხტის მცირე ზრდაც კი ამცირებს სისტემის პოტენციურ ენერგიას და ასტაბილიზებს მოლეკულას.



ნახ.7. ატომთა ელექტრონული ღრუბლების ფორმის შეცვლა მათი ურთიერთმიახლოებისას

ქიმიური ბმის წარმოქმნისას ყოველთვის გამოიყოფა ენერგია. ბმის წარმოქმნის შემდეგ ენერგიის იგივე რაოდენობაა აუცილებელი ამ ბმის გასახლეჩად. ამ ენერგიის სიდიდე დამოკიდებულია მონაწილე ატომებზე. მაგალითად, როდესაც ფტორის ატომების ორი მთლიანად ერთი მთლიანი ფტორის მოლეკულის წარმოქმნით, გამოიყოფა 156 კჯ ენერგია. ე. ი. $F - F$ ბმის ენერგია ტოლია 156 კჯ მოლზე. წყალბადის ფტორიდის ბმის ენერგია კი 565 კჯ/მოლია, ე. ი. ეს ბმა სამჯერ უფრო ძლიერია. ე. ი. $H - F$ ბმა HF -ში უფრო სტაბილურია, ვიდრე F_2 -ში.

7.2.2. ქიმიური ბმები და რეაქციები

ქიმიურ რეაქციებში ადგილი აქვს ბმების გადაჯგუფებას ისე, რომ რეაგენტები გარდაიქმნება პროდუქტებად. რეაქცია იქნება ენერგეტიკულად ხელსაყრელი, თუ ბმის გასახლეჩად საჭირო ენერგია იქნება ნაკლები, ვიდრე ის, რომელიც გამოიყოფა ახალი ბმების წარმოქმნისას.

7.2.3. ქიმიური ბმები და მოლეკულების სტრუქტურა

ქიმიური ბმის ასახსნელად საჭიროა ისევ მივუბრუნდეთ ენერგეტიკას. როდესაც ვიხილავთ იონურ ბმას მეტალებსა და არამეტალებს შორის, ვხედავთ, რომ კათიონების და ანიონების წარმოქმნა თანხმობაშია np^6 ელექტრონული კონფიგურაციის მიღწევასთან, რაც ანალოგიურია ინერტული აირების შემთხვევისა. არამეტალის ატომებისათვის ინერტული აირის კონფიგურაციის მიღწევა შეიძლება ელექტრონის მიერთებით მეტალის ატომებიდან, რაც წარმოქმნის იონურ ბმას. როდესაც არამეტალი ურთიერთქმედებს სხვა არამეტალთან, ისინი ელექტრონებს ინაწილებენ. ამრიგად, ელექტრონების შესაბამისი რაოდენობის განაწილებით, ატომს შეუძლია მიაღწიოს ელექტრონულ კონფიგურაციას, რომელიც ანალოგიურია ინერტული აირისა. ძირითადი

ჯგუფების ატომებისგან შედგენილი მრავალი მოლეკულისთვის, თითოეული ატომის გარშემო ჩნდება რვა სავალენტო ელექტრონი. ეს გარემოება ცნობილია, როგორც **ოქტეტის წესი**. ატომი წარმოქმნის კოვალენტურ ბმებს რვა სავალენტო ელექტრონის ანსამბლის მიღწევით. ინერტული აირის ატომის სავალენტო გარსის ელექტრონული კონფიგურაციაა $ns^2 np^6$ ყველა რვა სავალენტო ელექტრონისთვის. რადგანაც წყალბადის სავალენტო გარსში არ არის p ორბიტალები, $n = 1$. იგი გამოწვეულია ოქტეტის წესიდან და მას შეუძლია გაინაწილოს მხოლოდ ორი ელექტრონი.

ოქტეტის წესის ძირითადი კონცეფცია შეიძლება გამოვხატოთ ამერიკელი ქიმიკოსის ლუისის წერტილიანი სიმბოლოთი. ელემენტისათვის ლუისის სიმბოლოს დასახაზად უნდა ავიღოთ მისი ატომური სიმბოლო და მის ოთხივე მხარეს დავსვათ წერტილები, რათა გამოვსახოთ სავალენტო ელექტრონების რიცხვი. როცა მივდივართ ძირითადი ჯგუფების პერიოდის გასწვრივ, სიმბოლოს გარშემო პირველი ოთხი წერტილი განლაგდება ცალ-ცალკე. მეხუთე წერტილიდან დაწყებული, ისინი წყვილდება.

ელექტრონების განაწილება $F + F$ ან $H - H$ ბმის წარმოქმნით ეფექტურად ანიჭებს თითოეულ ფტორის ატომს ელექტრონების სრულ ოქტეტს. ელექტრონების წყვილი, რომელიც განაწილებულია ორი ატომის მიერ, განიხილება როგორც **მაკავშირებელი წყვილი**. სხვა საერთო ელექტრონები, რომლებიც დაკავშირებულია ცალკეულ ატომთან, განიხილება როგორც **განუყოფელი წყვილი**. ფტორის მოლეკულაში არის ერთი მაკავშირებელი წყვილი და ექვსი ცალკეული წყვილი.

მოლეკულათა უმრავლესობა უფრო რთულია, ვიდრე F_2 და შეიცავს საერთო ელექტრონების ერთზე მეტ წყვილს. თუ ორი ჟანგბადის ატომი აერთიანებს ელექტრონების ერთ წყვილს, სხვა ატომს აღარ ექნება სავალენტო ელექტრონების ოქტეტი. მაგრამ, თუ ელექტრონების ორი წყვილია გაერთიანებული, ჟანგბადის ორივე ატომი ემორჩილება ოქტეტის წესს. როდესაც ელექტრონების ორი წყვილი ხდება საერთო, საქმე გვაქვს **ორმაგ ბმასთან** და სამი გაერთიანებული წყვილი იძლევა **სამმაგ ბმას**. ორმაგი ბმები უფრო ძლიერია ვიდრე უბრალო ბმა და სამმაგი ბმა უფრო ძლიერია, ვიდრე ორმაგი.

7.2.4. დონორულ-აქცეპტორული ბმა

დონორულ-აქცეპტორული ბმა წარმოადგენს კოვალენტური ბმის კერძო შემთხვევას. იგი წარმოიქმნება ერთი ატომის გაუზიარებელი ელექტრონული წყვილის (ორელექტრონიანი ღრუბლის) და მეორე ატომის თავისუფალი ორბიტალის ხარჯზე. განვიხილოთ NH_4^+ და BF_4^- იონების წარმოქმნა



ატომს, რომელიც გაუზიარებელ ელექტრონულ წყვილს საზიაროდ გადასცემს მეორე ატომს, დონორი ეწოდება, ხოლო ატომს, რომელიც გაუზიარებელ ელექტრონულ წყვილს, იძენს აქცეპტორი.

თავისი სიძლიერით დონორულ-აქცეპტორული ბმა არ განსხვავდება მოლეკულაში არსებული სხვა კოვალენტური ბმისაგან NH_4^+ და BF_4^- იონებში ყველა ბმა ტოლფასია. დონორულ-აქცეპტორულ ბმას კოორდინაციულ ბმასაც უწოდებენ. მას უდიდესი მნიშვნელობა აქვს როგორც კოორდინაციული ნაერთების ქიმიაში, ისე ორგანულ და მაღალმოლეკულურ ნაერთთა ქიმიაში.

7.3. ელექტროუარყოფითობა და ბმის პოლარობა

ელექტრონების გაერთიანება კოვალენტური ბმების წარმოქმნით და ელექტრონის სრული გადაცემა, რასაც ადგილი აქვს იონური შეკავშირებისას, მოითხოვს ორ დამატებით ცნებას: ელექტროუარყოფითობას და ბმის პოლარობას.

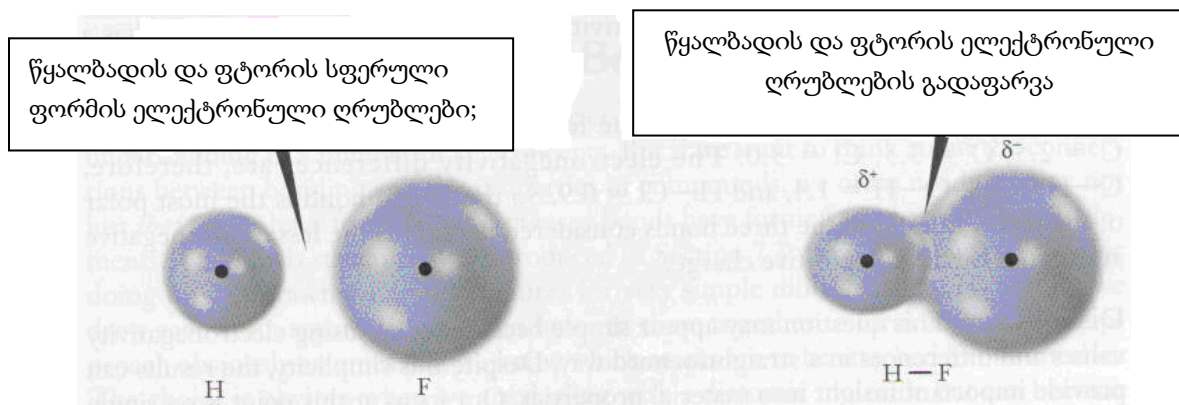
7.3.1. ელექტროუარყოფითობა

ატომის უნარს, მიიზიდოს საზიარო ელექტრონები, ელექტროუარყოფითობა ეწოდება. თითქოს ეს ცნება მარტივია, მაგრამ მისი ექსპერიმენტულად

განგარიშება ძნელია. ამის დადგენისათვის საჭიროა მრავალი ფაქტორის განხილვა, როგორცაა ატომის ზომა, სწრაფვა ელექტრონისადმი, იონიზაციის პოტენციალი და ერთეულთა ნებისმიერი სკალა. რაც უფრო მეტია ელექტროუარყოფითობის სიდიდე, მით უფრო მეტია ალბათობა იმისა, რომ ელემენტი მიიზიდავს ელექტრონის ზედმეტ სიმკვრივეს ქიმიური ნაერთის წარმოქმნით. ელექტროუარყოფითობას აქვს ზრდის ტენდენცია ჯგუფში ატომური ნომრის შემცირებისას ქვევიდან ზევით ან პერიოდის გასწვრივ მარცხნიდან მარჯვნივ. ასე რომ, ეს ტენდენცია პარალელურია ელექტრონისადმი სწრაფვისა. ყველაზე ელექტროუარყოფითი ელემენტია ფტორი. მისთვის ამ სიდიდის მნიშვნელობაა 4. ჟანგბადი და აზოტი ასევე ხასიათდება მაღალი ელექტროუარყოფითობით.

7.3.2. ბმის პოლარობა

სხვადასხვა ელექტროუარყოფითობის მქონე ატომებს შორის კოვალენტური შეკავშირება წარმოქმნის ბმას, რომელშიც დადებითი და უარყოფითი მუხტების ცენტრები წანაცვლებულია. რადგან მოლეკულის ერთ უბანზე დადებითი მუხტია და მეორეზე – უარყოფითი, მოლეკულას გააჩნია მასთან დაკავშირებული ელექტრული ველი. დადებითი და უარყოფითი მუხტის ეს ორი წერტილი შეადგენს დიპოლს და ასეთი ბმა განიხილება როგორც პოლარული ბმა. რადგან ელექტრონები საზიაროა, ასეთ ბმას ხშირად უწოდებენ პოლარულ-კოვალენტურ ბმას (ნახ. 8).



ნახ.8. პოლარული კოვალენტური ბმის წარმოქმნა

კოვალენტური ბმების პოლარობა იცვლება მთლიანად არაპოლარულიდან (F_2 და H_2), პოლარობის შუალედური ხარისხის ცვლილების გავლით (HF) მთლიანად იონურამდე (NaF). ბმის ტიპი დამოკიდებულია მაკავშირებელი ატომების ელექტროუარყოფითობების სხვაობაზე. რაც მეტია სხვაობა, მით უფრო პოლარულია ბმა. რიგ შემთხვევებში, როდესაც ეს სხვაობა მეტია 2-ზე, ბმა განიხილება როგორც იონური.

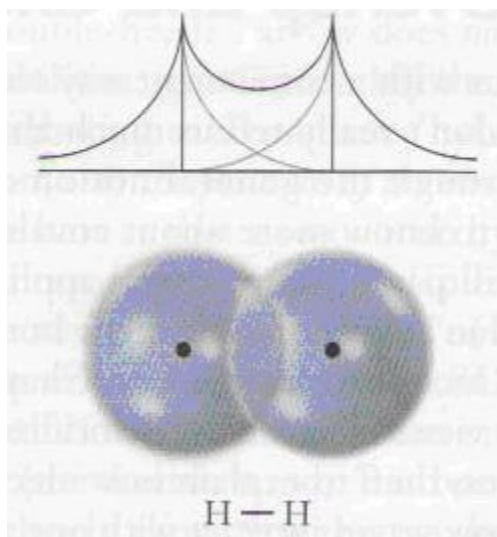
7.4. ორბიტალების გადაფარვა და ქიმიური შეკავშირება

ადრე დავადგინეთ, რომ ატომის თანამედროვე მოდელი განიხილავს ელექტრონებს, როგორც დელოკალიზებულ ტალღებს, რომლებიც აღიწერება ორბიტალებით. თუ ელექტრონები იქცევა როგორც ტალღები, საჭიროა იმის ახსნა, თუ როგორ წარმოქმნიან ისინი ბმებს ატომებს შორის. ამიტომ მნიშვნელოვანია ის, თუ როგორ ურთიერთქმედებენ ტალღები ერთმანეთთან.

კვანტურ-მექანიკურ მოდელში ელექტრონები ტალღის ერთი-ერთი სახეობა და შეიძლება გამოვხატოთ ქიმიური ბმის წარმოქმნა, როგორც ურთიერთქმედება ტალღებს შორის. მაგრამ იმისათვის, რომ მოხდეს ურთიერთქმედება სხვადასხვა ატომების ელექტრონულ ტალღებს შორის, მათ, პირველ რიგში, უნდა დაიკავონ სივრცის ერთი და იგივე უბანი. სხვანაირად რომ ვთქვათ, ატომები ისე უნდა განლაგდნენ, რომ ერთი ატომის სავალენტო ორბიტალმა გადაფაროს მეორე ატომის სავალენტო ორბიტალი, რათა წარმოიქმნას ბმა. ეს იდეა საფუძველი გახდა ქიმიური შეკავშირების სავალენტო ბმის მოდელისა, რომელშიც ყველა ბმა განიხილება როგორც ატომური ორბიტალების გადაფარვის შედეგი.

განვიხილოთ ორბიტალების გადაფარვა უმარტივესი მოლეკულის H_2 -ის მაგალითზე. წყალბადის ატომებს აქვთ ერთი სავალენტო ელექტრონი $1s$ ორბიტალზე. ორატომიანი წყალბადის მოლეკულის წარმოსაქმნელად ორი სხვადასხვა ატომის $1s$ ორბიტალმა უნდა გადაფაროს ერთმანეთი. ნახ. 9. ნაჩვენებია, ეს გადაფარვა და თუ როგორ წარმოიქმნება ბმა ორი ელექტრონის ტალღური ფუნქციების ზედდების შედეგად. რადგან ორბიტალები სფერული

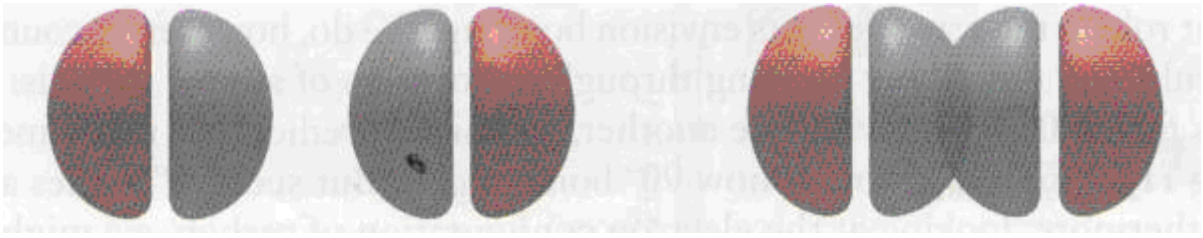
ფორმისაა, მათ არა აქვთ უპირატესი მიმართულება მიახლოებისას. მაგრამ როცა საქმე გვაქვს p ორბიტალებთან, მათი უფრო რთული ფორმა იწვევს ორბიტალთა ურთიერთქმედების სხვადასხვა გეომეტრიას, რაც შეიძლება გამოვიყენოთ ქიმიური ბმების ტიპების განსხვავებისათვის.



ნახ.9. კოვალენტური ბმა მოლეკულურ წყალბადში

მაგალითად, შეიძლება ვაჩვენოთ, რომ N_2 -ში უნდა იყოს სამმაგი ბმა აზოტის ორ ატომს შორის. თუმცა უარყოფითი მუხტის მნიშვნელოვანი ზრდა ბირთვებს შორის წარმოქმნის ძლიერ მიზიდვას მათ შორის, მაგრამ ისმის კითხვა, როგორ იკავებს ექვსი ელექტრონი სივრცის ერთი და იგივე უბანს მათ შორის ძლიერი განზიდვის გარეშე? აზოტის ატომის სავალენტო ელექტრონული კონფიგურაციაა $2s^2 2p^3$. რადგან $2p$ ორბიტალები ცალ-ცალკეა დაკავებული, ერთი ატომის $2p$ ორბიტალის მეორე ატომის $2p$ ორბიტალით გადაფარვით შეუძლებელია ბმის წარმოქმნა. მაგრამ მათი ფორმების გამო p ორბიტალებს შეუძლია გადაფარვა სხვადასხვა მიმართულებით.

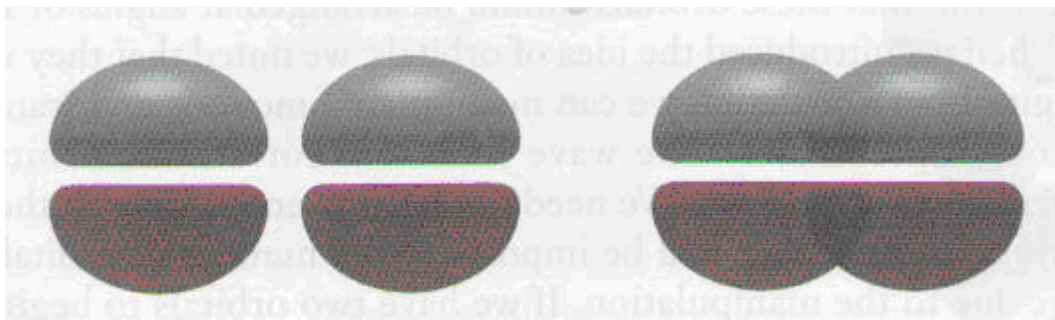
ნებისმიერი ატომის სამი $2p$ – ორბიტალი შეიძლება აღიწეროს როგორც განლაგებული x, y და z ღერძების გასწვრივ. დავუშვათ, რომ აზოტის ორი ატომი უახლოვდება ერთმანეთს z – ღერძის გასწვრივ (ნახ. 10).



ნახ.10. σ (სიგმა) ბმის წარმოქმნა

აქ $2p$ –ორბიტალები გადაფარავს ერთმანეთს ბოლოებით. ეს იწვევს ელექტრონული სიმკვრივის ზრდას ორი ბირთვის შემაერთებული წრფის გასწვრივ, ზუსტად ისე, როგორც H_2 -ის შემთხვევაში. ურთიერთქმედების ეს ტიპი წარმოქმნის ე. წ. **სიგმა ბმებს**. გადაფარვის ამ ტიპს ასევე ადგილი აქვს ბმებში, სადაც s ორბიტალი გადაფარავს p ორბიტალს ან როცა ორი s -ორბიტალი გადაფარავს ერთმანეთს.

განვიხილოთ აზოტის ატომების $2p_x$ და $2p_y$ ორბიტალები. რადგან ბირთვები მიწეულია ერთმანეთთან ახლოს, ეს ორბიტალები გადაფარავს ერთმანეთს შემაერთებული წრფის ორივე მხარეს (ნახ. 11.).



ნახ.11. π (პი) ბმის წარმოქმნა

ბირთვებს შორის ელექტრონული სიმკვრივის ზრდა გადამწყვეტია ქიმიური შეკავშირებისთვის. მაგრამ როდესაც ადგილი აქვს ასეთ გადაფარვას, ელექტრონული სიმკვრივის ზრდა არ იქნება ლოკალიზებული ბირთვებს შორის შემაერთებული წრფის გასწვრივ. ის ლოკალიზებულია ამ წრფის ზევით ან ქვევით ან წინ და უკან. ასეთ ბმებს ეწოდება **პი-ბმები**. N_2 -ის მოლეკულაში ჩვენ გვაქვს ერთი პი-ბმა წარმოქმნილი თითოეული ატომის $2p_x$ ორბიტალების გადაფარვით

და მეორე პი-ბმა წარმოქმნილი $2p_y$ ორბიტალების გადაფარვით. ამრიგად, სამმაგი ბმა შედგება ერთი სიგმა ბმისა და ორი პი ბმისგან.

7.5. ჰიბრიდული ორბიტალები

ორბიტალების შესახებ ჩვენი წარმოდგენა გამომდინარეობს ცალკეული ატომების კვანტურ-მექანიკური ინტერპრეტაციიდან. s, p, d და f ორბიტალების არსებობა პერიოდული სისტემის ფორმის დამაჯერებელ ახსნას იძლევა. მაგრამ, როდესაც ატომები ერთიანდებიან მოლეკულებში, ზემოთმოტანილი მოსაზრებები ვარაუდობს, რომ ხშირად იგივე ორბიტალები ვერ ხსნის არსებულ ფაქტებს. სავარაუდოდ, p ორბიტალების ელექტრონები იძლევა $H-O-H$ ბმის 90° კუთხეს წყალში და ეს არ ეთანხმება მოლეკულის გეომეტრიას. ამან გამოიწვია ორბიტალური ჰიბრიდიზაციის ცნების შემოტანა, რომელიც მოწოდებულია შეათანხმოს ორბიტალური გადაფარვის ცნება უამრავ დაკვირვებებთან მოლეკულათა ფორმებსა და სტრუქტურებზე. ჰიბრიდიზაციის იდეა აღიარებს იმ ფაქტს, რომ როდესაც ორი ან მეტი ატომი მიუახლოვდება ერთმანეთს საკმაოდ ახლოს, ისე, რომ წარმოქმნას ქიმიური ბმა, ურთიერთქმედება იქნება საკმარისად ძლიერი, რათა შეიცვალოს ამ ატომების ფორმა.

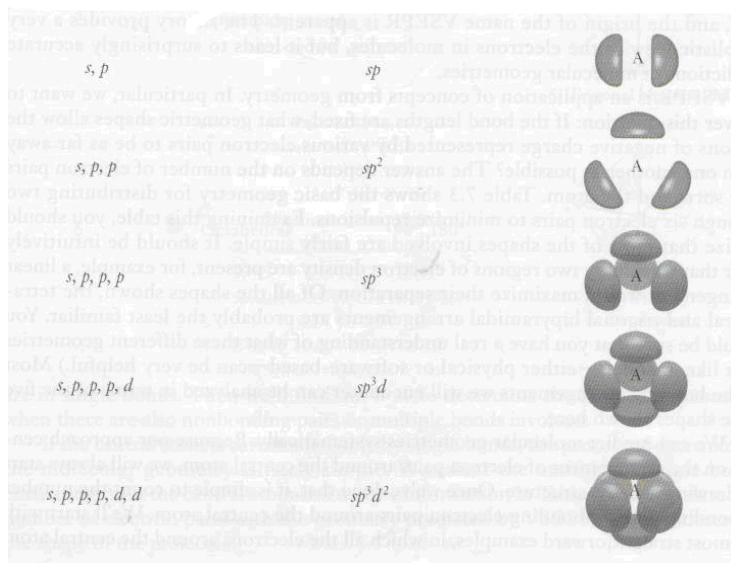
უმარტივესი სტაბილური ბინარული ნაერთი, წარმოქმნილი ნახშირბადის და წყალბადის მიერ, არის მეთანი CH_4 , ბმის სიგრძეების და სიდიდეების განსაზღვრა შესაძლებელია ექსპერიმენტულად და ეს გაზომვები ცხადყოფს, რომ ყველა ოთხივე $C-H$ ბმა ტოლფასია. მეტიც, მოლეკულების ბრუნვით შეიძლება მოლეკულათა ფორმების გაზომვაც, რამაც გვაჩვენა, რომ მეთანში $H-C-H$ ყველა კუთხე ტოლია $109,5^\circ$. ამ მონაცემების თანახმად, იმისთვის, რომ აღვწეროთ ბმები CH_4 -Si ორბიტალური გადაფარვის ტერმინებში, საჭიროა ოთხი იდენტური ორბიტალი ნახშირბადის ატომზე და რომ ეს ორბიტალები უნდა განლაგდნენ $109,5^\circ$ -იანი კუთხით ერთმანეთისადმი. მათემატიკაში შეგვიძლია ოპერირება ფუნქციებით და მათი გარდაქმნა მიღებული წესების მიხედვით. ატომური

ორბიტალების ტალღური ფუნქციებით ოპერირება შესაძლებელია ზუსტად იმავე გზით. თუ ვიწყებთ ორი ორბიტალით, დამთავრებისას ისევ უნდა გვქონდეს ორი ორბიტალი. ეს უზრუნველყოფს იმას, რომ შეგვიძლია ყველა საჭირო ელექტრონის განთავსება. თუ ავიღებთ ატომური ორბიტალების წრფივ კომბინაციას, მივიღებთ ახალ ორბიტალებს, რომლებიც საფუძველი იქნება შეკავშირების მოდელისა. მიღებულ ორბიტალებს უწოდებენ **ჰიბრიდულ ორბიტალებს**, რადგან ისინი წარმოადგენენ ორი ან მეტი ატომური ორბიტალის ნარევს.

ნახშირბადის ატომის **s** ორბიტალი და სამი **p** ორბიტალი გადაფარავს ერთმანეთს და წარმოქმნის ოთხ ახალ ჰიბრიდულ ორბიტალს, რომელთაც აქვთ ერთი და იგივე ენერგია. ამ ორბიტალების სახელია **sp³**, სადაც ინდექსი გვიჩვენებს, რომ მონაწილეობს სამი **p** ორბიტალი. ელექტრონების განთავსება ამ ოთხ ეკვივალენტურ **sp³** ორბიტალებზე გულისხმობს, რომ თითოეული **sp³** ორბიტალი მკაცრად ორიენტირებულია გარკვეული მიმართულებით **109,5°**-იანი კუთხით ორბიტალებს შორის. ამდენად, ეს ჰიბრიდული ორბიტალები აადვილებს დაკვირვებების ახსნას **CH₄**-თვის. ნახშირბადის **sp³** ორბიტალის და წყალბადის **s** ორბიტალების გადაფარვა წარმოქმნის ოთხ **C – H** ბმას.

ეს კონცეფცია უაღრესად უნივერსალურია იმ ორბიტალების რაოდენობის მიმართ, რომლებიც შეიძლება გაერთიანდნენ (ნახ. 12).

ორბიტალების კომბინაცია ჰიბრიდიზაცია ორბიტალების გეომეტრია



ნახ.12. ორბიტალების ჰიბრიდიზაციის სქემები

როდესაც სქემაში ჩართულია მხოლოდ ერთი p ორბიტალი, ვიღებთ sp ჰიბრიდ ორბიტალს და როდესაც ორი p ორბიტალი, ჰიბრიდული ორბიტალები იქნება sp^2 . ატომებისათვის, რომელთა სავალენტო ელექტრონები განლაგებულია $n = 3$ გარსზე ან ზევით, ჰიბრიდიზაციაში ჩართულია აგრეთვე d -ორბიტალები. ამრიგად, sp^3d ჰიბრიდიზაცია წარმოქმნის ხუთ ორბიტალს, ექვსი ორბიტალის შემთხვევაში იქნება sp^3d^2 ჰიბრიდები. ყველა ამ სქემის გამოყენება შესაძლებელია შეკავშირების ასახსნელად კოვალენტურ მოლეკულებში.

8. მოლეკულები

ამ თავის შესწავლის შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

- ახსნას, თუ როგორ არის დაკავშირებული მეტალების, იზოლატორების და ნახევარგამტარების ელექტრული თვისებები მათ ქიმიურ შეკავშირებასთან.
- განსაზღვროს მოლეკულათაშორისი ძალების ტიპები, რომლებიც ყველაზე მნიშვნელოვანია გარკვეული ნაერთისათვის.
- განმარტოს კავშირი მოლეკულათაშორის ძალებსა და ისეთ თვისებებს შორის, როგორიცაა დუდილის ტემპერატურა და ორთქლის წნევა.

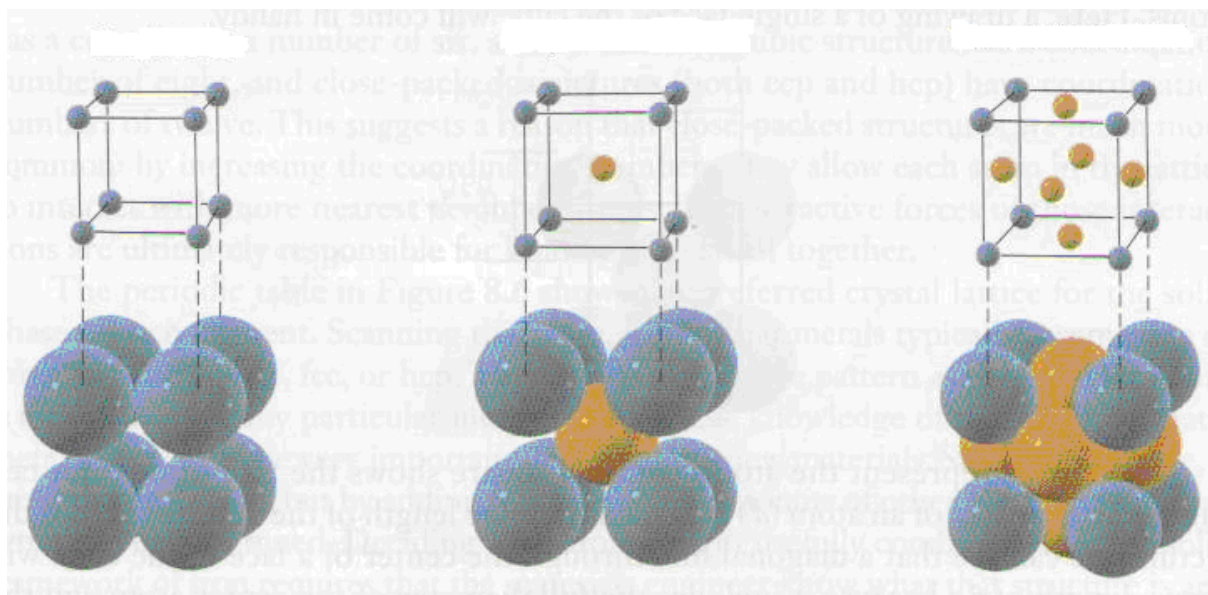
8.1. კრისტალური მესერის ტიპები

ცნობილია, რომ ბევრ ნაერთს აქვს რეგულარული, განმეორებადი გეომეტრიული სტრუქტურა. ეს განიხილება როგორც **კრისტალური** სტრუქტურა. სხვა ნაერთები მყარდება ნებისმიერი ორიენტაციით. მათ **ამორფულ** სტრუქტურებს უწოდებენ.

რადგან ატომებს განიხილავენ როგორც სფეროებს, მათი კრისტალურ მყარ სხეულად განლაგება გარკვეული გაგებით ანალოგია იმის, რომ ბურთულები ჩავაწყობთ ყუთში. კრისტალის სტრუქტურის სიმკვრივის მახასიათებელია **ჩაწყობის ეფექტურობა**. ეს სიდიდე გვიჩვენებს სივრცის იმ პროცენტულ რაოდენობას, რომელიც დაკავებულია მოცემული განლაგებით. ატომებისთვის ეს სიდიდე ცხადად არის დაკავშირებული მასალის სიმკვრივესთან, რადგან ჩაწყობის ეფექტურობის გაზრდა მეტ ატომს მოათავსებს იგივე მოცულობაში.

ცნობილია, სამი სახეობის კრისტალური მესერი (ნახ. 13) მარცხენა ნახატზე ნაჩვენებია **მარტივი კუბური მესერი**, რომელშიც ატომები განლაგებულია კუბის კუთხეებში. ნახატის ცენტრალურ ნაწილში ნაჩვენებია **მოცულობადაცენტრებული** კუბური სტრუქტურა. ამ შემთხვევაში დამატებით ატომები მოათავსებულია კუბის ცენტრში. ნახატის მარჯვენა ნაწილში ნაჩვენებია **წახნაგდაცენტრებული** კუბური

სტრუქტურა, რომელშიც თითო ატომი მოთავსებულია კუბის თითოეულ კუთხეში და დამატებითი ატომები კუბის თითოეული ექვსი წახნაგის ცენტრში.



ნახ.13. კუბური კრისტალური მესერის სახეები

გარდა ჩაწყობის ეფექტურობისა, მნიშვნელოვანია აგრეთვე **კოორდინაციული რიცხვის** ცნება. ეს არის ატომების რიცხვი, რომლებიც უშუალოდ ემიჯნებიან ნებისმიერ მოცემულ ატომს.

8.2. შეკავშირება მყარ სხეულებში: მეტალები

როცა განვიხილავთ ზოგადად მეტალებს და, კერძოდ, გარდამავალ მეტალებს, არის მცირე განსხვავება ელექტროუარყოფითობაში ელემენტიდან ელემენტამდე. ასე რომ, მეტალები და შენადნობები არ ქმნიან იონურ ბმებს. საჭიროა გრძელი გზა, რათა მათი ქვეგარსები შეივსოს. მათ ესაჭიროებათ დიდი რაოდენობა კოვალენტური ბმებისა, რათა მიაღწიონ დასრულებულ ოქტეტს. თუ მეტალებს არ ახასიათებთ არც იონური და არც კოვალენტური ბმები, როგორ უკავშირდებიან ისინი ერთმანეთს?

პირველი და უმარტივესი ახსნა მეტალური შეკავშირებისა ეს არის **ელექტრონების მოძრაობა**. ამ მოდელის ძირითადი მახასიათებელია ის, რომ

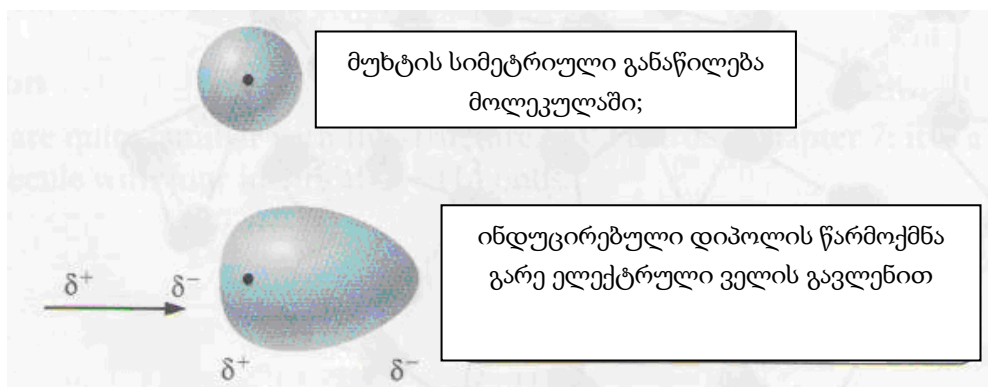
მეტალის კრისტალური მესერის კვანძებში მოთავსებულია მეტალის იონები, ხოლო სავალენტო ელექტრონები დელოკალიზებულია, თავისუფლად მოძრაობენ მყარ სხეულში და არ არიან მიბმული რომელიმე ცალკეულ გზაზე. ყოველივე ზემოთ აღნიშნული განაპირობებს ე.წ. **მეტალურ ბმას**. ეს მოდელი ხსნის მეტალების მთელ რიგ თვისებებს. მაგალითად, ეს დელოკალიზებული ელექტრონები თავისუფლად მოძრაობენ ნებისმიერ მოდებულ ელექტრულ ველში, ასე რომ, მეტალების ელექტრო- და სითბოგამტარობა ასევე აიხსნება ამ მოდელით.

8.3. მოლეკულათაშორისი ძალები

8.3.1. ძალები მოლეკულებს შორის

ატომებს შორის ურთიერთქმედებები, რომლებიც წარმოქმნიან ბმებს და შესაბამისად, მოლეკულებს, მეტად მნიშვნელოვანია ქიმიაში. ასევე ძალზედ მნიშვნელოვანია ძალები მოლეკულებს შორის, რომლებიც მნიშვნელოვანწილად განსაზღვრავენ კონდენსირებული ფაზების სტრუქტურას და თვისებას.

დისპერსულ ძალებს ლონდონის ძალები ეწოდება და ისინი საერთოა ყველა მოლეკულისათვის. ისინი განეკუთვნება **მცისიერ დიპოლ-ინდუცირებულ დიპოლურ ძალებს**. მოლეკულის ელექტრულ ველში მოთავსებისას წარმოიქმნება მცისიერი დიპოლი, რაც ნაჩვენებია ნახ. 14.

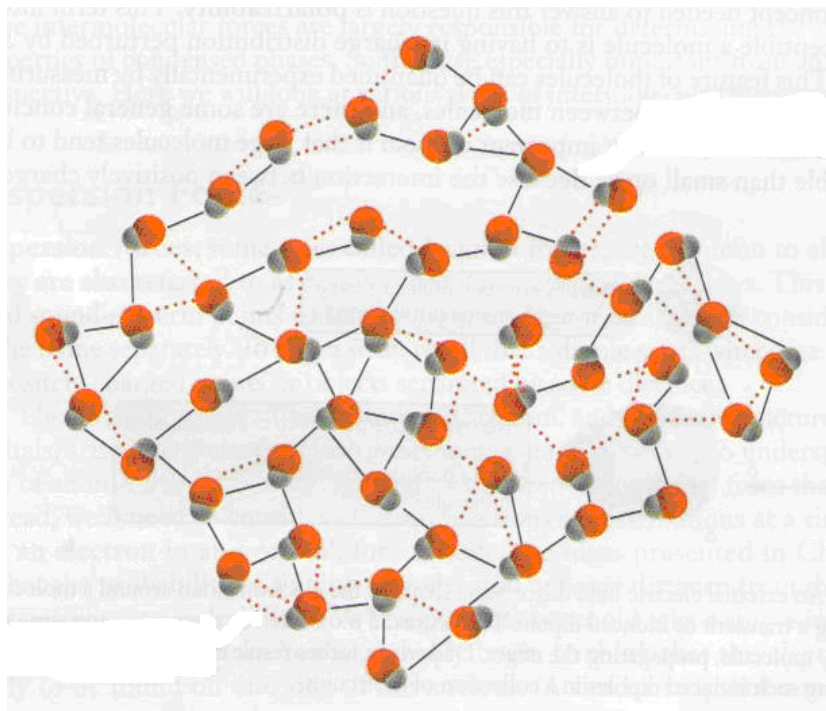


ნახ.14. დიპოლის წარმოქმნა

8.3.2. დიპოლ-დიპოლური ძალები

როდესაც მოლეკულაში არის მუდმივი დიპოლები, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ერთმანეთთან, არის ტენდენცია, რომ ეს დიპოლები განლაგდნენ სწორ ხაზზე. ეს გამწვრივება, განსაკუთრებით სითხეებში, არ არის ხისტი. ერთი მოლეკულის დადებითი ბოლოსათვის ხელსაყრელია, რომ იყოს მეორე მოლეკულის უარყოფით ბოლოსთან ახლოს და პირიქით. მაგრამ მუხტი ამ პოლუსებზე იშვიათად არის მეტი, ვიდრე ელექტრონზე. ამრიგად, თუმცა სხვადასხვა ნიშნის მუხტების მიზიდვა ან ერთნაირი ნიშნის მუხტების განზიდვა მეტია, ვიდრე მათი დისპერსიის ძალები, ისინი შედარებადია ქიმიური ბმების სიმტკიცესთან. სუსტი მიზიდულობების და განზიდვებისას დიპოლების გამწვრივება ვერ იქნება აბსოლუტური. ნებისმიერ მომენტში იქნება მოლეკულათა წყვილები ან ჯგუფები, რომლებიც განიცდიან ურთიერთგანზიდვას.

მაგალითად, 50 მოლეკულიან ნიმუშში უფრო მეტია მიზიდვითი ურთიერთქმედებები, ვიდრე განზიდვითი (ნახ. 15).



ნახ.15. დიპოლებს შორის მიზიდვის (—) და განზიდვის (-----) ძალები

მოგვიანებით სხვადასხვა ურთიერთქმედებების ადგილი იცვლება, მაგრამ განზიდვების და მიზიდვების რაოდენობა რჩება უცვლელი. რადგანაც ეს ეფუძნება მუდმივ და არა გარდამავალ დიპოლებს. ტიპიურად, ეს დიპოლ–დიპოლური ურთიერთქმედებები უფრო ძლიერია, ვიდრე დისპერსული ძალები.

8.3.3. წყალბადური კავშირი

კიდევ ერთი მოლეკულათაშორისი ურთიერთქმედება ყველაზე არამკაფიოდ განსაზღვრული ტერმინია. თუმცა მას ხშირად უწოდებენ „წყალბადურ ბმებს“, წყალბადური შეკავშირებითი ურთიერთქმედება სულად არ არის რეალური ბმა. ის არ შეიცავს ბმის ფორმალურ გაგებას. ეს არის უფრო დიპოლ–დიპოლური ურთიერთქმედების განსაკუთრებით ძლიერი ფორმა, რომელიც დაიკვირვება ნაერთში ელემენტების გარკვეული კომბინაციებისას. წყალბადური შეკავშირება ყველაზე ძლიერი მოლეკულათაშორისი ურთიერთქმედებაა, რადგან წყალბადური ბმები გამოკვეთილ როლს თამაშობენ ბიოქიმიაში, ეს ურთიერთქმედებები დიდი სასიცოცხლო მნიშვნელობისაა.

„წყალბადი“ წყალბადური შეკავშირებისას ყოველთვის არის წყალბადის ატომი, ბმული ძლიერ ელექტროუარყოფით ატომთან, ჩვეულებრივ ეს არის N, O ან F. მაღალი ელექტროუარყოფითობის მქონე ატომს აქვს ტენდენცია მიიზიდოს ელექტრონული წყვილი და ის გაიზიაროს წყალბადთან. ასე რომ, წყალბადის ატომი მიიღებს ნაწილობრივ დადებით მუხტს. რადგან წყალბადის ატომში არ არის სხვა სავალენტო ელექტრონები, ეს დადებითი მუხტი, ძირითადად, „განლაგებულია“ სხვა მოლეკულებზე. თუ ნაწილობრივი უარყოფითი მუხტის მქონე ატომი და შესაბამისი ელექტრონების ცალკეული წყვილი უახლოვდება ამ დადებით მუხტს, წარმოიქმნება ძლიერი დიპოლური ტიპის მიზიდვა. ასეთი ატომებია, როგორც ზევით აღინიშნა, N, O და F. ამ ელემენტებს, ყველა თავის ნაერთში აქვთ ტენდენცია ჰქონდეს ერთი ან მეტი ელექტრონების ცალკეული წყვილი და ეს ელექტრონები, სულ ცოტა, ნაწილობრივ გაერთიანებულია მეორე მოლეკულის მეზობელ წყალბადის ატომთან.

წყალბადური შეკავშირების უმარტივესი მაგალითია ნაერთები, რომლებიც შეიცავენ სუფთა ნივთიერებას, რომლის მოლეკულებში შედის როგორც წყალბადის ატომი, ასევე მაღალი ელექტროუარყოფითობის მეორე ატომი, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ერთმანეთთან. მაგალითად, წყალბადის ფტორიდში ერთი მოლეკულის H ატომი მიიზიდება მეორე მოლეკულის F-ით. ანალოგიური სიტუაციაა წყლის შემთხვევაში, სადაც ჟანგბადის ატომები არის წყარო ელექტრონების განუყოფელი წყვილისა, რომლისკენაც მიიზიდება წყალბადის ატომები. მნიშვნელოვანია, რომ ეს წყალბადური შეკავშირებით ურთიერთქმედებები ბევრად უფრო სუსტია, ვიდრე ქიმიური ბმები ცალკეული მოლეკულის შიგნით. მაგალითად, წყალში წყალბადური კავშირები აკავებს მოლეკულებს ერთმანეთთან მყარ ან თხევად ფაზებში. უფრო რთულ შემთხვევებში, კერძოდ, ბიოლოგიურ ნაერთებში. წყალბადურ შეკავშირებას შეიძლება ადგილი ჰქონდეს სხვადასხვა მოლეკულებს შორის ან დიდი მოლეკულის, როგორიცაა პროტეინი, ცალკეულ ნაწილებს შორის.

განხილული ძალები – დისპერსიულ, დიპოლ–დიპოლური და წყალბადური შეკავშირება წარმოქმნის მრავალ ურთიერთქმედებას, რომლებსაც ადგილი აქვს მოლეკულებს შორის და საშუალებას გვაძლევს გავიაზროთ კონდენსირებული ფაზების როგორც არსებობა, ასევე თვისებები. არც ერთი ეს ძალა არ არის ისეთი ძლიერი, როგორც აშკარად სუსტი ქიმიური ბმები. წყალბადური შეკავშირება, როგორც წესი, ყველაზე ძლიერია მოლეკულათაშორის ურთიერთქმედებებში. მაგრამ ისინიც კი ერთი რიგით უფრო სუსტია, ვიდრე კოვალენტური ბმა.

8.4. კონდენსირებული ფაზები – სითხეები

მყარი სხეულები არ არის მატერიის ერთადერთი კონდენსირებული ფაზა. ზემოთ აღწერილი მოლეკულათაშორისი ძალები ხშირად წარმოქმნის როგორც სითხეებს, ასევე მყარ სხეულებს. სტრუქტურულ ასპექტში სითხეები არ არის ისეთი მოწესრიგებული, როგორც მყარი სხეულები.

ძირითადი განსხვავება სითხეებსა და მყარ სხეულებს შორის არის ის, რომ სითხეებში ატომები და მოლეკულები ბევრად უფრო მოძრავია. მყარ სხეულში თითოეული ნაწილაკის საშუალო პოზიცია, ძირითადად, უცვლელია. ატომები რჩება ფიქსირებულ მდგომარეობაში დროთა განმავლობაში. საწინააღმდეგოდ ამისა, სითხეში ნაწილაკები თავისუფლად მოძრაობენ ერთმანეთის მიმართ და ეს ხდება მუდმივად. ეს მუდმივი მოძრაობა მნიშვნელოვან როლს ასრულებს მაშინ, როდესაც სითხეები გამოიყენება როგორც გამხსნელები, რომლებსაც შეუძლიათ სხვა ქიმიური ნაერთების გახსნა. გახსნილ ნაწილაკებს ასევე შეუძლიათ მოძრაობა, რაც იწვევს მათ შეხვედრას სხვა გახსნილ მასალასთან (ან მყარ სხეულთან, რომელიც შეხებაშია სითხესთან) და, საბოლოო ჯამში, ადგილი აქვს ქიმიურ რეაქციას.

მოკლედ განვიხილოთ სითხეებთან დაკავშირებული რამდენიმე ცნება, **ორთქლის წნევა** ეს არის ნივთიერების აირადი ფაზის წნევა, რომელიც წონასწორობაშია სუფთა სითხესთან დახურულ კონტეინერში. სითხის **ნორმალური დუდილის წერტილი** განისაზღვრება როგორც ტემპერატურა, რომელზეც სითხის ორთქლის წნევა ატმოსფერულს უდრის. **ზედაპირული დაჭიმულობა** ეწოდება მოვლენას, როდესაც სისტემაში ადგილი აქვს მოლეკულების რიცხვის მინიმალურ რაოდენობას მის მაღალი ენერგიის მქონე გარემოში.

9. ენერგია და ქიმია

ამ თავის შესწავლის შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

- განსაზღვროს მუშაობა და სითბო სტანდარტულ პირობებში;
- განსაზღვროს მდგომარეობის ფუნქციები და ახსნას მათი მნიშვნელობა;
- ჩამოაყალიბოს თერმოდინამიკის პირველი კანონი სიტყვიერად და როგორც განტოლება;
- ახსნას ჰესის კანონი თავისი სიტყვებით.
- გამოთვალოს ΔH ქიმიური რეაქციებისთვის ცხრილის მონაცემებიდან.

9.1. ენერგიის ფორმები

ენერგიის დიდი ნაწილი იყოფა ორ ვრცელ კატეგორიად: **პოტენციური ენერგია** და **კინეტიკური ენერგია**. პოტენციური ენერგია დაკავშირებულია ობიექტის ფარდობით მდებარეობასთან. კინეტიკური ენერგია დაკავშირებულია მოძრაობასთან. ნებისმიერი სხეულის მოძრაობისას პოტენციური ენერგია გარდაიქმნება კინეტიკურში. ნებისმიერ ნაერთს და ობიექტს, იქნება ეს მაკროსკოპული თუ მიკროსკოპული, აქვს ენერგიის ეს ფორმები. ნებისმიერი ნაერთი ან ობიექტი შედგება ატომებისა და მოლეკულებისაგან, რომლებსაც გააჩნიათ მუდმივ მოძრაობასთან დაკავშირებული კინეტიკური ენერგია და პოტენციური ენერგია, რომელიც განპირობებულია სხვადასხვა ძალებით, რომლებითაც ისინი მოქმედებენ ერთმანეთზე. ატომების და მოლეკულების კინეტიკური და პოტენციური ენერგიების ჯამი შეადგენს სხეულის **შიდა ენერგიას**.

ობიექტის შიდა ენერგიის დიდი ნაწილი დაკავშირებულია პოტენციურ ენერგიასთან, რომელიც განპირობებულია ატომების ფარდობითი მდებარეობით. ქიმიური ბმის წარმოქმნა ან გახლეჩა ცვლის პოტენციურ ენერგიას. ქიმიურ რეაქციათა უმრავლესობისას რეაგენტებში იხლიჩება ბმები და პროდუქტებში წარმოიქმნება ახალი ბმები. თუ ბმის წარმოქმნისას გამოყოფილი ენერგია მეტია,

ვიდრე ის დაიხარჯა ზმის გახლეჩისას, ამ პროცესისას ენერგია თავისუფლდება. ეს ენერგია ხშირად განიხილება როგორც ქიმიური ენერგია.

ზოგჯერ სასარგებლოა გამოვიყენოთ უფრო სპეციალური ტერმინები ენერგიის სხვადასხვა ფორმებისათვის. **გამოსხივების ენერგია** დაკავშირებულია სინათლესთან ან ელექტრომაგნიტურ გამოსხივებასთან. **მექანიკური ენერგია** დაკავშირებულია მაკროსკოპული ობიექტების მოძრაობასთან. **სითბური ენერგია** ობიექტის ტემპერატურის ცვლილების შედეგია (ეს შეიძლება დაუკავშიროთ ატომების და მოლეკულების მოძრაობის მოლეკულურ დონეზე). ელექტრული ენერგია განპირობებულია მუხტის მოძრაობით – როგორც წესი, ელექტრონების მეტალში. **ბირთვული ენერგია**, რომელიც გამოიყოფა ბირთვული აფეთქებისას, არის პოტენციური ენერგიის ფორმა, რომელიც დაკავშირებულია ატომბირთვში პროტონების და ნეიტრონების განლაგებასთან.

9.2. სითბო და მუშაობა

ენერგიის რა კლასიფიცირებაც არ უნდა ჩავატაროთ, მთელი ენერგია გადადის სითბოში ან მუშაობაში. **სითბო** – ეს არის ენერგიის ნაკადი ორ ობიექტს შორის, უფრო თბილიდან უფრო ცივისკენ, ტემპერატურათა სხვაობის გამო. თუ დავაზუსტებთ, სითბო არის **პროცესი** და არა სიდიდე.

ენერგიის გადაცემის მეორე ფორმაა **მუშაობა**. ეს არის ენერგიის გადაცემა, რომელიც სრულდება გარკვეული ძალით მასის გადატანისას რაღაც მანძილზე წინააღმდეგობის დაძლევის გამო. მაკროსკოპული სხეულების განხილვისას მუშაობა, როგორც წესი, გამოიხატება მექანიკური ენერგიის ტერმინებით, მაგრამ მუშაობა მოიცავს მოვლენათა ფართო სპექტრს. მუშაობის ყველაზე ცნობილი მაგალითი ქიმიურ პროცესებში არის **წნევა – მოცულობის (PV) მუშაობა**, როცა აირი ფართოვდება, ის ასრულებს მუშაობას. ასევე უფრო ცხადი მაგალითი მუშაობისა ქიმიური რეაქციისას არის ბენზინის წვა მანქანის ძრავაში.

9.3. ენერგიის ერთეულები

SI სისტემაში ენერგიის ერთეულია ჯოული (ჯ), რომელიც ტოლია 1 კგ·მ²/წმ². მუშაობა ეს არის ძალა გამრავლებული მანძილზე და ძალა – ეს არის მასა გამრავლებული აჩქარებაზე. ასე რომ, მუშაობა = მასა×აჩქარება×მანძილი.

$$\text{ანუ } \text{კგ} \frac{\text{მ}}{\text{წმ}^2} \times \text{მ} = \frac{\text{კგ} \text{ მ}^2}{\text{წმ}^2}$$

კიდევ გამოიყენება ტრადიციული ერთეული კალორია, რომელიც თავდაპირველად განისაზღვრა როგორც ენერგიის რაოდენობა, რომელიც აუცილებელია 1 გ. წყლის გასათბობად 14,5°C ან 15,5°C-მდე. 1 კალორია ეკვივალენტურია 4,184 ჯ-ს.

9.4. ენერგიის გარდაქმნა და ენერგიის შენახვა

განვიხილოთ ბუნების კანონები, რომლებსაც ვიყენებთ, როდესაც ენერგიის ერთი ფორმა გადადის მეორეში. პირველი და მთავარი დებულებაა ის, რომ ენერგიის გარდაქმნისას საერთო ენერგია ინახება. თუ სწორად დავთვლით ენერგიის გადაცემას და ენერგიის გარდაქმნის ყველა პროცესს, ენერგიის საერთო რაოდენობა რჩება მუდმივი. ენერგიის ყველა სახის ზუსტი ანგარიშისათვის უნდა ზუსტად განვსაზღვროთ ტერმინების მთელი რიგი. პირველი, თუ რას ვსწავლობთ. **სისტემა** განისაზღვრება როგორც სამყაროს ნაწილი. სამყაროს დანარჩენი ნაწილი განიხილება როგორც **გარემო**. ეს განმარტებები ნიშნავს, რომ სისტემა პლუს გარემო ტოლია სამყაროსი. სისტემა და გარემო გაყოფილია **საზღვრით**. რიგ შემთხვევებში ეს საზღვარი შეიძლება იყოს ფიზიკური კონტეინერი, სხვა შემთხვევებში ის უფრო აბსტრაქტული სახისაა.

მას შემდეგ რაც ავირჩიეთ შესაბამისი სისტემა, ენერგიის შენახვის კონცეფცია მყისიერად ხდება სასარგებლო. რადგანაც სითბო და მუშაობა მხოლოდ ენერგიის გარდაქმნის შესაძლო ფორმებია, ჩვენ შეგვიძლია სისტემის საერთო ენერგიის (E)

ცვლილება მივაწეროთ ამ ორ კომპონენტს. სითბო ჩვეულებრივ აღნიშნება q -თი, მუშაობა w -თი, ასე რომ

$$\Delta E = q + w$$

სიმბოლო Δ (დელტა) შემოსულია როგორც აღნიშვნა, რომელიც ნიშნავს „ცვლილებას“. ეს სიმბოლო, რომელიც ხშირად გამოიყენება თერმოდინამიკაში, შეიძლება ასევე განისაზღვროს, როგორც სხვაობა საბოლოო და საწყის მდგომარეობებს შორის:

$$\Delta E = E_{\text{საბ}} - E_{\text{საწყ}}$$

ეს განტოლება ადვილად ამოხსნადია, რადგანაც შეიცავს თავისუფალ არჩევანს სითბოს და მუშაობის სიდიდეების ნიშნისათვის. შეთანხმებით, ენერგიას, გარდაქმნილს სისტემაში, აქვს დადებითი ნიშანი და, ენერგიას, გამოსულს სისტემიდან – უარყოფითი. ამრიგად, როდესაც სითბო შემოდის სისტემაში გარემოდან, q -ს მნიშვნელობა დადებითია და როდესაც სისტემაზე სრულდება მუშაობა, w -ს მნიშვნელობა დადებითია. საწინააღმდეგოდ, როდესაც სითბო გადის სისტემიდან ან სისტემა ასრულებს მუშაობას გარემოზე, q და w უარყოფითი სიდიდეებია.

ნიშნის დადგენის ჩვენი შეთანხმების თანახმად, სითბოს და მუშაობის პროცესებს განვიხილავთ სისტემის პერსპექტივიდან გამომდინარე. ასე რომ, ΔE -ს გამოთვლილი მნიშვნელობა ასევე არის სისტემის შიდა ენერგიის ცვლილება, რომელიც ზუსტად კომპენსირდება გარემოში ცვლილებით: $\Delta E_{\text{გარ}} = \Delta E_{\text{სისტ}}$ (ჩვეულებრივ ვწერთ ΔE და არა $\Delta E_{\text{სისტ}}$, რადგან განმარტებით სისტემა ყველაზე მეტად გვაინტერესებს). ამრიგად, სამყაროს ენერგია რჩება მუდმივი.

$$\Delta E_{\text{საბყ}} = \Delta E_{\text{გარ}} + \Delta E_{\text{სისტ}} = 0$$

ენერგია შეიძლება გადავიდეს ერთი ფორმიდან მეორეში. მაგრამ ის არ შეიძლება წარმოიქმნას ან დაიშალოს. ეს არის თერმოდინამიკის პირველი კანონი.

9.5. სითბოტევადობა და კალორიმეტრია

ექსპერიმენტულად დადგინდა, რომ ტემპერატურის გარკვეულ ცვლილებასთან დაკავშირებული სითბოს გამოსათვლელად აუცილებელია ვიცოდეთ გასათბობი მასალის რაოდენობა და იდენტურობა, ისევე როგორც ტემპერატურის ცვლილება.

ეს იდეა ადვილად გამოისახება განტოლებით. ჩვენ გვაქვს ორი ვარიანტი ნივთიერების რაოდენობის გამოსახატავად: მასით ან მოლეზით. მასის გამოყენების შემთხვევაში ამ ცნებას ეწოდება **ხვედრითი სითბოტევადობა** (ანუ ხვედრითი სითბო):

$$q=mc\Delta T$$

q - მასალის ფიზიკური თვისებაა და იზომება იმით, თუ რამდენი სითბოა საჭირო ერთი გრამი მასალის 1°C -ით გასათბობად. ანალოგიურად **მოლური სითბოტევადობაც** ფიზიკური სიდიდეა, რომელიც აღწერს იმას, თუ რამდენი სითბოა საჭირო, რომ ერთი მოლი ნივთიერების ტემპერატურა გაიზარდოს 1°C -ით. ამ შემთხვევაში $q=nC_p \Delta T$.

ინდექსი "**p**" C_p -ში გვიჩვენებს, რომ ეს არის სითბოტევადობა მუდმივი წნევისას. სხვა პირობებში, მაგალითად, მუდმივი მოცულობისას, სითბოტევადობის მნიშვნელობა უმნიშვნელოდ განსხვავებულია.

სითბოტევადობა ერთი და იგივეა იმისდა დამოუკიდებლად, თუ რომელ ერთეულებშია გამოსახული ტემპერატურა: K-ში თუ $^{\circ}\text{C}$ -ში, მთავარია, რომ სითბო დამოკიდებულია ტემპერატურათა სხვაობაზე და არა თავად ტემპერატურაზე.

კალორიმეტრია ეს არის ტერმინი, რომელიც გამოიყენება სითბოს ნაკადის გასაზომად. შესაბამის ხელსაწყოს ეწოდება **კალორიმეტრი**.

მთელი კალორიმეტრის სითბოტევადობა მიიღება გარემოში სითბოს მიწოდებით გამოწვეული ტემპერატურის ცვლილების გაზომვით.

სითბოს ცნობილი რაოდენობა=კალორიმეტრის მუდმივას გამრავლებულს ΔT ანუ $q=C\times\Delta T$.

9.6. ენთალპია

რადგან რეაქციის სითბო დამოკიდებულია რეაქციის პირობებზე, ხელსაყრელია განისაზღვროს ორი მათემატიკური ფუნქცია ენერგიისათვის. შიდა ენერგიის განმარტების გამოყენებით, შეიძლება ვაჩვენოთ, რომ მუდმივი მოცულობის პირობებში შიდა ენერგია ტოლია სითბოს ნაკადისა:

$$\Delta E = q + w$$

ქიმიური რეაქციების შემთხვევაში ჩვეულებრივ ვიხილავთ მხოლოდ PV-მუშაობას. გაფართოებისას აირი ასრულებს მუშაობას, რომელიც ტოლია $P\Delta V$ -სი. მაგრამ როცა გაფართოებული აირი ჩვენი სისტემაა, w იქნება აირზე შესრულებული მუშაობა, ე. ი. $-p\Delta V$,

$$\Delta E = q - p\Delta V$$

ეს განტოლება გვიჩვენებს, თუ როგორ უკავშირდება შიდა ენერგია სითბოს თუ მოცულობა მუდმივია, $\Delta V = 0$ და

$$\Delta E = q_V$$

სადაც ინდექსი „ V “ აღნიშნავს, რომ განტოლება სამართლიანია მხოლოდ მუდმივი მოცულობის პირობებში.

მაგრამ რა ხდება მუდმივი წნევის პირობებში? აქ საჭიროა შემოვიტანოთ ფუნქცია, რომელიც ტოლი იქნება სითბოს ნაკადისა მუდმივი წნევის პირობებში. ეს ფუნქცია ცნობილია ენთალპიის სახელით და ასე გამოისახება:

$$H = E + PV$$

აქედან ენთალპიის ცვლილება ტოლია სითბოს ნაკადისა მუდმივი წნევის პირობებში, ე. ი.

$$\Delta H = \Delta E + \Delta(PV),$$

ანუ

$$\Delta H = (q - P\Delta V) + \Delta(PV)$$

თუ წნევა მუდმივია, $\Delta(PV)$ წევრი ხდება $p\Delta v$ და $\Delta H = q - P\Delta V + P\Delta V$

ანუ $\Delta H = q_p$

როდესაც სითბო გადის სისტემიდან, პროცესი ეგზოთერმულია და $\Delta H < 0$ და პირიქით, როდესაც სისტემა შთანთქმავს სითბოს, პროცესი ენდოთერმულია და $\Delta H > 0$.

9.6.1. სითბური მოვლენები გახსნის დროს

ნივთიერებების გახსნა შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც ორი თანმიმდევრული პროცესი: 1. ნივთიერების დაშლა მოლეკულებად და იონებად, რაზეც იხარჯება ენერგია, 2. მოლეკულებისა და იონების სოლვატაცია (ჰიდრატაცია), რაც დაკავშირებულია ენერგიის გამოყოფასთან. ამიტომ ნივთიერებების გახსნას თან სდევს გარკვეული სიდიდის სითბური ეფექტი.

გახსნის სითბური ეფექტი არის სითბოს ის რაოდენობა, რომელიც გამოიყოფა ან შთაინთქმება ერთი მოლი ნივთიერების გახსნისას დიდი რაოდენობით გამხსნელში.

სითბოს გამოყოფა ან შთაინთქმა დამოკიდებულია გახსნილი ნივთიერების ბუნებაზე. მაგალითად, თუ მყარი ნივთიერების გახსნისას ჰიდრატაციის ენერგია მეტია კრისტალური მესერის ენერგიაზე, გახსნის პროცესი ეგზოთერმული იქნება, ხოლო თუ ნაკლებია, ენდოთერმული. ატომური კრისტალური მესერის მქონე ნივთიერებები (ალმასი, გრაფიტი, Si, P, SiO₂ და სხვა) წყალში საერთოდ არ იხსნებიან, რადგან ატომთა შორის არსებული კოვალენტური ბმის ენერგია ბევრად მეტია, ვიდრე ჰიდრატაციის ენერგია. აირების და სითხეების წყალში გახსნის პროცესი ეგზოთერმულია.

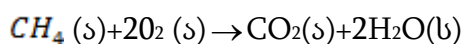
9.7. რეაქციის სითბო

ჩვენ განვიხილეთ ენთალპიის ცვლილება მარტივი ფიზიკური პროცესებისათვის, როგორიცაა ტემპერატურის ცვლილება, მაგრამ ენთალპია ასევე იცვლება ქიმიური რეაქციებისას. ჩვეულებრივ, ეს ცვლილება განიხილება როგორც

რეაქციის სითბო. რადგან რეაქციათა უმრავლესობა მიმდინარეობს მუდმივი წნევის პირობებში, ეს ცნება მნიშვნელოვანია, თუმცა ის ოდნავ არაზუსტია.

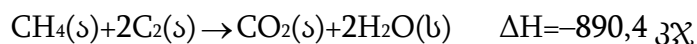
9.8. ბმები და ენერგია

ქიმიური რეაქციები შეიცავს ენერგიის ცვლილებას, რადგან ქიმიური ბმები იხლიჩება და წარმოიქმნება, როდესაც რეაგენტები გარდაიქმნება პროდუქტებში. მაგალითად, ავიღოთ მარტივი რეაქცია – მეთანის წვა



მარცხენა მხარეს გვაქვს ოთხი ერთმაგი C–H ბმა და ორი ორმაგი ბმა O=O. მარჯვენა მხარეს, ორი C=O ორმაგი ბმა და ოთხი O–H ერთმაგი ბმა. რეაქციის მიმდინარეობისას რეაგენტების ყველა კავშირი იხლიჩება და ისინი ითხოვენ ენერგიის მიწოდებას. მეორეს მხრივ, წარმოიქმნება პროდუქტების ყველა ბმები და ეს გამოყოფს ენერგიას. (გავიხსენოთ, რომ ბმის წარმოქმნა ყოველთვის ეგზოთერმულია და ბმის გახლეჩა ყოველთვის ენდოთერმული). თუ ახალი ბმების წარმოქმნისას გამოყოფილი ენერგია მეტია ბმის გახლეჩის ენერგიაზე, მაშინ მთლიანი რეაქცია უნდა იყოს ეგზოთერმული და პირიქით.

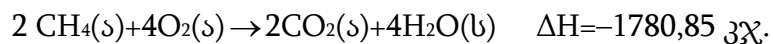
ქიმიური რეაქციის მთლიანი ენერგეტიკა შეიძლება შევაჯამოთ თერმოქიმიურ განტოლებაში. კერძოდ, მეთანის შემთხვევაში მას ექნება შემდეგი სახე:



ΔH -ს სიდიდე გამოთვლილია ერთი მოლი მეთანისთვის.

ამ განტოლებაში ორი მნიშვნელოვანი მომენთია: პირველი, ნათელია, რეაქცია ეგზოთერმულია თუ ენდოთერმული, რადგანაც ΔH -ს აქვს ნიშანი. მეორე, თერმოქიმიური განტოლება შეიცავს ΔH -ს რიცხვით მნიშვნელობას, ასე რომ, შეგვიძლია ზუსტად ვთქვათ, თუ რამდენი სითბო გამოიყოფა. მნიშვნელოვანია გავიაზროთ, რომ ნაჩვენები სითბო ზუსტად ამ განტოლებისთვისაა თუ მეთანის ერთი მოლი რეაგირებს ორ მოლ ჟანგბადთან, გამოიყოფა 890,4 კჯ, მაგრამ თუ მეტი მეთანი დაიწვება, გამოიყოფა მეტი სითბო. ასე რომ, თუ სტექიომეტრული

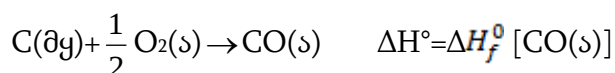
კოეფიციენტები გამრავლდება რაღაც მამრავლზე, რეაქციის სითბო იმდენჯერვე გაიზრდება, მაგ.,



9.9. რეაქციების სითბო ზოგიერთი სპეციფიკური რეაქციისათვის

წვა ნაწილია ენერგოეკონომიკისა, ამიტომ ენთალპიის ცვლილება გამოიყენება სხვადასხვა სახის საწვავთა შესადარებლად. ზოგჯერ წვის ამ სითბოს აღნიშნავენ როგორც $\Delta H_{\text{წვ.}}$. ანალოგიურად, სითბოს ნეიტრალიზაციის რეაქციისას მჟავასა და ფუძეს შორის, უწოდებენ ნეიტრალიზაციის სითბოს – $\Delta H_{\text{ნეიტრ.}}$.

წარმოქმნის რეაქციები ხასიათდება სპეციალურად აღნიშნული რეაქციის სითბოთი, რომელიც ცნობილია როგორც წარმოქმნის სითბო ΔH_f° . წარმოქმნის რეაქცია არის ქიმიური რეაქცია, რომლის დროსაც ნაერთის ერთი მოლი წარმოიქმნება მისი ელემენტებიდან სტანდარტულ პირობებში. **სტანდარტული მდგომარეობა** არის ელემენტის ყველაზე სტაბილური ფორმა ოთახის ტემპერატურაზე (25°C) და 1 ატმ წნევაზე. ნახშირის მონოქსიდის წარმოქმნის რეაქცია ასეთია:



აღსანიშნავია, რომ წარმოქმნის რეაქციის განმარტება გულისხმობს, რომ ნებისმიერი ელემენტის წარმოქმნის სითბო სტანდარტულ პირობებში ყოველთვის იქნება ნულის ტოლი. მაგალითად, $Q_2(\text{g})$ -სთვის, ჩვენ გვჭირდება ერთი მოლი $Q_2(\text{g})$, როგორც პროდუქტი და ჟანგბადი, როგორც რეაგენტი სტანდარტულ მდგომარეობაში.

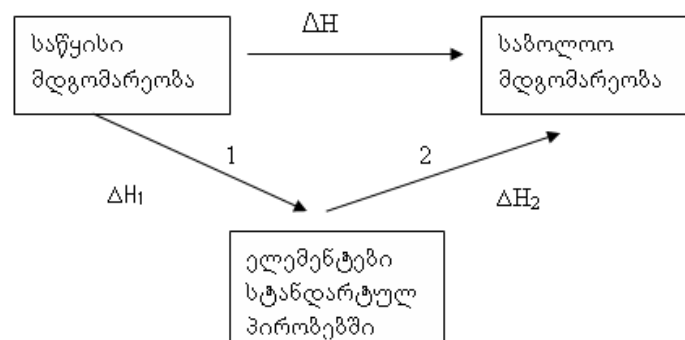
9.10. ჰესის კანონი და რეაქციის სითბო

9.10.1. ჰესის კანონი

რეაქციის სითბოს თეორიული განსაზღვრისათვის ვიყენებთ ჰესის კანონს: ნებისმიერი პროცესის ენთალპიის ცვლილება არ არის დამოკიდებული პროცესის წარმართვის სპეციფიკურ გზაზე. ამ იდეის საბაზო კონცეფცია არის ის, რომ ენთალპია არის მდგომარეობის ფუნქცია. ასეთი ფუნქცია არის ცვლადი, რომლის მნიშვნელობა დამოკიდებულია მხოლოდ სისტემის მდგომარეობაზე და არა მის წინაისტორიაზე. ეს ცნება ძალზე მნიშვნელოვანია ქიმიური რეაქციისათვის. ჩვენ თითქმის არაფერი ვიცით მაკროსკოპული დეტალების შესახებ, თუ როგორ გარდაიქმნება რეალურად რეაგენტების მოლეკულები პროდუქტებად. მაგრამ შედარებით ადვილია იმის განსაზღვრა, თუ რას წარმოადგენენ რეაგენტები და პროდუქტები. რადგან ენთალპია მდგომარეობის ფუნქციაა, თუ ვიპოვით გზას, რათა განვსაზღვროთ ენთალპიის ცვლილება ნებისმიერი სპეციფიკური გზისათვის, რომელშიც რეაგენტები გარდაიქმნება სასურველ პროდუქტებად, ჩვენ გვეცოდინება, რომ შედეგის გამოყენება შესაძლებელი იქნება რეაქციის ნებისმიერი რეალური გზისთვის.

9.10.2. წარმოქმნის რეაქციები და ჰესის სითბო

ცნობილია წარმოქმნის სითბო მრავალი ნაერთისათვის. ჰესის კანონი საშუალებას იძლევა ამ მონაცემების გამოყენებით გამოვთვალოთ ენთალპიის ცვლილება ვირტუალურად ყველა ქიმიური რეაქციისათვის.



სქემიდან ცხადია, რომ რეაქციის 1-ლი საფეხურია რეაგენტების დაშლა ელემენტებად მათ სტანდარტულ მდგომარეობაში. მაგრამ ეს საწინააღმდეგო პროცესია რეაგენტების წარმოქმნის რეაქციისა. ასე რომ, პროცესის ენთალპიის ცვლილება იქნება $-H_f^0$ (რეაგენტების). ანალოგიურად, საფეხური 2-ის, პროდუქტების წარმოქმნა ელემენტებიდან, ენთალპიის ცვლილება იქნება ΔH_f^0 (პროდუქტების). უნდა გვახსოვდეს, რომ წარმოქმნის რეაქცია განისაზღვრება ნაერთის **ერთი მოლის** გენერაციისათვის. შესაბამისად, ცხრილებში მოტანილი წარმოქმნის სითბოების გამოსაყენებლად ჩვენ ΔH უნდა გავამრავლოთ გაწონასწორებული განტოლების სტექიომეტრულ კოეფიციენტებზე, რათა მივიღოთ დახარჯული რეაგენტების ან წარმოქმნილი პროდუქტების მოლების რიცხვი.

ამ ფაქტორების გათვალისწინება გვამღევს ერთ-ერთ ყველაზე სასარგებლო განტოლებას თერმოქიმიაში:

$$\Delta H^0 = \sum_i \nu_i \cdot \Delta H_f^0 (\text{პროდუქტი})_i - \sum_j \nu_j \cdot \Delta H_f^0 (\text{რეაგენტი})_j$$

ბერძნული ასო ν -თი აღნიშნულია სტექიომეტრული კოეფიციენტები. პირველი ჯამი მთლიანად რეაგენტებისაა და მეორე – პროდუქტების.

10. ენტროპია და თერმოდინამიკის მეორე კანონი

ამ თავის შესწავლის შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

- განმარტოს ენტროპიის ცნება თავისი სიტყვებით;
- გამოიყვანოს ΔS -ს ნიშანი მრავალი ქიმიური რეაქციისათვის რეაგენტებისა და პროდუქტების ფიზიკური მდგომარეობიდან გამომდინარე;
- ჩამოაყალიბოს თერმოდინამიკის მეორე კანონი სიტყვებით და განტოლებით და გამოიყენოს ის პროცესის თავისთავადობის პროგნოზირებისათვის;
- ჩამოაყალიბოს თერმოდინამიკის მესამე კანონი;
- ცნობილი მონაცემების საფუძველზე გამოთვალოს ქიმიური რეაქციის ენტროპიის ცვლილება;
- გამოიყვანოს დამოკიდებულება სისტემის თავისუფალი ენერგიის ცვლილებასა და სამყაროს ენტროპიის ცვლილებას შორის;
- ცხრილების მონაცემების საფუძველზე გამოთვალოს ქიმიური რეაქციის ენერგიის ცვლილება;
- ახსნას ტემპერატურის როლი იმის დასადგენად, არის რეაქცია თავისთავადი თუ არა;
- ცხრილის მონაცემების საფუძველზე განსაზღვროს ტემპერატურული დიაპაზონი, რომელშიც რეაქცია იქნება თავისთავადი.

10.1. თავისთავადობა

10.1.1. ბუნების ისარი

ჩვენი გამოცდილებიდან, დრო გარდაუვლად მიედინება წარსულიდან მომავლისაკენ და ეს მიმართულება შეუქცევადია. გარკვეული გაგებით, დრო არის ისარი, რომელიც მიუთითებს ბუნების მიმართულებას. მაგალითად, ნახშირწყლების წვისას წარმოიქმნება ნახშირორჟანგი და წყალი. წყლის ორთქლი და ნახშირორჟანგი ყოველთვისაა ჰაერში, მაგრამ ისინი არასოდეს რეაგირებენ ერთმანეთთან. ბუნებამ ცხადად „იცის“ ამ პროცესის მიმართულება.

10.1.2. თავისთავად მიმდინარე პროცესები

უფრო ფორმალური გზა ბუნების მიმართულების გამოსახატავად ეფუძნება იმ ფაქტს, რომ ზოგიერთი მოვლენები „ხდება“, მაგრამ სხვები არა. ზოგიერთი პროცესი მიმდინარეობს ჩარევის გარეშე და ვამბობთ, რომ ისინი თავისთავადია. თერმოდინამიკური თვალთახედვით, თავისთავად მიმდინარე პროცესი არის პროცესი, რომელიც მიმდინარეობს გარე ჩარევის გარეშე. თითქოსდა განსხვავება თავისთავად და არათავისთავად პროცესებს შორის ცხადია, მაგრამ ეს ყოველთვის ასე არ არის.

ხშირად სიტყვა თავისთავადი განიხილება როგორც მაჩვენებელი იმისა, რომ პროცესი ან რეაქცია მიდის სწრაფად. მაგრამ ჩვენი განსაზღვრა არ ეხება საერთოდ პროცესის სიჩქარეს. ზოგი თავისთავადი პროცესი ძალიან სწრაფია, ბევრი მათგანი კი დიდხანს მიმდინარეობს. ზოგიერთ მასალაში, მაგალითად, ქაღალდში, ქიმიური ნაერთები თავისთავად იშლება დროთა განმავლობაში. მაგრამ ზოგიერთი თავისთავადი რეაქცია ისე ნელია, რომ საჭიროა ძალიან დიდი დრო მის დასაკვირვებლად. ზოგი რეაქცია სწრაფია, მაგრამ თავისით არ იწყება. მაგალითად ბენზინის წვა, თავისთავად ბენზინი არ ააღდება, თუ მას არ მივაწოდეთ მცირე ენერგია ნაპერწკლის სახით.

10.1.3. ენთალპია და თავისთავადობა

გავიხსენოთ, რომ ქიმიურ რეაქციაში ენთალპიის ცვლილება ტოლია სითბოს ნაკადისა მუდმივი წნევის პირობებში:

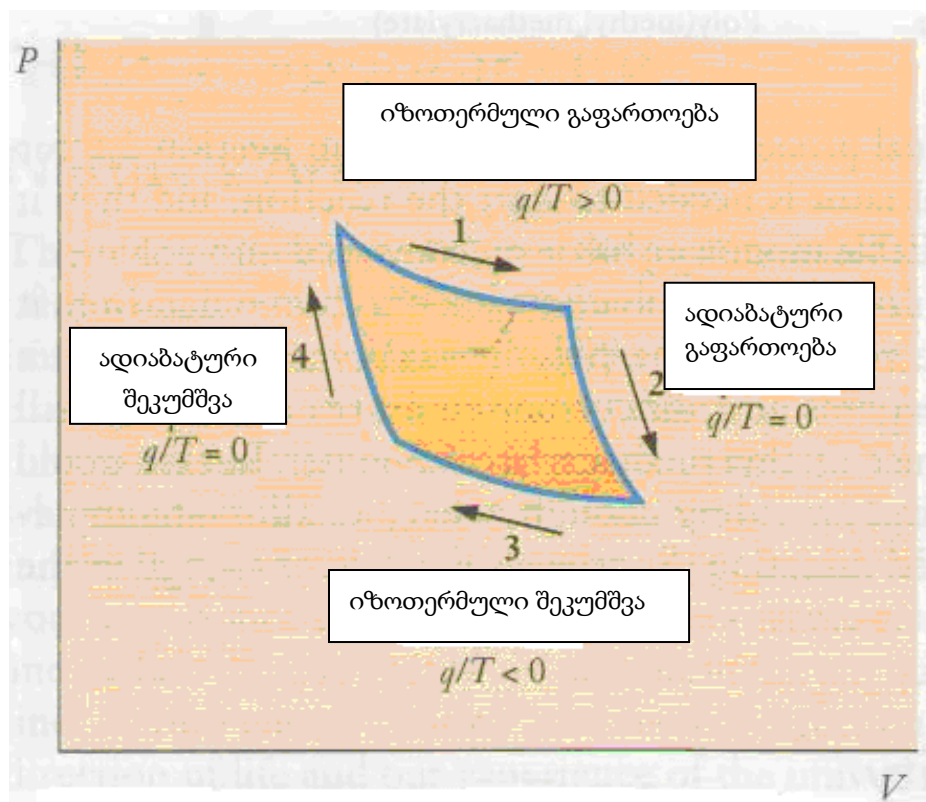
$$\Delta H = q_p$$

როდესაც ΔH უარყოფითია, რეაქცია ეგზოთერმულია და როდესაც დადებითი - ენდოთერმული. ჩვენ გარშემო მიმდინარე პროცესების უმრავლესობა ეგზოთერმულია. ე.ი. არსებობს გარკვეული კავშირი ენთალპიასა და თავისთავადობას შორის. მაგრამ ეს დამოკიდებულება არ არის ექსკლუზიური. ასევე, ზოგიერთი ენდოთერმული რეაქციაც თავისთავად მიმდინარეობს.

მაგალითად, ყინულის დნობა ოთახის ტემპერატურაზე. ასე რომ, შეიძლება დავასკვნათ, რომ გარკვეული გაგებით ეგზოთერმული რეაქციები უფრო ხელსაყრელია. რეაქციის თავისთავადობის წინასწარმეტყველებისათვის შემოტანილია დამატებითი თერმოდინამიკური მდგომარეობის ფუნქცია – ენტროპია.

10.2. ენტროპია

ეს ტერმინი შემოვიდა კარნოს ციკლის განხილვის შედეგად (ნახ. 16). ცხადი გახდა, რომ არსებობს ადრე უცნობი მდგომარეობის ფუნქცია, რადგან q/T -ს ჯამი ჩაკეტილ ციკლში ნულის ტოლია. ამ ახალ ფუნქციას დაარქვეს ენტროპია. მალე დავრწმუნდებით, რომ ენტროპიის ცვლილება სისტემაში და მის გარემოში საშუალებას იძლევა ვიწინასწარმეტყველოთ, იქნება პროცესი თავისთავადი თუ არა.



ნახ.16. კარნოს ციკლი

10.2.1. ალბათობა და თავისთავადი ცვლილება

ალბათობის ცნების დასადგენად განვიხილოთ კამათლის მაგალითი. ალბათობა იმისა, რომ კამათლის გაგორებისას გამოვა რომელიმე რიცხვი, მაგალითად, ოთხიანი, არის ერთი მეექვსედი. ორი კამათლის გაგორებისას რომ გამოვიდეს ორი ოთხიანი, ამის ალბათობა იქნება ერთი ოცდამეთექვსმეტედი. ზოგადად, ალბათობა $= (1/6)^N$, სადაც N არის კამათლის გაგორებათა რიცხვი. მაგრამ ეს დამოკიდებულება არაა ზოგადი. ერთიანი მრიცხველში გვიჩვენებს ერთი კამათლის ცალკეულ კონკრეტულ გაგორებას და ექვსიანი მნიშვნელში გვიჩვენებს, რომ შესაძლებელია კამათლის გაგორებისას გამოვიდეს ექვსი სხვადასხვა რიცხვი. მაგრამ ამ დამოკიდებულებიდან შეიძლება ვიწინასწარმეტყველოთ, რომ ერთი და იგივე რიცხვის გამოსვლა ხუთი კამათლის გაგორებისას იქნება $1/1296$.

ალბათობის მათემატიკის განვითარება ორი მნიშვნელოვანი თვისებით ხასიათდება. პირველი, ის გვიჩვენებს, რომ მოვლენათა ხდომილების ალბათობა დაფუძნებულია ცალკეული მოვლენის ალბათობაზე, რომელსაც ჩვენ შემდეგ ვამრავლებთ. ეს დაკვირვება მნიშვნელოვანი ხდება, როდესაც განვიხილავთ, თუ რამდენი მოლეკულაა ჩართული პროცესში, რომელსაც ჩვენ ვაკვირდებით ბუნებაში ან ლაბორატორიაში. მეორე, გზების რიცხვი, რათა ჩავატაროთ მოწესრიგებული დაკვირვება (მაგალითად, კამათელზე ოთხიანის გამოსვლა) ნაკლებია, ვიდრე გზების რიცხვი უფრო ქაოტური დაკვირვებებისა. თუ მიუყენებთ ამ დაკვირვებებს $\approx 10^{23}$ ნაწილაკის შემცველ მოლეკულათა ნაკრებს, ზუსტად განსაზღვრული განლაგების მიღწევის შანსები დაბალია. წარმოვიდგინოთ ავაგადროს რიცხვის რაოდენობის კამათლები. ალბათობა იმისა, რომ ყოველ მათგანზე გამოვა ოთხიანი, არის $\left(\frac{1}{6}\right)^{6,02 \times 10^{23}}$. ეს რიცხვი უსასრულოდ მცირეა.

10.2.2. ენტროპიის განსაზღვრა

ნაწილაკთა დიდი რიცხვისათვის ალბათობა ხელსაყრელია შემთხვევითი განლაგებებისათვის. ამ აზრის გამოყენებით შეგვიძლია პირობითად განვსაზღვროთ ალბათობა, როგორც სისტემის ქაოტურობის ან უწყესრიგობის ზომა. მაგრამ შეგვიძლია შემოვიტანოთ განსაზღვრა, რომლის გამოყენება შეიძლება მათემატიკურად და მოლეკულურ ასპექტში. ამისათვის მივმართოთ სტატისტიკურ თერმოდინამიკას, სადაც ვიპოვით ამ განსაზღვრის მკაფიო დამატებას. მოვლენათა მოხდენის ალბათობა არ არის იმ გზების რაოდენობა, რომლებითაც ნაწილაკები განლაგდებიან ფიზიკურად, არამედ არის რაოდენობა გზებისა, რომლებითაც ნაწილაკები მიაღწევენ იმავე ენერგიას (ეს ორი ალბათობა ხშირად კორელაციაშია ერთმანეთთან). მოლეკულათა სიჩქარეების მაქსიმალური ბოლცმანის განაწილების განტოლებიდან ცნობილია, რომ ნებისმიერ აირში ოთახის ტემპერატურაზე მისი ზოგიერთი ნაწილაკი მოძრაობს სწრაფად და ზოგიერთი ნელა. მაგრამ ზუსტად ვერ ვიტყვით, თუ რომელი ნაწილაკი მოძრაობს ძალიან სწრაფად და რომელი უფრო ნელა. არის მთელი რიგი გზებისა, სხვადასხვა ნაწილაკებით, რომლებიც ვარაუდობენ სხვადასხვა სიჩქარეებს, რომ ნიმუშს აქვს ერთი და იგივე საერთო ენერგია და, შესაბამისად, ერთი ტემპერატურა. სტატისტიკურ მექანიკაში გზა, რომლითაც ნაწილაკთა კრებულს მიენიჭება მოცემული ენერგია, დაკავშირებულია **მიკრომდგომარეობის** ცნებასთან. მოცემული ენერგიისათვის მიკრომდგომარეობათა რიცხვი აღინიშნება Ω -თი და სისტემის ენტროპია (S) დაკავშირებულია მიკრომდგომარეობათა რიცხვთან განტოლებით

$$S = k_B \ln \Omega$$

აქ k_B არის რიცხვითი მუდმივა, ე.წ. ბოლცმანის მუდმივა. მნიშვნელოვანია, რომ თუ სისტემა ხდება „უფრო ქაოტური“, Ω -ს მნიშვნელობა იზრდება. ასე რომ, სისტემის ენტროპია იზრდება, თუ სისტემა მოძრაობს ნაწილაკთა უფრო ქაოტური განაწილებისაკენ, რადგან ასეთი ქაოტურობა ზრდის მიკრომდგომარეობათა რიცხვს.

10.2.3. პროცესებში ენტროპიის ცვლილებების შეფასება

თუმცა მიკრომდგომარეობის ცნება აბსტრაქტულია, ჩვენ მაინც ვამტკიცებთ, რომ გარკვეული ტიპის ცვლილებები იწვევს ენტროპიის ზრდას (რადგან არსებობს მრავალი ხელმისაწვდომი მიკრომდგომარეობა). განვიხილოთ მყარი სხეულის დნობა სითხის წარმოქმნით. მყარ სხეულში ნაწილაკები უძრავად იკავებენ ადგილებს. ასე რომ, გზების რაოდენობა, რომლითაც მათ შეუძლიათ მიიღონ ენერგია, შეზღუდულია. თხევად ფაზაში ნაწილაკების მოძრაობა ერთმანეთის მიმართ გარკვეული ენერგიის მიღწევის ბევრად უფრო მეტ შესაძლებლობებს ქმნის. ასე რომ, იზრდება მიკრომდგომარეობების რიცხვი და, შესაბამისად, ენტროპიაც. იგივე მოსაზრება შეიძლება მივუყენოთ დუდილს, როდესაც მოლეკულები, რომლებიც სითხეში თავდაპირველად ახლოსაა ერთმანეთთან, მერე ბევრად უფრო აქტიურად არიან განაწილებული აირად ფაზაში. მოლეკულათა ქაოტური მოძრაობის ზრდა შეესაბამება უფრო მეტ მიკრომდგომარეობებს. ასე რომ, ენტროპია იზრდება. სხვა შესაძლო გზა სისტემის ენტროპიის გაზრდისა არის არსებული ნაწილაკების რიცხვის გაზრდა. ამრიგად, ქიმიური რეაქცია, რომლის დროსაც წარმოიქმნება ორი მოლი აირი, მაშინ როცა თავდაპირველად იყო ერთი, იწვევს ენტროპიის ზრდას.

ენტროპია აგრეთვე იცვლება ტემპერატურის ცვლილებით. განვიხილოთ მოლეკულების ნიმუში ექსტრემალურად დაბალ ტემპერატურაზე. ასეთ ნიმუშში ნაკლებადაა ალბათობა მაღალი სიჩქარის მქონე მოლეკულების, რადგან მათ უნდა მიენიჭოთ ენერგიის ძალიან დიდი რაოდენობა. ასე რომ, ცალკეული მოლეკულის სიჩქარე შეზღუდული იქნება მთლიანი შესაძლო ენერგიით. თუ ნიმუშები თბება უფრო მაღალ ტემპერატურაზე, მოლეკულების ნაწილი იმოძრაებს უფრო სწრაფად, რადგან ხელმისაწვდომია უფრო მეტი საერთო ენერგია. უფრო ცხელ სისტემაში არის უფრო მეტი შესაძლებლობა მათი ენერგიის განაწილებისა. ეს მსჯელობა ვრცელდება სიჩქარეთა მთელ განაწილებაზე და მნიშვნელოვანი შედეგია ის, რომ სისტემის გათბობისას ენტროპია იზრდება.

10.3. თერმოდინამიკის მეორე კანონი

დადგენილია, რომ შეუძლებელია სითბოს მთლიანად გარდაქმნა მუშაობაში. ეს არის ერთ-ერთი საშუალება თერმოდინამიკის მეორე კანონის გამოხატვისა. განვიხილოთ სითბო, რომლის ნაკადი განპირობებულია მოლეკულების ქაოტური დაჯახებით და ტემპერატურის ზრდა იწვევს მოლეკულების ქაოტური მოძრაობის ზრდას. ამის საწინააღმდეგოდ, მუშაობა მოითხოვს მასის გარკვეულ მანძილზე გადაადგილებას. გადაადგილების მისაღებად უნდა იყოს მიმართულება დაკავშირებული მოძრაობასთან. და ეს მიმართულება გულისხმობს, რომ არის მოძრაობის წესრიგი. ამიტომ, სითბოს მოძრაობაში გარდაქმნა არის პროცესი, რომელიც მიმართულია ქაოტური მოძრაობიდან მოწესრიგებული მოძრაობისაკენ.

როგორ დავაკავშიროთ ყოველივე ეს ენტროპიასთან? ამისათვის ნათლად უნდა გავიაზროთ, რომ ცვლილებები სამყაროში მოიცავს როგორც სისტემას, ასევე მის გარემოსაც. თუ განვიხილავთ მარტო სისტემას, ვერ გავიგებთ, საერთოდ, თუ როგორ ყალიბდება წესრიგი, ენტროპიის ცნებით თერმოდინამიკის მეორე კანონის გამოსახატავად შევჩერდებით ენტროპიის მთლიან ცვლილებაზე სამყაროსათვის, $\Delta S_{\text{საგყ}}$.

$$\Delta S_{\text{საგყ}} = \Delta S_{\text{სისტ}} + \Delta S_{\text{გარ}}.$$

რადგან ბუნებას გააჩნია ტენდენცია იმოძრაოს უფრო ალბათური მდგომარეობისაკენ, ჩვენ შეიძლება ჩამოვაცალიოთ თერმოდინამიკის მეორე კანონის ეკვივალენტური ფორმა. ნებისმიერი თავისთავადი პროცესის დროს სამყაროს მთლიანი ენერგიის ცვლილება დადებითია $\Delta S_{\text{საგყ}} > 0$. ის, რომ ეს დებულება ეკვივალენტურია ჩვენი საწყისი ვარიანტისა, არ არის ცხადი. მაგრამ ენერგია, რომელიც არ გარდაიქმნება მუშაობაში (პროცესი, რომელიც არ ამცირებს ენტროპიას), გადაეცემა გარემოს სითბოს სახით. ამრიგად, გარემოს ენტროპია იზრდება და სისტემისა და გარემოს მთლიანი ენტროპიის ცვლილება დადებითია.

10.3.1. შედეგები და გამოყენებები

მეორე კანონის ამ გამოხატულების შედეგები შორს მიმავალია ქიმიური რეაქციების და სხვა პროცესების გამოსავლის გამოთვლისა და წინასწარმეტყველებისათვის.

გარემოს შეუძლია შთანთქას სითბოს რაოდენობა, რომელიც ტოლია ΔH -ს მაგრამ გარემო ძალიან დიდი რეზერვუარია. ასე რომ, ეს სითბო ვერ გამოიწვევს ტემპერატურულ ცვლილებას. ეს ნიშნავს, რომ ენტროპიის ცვლილება გარემოსათვის ასე გამოიყურება:

$$\Delta S_{\text{გარ}} = -\frac{\Delta H}{T}$$

ეს სიდიდე სისტემისათვის ΔS -ს ტოლია და თუმცა ჩვენ არ ვიცით მისი მნიშვნელობა, ვიცით, რომ ის უნდა იყოს უარყოფითი. თავისთავადი პროცესის კრიტერიუმი ასეთია:

$$\Delta S_{\text{საშე}} = \Delta S + \Delta S_{\text{გარ}} > 0$$

ეს იქნება სწორი, თუ $\Delta S_{\text{გარ}}$ აბსოლუტური მნიშვნელობა აღემატება ΔS -ს. (გვახსოვდეს, რომ $\Delta S < 0$ და $\Delta S_{\text{გარ}} > 0$). ΔS და ΔH -ს სიდიდეები დამოუკიდებელია ტემპერატურისაგან, მაგრამ $\Delta S_{\text{გარ}}$ მცირდება ტემპერატურის ცვლილებით. ასე რომ, საკმარისად მაღალ ტემპერატურაზე $\Delta S_{\text{საშე}}$ უკვე აღარ იქნება დადებითი და რეაქცია აღარ იქნება თავისთავადი.

10.4. თერმოდინამიკის მესამე კანონი

თერმოდინამიკის მესამე კანონი გვეუბნება, რომ ნებისმიერი ნაერთის სრულყოფილი კრისტალის ენტროპია მიისწრაფის ნულისაკენ თუ ტემპერატურა მიისწრაფის აბსოლუტურ ნულისკენ. მესამე კანონის დამატებითი შედეგია ის, რომ შეუძლებელია აბსოლუტური ნულის მიღწევა, თუმცა მეცნიერები ძალიან ახლოს მივიდნენ ამ სიდიდესთან. რადგან ყველა ნაერთის გაცივება შესაძლებელია ნულთან ახლოს მდებარე ტემპერატურამდე (პრინციპში მაინც), შესაძლებელია

ნებისმიერი ქიმიური ნაერთის ერთი მოლის შეფასება სტანდარტულ პირობებში ენტროპიის ცვლილების განსაზღვრით $0K$ -დან $298 K$ -მდე $1_{\circ}^{\circ}$ წნევისას. ეს პროცესი გვაძლევს **სტანდარტულ მოლურ ენტროპიას**, S° .

რადგან ენტროპია მდგომარეობის ფუნქციაა და რადგან მესამე კანონი საშუალებას იძლევა განვსაზღვროთ ნებისმიერი ნაერთის სტანდარტული მოლური ენტროპიის სიდიდე, ჩვენ შეგვიძლია ამოვხსნათ განტოლება რეაქციის პროცესში ენტროპიის ცვლილებებისათვის.

ჰესის კანონის ანალოგიით,

$$\Delta S^{\circ} = \sum_i \nu_i S^{\circ}(\text{პროდუქტი})_i - \sum_j \nu_j S^{\circ}(\text{რეაგენტი})$$

აქ სტექიომეტრული კოეფიციენტი აღნიშნულია ν -ით და ინდექსები i და j ეხება ცალკეულ პროდუქტს და რეაგენტს, შესაბამისად. ჩვეულებრივ პრაქტიკაში ეს განტოლება გამოიყენება ჰესის განტოლების მსგავსად. განსხვავება ისაა, რომ აქ ჩვენ ვიყენებთ, ენერგიის **აბსოლუტურ** სიდიდეებს ენთალპიის ცვლილებისაგან განსხვავებით წარმოქმნის რეაქციების დროს (ΔH_f°).

10.5. ჯიბსის თავისუფალი ენერგია

თერმოდინამიკა ერთ-ერთი ყველაზე თვალსაჩინო მაგალითია მეცნიერებაში მათემატიკის გამოყენებისა. აქ ჩვენ განვიხილავთ ერთ-ერთი ცნობილი მეცნიერის, ჯიბსის მათემატიკურ მცდელობას. თერმოდინამიკაში მან შემოიტანა ახალი ფუნქცია, რომელსაც ეწოდება **ჯიბსის თავისუფალი ენერგია**, G :

$$G = H - TS$$

მან გაიაზრა, რომ ამ ფუნქციას შეუძლია იწინასწარმეტყველოს, არის თუ არა პროცესი თავისთავადი მუდმივი წნევის და ტემპერატურის პირობებში. ეს შეზღუდვა არის ის, რაც მოითხოვება, რადგან ლაბორატორიული პროცესების უმრავლესობა ამ პირობებში მიმდინარეობს. თუ განვიხილავთ ჯიბსის თავისუფალი ენერგიის ცვლილებას პროცესისათვის, რომელიც მუდმივ ტემპერატურაზე მიმდინარეობს, მივიღებთ

$$\Delta G = \Delta H - \Delta TS$$

10.5.1. თავისუფალი ენერგია და თავისუფალი ცვლილება

როგორ არის დაკავშირებული თავისუფალი ენერგიის ეს ცვლილება პროცესის თავისთავადობასთან? ჩვენ უკვე დავადგინეთ, რომ სისტემის პლუს გარემოს საერთო ენტროპია უნდა იზრდებოდეს თავისთავადი პროცესის დროს. შეიძლება ჩავწეროთ:

$$\Delta S_{\text{საზოგადოება}} = \Delta S_{\text{სისტემა}} + \Delta S_{\text{გარემო}}$$

სისტემის ენტროპიის ცვლილებას ჩვეულებრივ აღნიშნავენ როგორც ΔS -ს, ასე რომ, „სისტ“ ინდექსს გამოვრიცხავთ:

$$\Delta S_{\text{საზოგადოება}} = \Delta S + \Delta S_{\text{გარემო}}$$

გარემოს ენტროპიის ცვლილება განპირობებულია სითბოს ნაკადით და რადგან T მუდმივია, შეიძლება იმის ჩვენება, რომ $\Delta S_{\text{გარემო}}$ მხოლოდ $\Delta S_{\text{გარემო}}/T$ -ია და $q_{\text{გარემო}}$ - ეს არის $q_{\text{სისტემა}}$ მუდმივი წნევის პირობებში $q_{\text{სისტემა}}$ არის ΔH . ამ ცნებების გაერთიანებით ვიღებთ, რომ

$$\Delta S_{\text{გარემო}} = -\frac{\Delta H}{T}$$

ჩავსვათ ეს ΔS -ს განტოლებაში

$$\Delta S_{\text{საზოგადოება}} = \Delta S - \frac{\Delta H}{T}$$

თუ ორივე მხარეს გავამრავლებთ T -ზე, დავინახავთ კავშირს ΔG -თან. შევადაროთ ეს განტოლებას:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

და მივიღებთ, რომ $\Delta G = \Delta H - T\Delta S_{\text{საზოგადოება}}$

ყველა შემთხვევაში T აბსოლუტური ტემპერატურაა. ასე რომ, მისი მნიშვნელობა ყოველთვის დადებითია. ეს ნიშნავს, რომ ბოლო განტოლება უზრუნველყოფს, რომ ΔG -ს ნიშანი ყოველთვის იქნება საწინააღმდეგო $\Delta S_{\text{საზოგადოება}}$ -სი.

ასე რომ, თუ $\Delta S_{\text{სამყ}} \geq 0$ დადებითია, რასაც ადგილი უნდა ჰქონდეს ნებისმიერი თავისთავადი პროცესისას, მაშინ ΔG უნდა იყოს უარყოფითი.

ჯიბსის განტოლება შეიძლება ასევე გამოვიყენოთ ΔH და ΔS -ის როლის გაგების ფორმალიზებისათვის მოცემული რეაქციის თავისთავადობის დადგენისას. ჩვენ უკვე დავადგინეთ, რომ ეგზოთერმულ რეაქციებს ($\Delta H < 0$) უპირატესობა აქვთ ენდოთერმულთან შედარებით და ასევე ის, რომ რეაქციები, სადაც $\Delta S > 0$, უფრო ხელსაყრელია. ჯიბსის განტოლების თანახმად, თუ $\Delta H < 0$ და $\Delta S > 0$, ΔG ყოველთვის უარყოფითია. მაგრამ ყველა თავისთავადი პროცესი არ შეესაბამება ამ სპეციფიკურ დასკვნას. თუ პროცესი ეგზოთერმულია, მაგრამ ენტროპია მცირდება, მაშინ ΔG -ს ნიშანი დამოკიდებულია ტემპერატურაზე. თუ T იზრდება, $-T\Delta S$ წევრის ფარდობითი მნიშვნელობა ასევე იზრდება; ასე რომ, ასეთი პროცესები შეიძლება იყოს თავისთავადი მხოლოდ უფრო დაბალ ტემპერატურაზე, როდესაც ΔH წევრი დომინირებს. პროცესებს, რომლებიც თავისთავად მიმდინარეობენ მხოლოდ უფრო დაბალ ტემპერატურებზე, უწოდებენ **ენტალპიით მართულს**, რადგან ენდოთერმული პროცესებისას, თუ სისტემის ენტროპია მცირდება, ΔG -ს ნიშანი ყოველთვის იქნება დადებითი და პროცესი არასოდეს იქნება თავისთავადი. მაგრამ ისეთი ენდოთერმული პროცესი, როცა ენტროპია იზრდება, შეიძლება იყოს თავისთავადი მაღალ ტემპერატურებზე, როცა $-T\Delta S$ წევრი უფრო მეტია, ვიდრე ΔH წევრი. ასეთ პროცესებს უწოდებენ **ენტროპიით მართულს**.

10.5.2. თავისუფალი ენერგია და მუშაობა

რატომ შემოვიდა ტერმინი **თავისუფალი ენერგია**? შეიძლება ვაჩვენოთ, რომ ჯიბსის თავისუფალი ენერგიის ცვლილება ტოლია სისტემის მიერ შესრულებული მაქსიმალური სასარგებლო მუშაობისა:

$$\Delta G = -w_{\text{max}}$$

მინუს ნიშანი შემოვიდა, რათა იყოს შესაბამისობა იმ შეთანხმებასთან, რომ w არის **სისტემაზე** შესრულებული მუშაობა. ეს დამოკიდებულება გულისხმობს, რომ

ΔH გვიჩვენებს, თუ რამდენი ენერგიაა „თავისუფალი“ ან ხელმისაწვდომი რაიმე სასარგებლოს გასაკეთებლად.

აღვნიშნოთ, რომ მუშაობა არ არის მდგომარეობის ფუნქცია. ასე რომ, მაქსიმალური მუშაობა შესრულდება მხოლოდ მაშინ, თუ პროცესს ჩავატარებთ კონკრეტული გზით. ამ შემთხვევაში მოთხოვნა არის ის, რომ ცვლილება უნდა მოხდეს **შექცევადი გზით**. ეს ნიშნავს, რომ სისტემა ახლოსაა წონასწორობასთან და ცვლადის მცირე ზრდადი ცვლილება სისტემას დააბრუნებს საწყის მდგომარეობაში. მაქსიმალური მუშაობა შესაძლებელია მხოლოდ **შექცევადი პროცესებისას**.

შექცევადი პროცესებისას ნებისმიერი ცვლადის მცირე ზრდადი ცვლილება ვერ აღადგენს საწყის მდგომარეობას. მუშაობის რაოდენობა, ხელმისაწვდომი შეუქცევად პროცესებში, ყოველთვის ნაკლებია, ვიდრე მაქსიმალური მუშაობა. ასე რომ, თუმცა თავისუფალი ენერგიის ცვლილების გამოყენება შესაძლებელია მოცემულ პროცესში მიღებული მუშაობის სიდიდის ზედა ზღვრის დასადგენად, რეალური მუშაობა იქნება მნიშვნელოვან წილად ნაკლები. რეაგენტთა ნარევი, როგორიცაა, მაგალითად, წვის რეაქციებისათვის, ძალზედ შორს იმყოფება წინასწორობისგან. ასეთი სისტემები ძალიან სწრაფად იცვლებიან და სწრაფ ცვლილებებს ახასიათებს ტენდენცია, იყვნენ შეუქცევადი.

10.6. თავისუფალი ენერგია და ქიმიური რეაქციები

თავისუფალი ენერგია მდგომარეობის ფუნქციაა. ასე რომ, სისტემის თავისუფალი ენერგია დამოკიდებულია ისეთ ცვლადებზე, როგორიცაა კონცენტრაცია ან წნევა. ჩვეულებრივ, საჭირო შედარების ჩასატარებლად, სტანდარტული პირობებია 1 ატმოსფერო წნევა და ხსნარის კონცენტრაცია 1 მოლი. თავისუფალი ენერგიის ცვლილება ამ პირობებში არის **სტანდარტული ჯიბის თავისუფალი ენერგიის ცვლილება**, ΔG^0 . თუმცა შესაძლებელია ამ სიდიდის გამოთვლა ΔH^0 და S^0 -ის გამოყენებით მოცემულ ტემპერატურაზე, მაგრამ უფრო მოსახერხებელი გზა თავისუფალი ენერგიის გამოსათვლელად მრავალი

რეაქციისათვის არის იმ ფორმულირების გამოყენება, რომელიც ჰესის კანონის ანალოგიურია:

$$\Delta G^0 = \sum_i \nu_i G_f^0 (\text{პროდუქტი}) - \sum_j \nu_j G_f^0 (\text{რეაგენტი})$$

აქ ჩვენ ისევ ვიყენებთ წარმოქმნის რეაქციის განმარტებას. აღსანიშნავია, რომ $\Delta G_f^0 = 0$ სტანდარტულ მდგომარეობაში მყოფი ელემენტებისათვის, იმავე მოსაზრებით, რომ მათი წარმოქმნის სითბოები ნულის ტოლია. რადგანაც წარმოქმნის რეაქციაში გამოყენებულია ელემენტები მათ სტანდარტულ მდგომარეობაში, რათა განისაზღვროს რეაგენტები, ელემენტის წარმოქმნის რეაქციაში იქნება ერთი და იგივე ქიმიური ნაწილაკები როგორც რეაგენტი, ასევე როგორც პროდუქტი. ცხადია, ეს პროცესი ვერ შეცვლის თერმოდინამიკური მდგომარეობის ვერცერთ ფუნქციას.

11. ქიმიური კინეტიკა

ამ თავის შესწავლის შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

- განსაზღვროს ქიმიური რეაქციის სიჩქარე და გამოხატოს სიჩქარე ცალკეული რეაგენტების და პროდუქტების კონცენტრაციებით;
- გამოიყენოს საწყისი სიჩქარეების მეთოდი, რათა დაადგინოს სიჩქარის კანონები ექსპერიმენტული მონაცემებიდან;
- გამოიყენოს გრაფიკული მეთოდები სიჩქარის კანონების დასადგენად;
- ახსნას განსხვავება ელემენტარულ რეაქციებსა და მრავალსაფეხურიან რეაქციებს შორის;
- იპოვოს სიჩქარის კანონი, ნაწინასწარმეტყველები ცალკეული რეაქციის მექანიზმისათვის;
- მოლეკულურ დონეზე ახსნას არენიუსის განტოლების მნიშვნელობა;
- გამოთვალოს რეაქციის აქტივაციის ენერგია ექსპერიმენტული მონაცემებიდან;
- ახსნას კატალიზატორის როლი პრაქტიკული ქიმიური რეაქციებისათვის.

11.1. ქიმიური რეაქციის სიჩქარეები

11.1.1. სიჩქარის და რეაქციის სიჩქარის ცნება

გადაადგილებისას საშუალო სიჩქარე ასე განისაზღვრება:

$$\text{საშუალო სიჩქარე} = \frac{\text{განვლილი მანძილი}}{\text{დახარჯული დრო}}$$

ამ თანაფარდობაში არის წინსვლის (გავლილი მანძილი) შეფარდება იმ დროსთან, რაც ამ წინსვლას ჰკირდება. რადგან მანძილი იზომება ნულიდან (საწყისი წერტილიდან) სვლის ბოლომდე, მანძილის ცვლილება შეიძლება აღვნიშნოთ როგორც Δd . შესაბამისად, დროის ცვლილება იქნება Δt და

$$\text{საშუალო სიჩქარე} = \frac{\Delta d}{\Delta t}$$

როგორ მივუყენოთ ეს თანაფარდობა ქიმიურ რეაქციებს?

ჩვენ გვჭირდება რეაქციის სვლის შეფარდება რეაქციის დროსთან. ქიმიური რეაქციისას იცვლება რეაგენტების იდენტურობა და არა გავლილი მანძილი. ასე რომ, ქიმიური რეაქციის სიჩქარის დასადგენად უნდა გაიზომოს რეაგენტების შემცველობის ცვლილება, რასაც ადგილი აქვს რეაქციის მსვლელობისას. ჩვეულებრივ ეს ხდება კონცენტრაციების გაზომვით. ამრიგად, **რეაქციის სიჩქარე** – ეს არის კონცენტრაციის ცვლილების შეფარდება რეაქციის დროზე.

$$\text{საშუალო სიჩქარე} = \frac{\text{კონცენტრაციის ცვლილება}}{\text{რეაქციის დრო}}$$

განვსაზღვროთ ერთეულები ამ თანაფარდობაში. ჩვეულებრივ, კონცენტრაცია იზომება მოლარობით, ანუ $\text{მოლი} \times \text{ლ}^{-1}$ და დრო წამებში, ასე რომ, სიჩქარის ერთეული, ჩვეულებრივ, არის $\text{მოლი} \times \text{ლ}^{-1} \text{წმ}^{-1}$. მათემატიკურად ეს ფარდობა შეიძლება გამოვსახოთ კომპაქტური ფორმით კვადრატული ფრჩხილების გამოყენებით, რათა აღვნიშნოთ კონცენტრაცია ან მოლარობა

$$\text{საშუალო სიჩქარე} = \frac{\Delta[\text{ნივთიერების}]}{\Delta t}$$

რეაქციის სიჩქარის გაანგარიშებისას იბადება კითხვა, რომელი სიჩქარე უნდა გავზომოთ: პროდუქტის წარმოქმნის თუ რეაგენტების დაშლის. პასუხი ასეთია: ერთ-ერთი, მაგრამ ამის თანმიმდევრული შესრულება შეიძლება მხოლოდ რეაქციის სტექიომეტრიის გათვალისწინებით.

თუ ვზომავთ პროდუქტის კონცენტრაციის ზრდას, რეაქციის სიჩქარე, როგორც წესი, დადებითი სიდიდეა. როცა ვაკვირდებით რეაგენტის კონცენტრაციის **შემცირებას**, უნდა გამოვიყენოთ ნიშანი მინუსი, რათა მივიღოთ სიჩქარის დადებითი მნიშვნელობა. ასე რომ, რეაქცია შეიძლება განისაზღვროს ასე:

$$\text{სიჩქარე} = \frac{\Delta[\text{პროდუქტი}]}{\Delta t}$$

ან

$$\text{სიჩქარე} = - \frac{\Delta[\text{რეაგენტი}]}{\Delta t}$$

11.1.2. საშუალო და მყისიერი სიჩქარე

განასხვავებენ ორი სახის რეაქციის სიჩქარეს. როდესაც ლაპარაკია საშუალო სიჩქარეზე, კინეტიკურ მრუდზე (კონცენტრაციის დამოკიდებულებას დროზე) ზომავენ ორ კონცენტრაციას ორ სხვადასხვა დროს, რომლებიც გაყოფილია სასრული განსხვავებით და ხაზის დახრა იძლევა სიჩქარეს. მყისიერი სიჩქარე ეხება სიჩქარეს კონკრეტულ მომენტში და ის მოცემულია მრუდის მხებით (ტანგენსით) და განისაზღვრება კონცენტრაციის ცვლილებით დროში.

11.2. სიჩქარის კანონები და სიჩქარეების კონცენტრაციული დამოკიდებულება

11.2.1. სიჩქარის კანონი

მრავალი ქიმიური რეაქციის შესწავლამ აჩვენა, რომ რეაქციის სიჩქარის დამოკიდებულება კონცენტრაციაზე ხშირად ემორჩილება მარტივ მათემატიკურ კანონს. ეს შეიძლება შეჯამდეს მათემატიკურ განტოლებაში, რომელიც ცნობილია როგორც სიჩქარის კანონი. არსებობს ამ კანონის ორი ფორმა და ჩვენ დავიწყებთ დიფერენციალური სიჩქარის კანონით. რეაქციისათვის x და y ნაერთებს შორის რეაქციის სიჩქარე ჩვეულებრივ აღიწერება განტოლებით

$$\text{სიჩქარე} = k[x]^m[y]^n,$$

სადაც k არის სიჩქარის მუდმივა, $[x]$ და $[y]$ რეაგენტების კონცენტრაცია, m და n ჩვეულებრივ ან მთელი რიცხვებია, ან მთელის ნახევარი. m და n რეალური მნიშვნელობები შეიძლება გაიზომოს ექსპერიმენტულად. (ზოგიერთ შემთხვევაში, ეს სიდიდეები შეიძლება დაუკავშირდეს სტექიომეტრულ კოეფიციენტებს, მაგრამ არა ყოველთვის!) ექსპერიმენტულად განსაზღვრული ხარისხის მაჩვენებლები, ამ შემთხვევაში m და n , განიხილება როგორც რეაქციის რიგი. მაგალითად, თუ $m = 1$, რეაქცია პირველი რიგისაა რეაგენტ X -თვის; თუ $m = 2$, რეაქცია მეორე რიგისაა. იშვიათია, თუ ხარისხის მაჩვენებელი სიჩქარის კანონში მეტია ორზე. როდესაც სიჩქარის კანონი დამოკიდებულია ერთზე მეტი რეაგენტის კონცენტრაციაზე,

შეგვიძლია განვასხვავოთ რეაქციის საერთო რიგი და რიგი ცალკეული რეაგენტების მიმართ. ამდენად, სიჩქარის კანონი

$$\text{სიჩქარე} = K[A][B]$$

მთლიანად მეორე რიგისაა, მაგრამ პირველი რიგისაა A რეაგენტის, ისევე როგორც B რეაგენტის მიმართ.

სიჩქარის მუდმივა იძლევა მნიშვნელოვან ინფორმაციას ქიმიური რეაქციის კინეტიკის შესახებ. სიჩქარის მუდმივას სიდიდით მსჯელობენ, არის რეაქცია სწრაფი თუ არა. თუ სიჩქარის მუდმივა მცირე სიდიდისაა, რეაქცია ნელია და საწინააღმდეგოდ, მაღალი სიჩქარის მუდმივა მიუთითებს სწრაფ რეაქციაზე. ქიმიური რეაქციებისათვის სიჩქარის მუდმივას დიაპაზონი გავრცობილია რამდენიმე რიგის ფარგლებში. აღსანიშნავია ისიც, რომ სიჩქარის მუდმივა დამოკიდებულია ტემპერატურაზე.

სიჩქარის მუდმივას ერთეულები დამოკიდებულია რეაქციის მთლიან რიგზე. ჩვენ აღვნიშნეთ, რომ სიჩქარის ერთეულია $\text{ლ მოლი}^{-1} \text{წმ}^{-1}$, როცა კონცენტრაცია მოცემულია, როგორც მოლი ლ^{-1} . სიჩქარის მუდმივას ერთეულები ისე უნდა შევარჩიოთ, რომ მათ გააწონასწორონ სიჩქარის კანონი. პირველი რიგის რეაქციისათვის ეს ერთეული იქნება წმ^{-1} , ხოლო მეორე რიგის რეაქციისთვის $\text{ლ მოლი}^{-1} \text{წმ}^{-1}$.

11.2.2. სიჩქარის კანონის განსაზღვრა

როგორც აღვნიშნეთ, სიჩქარის კანონი შეიძლება განისაზღვროს ექსპერიმენტულად. ამისათვის არსებობს ორი გზა. აქ ჩვენ განვიხილავთ მდგომარეობას, რომელიც მდგომარეობს რეაქციის საწყისი სიჩქარის გაზომვაში როდესაც ვცვლით სხვადასხვა რეაგენტების კონცენტრაციებს. სიმარტივისთვის განვიხილოთ რეაქცია, რომელშიც მხოლოდ ერთი რეაგენტია - A . ასეთი რეაქციის სიჩქარე განისაზღვრება როგორც სიჩქარის მუდმივა გამრავლებული A -ს კონცენტრაციაზე რაღაც ხარისხში:

$$\text{სიჩქარე} = K[A]^n.$$

გაითვალისწინეთ, რომ რეაქციის რიგი (n), როგორც წესი, მთელი რიცხვია და იშვიათად აღემატება ორს. ეს გვაძლევს სამ სხვადასხვა რიგს: 0, 1 და 2. თითოეული შემთხვევისთვის, თუ A -ს კონცენტრაცია ორმაგდება, სიჩქარე იცვლება მარტივი და პროგნოზირებადი გზით.

1. თუ $n = 0$, A -ს კონცენტრაციის გაორმაგება არ ცვლის სიჩქარეს საერთოდ, რადგან ნებისმიერი სიდიდით ნულოვან ხარისხში ტოლია 1-ის.
2. თუ $n = 1$, A -ს კონცენტრაციის გაორმაგება ორჯერ ზრდის სიჩქარეს.
3. თუ $n = 2$, A -ს კონცენტრაციის გაორმაგება ოთხჯერ ზრდის სიჩქარეს.

რეაქციის სხვა რიგები ასევე შესაძლებელია და იძლევა უფრო რთულ დამოკიდებულებას. მაგრამ მოყვანილი სამი შემთხვევა მოიცავს რეაქციების დიდ უმრავლესობას.

თუ განვიხილავთ ორი რეაგენტის შემთხვევას, ამ დროს რეაქციის კანონში სამი უცნობია: სიჩქარის მუდმივა და ორი რეაქციის რიგი. ამ სამი პარამეტრის სიდიდეების განსაზღვრისათვის უნდა ჩავატაროთ სულ ცოტა სამი ექსპერიმენტი. როდესაც სისტემა დამოკიდებულია რამდენიმე ცვლადზე, კარგი იდეაა განვაცალკევოთ ერთი ცვლადის გავლენა დანარჩენებზე. ასეთ შემთხვევაში ერთი რეაგენტის კონცენტრაციას ინარჩუნებენ მუდმივს და ცვლიან დანარჩენებს, რათა დაადგინონ მათი გავლენა სიჩქარეზე.

11.3. მთელრიცხვიანი სიჩქარის კანონები

ზემოთ აღნიშნული მეთოდი საშუალებას იძლევა ვიწინასწარმეტყველოთ რეაქციის სიჩქარე კონცენტრაციათა მოცემული ნაკრებისათვის. მაგრამ რადგან რეაგენტების კონცენტრაციები იცვლება დროში, სიჩქარის კანონი არ მოგვცემს საშუალებას კონცენტრაციის ან სიჩქარის პროგნოზირებისა უფრო გვიან მომენტში. ამისათვის უნდა შევადგინოთ განტოლება, რომელიც დაწვრილებით აღწერს, თუ როგორ იცვლება კონცენტრაცია როგორც დროის ფუნქცია. ეს განტოლება, რომელსაც ეწოდება, მთელრიცხვიანი სიჩქარის განტოლება, თავისთავად

გამოიყვანება სიჩქარის კანონიდან. თუ ვიცით სარეაქციო სისტემაში ყველა კონცენტრაცია დროის ნებისმიერ მომენტში და ვიცით, თუ როგორ იცვლება რეაქციის სიჩქარე დროში, შეგვიძლია ვიწინასწარმეტყველოთ, რა კონცენტრაცია იქნება დროის რაღაც უფრო გვიან მომენტში.

მთელრიცხვიანი სიჩქარის კანონის სახე დამოკიდებულია რეაქციის რიგზე. თუ ვიცით ეს კანონი რამდენიმე ცნობილი რეაქციის რიგისათვის, ეს შეგვიძლია გამოვიყენოთ როგორც მოდელი მონაცემების შესადარებლად.

ნულოვანი რიგის სიჩქარის კანონი

უმარტივესი სიჩქარის კანონი ასახავს ნულოვანი რიგის რეაქციას:

$$\text{სიჩქარე} = K[A]^0 = K$$

$$\text{ამ შემთხვევაში } [A]_t = [A]_0 - Kt \text{ ანუ } [A]_t = -Kt + [A]_0$$

შევადაროთ ეს წრფის განტოლებას $y = mx + b$.

თუ ავაგებთ გრაფიკს $[A]$ როგორც t -ს ფუნქციას, მივიღებთ სწორ ხაზს, რომლის დახრა (m) ტოლია $-K$ -სი და გადაკვეთა y ღერძთან (b) ტოლი იქნება $[A]_0$ -ს.

პირველი რიგის სიჩქარის განტოლება

პირველი რიგის რეაქციისათვის ერთი რეაგენტით, A , მთელრიცხვიანი სიჩქარის კანონი მოცემულია განტოლებით:

$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -Kt,$$

ანუ

$$[A]_t = [A]_0 e^{-Kt}$$

$[A]_0$ – რეაგენტის საწყისი კონცენტრაციაა, როცა $t = 0$. თუ ვიცით სიჩქარის მუდმივა და საწყისი კონცენტრაცია, შეგვიძლია ვიწინასწარმეტყველოთ კონცენტრაცია დროის ნებისმიერ შემდგომ მომენტში

მეორე რიგის სიჩქარის კანონი

მეორე რიგის რეაქციებისათვის მთელრიცხვიანი სიჩქარის კანონის მათემატიკური ფორმა მთლიანად განსხვავდება პირველი რიგის რეაქციიდან [A] რეაგენტის ხარჯვისათვის კანონი ასეთია:

$$\frac{1}{[A]_t} - \frac{1}{[A]_0} = kt$$

ეს განტოლება გვაძლევს მეორე რიგის რეაქციას, როგორც დროის ფუნქციის მათემატიკურ მოდელს. მეორე რიგის კინეტიკისათვის მთელრიცხვიანი სიჩქარის კანონის ფორმა მყისიერად ვარაუდობს სწორხაზოვნებას. ე.ი. დამოკიდებულება $1/[A] - t$ უნდა იყოს წრფივი.

ნახევრად დაშლის პერიოდი ეს არის დრო, როდესაც რეაგენტის კონცენტრაცია ორჯერ მცირდება. თუმცა ეს რაოდენობა შეიძლება განისაზღვროს ნებისმიერი რეაქციისათვის, მაგრამ ის განსაკუთრებით მნიშვნელოვანია პირველი რიგის რეაქციებისათვის.

განმარტების თანახმად, როდესაც რეაქცია მიმდინარეობს ერთი ნახევარ პერიოდით $t_{1/2}$, რეაგენტის კონცენტრაცია $[A] = \frac{1}{2} [A]_0$. ამრიგად,

$$\ln \left(\frac{\frac{1}{2} [A]_0}{[A]_0} \right) = \ln \left(\frac{[A]_0}{2[A]_0} \right) = -Kt_{1/2}$$

ანუ

$$\ln \frac{1}{2} = -Kt_{1/2}, \quad \ln 1 - \ln 2 = -Kt_{1/2}, \quad \ln 2 = Kt_{1/2}.$$

ანუ

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{K} = \frac{0,693}{K}$$

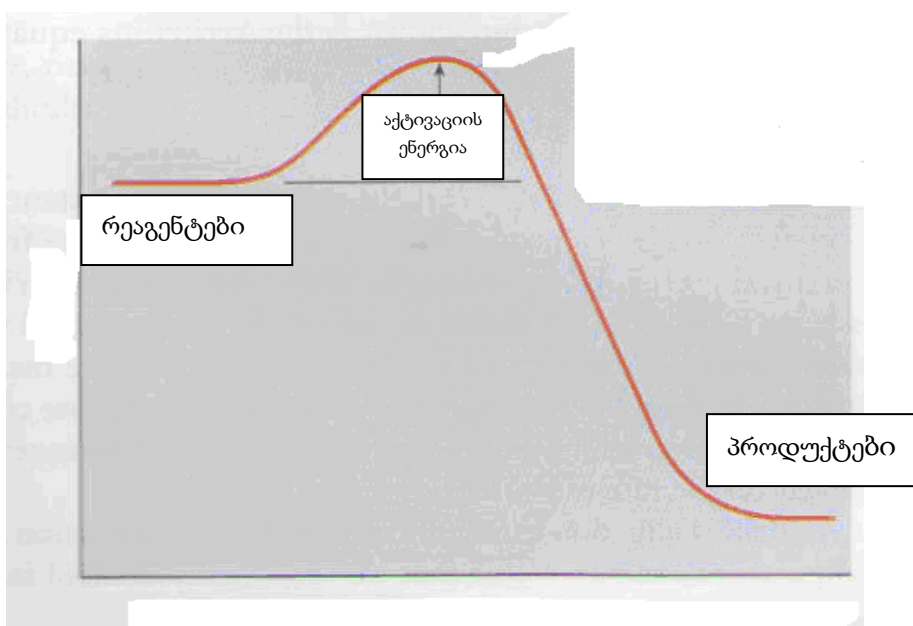
ეს განტოლება აკავშირებს ნებისმიერი პირველი რიგის რეაქციის ნახევარ პერიოდს მისი სიჩქარის მუდმივასთან. რადგან K არ არის დამოკიდებული ნივთიერების რაოდენობაზე, ასევე $t_{1/2}$ -ც. ეს სიდიდე ჩვეულებრივ გამოიყენება ბირთვული დაშლის კინეტიკაში.

11.4. ტემპერატურა და კინეტიკა

მოლეკულურ-კინეტიკური თეორიის თანახმად, მოლეკულები რეაგირებენ ერთმანეთთან მხოლოდ დაჯახებებით. ასე რომ, საჭიროა ორი მოლეკულის დაჯახება, რათა მოხდეს რეაქცია. ყველა დაჯახება, ცხადია, არ გამოიწვევს ქიმიურ რეაქციას. მაგალითად, ჰაერში O_2 და N_2 მოლეკულები სისტემატურად ეჯახებიან ერთმანეთს, მაგრამ რეაქცია არ მიდის. რა დამატებითი ცვლილებები უნდა გავითვალისწინოთ რეაქციისათვის? ერთ-ერთი ვარიანტი არის დაჯახებული მოლეკულების კინეტიკური ენერგია. ნელა მოძრავი მოლეკულების დაჯახება არ გამოიწვევს რეაქციას, მაშინ როცა სწრაფად მოძრავი მოლეკულები რეაგირებენ ერთმანეთთან.

გავიხსენოთ ბოლცმანის განაწილება, რომელიც აღწერს მოლეკულების სიჩქარეებს ტემპერატურის მიხედვით. მაღალ ტემპერატურაზე მოლეკულების მეტი ნაწილი მოძრაობს მაღალი სიჩქარეებით. ასე რომ, მაღალ ტემპერატურაზე რეაქციებს აქვთ ტენდენცია მიმდინარეობდნენ უფრო სწრაფად, რადგან მეტ დაჯახებას რეაგენტებს შორის აქვს მაღალი ენერგია რეაქციის მოსახდენად.

რეაქციის მოსახდენად საჭიროა ენერგიის მიწოდება, რათა დაიწყოს ბმების გახლეჩა რეაგენტებში. სტანდარტული თერმოდინამიკური მონაცემები საშუალებას გვაძლევს ვიწინასწარმეტყველოთ იქნება რეაქცია ეგზოთერმული თუ ენდოთერმული. მაგრამ რეაგენტების პროდუქტად გარდაქმნისათვის რეაქციამ პირველად უნდა გადალახოს ენერგიის ზღურბლი, რომელსაც **აქტივაციის ენერგია** ან **აქტივაციის ბარიერი** ეწოდება. სწრაფად მოძრავი ნაწილაკების დაჯახებები უზრუნველყოფს საკმარის კინეტიკურ ენერგიას ამ ბარიერის გადასალახავად. რაც უფრო მაღალია ეს ბარიერი, მით უფრო მეტი კინეტიკური ენერგიაა საჭირო. ასე რომ, აქტივაციის ენერგია განსაზღვრავს იმას, თუ როგორი უნდა იყოს ენერგია, რომ გამოიწვიოს რეაქცია (ნახ. 17).



ნახ.17. პოტენციური ენერგიის ცვლილება ეგზოთერმული რეაქციის დროს

11.4.1. არენიუსის კანონი

რეაქციების უმრავლესობისათვის ტემპერატურული დამოკიდებულება ცნობილია, როგორც არენიუსის კანონი.

$$K = Ae^{-E_a/RT}$$

E_a – აქტივაციის ენერგია, R – აირების უნივერსალური მუდმივა, T – ტემპერატურა (კელვინებში) და A – პროპორციულობის კოეფიციენტი, ე.წ. სიხშირის მამრავლი ანუ ექსპონენტის წინა მამრავლი. ეს დამოკიდებულება წრფივია: E_a -ს ზრდით K მცირდება და უფრო დაბალი სიჩქარის მუდმივა შეესაბამება უფრო ნელ რეაქციას.

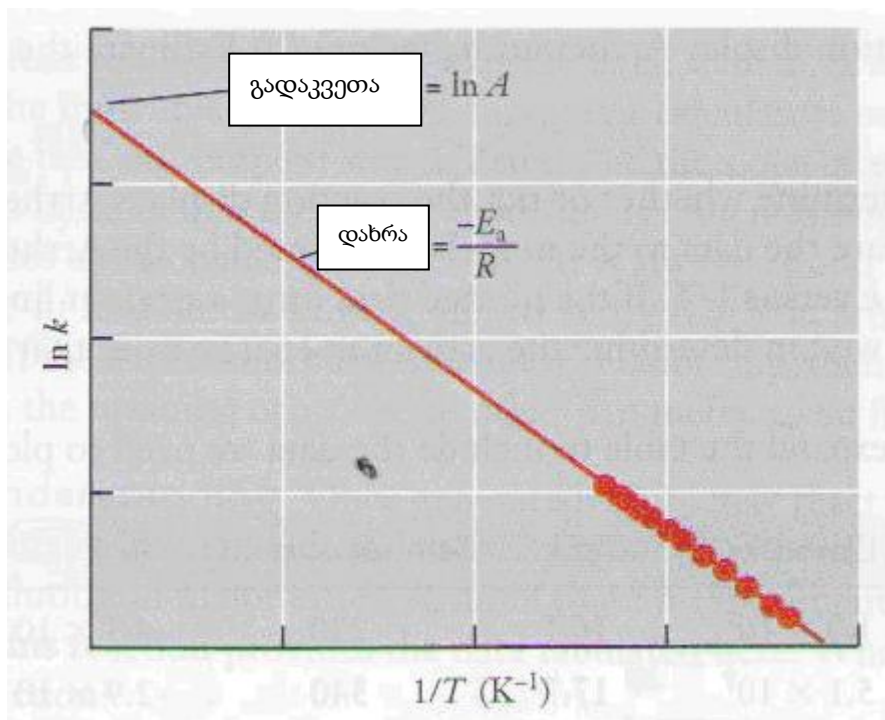
ამ განტოლებით შეიძლება აქტივაციის ენერგიის ექსპერიმენტული განსაზღვრა. თუ განტოლების ორივე მხარეს გავალოგარიტმებთ, მივიღებთ

$$\ln K = -\frac{E_a}{RT} + \ln A$$

ანუ

$$\ln K = -\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} \right) + \ln A$$

K -ს გასაზომად გვჭირდება სულ ცოტა ორი ტემპერატურა. ეს განტოლება ანალოგიურია $y = mx + b$. ასე რომ, გრაფიკი $\ln K - 1/T$ იქნება სწორი ხაზი, რომლის დახრაც E_a/R . R -ის მნიშვნელობა ცნობილია. ასე რომ, გრაფიკის დახრიდან შეგვიძლია შევაფასოთ აქტივაციის ენერგია (ნახ. 18).



ნახ.18. არენიუსის განტოლების გრაფიკული გამოსახულება

11.5. რეაქციის მექანიზმები

რეაქციის მექანიზმი ეს არის ნაკრები ერთი ან მეტი მოლეკულური საფეხურისა, რომლებითაც რეაგენტები გარდაიქმნება პროდუქტებად.

11.5.1. ელემენტარული საფეხურები და რეაქციის მექანიზმები

რეაქციის მექანიზმის ცალკეულ საფეხურებს ელემენტარული საფეხურები ეწოდება. ჩვეულებრივ, ადგილი აქვს მხოლოდ სამი სახის ელემენტარულ საფეხურს ერთი, ორი ან სამი მოლეკულის მონაწილეობით. საფეხურს ერთი

რეაგენტის მონაწილეობით ეწოდება **მონომოლეკულური**, ორი და სამი რეაგენტის მონაწილეობით კი – **ბიმოლეკულური** და **ტრიმოლეკულური**, შესაბამისად.

მნიშვნელოვანია იმის აღნიშვნა, რომ რეაქციის მექანიზმის დაწერისას, თითოეული განტოლება ყოველთვის ელემენტარული საფეხურია. რეაქციის მექანიზმს აქვს ორი მნიშვნელოვანი მახასიათებელი: 1. ქიმიურ ნაწილაკებს, რომლებიც წარმოიქმნება ერთ საფეხურზე და იხარჯება შემდეგში, ეწოდება **შუალედური ან მორეაგირე შუალედური**. მრავალი მექანიზმი შეიცავს ერთ ან მეტ შუალედურ ნაწილას; 2. როდესაც მექანიზმის ნაბიჯები სწორადაა შეჯამებული, ისინი იძლევა ჯამური რეაქციის სტექიომეტრიას.

რადგან ადგილი აქვს დაჯახებათა დიდ რაოდენობას აირადი ფაზის რეაქციის ნებისმიერ მომენტში და მორეაგირე შუალედური ნაწილაკების სწრაფ წარმოქმნას და დაშლას, რეაქციის მექანიზმის ზუსტი დადგენა შეუძლებელია. მაგრამ გამომდინარე რეაქციის სიჩქარეებიდან და სავარაუდო მექანიზმის შედარებით ექსპერიმენტულ სიჩქარეებთან და საერთო სტექიომეტრიასთან, შეგვიძლია ვივარაუდოთ მექანიზმი, რომელიც შეესაბამება მიღებულ მონაცემებს.

11.6. კატალიზი

კატალიზატორი არის ნივთიერება, რომელიც ცვლის რეაქციის სიჩქარეს, მაგრამ თვითონ უცვლელი რჩება.

11.6.1. ჰომოგენური და ჰეტეროგენული კატალიზი

კატალიზატორები ორი სახისაა: **ჰომოგენური კატალიზატორები** იმავე ფაზაშია, რომელშიც მორეაგირე ნივთიერებებია, მაშინ, როცა **ჰეტეროგენული კატალიზატორები** განსხვავებულ ფაზაშია. აირადი ფაზის რეაქციებში ჰეტეროგენული კატალიზატორი, როგორც წესი, მყარი ზედაპირია. აღსანიშნავია, რომ ჰეტეროგენულ რეაქციაში კატალიზატორის ქმედების ეფექტურობა

დამოკიდებულია შემხები ზედაპირის ფართზე. რაც მეტია შეხების ზედაპირი, მით უფრო მაღალია კატალიზური რეაქციის სიჩქარე.

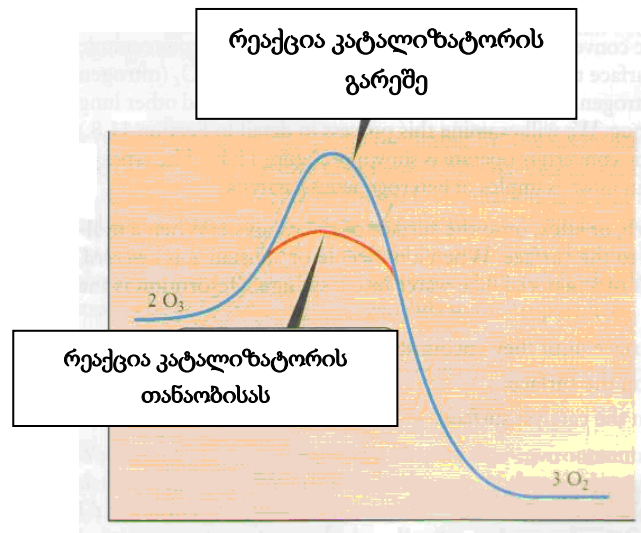
მაგალითად, ატმოსფერული ოზონის კატალიზური დაშლა შეიცავს აირადი ფაზის რეაქციებს. ასე რომ, ეს არის ჰომოგენური კატალიზის მაგალითი. და ყველაზე მნიშვნელოვანი კატალიზატორი ამ პროცესისათვის არის ქლორი, რომელიც საკმაოდ რაოდენობითაა სტრატოსფეროში.

ჰეტეროგენული კატალიზი გარკვეულ როლს თამაშობს როგორც ატმოსფეროს, ასევე ტროპოსფეროს ქიმიაში. მაგალითად, ავტომანქანებში გამოიყენება ფოროვანი კერამიკული მასა გამონაბოლქვი აირების შთანთქმის მიზნით.

11.6.2. კატალიზის მოლეკულური ასპექტი

ქიმიური რეაქციის აქტივაციის ენერგია მნიშვნელოვან როლს ასრულებს კინეტიკაში. კატალიზატორი ცვლის რეაქციის სიჩქარეს, წარმოქმნის რა რეაქციის მიმდინარეობის ახალ გზას, რომელიც ამცირებს აქტივაციის ენერგიას.

ადრე აღვნიშნეთ, რომ აქტივაციის ბარიერის ენერგია, ჩვეულებრივ, მიიღება სწრაფად მოძრავი ნაწილაკების დაჯახებებიდან. როდესაც სისტემაში შეაქვთ კატალიზატორი, საჭირო ენერგიის რაოდენობა მცირდება და მოლეკულების უმეტეს ნაწილს გააჩნიათ სიჩქარე, რომელიც საკმაოდ მაღალია, რათა უზრუნველყოს საჭირო ენერგია. ასე რომ, კატალიზატორის გავლენა მოლეკულურ დონზე ამცირებს აქტივაციის ენერგიას და საერთო შედეგია რეაქციის სიჩქარის გაზრდა (ნახ. 19).



ნახ.19. სისტემის აქტივაციის ენერგიის ცვლილება კატალიზატორის გავლენით

12. ქიმიური წონასწორობა

ამ თავის შესწავლის შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

- ახსნას, რომ წონასწორობა დინამიკურია და რომ წონასწორობისას პირდაპირი და შებრუნებული რეაქციების სიჩქარეები ტოლია. ჩამოაყალიბოს ეს იდეები საკუთარი სიტყვებით;
- დაწეროს წონასწორობის მუდმივას განტოლება ნებისმიერი შექცევადი რეაქციისათვის;
- გამოთვალოს წონასწორობის მუდმივა ექსპერიმენტული მონაცემებიდან;
- გამოთვალოს წონასწორობის მუდმივა საწყისი მონაცემებიდან და წონასწორობის მუდმივას რიცხვითი მნიშვნელობიდან.;
- გამოთვალოს მოლური ხსნადობა K_{sp} -დან ან პირიქით;
- დაწეროს წონასწორობის მუდმივები სუსტი მჟავების და სუსტი ფუძეების დისოციაციისათვის და გამოიყენოს ისინი pH -ის ან იონიზაციის ხარისხის გამოსათვლელად;
- გამოთვალოს სისტემის ახალი წონასწორობის მუდმივა მიღებული დატვირთვის შემდეგ.

12.1. ქიმიური წონასწორობა

12.1.1. შექცევადი და შეუქცევადი რეაქციები

თუ მოვითავსებთ წყლით სავსე ჭიქას და დავტოვებთ მას ღამით, დილით ვნახავთ ან ცარიელ ჭიქას ან დადაბლებულ წყლის დონეს. ე.ი. წყლის ნაწილი აორთქლდა. თუ იმავე ცდას გავიმეორებთ თავდახურული ჭიქით, ვნახავთ, რომ მთელი წყალი ჭიქაში ადგილზეა. ასეთ დახურულ სისტემაში დამყარდა დინამიკური წონასწორობა წყალსა და წყლის ორთქლს შორის. წონასწორობისას, სიჩქარე, რომლითაც მოლეკულები ტოვებენ სითხის ზედაპირს, ტოლია სიჩქარისა, რომლითაც ისინი უბრუნდებიან ამ ზედაპირს. აორთქლების სიჩქარის განსაზღვრა შეიძლება მოლეკულური ენერგიების განაწილებით სითხეში.

მხოლოდ ის მოლეკულები დაძლევენ მოლეკულათაშორის ძალებს და გადავლენ ორთქლის ფაზაში, რომელთაც აქვთ საკმარისი კინეტიკური ენერგია. თუ დავუშვებთ, რომ წყლის ტემპერატურა მუდმივია, აორთქლების სიჩქარე იქნება მუდმივი. რაც შეეხება კონდენსაციის სიჩქარეს, ყოველ მომენტში აირადი ფაზის მოლეკულები ეჯახება სითხის ზედაპირს და არის გარკვეული ალბათობა იმისა, რომ ისინი დარჩებიან ამ ზედაპირზე და დაუბრუნდებიან თხევად ფაზას.

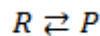
სიჩქარე, რომლითაც აირის მოლეკულები ეჯახებიან სითხის ზედაპირს, პროპორციულია აირის მოლეკულების რაოდენობისა, ანუ აირის წნევისა. თუ თავიდან არის მარტო სითხე, კონდენსაციის სიჩქარე ნულის ტოლია. მაგრამ რადგან ადგილი აქვს აორთქლებას, მცირე დროის შემდეგ კონტეინერში იქნება გარკვეული რაოდენობის ორთქლი, დაიწყება კონდენსაცია. სანამ აორთქლების სიჩქარე მეტია კონდენსაციის სიჩქარეზე, ჯამური ეფექტი გაიზრდება ორთქლის ფაზის წნევის ზრდასთან ერთად. ეს, თავის მხრივ, გაზრდის კონდენსაციის სიჩქარეს. საბოლოო ჯამში ორივე სიჩქარე გაუტოლდება ერთმანეთს და ამ წერტილის შემდეგ არ ხდება სითხის ან ორთქლის რაოდენობის რაიმე ცვლილება.

ამას უწოდებენ **დინამიკურ წონასწორობას**, რადგან აორთქლება და კონდენსაცია არ ჩერდება წონასწორობისას. ამ კონკურირებადი პროცესების სიჩქარეები უტოლდება ერთმანეთს, მაგრამ **არ მიდის ნულამდე**. ასე რომ, მიკროსკოპულ დონეზე ცალკეული მოლეკულები აგრძელებენ მოძრაობას სითხიდან აირად ფაზაში და პირიქით. მაგრამ მაკროსკოპულ დონეზე სითხისა და ორთქლის დასაკვირვებელი რაოდენობა აღარ იცვლება.

რაც შეეხება ქიმიურ რეაქციებს, ხერხით, რომლითაც აქამდე ვწერდით განტოლებებს, ვიხილავდით მხოლოდ **პირდაპირ** რეაქციას. შექცევადი რეაქციის შემთხვევაში, ნაერთები, რომლებსაც ჩვენ ვუწოდებთ პროდუქტებს, რეაგირებენ რეაგენტის წარმოქმნით. რიგ შემთხვევებში, შექცევადი რეაქცია შეიძლება მომდინარეობდეს უფრო მეტი ინტენსივობით, სხვა შემთხვევაში კი იყოს უმნიშვნელო. მაგრამ, პრინციპში, ის უნდა მიმდინარეობდეს ყოველი ქიმიური რეაქციისას. ეს ნიშნავს, რომ ჩაკეტილ სისტემაში ნებისმიერი ქიმიური რეაქცია, რომელიც, საბოლოო ჯამში, მიაღწევს დინამიკურ წინასწორობას, ანალოგიურია იმისა, რომელიც აღვწერეთ აორთქლების შემთხვევაში.

ორ რეაგენტს შორის ქიმიური რეაქციის დაწყების მომენტში არ არის არავითარი პროდუქტი. ვიცით, რომ ქიმიური რეაქციის სიჩქარე დამოკიდებულია რეაგენტების კონცენტრაციაზე. ასე რომ, საწყის სტადიაზე შექცევადი რეაქციის სიჩქარე ნულის ტოლია, რადგან მისი რეაგენტების – პირდაპირი რეაქციის პროდუქტების – კონცენტრაციაც ნულის ტოლია. ამრიგად, როდესაც ჩვენ პირველად ვურევთ რეაგენტებს, პირდაპირი რეაქციის სიჩქარე მეტია, ვიდრე შექცევადისა. დროთა განმავლობაში რეაგენტების კონცენტრაცია მცირდება, პროდუქტებისა კი იზრდება. კონცენტრაციების ამ ცვლილებას თან სდევს სიჩქარის ცვლილება: პირდაპირი რეაქცია ნელდება და შექცევადი – ჩქარდება. საბოლოოდ, მყარდება ქიმიური წონასწორობა, როცა ორი სიჩქარე უტოლდება ერთმანეთს და როგორც რეაგენტების, ასევე პროდუქტების კონცენტრაცია ხდება მუდმივი. წონასწორობისას ნებისმიერ ქიმიურ სისტემაში პირდაპირი რეაქციის სიჩქარე ტოლია შექცევადი რეაქციის სიჩქარისა.

პირდაპირი და შექცევადი რეაქციების სიჩქარის კანონებით ივარაუდება, რომ მათემატიკური დამოკიდებულება უნდა აღწერდეს წონასწორობას. ნებისმიერი რეაქციისათვის, რომელშიც მონაწილეობენ რეაგენტები R და პროდუქტები P , ქიმიურ განტოლებას ვწერთ შექცევადი ისრით:



სიმარტივისათვის დავუშვათ, რომ თითოეული ეს რეაქცია მიმდინარეობს ერთი ელემენტარული საფეხურით. პირდაპირი რეაქციის სიჩქარე ასეთია:

$$\text{სიჩქარე}_{\text{პირ}} = K_{\text{პირ}}[R]$$

ასევე, შექცევადი რეაქციისათვის

$$\text{სიჩქარე}_{\text{შექ}} = K_{\text{შექ}}[P]$$

წონასწორობისას

$$\text{სიჩქარე}_{\text{პირ}} = \text{სიჩქარე}_{\text{შექ}}$$

ე.ი.

$$K_{\text{პირ}}[R]_{\text{წონ}} = K_{\text{შექ}}[P]_{\text{წონ}}$$

რადგან წონასწორობის დროს სიჩქარეები ტოლია, ჩვენ პირდაპირ შეგვიძლია აღვნიშნოთ კონცენტრაციები, როგორც **წონასწორული** კონცენტრაციები, რასაც მიუთითებს ინდექსი: „წონ“. გადავწეროთ განტოლება ასე:

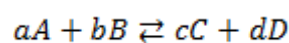
$$\frac{K_{\text{პირ}}}{K_{\text{შე}}} = \frac{[P]_{\text{წონ}}}{[R]_{\text{წონ}}}$$

$K_{\text{პირ}}$ და $K_{\text{შე}}$ სიჩქარის მუდმივებია, ასე რომ, თუ ტემპერატურა მუდმივია, განტოლების მარცხენა მხარე ასევე მუდმივია. ეს ნიშნავს, რომ მოცემულ ტემპერატურაზე ფარდობა $\frac{[R]_{\text{წონ}}}{[P]_{\text{წონ}}}$ ასევე მუდმივია.

12.2. წონასწორობის მუდმივები

12.2.1. წონასწორობის გამოსახულება

ზოგადი ქიმიური რეაქციისათვის



ჩვენ შეგვიძლია განვსაზღვროთ კონცენტრაციათა ფარდობა, იმის მიუხედავად არის წონასწორობა თუ არა:

$$Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

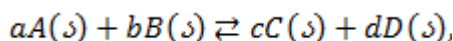
ჩვენ განვიხილავთ ამ ფარდობას, როგორც რეაქციის კოეფიციენტს Q -ს. პროდუქტების კონცენტრაცია მრიცხველშია და რეაგენტების მნიშვნელში. თითოეული კონცენტრაცია აყვანილია ამ ნაწილაკის სტექიომეტრული კოეფიციენტის შესაბამის ხარისხში გაწონასწორებული ქიმიური განტოლებიდან წონასწორობის დროს. მაგრამ წონასწორობისას ეს ფარდობა ხდება წონასწორობის გამოსახულება და Q -ს შესაბამის მნიშვნელობას ეწოდება **წონასწორობის მუდმივა** – K .

$$K = \frac{[C]_{\text{წონ}}^c [D]_{\text{წონ}}^d}{[A]_{\text{წონ}}^a [B]_{\text{წონ}}^b}$$

კონკრეტული რეაქციის K -ს დასადგენად უნდა გაიზომოს რეაგენტებისა და პროდუქტების კონცენტრაციები წონასწორობისას. აღსანიშნავია, რომ განსხვავებით სიჩქარის გამოსახულებიდან ქიმიურ კინეტიკაში, წონასწორობის მუდმივას გამოსახულება ყოველთვის ეფუძნება პირდაპირი რეაქციის სტექიომეტრიას.

12.2.2. აირადი ფაზის წონასწორობა: $K_p - K_c$.

აირადი ფაზის რეაქციებისათვის ზოგჯერ იყენებენ წონასწორობის მუდმივას ალტერნატიულ განსაზღვრას, რომელშიც მოლარობები ჩანაცვლებულია პარციალური წნევებით. სიმბოლო K_p გამოყენებულია ასეთი წონასწორობის მუდმივას აღსანიშნავად. ზოგადი განტოლება შეიძლება ჩავწეროთ აირებისათვის:



აქედან

$$K_p = \frac{(P_C)_{წონ}^c (P_D)_{წონ}^d}{(P_A)_{წონ}^a (P_B)_{წონ}^b}$$

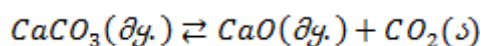
შეიძლება ჩაიწეროს სხვადასხვა თერმოდინამიკური სიდიდეების ცვლილებებიც, მაგალითად, $\Delta n_{აირი}$ განისაზღვრება, როგორც აირის მოლების რიცხვი პროდუქტის მხარეს მინუს აირის მოლების რიცხვი რეაგენტების მხარეს. შეიძლება დავწეროთ:

$$K_p = K_c \times RT^{\Delta n_{აირი}}$$

წონასწორობის მუდმივები K_p და K_c იქნება ტოლი მხოლოდ მაშინ, როცა $\Delta n_{აირი} = 0$. ამიტომ, როდესაც საქმე გვაქვს აირადი ფაზის წონასწორობის მუდმივებთან, უნდა ვიყოთ დარწმუნებული, თუ რომელ სიდიდეს ვაკვირდებით: K_p თუ K_c -ს. სიმარტივისათვის ამ ტექსტში ყველა წონასწორობის მუდმივა ეფუძნება მოლურ კონცენტრაციებს და არა წნევებს, შესაბამისად, აღარ გამოვიყენებთ ინდექსს „c“

12.2.3. ჰომოგენური და ჰეტეროგენული წონასწორობა

ჰომოგენური წონასწორობა ეწოდება წონასწორობას, როდესაც რეაგენტები და პროდუქტები ერთსა და იმავე ფაზაშია, კერძოდ, აირადში ან თხევადში. თუ ერთ-ერთი რეაგენტი ან პროდუქტი განსხვავებულ ფაზაშია – მყარში ან თხევადში, წონასწორობის გამოსახულება უნდა დაზუსტდეს. მყარ სხეულში ან სითხეში კონცენტრაცია არ იცვლება რეაქციის მიმდინარეობისას. განსხვავებით აირებისგან ან ხსნარებისგან, მყარი სხეული ან სითხე არ ხასიათდება ცვლადი კონცენტრაციით. მაგალითად, კალციუმის კარბონატის დაშლა ხდება ჩაკეტილ სისტემაში:



გარკვეულ ტემპერატურაზე წონასწორობის დამყარების შემდეგ აირადი CO_2 -ს კონცენტრაცია შეიძლება გამოისახოს როგორც *მოლი ლ⁻¹*. თუ სისტემას გავახურებთ, უფრო მეტი CaO და CO_2 წარმოიქმნება და თუ სისტემის მოცულობა რჩება მუდმივი, CO_2 -ს კონცენტრაცია *მოლი ლ⁻¹* იზრდება უფრო მაღალ ტემპერატურაზე. მაგრამ მყარი სხეულების კონცენტრაცია არ შეიცვლება, თუმცა როგორც მათი მოლელების რიცხვი, ასევე მოცულობები იცვლება. მყარი სხეულების სიმკვრივე ძალიან სუსტად იცვლება ტემპერატურის ცვლილებით და CaCO_3 -ის მოლელების რიცხვის ფარდობა CaCO_3 -ის მოცულობასთან რჩება მუდმივი. მყარი სხეულის, ისევე როგორც სითხის კონცენტრაცია არ იცვლება. ეს ფაქტი საშუალებას გვაძლევს აღვწეროთ წონასწორობის გამოსახულება ჰეტეროგენული წონასწორობისთვის მრავალსაფეხურიან სისტემაში. რადგან რეაგენტებისა და პროდუქტების კონცენტრაციები მუდმივია, ისინი, რომლებიც მყარ ან თხევად ფაზაშია, არ ფიგურირებენ გამოსახულებაში. ასე რომ, წონასწორობის გამოსახულება შეიცავს მხოლოდ ნახშირორჟანგის კონცენტრაციას:

$$K = [\text{CO}_2]$$

12.2.4. წონასწორობის გამოსახულების რიცხვითი მნიშვნელობა

წონასწორობის მუდმივას მნიშვნელობები ძვეს ძალიან ფართო დიაპაზონში. ცნობილია 10^{-99} , ისევე როგორც 10^{99} ან მეტი. რას გვეუბნება ეს სიდიდე? განვიხილოთ წონასწორობის გამოსახულება რეაქციისათვის როგორც ალგებრული დამოკიდებულება:

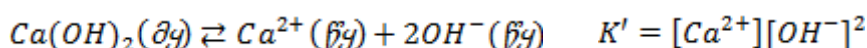
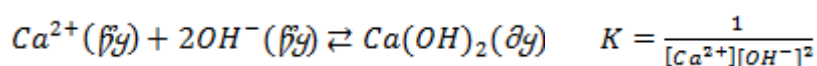
$$K = \frac{[\text{პროდუქტები}]}{[\text{რეაგენტები}]}$$

K -ს ძალიან დიდი მნიშვნელობისთვის პროდუქტის კონცენტრაცია იქნება ძალიან დიდი და რეაგენტის კონცენტრაცია მცირე. საწინააღმდეგოდ, თუ K მცირე სიდიდეა, რეაგენტების კონცენტრაცია იქნება მაღალი და პროდუქტებისა – მცირე.

ამრიგად, K -ს მნიშვნელობა მიგვითითებს მიმართულებაზე, რომლითაც რეაქცია, სავარაუდოდ, მიმდინარეობს. K -ს მაღალი მნიშვნელობისას, უპირატესად, პროდუქტებია და დაბალი მნიშვნელობები ($K \ll 1$) ნიშნავს, რომ რეაგენტთა უმრავლესობა უცვლელია. თუ K ერთის რიგისაა, წონასწორობისას არის როგორც რეაგენტების, ასევე პროდუქტების მნიშვნელოვანი რაოდენობა.

12.2.5. ქიმიური რეაქციის მიმართულების შეცვლა

წონასწორობის რეაქციისას როგორც პირდაპირი, ასევე შებრუნებული რეაქციები მნიშვნელოვანია. ასე რომ, შეიძლება რეაქციის განტოლება დაიწეროს როგორც ერთი, ასევე მეორე მიმართულებით. განვიხილოთ კალციუმის ჰიდროქსიდის დალექვა. შეგვიძლია, დავწეროთ წონასწორობის გამოსახულება განტოლების ორივე სახისათვის:



ცხადია, რომ წონასწორობის გამოსახულებები ერთმანეთის შებრუნებულია. ასე რომ, როცა ვაბრუნებთ ქიმიური განტოლებას რეაგენტებისა და პროდუქტების

გადანაცვლების გზით, ჩვენ ვახდენთ სიჩქარის მუდმივას გამოსახულების და მისი მნიშვნელობის გადაბრუნებას:

$$K' = \frac{1}{K}.$$

12.3. წონასწორული კონცენტრაციები

ქიმიურ წონასწორობაზე დაფუძნებული გამოთვლები ყოველთვის გარკვეულწილად მართებულია და ხშირად მოიცავს მონაცემების დიდ რაოდენობას. აღსანიშნავია სამი ძირითადი ხერხი, რომელიც უნდა გამოვიყენოთ ნებისმიერი წონასწორობის გამოსათვლელად:

- გაწონასწორებული ქიმიური განტოლების ჩაწერა შესაბამისი წონასწორობისათვის.

- შესაბამისი გამოსახულების ჩაწერა წონასწორობისათვის.

- ცხრილის შედგენა ყველა მორეაგირე ნაწილაკის კონცენტრაციისათვის.

ცხრილის პირველი რიგი შეიცავს საწყის კონცენტრაციებს, მეორე – ამ კონცენტრაციების ცვლილებას წონასწორობის დამყარებისას და მესამე რიგი – საბოლოო წონასწორულ კონცენტრაციებს. ამ ინფორმაციიდან ბევრი შეიძლება უცნობი იყოს პრობლემის გადაჭრისას, მაგრამ ცხრილი იძლევა ხელსაყრელ გზას შესაბამისი ინფორმაციის მოსაპოვებლად.

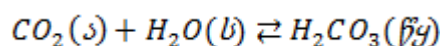
12.4. ლე შატელიეს პრინციპი

ლე შატელიეს პრინციპში გაერთიანებულია გზები, რომლითაც ნებისმიერი წონასწორული სისტემა რეაგირებს ცვლილებებზე. თუ წონასწორობაში მყოფი სისტემა დატვირთულია, ის რეაგირებს წონასწორობის აღდგენით, რათა შეამციროს მიღებული დატვირთვა.

წონასწორობაზე გავლენას ახდენს მრავალი ფაქტორი, კერძოდ, რეაგენტის ან პროდუქტის კონცენტრაციის ცვლილება, წნევის ცვლილება (როდესაც აირადი ფაზაა წარმოდგენილი), ტემპერატურის ცვლილება, კატალიზატორი და ა. შ.

ქიმიური წონასწორობის შედეგია წონასწორობა სხვადასხვა ნაწილაკების კონცენტრაციებს შორის. ასე რომ, ყველაზე პირდაპირი გზა ქიმიური სისტემის წონასწორობის მდგომარეობიდან გამოსაყვანად არის ერთი ან მეტი რეაგენტის ან პროდუქტის კონცენტრაციის შეცვლა.

ასევე წნევის შეცვლით, განსაკუთრებით აირად ფაზაში, შესაძლებელია წონასწორობაზე ზემოქმედება. ლე შატელიეს პრინციპის თანახმად, წონასწორობა წაინაცვლებს იმ მიმართულებით, სადაც მოხდება მოდებული დატვირთვის კომპენსირება. ეს შეიძლება განზოგადდეს ნებისმიერი ქიმიური რეაქციისთვის აირების მონაწილეობით. თუ აირების მოლეზის რიცხვი განსხვავდება რეაგენტებსა და პროდუქტებს შორის, წნევის წანაცვლება (გამოწვეული მოცულობის ცვლილებით) გამოიწვევს წონასწორობის მდგომარეობის ცვლილებას. ამის მაგალითია წყალში გახსნილი ნახშირორჟანგი, რადგან როგორც სტექიომეტრია აჩვენებს, აირადი ფაზის რეაგენტების უფრო მეტი მოლია (ერთი მოლი CO_2), ვიდრე აირადი ფაზის პროდუქტების მოლეზი:



თუ აირადი რეაგენტების მოლეზის რიცხვი ტოლია აირადი პროდუქტების მოლეზის საერთო რიცხვისა, ინდუცირებული წნევის ცვლილება არ იწვევს ცვლილებას წონასწორობის მდგომარეობაში. იმის გასააზრებლად, თუ როგორ მოქმედებს ტემპერატურა სისტემაზე, განვიხილოთ ტემპერატურა როგორც სითბოს ნაკადი სარეაგირო სისტემის შიგნით ან გარეთ. ამ ტერმინოლოგიის გამოყენებით შეიძლება გავიხსენოთ, რომ კავშირი ქიმიურ რეაქციებსა და სითბოს შორის მომდინარეობს თერმოდინამიკიდან. თუ ვიცით, როგორია რეაქცია – ეგზოთერმული თუ ენდოთერმული, მაშინ შეიძლება იმის პროგნოზირება, თუ როგორ ირეაგირებს ის ტემპერატურის ცვლილებაზე.

ეგზოთერმული რეაქციისას სითბო გამოდის სისტემიდან. ჩვენ შეგვიძლია ვთქვათ, რომ ეს სითბო რეაქციის პროდუქტია. ეს პოსტულატი შეიძლება ჩავწეროთ თერმოქიმიური რეაქციის სახით:

ენდოთერმული რეაქცია: რეაგენტები→პროდუქტები+სითბო

როდესაც ტემპერატურა იზრდება, ჩვენ სისტემაზე ვმოქმედებთ სითბოს საშუალებით. ლე შატელიეს პრინციპის თანახმად, სისტემა შეეცდება ამ ზემოქმედების კომპენსირებას და ჭარბ სითბოს შთანთქავს, ამ დროს წონასწორობა წაინაცვლებს რეაგენტებისაკენ. როდესაც ტემპერატურა მცირდება, სითბო გამოდის სისტემიდან და სისტემა რეაგირებს დამატებითი სითბოს წარმოქმნით – მოძრაობს პროდუქტებისაკენ.

ენდოთერმული რეაქციებისათვის ვწერთ:

ენდოთერმული რეაქცია: რეაგენტები+სითბო→პროდუქტები

თუ ტემპერატურა იზრდება, ენდოთერმული სისტემის წონასწორობა გადაინაცვლებს იმ მიმართულებით, რომ შთანთქას სითბო – პროდუქტებისაკენ. თუ ტემპერატურა მცირდება, მოძრაობა რეაგენტების მიმართულებით გამოყოფს სითბოს ამ ზემოქმედების კომპენსირებისათვის.

კონცენტრაციის წონასწორობაზე ზეგავლენის საპირისპიროდ, როდესაც წონასწორობის მუდმივა არ იცვლება, ტემპერატურის ცვლილებით ასევე იცვლება წონასწორობის მუდმივას **მნიშვნელობა**. მაგრამ ის ფაქტი, რომ წონასწორობის მუდმივა ტემპერატურის ფუნქციაა, მნიშვნელოვანია ქიმიური რეაქციებისათვის, რომლებიც მიმდინარეობენ სამრეწველო პირობებში.

რაც შეეხება კატალიზატორის ზემოქმედებას, იგი ზრდის როგორც პირდაპირი ასევე შექცევადი რეაქციების სიჩქარეს თანაბრად და ამიტომ არ ახდენს გავლენას წონასწორობის მდებარეობაზე ან კონცენტრაციებზე, ე.ი. აჩქარებს წონასწორობის დამყარებას.

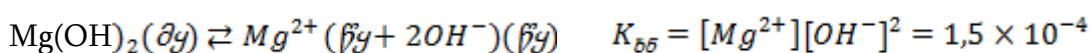
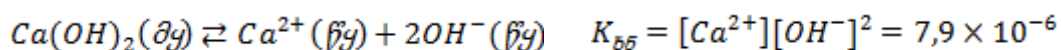
12.5. ხსნადობის წონასწორობა

ადრე შემოვიტანეთ ტერმინი **ხსნადობა**, რათა გაგვეზომა, თუ ნივთიერების რა რაოდენობის გახსნა შეუძლია გამხსნელს. ეს ხშირად გამოიყენება იონური ნაერთებისათვის. მაგალითად, ეს წესები განიხილავს კალციუმის ჰიდროქსიდს და მაგნიუმის ჰიდროქსიდს, როგორც უხსნად ნაერთებს. მაგრამ ცნობილია, რომ

ადგილი აქვს გაზომვად განსხვავებას ამ ორი ნაერთის ხსნადობაში. ასე რომ, უნდა განვმარტოთ, თუ რას ნიშნავს „უხსნადი“ ნაერთი. ჩვენ უფრო ფრთხილად უნდა ვიყოთ, თუ განვიხილავთ ორ ისეთ ნაერთს, როგორებიცაა კალციუმის ჰიდროქსიდი და მაგნიუმის ჰიდროქსიდი, როგორც **ძნელად ხსნად** ნაერთებს. საგრძნობი დროის შემდეგ და ხსნარის მუდმივი განახლებით (ე.ი. არაწონასწორულ პირობებში) ყველაზე უხსნადი ნაერთიც კი იხსნება.

12.5.1. ხსნადობის ნამრავლის განსაზღვრა

თუ კალციუმის ჰიდროქსიდს ან მაგნიუმის ჰიდროქსიდს მოვათავსებთ წყალში და სისტემა არ განიცდის გარე ზემოქმედებას, ნაერთსა და მის შემადგენელ იონებს შორის დამყარდება დინამიკური წონასწორობა. ამ რეაქციების აღმწერი წონასწორობა ჰეტეროგენულია. ასე რომ, წონასწორობის მუდმივას გამოსახულება არ შეიცავს მყარი ნაერთების კონცენტრაციას. აქ შედის მხოლოდ გახსნილი იონების კონცენტრაციების ნამრავლი. რადგან ეს ფორმა ფართოდ გამოიყენება ხსნადობის წონასწორობის მუდმივას გამოსახულებაში, ამ მუდმივას უწოდებენ **ხსნადობის ნამრავლის მუდმივას**. მაგალითად, შეგვიძლია ჩავწეროთ:



მოლური ხსნადობა არის გახსნილი მყარი სხეულის კონცენტრაცია ნაჯერ ხსნარში და გამოისახება მოლებით.

12.5.2. საერთო იონური ეფექტი

იონებს, რომლებიც ნაწილია წონასწორობის, მაგრამ შეტანილია გარედან, უწოდებენ საერთო იონებს, რადგან ისინი საერთოა ხსნარებისათვის და მყარი სხეულებისათვის. მაგალითად, თუ საერთო იონს (OH^{-}) შევიტანთ $Mg(OH)_2$ -ის ხსნარში, რომელიც უკვე წონასწორობაშია, საბოლოო წანაცვლება იქნება იმ მიმართულებით, რომელიც მოიხმარს საერთო იონს და წარმოქმნის დამატებით

მყარ $Mg(OH)_2$. ეს არის საერთო იონის ეფექტი. თუ ამის ნაცვლად ძნელად ხსნად მყარ სხეულს დავუმატებთ ხსნარს, რომელშიც უკვე იმყოფება საერთო იონები, მათი თანაობა ასუსტებს მყარი სხეულის ხსნადობას (რადგან მათ აქვთ ტენდენცია, უბიძგონ სისტემას რეაგენტების წარმოქმნისაკენ).

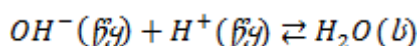
12.6. მჟავები და ფუძეები

12.6.1. მჟავებისა და ფუძეების ბრონსტედ-ლოურის თეორია

ფუძეებისა და მჟავების არენიუსის განმარტება შეიცავს ჰიდრონიუმის იონის წარმოქმნას (მჟავებისათვის) და ჰიდროქსიდ-იონების წარმოქმნას (ფუძეებისათვის). ბრონსტედმა და ლოურიმ ეს განსაზღვრება განავრცეს არაწყალ-ხსნარებზეც, რომლის თანახმად, ბრონსტედ-ლოურის მჟავა არის პროტონის (H^+) დონორი, ფუძე კი – პროტონის აქცეპტორი.

ეს არის უფრო ზოგადი განმარტება, რომელიც მოიცავს არენიუსის მჟავებსა და ფუძეებს. ასე მაგალითად, HCl აკმაყოფილებს ორივე განსაზღვრას. განვიხილოთ HCl -ის რეაქცია წყალთან. აირადი წყალბადის ქლორიდი იხსნება წყალში, მოქმედებს დიპოლ-დიპოლური ძალები და HCl -ის მოლეკულის ნაწილობრივ დადებითი წყალბადი მიეზიდება წყლის მოლეკულის ნაწილობრივ უარყოფით ჟანგბადის ატომს. შედეგად მიიღება ჰიდრატირებული პროტონი ანუ ჰიდრონიუმის იონი, H_3O^+ .

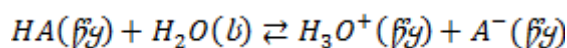
ბრონსტედ-ლოურის თეორიის მიხედვით, ფუძე არის პროტონის აქცეპტორი. OH^- (წყ) იონი, რომელიც წარმოიქმნება $NaOH$ (წყ)-ის იონიზაციით, არის ფუძე, რადგანაც ის ჩაიჭერს პროტონს ნებისმიერი პროტონის დონორიდან:



12.6.2. სუსტი მჟავები და ფუძეები

სუსტი მჟავები, როგორცაა, მაგალითად, ყველა ჰიდროქსიკარბომჟავა, ბოლომდე არ რეაგირებენ წყალთან. ასეთი ნაერთები განიხილება როგორც სუსტი მჟავები. სუსტი მჟავას და წყლის რეაქციის შედეგად წარმოიქმნება შეწყვილებული სისტემა: მჟავა-ფუძე, რომელშიც მჟავა და ფუძე მარჯვენა მხარეს უფრო ძლიერია, ვიდრე მათი შეწყვილებული ფუძე და მჟავა მარცხენა მხარეს. ეს ნიშნავს, რომ წონასწორობა უპირატესობას ანიჭებს მარცხენა მხარეს და მჟავას მოლეკულის მხოლოდ მცირე რაოდენობა განიცდის იონიზაციას.

ნებისმიერი სუსტი მჟავას (HA) დისოციაციის ზოგადი განტოლება ასე შეიძლება ჩაიწეროს:



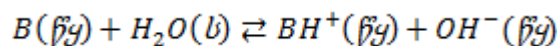
ამ რეაქციის წონასწორობის გამოსახულებას ექნება შემდეგი სახე:

$$K = \frac{[H_3O^+][A^-]}{[HA][H_2O]}$$

წონასწორობის რეაქციაში წყალი სითხეა. ასე რომ, ზუსტად ისევე როგორც მყარი სხეულების შემთხვევაში ხსნადობის წონასწორობისას, მისი კონცენტრაცია მუდმივია. ასე რომ, $[H_2O]$ ამოვარდება გამოსახულებიდან და მიღებულ K -ს უწოდებენ მჟავას იონიზაციის მუდმივას. K_a

$$K_a = \frac{[H_3O^+][A^-]}{[HA]}$$

სუსტი ფუძეებისათვის იონიზაციის წონასწორობა ასე ჩაიწერება



ზუსტად ისევე, როგორც სუსტი მჟავებისათვის, წონასწორობის მუდმივა შეიძლება ჩაიწეროს წყლის კონცენტრაციის წევრის გარეშე. მიღებულ წონასწორობის მუდმივას K_b უწოდებენ ფუძის იონიზაციის მუდმივას:

$$K_b = \frac{[BH^+][OH^-]}{[B]}$$

ცხადია, რომ სუსტი მჟავებისა და ფუძეების ეს რეაქციები წონასწორობის კერძო შემთხვევაა. როდესაც ნებისმიერი მჟავა გახსნილია წყალში, ყოველთვის

წარმოიქმნება ჰიდრონიუმის იონები, როგორც ერთ-ერთი პროდუქტი. ეს ნაწილაკები ისე ჩვეულებრივია, რომ დამუშავდა დამატებითი ხერხი მისი კონცენტრაციის აღსაწერად. ჩვენ ხშირად ვიყენებთ pH -ს სკალას, რომელშიც pH განსაზღვრულია როგორც ჰიდრონიუმის იონის კონცენტრაციის უარყოფითი ლოგარითმი:

$$pH = -\log[H_3O^+]$$

განვიხილოთ ხსნარი, რომელშიც ჰიდრონიუმის იონის კონცენტრაცია $= 0.1M$. $pH = -\log(10^{-1})$. $\log 10^{-1} = -1$, ასე რომ, $pH = 1$. ამ ლოგიკით მიღებულია pH -ის სკალა. თუ ჰიდრონიუმის იონის კონცენტრაციაა 1×10^{-x} , $pH = x$.

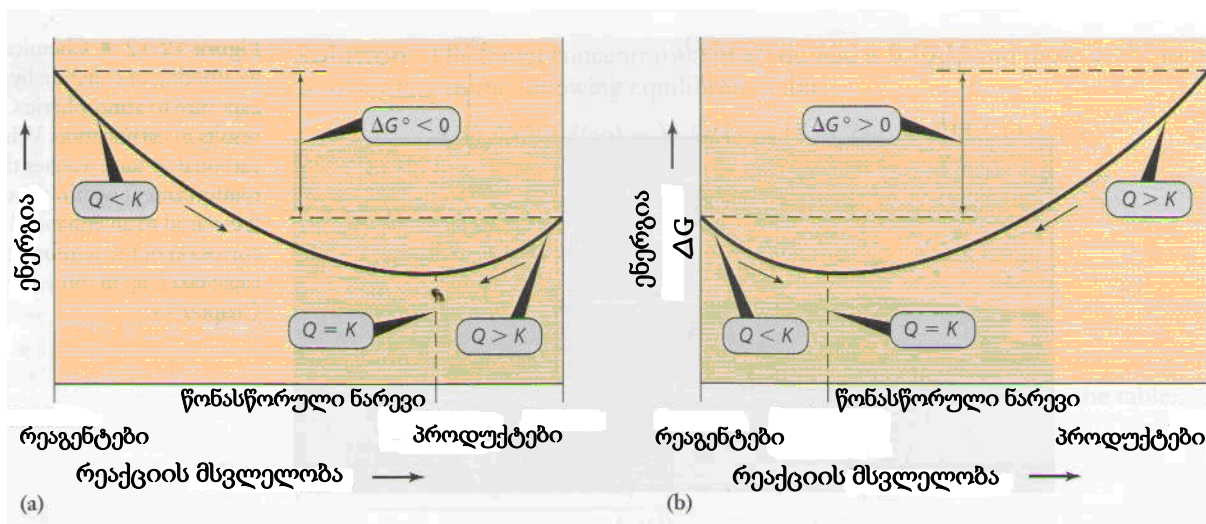
თუ მჟავასათვის ცნობილია K_a და მისი საწყისი კონცენტრაცია, შეგვიძლია გამოვთვალოთ ჰიდრონიუმის იონის კონცენტრაცია და ხსნარის pH .

12.7. თავისუფალი ენერგია და ქიმიური წონასწორობა

რადგან წონასწორობა ნებისმიერი ჩაკეტილი სისტემის შესაძლო შედეგია, ის რაღაცნაირად უნდა უკავშირდებოდეს თავისუფალ ენერგიასაც. წონასწორობა – ეს არის მინიმალური თავისუფალი ენერგიის მდგომარეობა. ყოველი სისტემა მიისწრაფვის წონასწორობისკენ, რადგან ამ დროს მისი თავისუფალი ენერგია მცირდება. წონასწორობის მიღწევისას თავისუფალი ენერგია იცვლება და $\Delta G = 0$.

ნახ. 20 ნაჩვენებია თავისუფალი ენერგია როგორც რეაქციის მსვლელობის ფუნქცია. თუმცა ვერტიკალურ ღერძზე ჯიბსის თავისუფალი ენერგიაა, აღსანიშნავია, რომ შეუძლებელია ნებისმიერ წერტილში სისტემის თავისუფალი ენერგიის აბსოლუტური მნიშვნელობის განსაზღვრა. ამის ნაცვლად შეგვიძლია გავზომოთ მხოლოდ თავისუფალი ენერგიის ცვლილება. ამიტომ გრაფიკის მიზანია იმის ჩვენება, რომ თავისუფალი ენერგია მცირდება, როცა რეაქცია მიდის წონასწორობისაკენ ნებისმიერი მიმართულებიდან (იქნება ეს რეაგენტები თუ პროდუქტები). ქიმიურ სისტემას აქვს ტენდენცია თავისთავად იმოძრაოს წონასწორობის მიმართულებით. წონასწორობის მიღწევის მომენტში თავისუფალი

ენერგიის ცვლილება ნულს გაუტოლდება. ასევე ცხადია, რომ ΔG° არის თავისუფალი ენერგიების სხვაობა რეაგენტებსა და პროდუქტებს შორის მათ სტანდარტულ მდგომარეობებში.



ნახ.20 თავისუფალი ენერგიის ცვლილება რეაქციის მსვლელობის დროს

ნახაზ 20 ბ-ზე ვაჩვენებთ რეაქციისათვის, $\Delta G^\circ > 0$, რადგან $G_{\text{პროდ}} > G_{\text{რეაგ}}$. ადრე ვაჩვენებთ, რომ რეაქცია, რომლის $\Delta G^\circ > 0$, არ მიმდინარეობს თავისთავად. ახლა ვნახავთ, რომ ეს იყო გამართივების მცირე ნაწილი. ყველა ქიმიური რეაქცია მიისწრაფვის მინიმალური თავისუფალი ენერგიისაკენ. თუმცა არის ცვალებადობა ერთი რეაქციიდან მეორისაკენ, თავისუფალი ენერგიის მინიმუმს „რეაქციის მსვლელობის“ გასწვრივ აქვს ტენდენცია იყოს ახლოს იმ მდგომარეობასთან (რეაგენტები ან პროდუქტები), რომელშიც უფრო დაბალია თავისუფალი ენერგია. ამრიგად, რეაქციისათვის, რომლის $\Delta G^\circ < 0$, წონასწორობის წერტილი მდებარეობს პროდუქტებთან უფრო ახლოს და ასეთი რეაქცია მიმდინარეობს პროდუქტების მიმართულებით (ნახ 20a). მეორე მხრივ, თუ $\Delta G^\circ > 0$, ჩვეულებრივ, წონასწორობის მდგომარეობა მიიღწევა მაშინ, როდესაც რეაგენტები ჯერ კიდევ არ დახარჯულა.

12.7.1. თავისუფალი ენერგია და არასტანდარტული პირობები

ΔG° -სა და წონასწორობის მუდმივას შორის (K) დამოკიდებულების მისაღებად, უპირველეს ყოვლისა, უნდა გავიაზროთ, რომ წონასწორობის მდგომარეობა არ შეესაბამება სტანდარტულ პირობებს. ნებისმიერი წონასწორობის რეაქციისათვის ვერ ვივარაუდებთ, რომ ყველა რეაგენტი და პროდუქტი იმყოფება 1 ატმოსფერულ წნევაზე და ერთი მოლი კონცენტრაციით! გავიხსენოთ გამოსახულება

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln Q$$

აქ R აირების უნივერსალური მუდმივაა, T – ტემპერატურაა და Q – რეაქციის კოეფიციენტი. მაგრამ Q უახლოვდება K -ს, როცა სისტემა აღწევს წონასწორობას, ამის გაერთიანება იმ ფაქტთან, რომ წონასწორობისას $\Delta G = 0$, ნიშნავს, რომ

$$0 = \Delta G^\circ + RT \ln K,$$

ანუ

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K$$

ამ განტოლებიდან შეგვიძლია გამოვთვალოთ წონასწორობის მუდმივა, თუ ცნობილია სტანდარტული თავისუფალი ენერგიის ცვლილება სასურველი რეაქციისათვის.

13. ელექტროქიმია

ამ თავის ათვისების შემდეგ სტუდენტი შეძლებს:

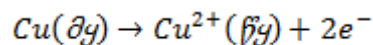
- ახსნას ჟანგვა და აღდგენა;
- დაწეროს და გააწონასწოროს ნახევრად რეაქციები მარტივი ჟანგვა-აღდგენითი პროცესებისათვის;
- აღწეროს განსხვავება გალვანურ და ელექტროლიტურ უჯრედებს შორის;
- გამოიყენოს სტანდარტული აღდგენის პოტენციალი ელემენტების პოტენციალის გამოსათვლელად როგორც სტანდარტულ, ასევე არასტანდარტულ პირობებში;
- გამოიყენოს სტანდარტული აღდგენის პოტენციალები ჟანგვა-აღდგენითი რეაქციის თავისთავადი მიმართულების პროგნოზირებისათვის;
- გამოთვალოს საჭირო დენისა და დროის სიდიდე, რაც აუცილებელია ელექტროლიზის პროცესისათვის.

13.1. ჟანგვა-აღდგენის რეაქციები და გალვანური ელემენტები

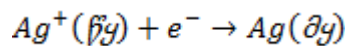
13.1.1. ჟანგვა-აღდგენა და ნახევრად რეაქცია

რეაქციები, რომლებშიც ადგილი აქვს ელექტრონის გადატანას, ცნობილია როგორც ჟანგვა-აღდგენის რეაქციები. თუ უფრო ღრმად ვსწავლობთ ელექტროქიმიას, პირველ რიგში უნდა გავაფართოოთ ქიმიური რეაქციების ამ კლასის გაგება და განვსაზღვროთ შესაბამისი ახალი ცნებები. დაჟანგვა არის გარკვეული ქიმიური ნაწილაკის მიერ ელექტრონის დაკარგვა, მაშინ როცა აღდგენა არის ელექტრონის მიერთება. მაგრამ ცნობილია, რომ ელექტრონი არ შეიძლება დაიკარგოს მუხტისა და ნივთიერების შენახვის კანონის შესაბამისად. ამას პირდაპირ მივყავართ ჟანგვა-აღდგენის ქიმიის ერთ-ერთ ყველაზე მნიშვნელოვან პრინციპთან, ელექტრონი დაკარგული დაჟანგვისას, ყოველთვის იქნება მიერთებული სხვა ნაწილაკის მიერ აღდგენისას. სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, ჩვენ არ გვექნება დაჟანგვა, თუ ამავე დროს არ არის აღდგენაც.

განვიხილოთ მაგალითი: თუ სპილენძის მავთულს მოვათავსებთ ვერცხლის ნიტრატის უფერულ ხსნარში, ძალიან მალე დავრწმუნდებით, რომ მიდის ქიმიური რეაქცია. მეტალური ვერცხლის კრისტალები წარმოიქმნება მავთულზე და ხსნარი ლურჯად შეიფერება. ამ რეაქციაში მეტალური სპილენძი იჟანგება Cu^{2+} -ად ხოლო Ag^+ იონები აღდგება მეტალურ ვერცხლამდე. რა მოხდა ქიმიურად? ხსნარის ლურჯი ფერი მიუთითებს Cu^{2+} იონების არსებობაზე, რომლებიც წარმოიქმნება სპილენძის მავთულიდან. ასე რომ, კათიონების წარმოქმნისას სპილენძის ატომები კარგავენ ელექტრონებს. ვამბობთ, რომ სპილენძი იჟანგება:

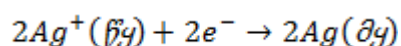
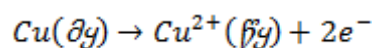


მაგრამ სად წავიდა ელექტრონები? ვერცხლის კათიონებმა მიიერთა სპილენძის მიერ დაკარგული ელექტრონები, ე. ი. ვერცხლი აღდგა:

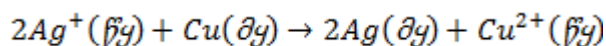


ამ ორი რეაქციით აღიწერება ე. წ. ნახევრად-რეაქციები სპილენძის დაჟანგვისა და ვერცხლის აღდგენისათვის. არცერთი ეს რეაქცია არ მიმდინარეობს ცალ-ცალკე.

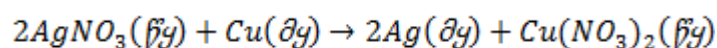
სპილენძი კარგავს ორ ელექტრონს დაჟანგვის ნახევრადრეაქციაში და ვერცხლი იძენს მხოლოდ ერთ ელექტრონს აღდგენის ნახევრადრეაქციაში. ეს გვეუბნება, რომ ელექტრონების შესანახად ვერცხლის ორი ატომი უნდა აღდგეს თითოეული დაჟანგული სპილენძის ატომისათვის. აღდგენა უნდა გავაორმაგოთ.



თუ ამ ორ ნახევრადრეაქციას შევკრებთ, გვექნება ერთიანი იონური განტოლება საერთო ჟანგვა-აღდგენის რეაქციისათვის:



ჩვენ ეს შეიძლება გადავწეროთ როგორც მოლეკულური განტოლება იონ-დამკვიდრებლების (ამ შემთხვევაში NO_3^-) მონაწილეობით:



შეიძლება ვთქვათ, რომ ვერცხლის იონები ჟანგავს მეტალურ სპილენძს ან მეტალური სპილენძი აღადგენს ვერცხლის იონებს. არც ერთი ეს დებულება არ არის უფრო მეტად ან ნაკლებად სწორი ვიდრე მეორე, რადგან ორივე პროცესი ერთდროულად მიმდინარეობს. შეიძლება ამ იდეის შემდეგნაირი განზოგადება.

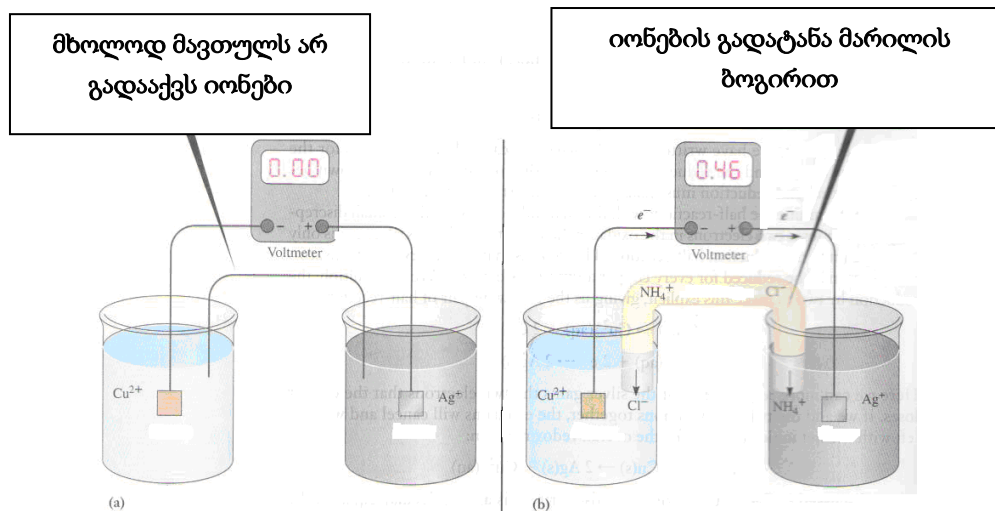
- ნაწილაკი, რომელიც იჟანგება, განიხილება როგორც აღმდგენი;
- ნაწილაკი, რომელიც აღდგება, განიხილება როგორც დამჟანგველი.

13.1.2. გალვანური ელემენტების აგება

განხილული ნახევრადრეაქციები იძლევა დაჟანგვის და აღდგენის რეაქციების გააზრების საშუალებას. ორივე ნახევრადრეაქცია მიმდინარეობს ერთი და იგივე ქიმიურ ჭურჭელში. მაგრამ რა მოხდება, თუ ამ რეაქციებს ჩავატარებთ ორ სხვადასხვა კონტეინერში?

მოვათავსოთ მეტალური სპილენძი Cu^{2+} იონების ხსნარში (იონი-დამკვირვებელი არ ასრულებს მნიშვნელოვან როლს. შეიძლება სულფატის გამოყენება – $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) (ნახ. 21a). ცალკე ჭურჭელში ვათავსებთ მეტალური ვერცხლს ან ვერცხლის მავთულს ვერცხლის იონების ხსნარში. ცალ-ცალკე ჭურჭელში რეაქცია არ მიმდინარეობს. შევაერთოთ ეს ხსნარები გამტარი მავთულით და მივაერთოთ ვოლტმეტრი. აღიმკვრება ხანმოკლე ელექტრული დენი, მაგრამ სხვა რაიმე შესამჩნევი ცვლილება არ ხდება. რატომ? მავთული არ იძლევა მუხტის უწყვეტი ნაკადის გადატანის საშუალებას ხსნარებს შორის, რადგან დამუხტული ნაწილაკები ხსნარებში იონების სახითაა და არა თავისუფალი ელექტრონების სახით.

ელექტრონების ნებისმიერი საწყისი ნაკადი სპილენძ-იონების შემცველი ხსნარიდან ვერცხლის იონების შემცველი ხსნარისკენ სწრაფად ჩერდება უარყოფითი მუხტის დაგროვებით ვერცხლის ხსნარიან ჭურჭელში. ორი ჭურჭლის შეერთება ე. წ. მარილის ბოგირით აადვილებს მუხტის დაგროვებას (ნახ. 21 b).



ნახ.21 . გალვანური ელემენტი

მარილის ბოგირი შეიცავს ძლიერ ელექტროლიტს, რომლის საშუალებითაც როგორც კათიონები, ასევე ანიონები მიგრირებენ ხსნარში, სადაც მათ უნდა შეინარჩუნონ ნეიტრალობა. დავუშვათ, რომ მარილის ბოგირი შევსებულია NH_4Cl -ით. ამონიუმის იონებს შეუძლიათ დინება ვერცხლის ხსნარიდან ჭურჭელში, რათა მოახდინონ Ag^+ (წყ) იონების მოცილების კომპენსირება და ქლორის იონები მიედინება სპილენძის ხსნარიდან ჭურჭელში, რათა მოახდინონ Cu^{2+} (წყ) იონების წარმოქმნის კომპენსირება. ნახაზზე შეიძლება დავინახოთ სხვადასხვა მოძრავი მუხტი ამ განლაგებაში. ასეთი გზით შექმნილ მოწყობილობა გალვანური ელემენტის სახეობაა.

გალვანური ელემენტი არის ნებისმიერი ელექტროქიმიური უჯრედი, რომელშიც თავისთავადი ქიმიური რეაქციის გამოყენება შეიძლება ელექტრული დენის გენერაციისათვის. ასეთ უჯრედში ელექტრული დენის დაკვირვების შედეგად შემოვიდა ელექტროქიმიის ცნება და ეს კავშირი ელექტრობასა და ქიმიას შორის სასიცოცხლო მნიშვნელობისაა თანამედროვე ქიმიური პრინციპების განვითარებისათვის.

13.1.3. გალვანური ელემენტების ტერმინოლოგია

ყველა გალვანური ელემენტი ხასიათდება საერთო თვისებებით. ელექტროგამტარ ადგილებს, სადაც ხდება დაჟანგვა ან აღდგენა, ელექტროდებს

უწოდებენ. დაჟანგვა ხდება ანოდზე და აღდგენა კათოდზე. ეს ტერმინები გამოიყენება სხვა ტიპის ელექტროქიმიურ ელემენტებშიც. რადგანაც ძალიან ბევრი შესაძლო ელექტროქიმიური ელემენტი არსებობს, შემუშავებულია მოკლე აღნიშვნები, მათი სპეციფიკური ქიმიის წარმოსადგენად. ამ ნოტაციით ჩამოთვლილია რეაქციაში მონაწილე მეტალები და იონები. ვერტიკალური ხაზი, I, აღნიშნავს ფაზათა საზღვარს და ორმაგი ხაზი, II, ე. წ. მარილის ბოგირს (ეს არის ძლიერი ელექტროლიტი, რომელიც იძლევა კათიონების ან ანიონების მიგრაციის საშუალებას ხსნარში, სადაც მათ უნდა შეინარჩუნონ ნეიტრალობა). ანოდი ყოველთვის იწერება მარჯვნივ და კათოდი – მარცხნივ:

ანოდი|ანოდის ელექტროლიტი||კათოდის ელექტროლიტი|კათოდი.

ამ ნოტაციაში არ არის იდენტიფიცირებული დამკვირვებელი იონები. ელექტროდების კონცენტრაცია შეტანილია, როგორც წესი, მოლეზში. ამას აქვს სპეციფიკური აზრი, რადგან ესენი ელექტროქიმიური ელემენტის სტანდარტული მდგომარეობის კონცენტრაციებია. თუ ელექტროქიმიურ ნახევრად-რეაქციაში ადგილი აქვს აირის წარმოქმნას ან ხარჯვას, სტანდარტული მდგომარეობის წნევა 1 ატმოსფეროა. სტანდარტული მდგომარეობა ასევე გულისხმობს, რომ საელექტროდე მასალა მის თერმოდინამიკურად სტანდარტულ მდგომარეობაშია, რაც ჩვეულებრივი ამბავია, რადგან საელექტროდე მასალათა უმრავლესობა მყარი სხეულებია ოთახის ტემპერატურაზე.

13.1.4. გალვანური ელემენტების ატომური ასპექტი

იმისათვის, რომ გავიგოთ კოროზიის გავრცელების ბუნება ან თუ როგორ გამოიყენება ელექტროქიმია დენის წყაროებში, საჭიროა ვიცოდეთ რამდენიმე ფუნდამენტური კანონი. აღსანიშნავია, რომ ელექტრონები მოძრაობენ სწორად აგებულ ელემენტში, მაგრამ რა აიძულებს ამ მოძრაობას? ამჯერად ჩვენ განვიხილავთ გალვანურ ელემენტს ატომურ დონეზე. როგორც წესი, ქიმიური სისტემები ელექტრულად ნეიტრალურია, მაგრამ ეს სამართლიანია მხოლოდ ერთ ფაზაში და არა ფაზებს შორის. ასე რომ, სისტემაში, რომელშიც არ არის ჩაკეტილი

წრედი, ადგილი აქვს ნაწილობრივ რეაქციას. ანოდზე მიმდინარეობს გარკვეული დაჟანგვა და კათიონები იხსნება ხსნარში და ანოდზე რჩება უარყოფითი მუხტი. კათოდზე ადგილი აქვს აღდგენას და ელექტროდზე იზრდება დადებითი მუხტი. ამრიგად, საწარმო წრედი შეიკვრება, წონასწორობის ფორმა სწრაფად მიიღწევა იქ, სადაც მუხტი იზრდება ცალკეულ ელექტროდებზე და ის ლოკალურად კომპენსირდება იონებს შორის ხსნარში. ასეთი წონასწორობის მდგომარეობა თითოეულ ელექტროდზე შეგვიძლია განვიხილოთ, როგორც **ნახევრადრეაქციის წონასწორობა**, მაგრამ ეს არ არის ჟანგვა-აღდგენის წონასწორობა.

მუხტის ზრდა ელექტროდებზე მნიშვნელოვანია, რადგან ეს ნიშნავს, რომ არის პოტენციალი ელექტრული მუშაობისათვის. ამ პოტენციალს უწოდებენ **ელემენტის პოტენციალს** ანუ **ელექტრომომძრავებელ ძალას** (ემძ). ემძ მნიშვნელოვანია, რადგან ის დაკავშირებულია მაქსიმალურ ელექტრულ მუშაობასთან, რომლის მიღებაც შესაძლებელია ელექტროქიმიურ უჯრედში:

$$W_{\max}=qE$$

აქ q არის მუხტი, რომელიც მოძრაობს ელექტრონების ნაკადში და E არის უჯრედის პოტენციალი. ეს განტოლება აკმაყოფილებს მუშაობის მეცნიერულ განმარტებას, რადგან რაღაცა (მუხტი) მოძრაობს რაღაც ძალის (ემძ) გავლენით.

13.2. ელემენტის პოტენციალები

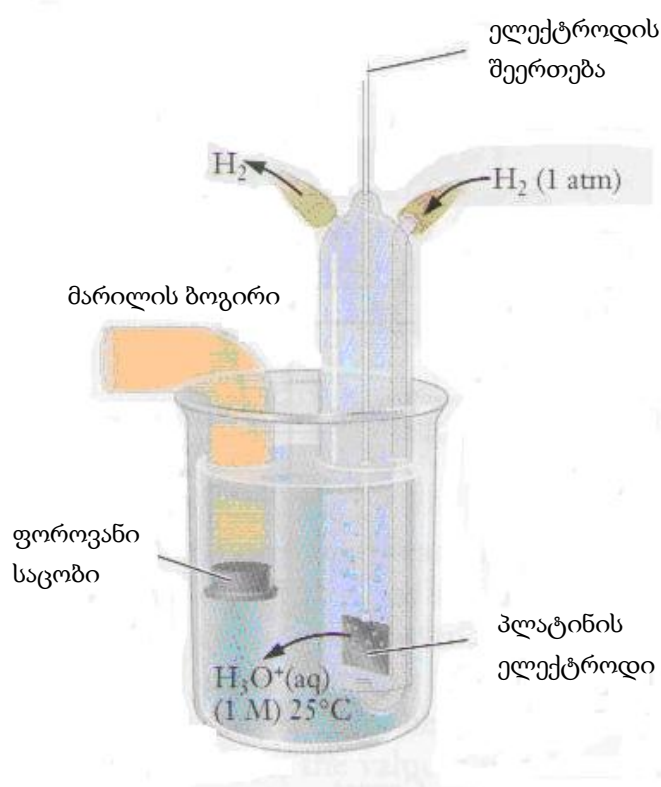
13.2.1. ელემენტის პოტენციალის გაზომვა

რა მოხდება, თუ გაღვანური ელემენტის ელექტროდებს შევაერთებთ მაღალი შიდა წინაღობის მქონე ვოლტმეტრთან? ჯერ შევაერთოთ ვოლტმეტრი ჩვეულებრივ ბატარეასთან. შედეგი დამოკიდებულია იმაზე, თუ ვოლტმეტრის რომელი ბოლო რომელ ელექტროდთანაა მიერთებული. ვოლტმეტრი ზომავს როგორც ელექტრული პოტენციალის სიდიდეს, ასევე მის პოლარობას.

ყოველთვის შეგვიძლია შევცვალოთ ვოლტმეტრის ბოლო, რომელთანაც ვაერთებთ ელექტროდს. ასე რომ, მოდით, უბრალოდ შევამოწმოთ გაზომვა, რათა ნებისმიერ მომენტში ვიცოდეთ დადებითი ძაბვა. ავიღოთ სპილენძისა და

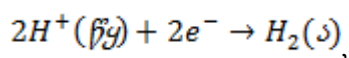
ვერცხლის მაგალითი. ელემენტის $Cu(s)|Cu^{2+}(1M) || Ag^+(1M)|Ag(s)$ პოტენციალია 0.462 ვ. თუ ავიღებთ იმავე სპილენძის ნახევრადელემენტს და მას შევაერთებთ იმ ნახევრადუჯრედთან, რომელშიც რკინა (III) აღდგება რკინა (II)-მდე, აღმოვაჩენთ, რომ გაზომილი ელემენტის პოტენციალია 0.434 ვ. თუ ამ რკინის ელექტროდს შევუერთებთ ვერცხლის ელემენტს, ჯამური პოტენციალი იქნება 0.028 ვ. ცხდია, რომ $0.462 = 0.434 + 0.028$. ეს მნიშვნელოვანია ორი მოსაზრების გამო. პირველი, ეს გვიჩვენებს, რომ ელემენტის პოტენციალების ცვლილება ახლოსაა მდგომარეობის ფუნქციის ქცევასთან და მეორე, ის გულისხმობს, რომ თუ ჩვენ ავირჩევთ გარკვეულ სტანდარტულ ელექტროდს, რომელსაც შევადარებთ ყველა სხვა ელექტროდს, შევძლებთ შევიძუშაოთ სისტემა ელემენტის პოტენციალის დასადგენად.

ასეთ ელექტროდად პოტენციალის გასაზომად შეირჩა სტანდარტული წყალბადის ელექტროდი (სწე) (ნახ. 22).

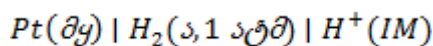


ნახ.22. წყალბადის სტანდარტული ელექტროდის სქემა

პლატინის მავთული ან კილიტა არის ელექტრონების გამტარი. გატარებული წყალბადი ბუშტუკების სახით ეფინება ელექტროდს 1 ატმ წნევაზე. $1M HCl$ (წყ.) არის ელექტროლიტის ხსნარი. ჯამური ნახევრადრეაქცია ასეთია:



ანუ



შეთანხმებით, ამ ნახევრადრეაქციას მიეწერება ზუსტად ნული ვოლტის სიდიდის პოტენციალი. ნებისმიერი სხვა ელექტროდი/ელექტროლიტის სისტემის ნახევრადელემენტის პოტენციალის დასადგენად ის უნდა მიუერთდეს სწე-ს და გაიზომოს პოტენციალი. რადგან სწე-ს მინიჭებული აქვს პოტენციალი 0.003 ვ პოტენციალი, რომელიც დაიკვირვება, მიეწერება მეორე ნახევრადრეაქციას.

13.2.2. სტანდარტული აღდგენის პოტენციალები

დაჟანგვის და აღდგენის სიდიდეები სხვადასხვა ქიმიური ნაერთისათვის განლაგებულია გარკვეულ დიაპაზონში. ყველა ნახევრად ელემენტის პოტენციალი დაჯგუფებულია, როგორც აღდგენა. სტანდარტული აღდგენის პოტენციალების ცხრილში მოტანილია ნებისმიერი ნახევრად რეაქციის პოტენციალი, რომელიც შეერთებულია სწე-თან. აღსანიშნავია, რომ ყველა ელექტროდი უნდა დამზადდეს ისე, რომ დაკმაყოფილდეს სტანდარტული პირობები – ყველა მასალა უნდა იყოს თერმოდინამიკურად სტანდარტულ მდგომარეობაში, ხსნარების კონცენტრაცია 1M და აირები 1 ატმ წნევის ქვეშ.

სტანდარტული აღდგენის პოტენციალები მოტანილია ცხრილში 2.

ცხრილი 2.

სტანდარტული აღდგენის პოტენციალი ზოგიერთი ნახევრადრეაქციისათვის

ნახევრადრეაქცია	სტანდარტული აღდგენის პოტენციალი (ვ)
$Zn^{2+} + 2e^- \rightarrow Zn$	-0,763
$Fe^{2+} + 2e^- \rightarrow Fe$	-0,440

ნახევრადრეაქცია	სტანდარტული აღდგენის პოტენციალი (ვ)
$2H^{2+} + 2e^- \rightarrow H_2$	0,000
$Cu^{2+} + 2e^- \rightarrow Cu$	+0,337
$Fe^{3+} + e^- \rightarrow Fe^{2+}$	+0,771
$Ag^{2+} + e^- \rightarrow Ag$	+0,7794

აღვნიშნოთ ამ ცხრილის ზოგიერთი თვისება. პირველი, თუმცა ნახევრადრეაქციები ჩამოთვლილია როგორც აღდგენები, ერთი ნახევრად რეაქცია მაინც ელექტროქმიურ უჯრედში აუცილებლად იქნება დაჟანგვა. მეორე, ზოგიერთ ნახევრადრეაქციას აქვს დადებითი პოტენციალი, მაშინ როცა სხვები უარყოფითია. სწე არის ანოდი – დაჟანგვის ადგილი. ასე რომ, დადებითი ძაბვა სტანდარტული აღდგენის პოტენციალისათვის ნიშნავს, რომ ნახევრადრეაქცია მიმდინარეობს აღდგენის მიმართულებით. თუ მნიშვნელობა უარყოფითია, ნახევრადრეაქცია მიმდინარეობს როგორც დაჟანგვა, რადგან სწე ასრულებს კათოდის როლს.

ეს დაკვირვება მნიშვნელოვანია ქიმიური ნაერთების დაჟანგვის და აღდგენისათვის, რომლებიც მონაწილეობენ ნახევრადრეაქციაში.

აღსანიშნავია, რომ სტანდარტული აღდგენის პოტენციალის მაღალი დადებითი მნიშვნელობა გულისხმობს, რომ ნაერთი ადვილად აღდგება და ამიტომ ის არის კარგი დამჟანგველი და პირიქით, თუ აღდგენის პოტენციალს აქვს შედარებით მაღალი უარყოფითი მნიშვნელობა, რეაქცია სწრაფად მიმდინარეობს შებრუნებული მიმართულებით – ნაერთი იჟანგება. ნახევრად რეაქციის პროდუქტი – ეს არის აღმდგენელი, რადგან შებრუნებული რეაქცია არის დაჟანგვა. სხვა შემთხვევაში ამ პარამეტრის სიდიდე მნიშვნელოვანია, რათა დადგინდეს, თუ რა იჟანგება და რა აღდგება. ნებისმიერ გალვანურ ელემენტში ნახევრადრეაქცია უფრო დადებითი აღდგენის პოტენციალით იქნება კათოდი.

ზემოაღნიშნულის გათვალისწინებით, შეიძლება განვსაზღვროთ ნებისმიერი სტანდარტული ელემენტის პოტენციალი ნახევრადრეაქციების წყვილისათვის:

$$E_{\text{ჯლ}}^{\circ} = E_{\text{ად}}^{\circ} - E_{\text{ჟ}}^{\circ}$$

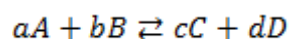
$E_{\text{აღ}}^{\circ}$ არის კათოდის სტანდარტული აღდგენის პოტენციალი და $E_{\text{აღ}}^{\circ}$ – ანოდის სტანდარტული აღდგენის პოტენციალი. მინუს ნიშანი აუცილებელია, რადგან დაჟანგვა საწინააღმდეგოა ცხრილში მოცემული აღდგენის პოტენციალისა.

13.2.3. არასტანდარტული პირობები

განტოლებას, რომელიც აღწერს ელემენტის პოტენციალებს არასტანდარტულ პირობებში, ნერნსტის განტოლება ეწოდება:

$$E = E^{\circ} - \frac{RT}{nF} \ln Q$$

Q არის რეაქციის კოეფიციენტი – რეაგენტებისა და პროდუქტების ფარდობა. თითოეული მათგანი ადის ხარისხში მათი სტექიომეტრული კოეფიციენტების გათვალისწინებით. ამრიგად, ზოგადი რეაქცია ასეთია:



$$Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

F არის ფარადეის მუდმივა და n – ელექტრონების რიცხვი, რომლებიც გადაეცემა ჟანგვა-აღდგენის რეაქციებში. F -ის მნიშვნელობაა $96,485 \text{ კლ} \times \text{კოლ}^{-1}$ ან $96,485 \text{ კლ} \times \text{კოლ}^{-1}$ (გავიხსენოთ, რომ $1 \text{ კოლ} = 1 \text{ კალორია}$). შეგვიძლია გამოვიყენოთ ნერნსტის განტოლება, რათა შევაფასოთ ელექტროქიმიური სისტემის პოტენციალი.

13.3. ელემენტის პოტენციალები და წონასწორობა

13.3.1. ელემენტის პოტენციალები და თავისუფალი ენერგია

გავიხსენოთ, რომ თავისუფალი ენერგია დაკავშირებულია მუშაობის მაქსიმალურად შესაძლო რაოდენობასთან, რომელიც შეიძლება შეასრულოს სისტემამ. გალვანური ელემენტის შემთხვევაში ეს იქნება ელექტრული მუშაობა. ასე

რომ, შეიძლება ჩამოვყალიბოთ დამოკიდებულება თავისუფალ ენერგიასა და ელემენტის პოტენციალს შორის შემდეგნაირად:

$$\Delta G^\circ = -nFE^\circ$$

აქ q მუხტი – ჩანაცვლებულია nF -ით, რადგან ჩვენ ხშირად უფრო ადვილად შეგვიძლია განვსაზღვროთ მოლეკი, ვიდრე მუხტი, როცა ვიხილავთ ქიმიურ პრობლემას. მინუს ნიშანი აუცილებელია, რადგან გალვანურ ელემენტს აქვს დადებითი ელემენტის პოტენციალი და თავისთავად გენერირებს ელექტრულ მუშაობას. ΔG° უნდა იყოს უარყოფითი, რაც მოითხოვება ნებისმიერი თავისთავადი პროცესისათვის. ამ განტოლების საშუალებით შეიძლება გამოვთვალოთ სტანდარტული თავისუფალი ენერგიის ცვლილება ნებისმიერი ელექტროქიმიური რეაქციისათვის, თუ ცნობილია შესაბამისი სტანდარტული აღდგენის პოტენციალები.

13.3.2. წონასწორობის მუდმივები

ΔG° დაკავშირებულია წონასწორობის მუდმივასთან (K) განტოლებით.

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln K$$

თუ ამ განტოლების მარჯვენა მხარეში შევიტანთ ΔG° -ს მნიშვნელობას, მივიღებთ დამოკიდებულებას ელემენტის პოტენციალსა და წონასწორობის მუდმივას შორის:

$$E^\circ = \frac{RT}{nF} \ln K$$

აქ ჩვენ განტოლების ორივე მხარე გავყავით nF , რათა გაგვეცალკევებინა ელემენტის პოტენციალი. ეს განტოლება ასევე წააგავს ნერნსტის განტოლებას და კავშირის დანახვა ადვილია. წონასწორობისას თავისუფალი ენერგიის ცვლილება ნულის ტოლია და რეაქციის კოეფიციენტი Q უტოლდება წონასწორობის მუდმივას K -ს.

ჩვენ შეიძლება მივიღოთ, ელექტროქიმიური რეაქციების უფრო ღრმა აზრი, თუ ნატურალურ ლოგარითმს შევცვლით ჩვეულებრივი ათობითი ლოგარითმით. მიიღება ოდნავ სახეშეცვლილი განტოლება:

$$E^{\circ} = \frac{2,303RT}{nF} \log K$$

მამრავლი 2,303 შემოვიდა ნატურალური ლოგარითმის ათობითით შეცვლის შედეგად: $\ln(10) = 2,303$. როგორც R , ასევე F მუდმივებია. ასე რომ, შეიძლება ამ განტოლების გამარტივება, თუ გამოვიყენებთ ამ მუდმივების რიცხვით მნიშვნელობებს, რადგან ყველაზე მეტად ჩვენ გვაინტერესებს პროცესები სტანდარტულ ტემპერატურაზე $+25^{\circ}\text{C}(298\text{K})$. რასაკვირველია, განტოლების საბოლოო ვერსია სამართლიანია მხოლოდ ამ ტემპერატურაზე:

$$E^{\circ} = \frac{0,0592}{n} \log K \quad (3)$$

თუ ავირჩევთ ელექტროქიმიურ რეაქციას, სადაც ხდება მხოლოდ ერთი ელექტრონის გადატანა 1.0 ვოლტ პოტენციალზე, მივიღებთ

$$K = \frac{10^{(1)(1,03)}}{0,05923} = 7,8 \times 10^{16}$$

ამრიგად, ელემენტის პოტენციალის შეზღუდვა 1.0 ვოლტით იძლევა K -ს ძალიან მაღალ მნიშვნელობას, მაშინაც კი, თუ მხოლოდ ერთი ელექტრონის გადატანა ხდება. K -ს მაღალი მნიშვნელობა მიუთითებს, იმაზე, რომ წონასწორობა ძალიან ხელსაყრელია პროდუქტებისათვის.

13.4. ელექტროლიზი

წონასწორობის განხილვიდან ვიცით, რომ ქიმიური რეაქციები შეიძლება მიმდინარეობდეს ან რეაგენტების ან პროდუქტების მიმართულებით. მაგრამ ასევე ცნობილია ბუნების სწრაფვა წონასწორობისაკენ. თუ ΔH -ს და ΔS -ს მათემატიკური ნიშნები ერთნაირია, შეგვიძლია წონასწორობის მიმართულების მანიპულირება ტემპერატურის ზრდით ან შემცირებით. მაგრამ ფუძე-მჟავას ქიმიაში ან ნალექების წარმოქმნისას არ არის ცხადი, რომ შეიძლება მივიღოთ თავისუფალი ენერგია და

წარმართოთ რეაქცია სასურველი გზით. საწინააღმდეგოდ ამისა, ჟანგვა-აღდგენითი რეაქციის თავისთავადი მიმართულების გამოყენება შესაძლებელია გალვანურ ელემენტში ელექტრული დენის მისაღებად ან შეგვიძლია გამოვიყენოთ გარე ელექტრული დენი, ჟანგვა-აღდგენითი რეაქციის არათავისთავადი მიმართულებით წარმართვისათვის. **ელექტროლიზი** – ეს არის პროცესი ელექტრული დენის გავლისა იონურ ხსნარში ან გამდნარ მარილში ქიმიური რეაქციის მისაღებად.

ელექტროლიტური უჯრედები იყოფა კატეგორიებად გამოყენებული ელექტროდების ბუნების მიხედვით. თუ ელექტროდები ქიმიურად ინერტული მასალებია, რაც უშუალოდ **უზრუნველყოფს** ელექტრონების გზას, პროცესს **პასიური ელექტროლიზი** ეწოდება. როდესაც ელექტროდები მონაწილეობენ ელექტროლიტურ რეაქციაში, საქმე გვაქვს **აქტიურ ელექტროლიზთან**. პასიური ელექტროლიზი გამოიყენება მრეწველობაში იმ მეტალების გასაწმენდად, რომლებიც ადვილად განიცდიან კოროზიას. აქტიური ელექტროლიზი გამოიყენება მასალების დასაფარავად კოროზიის თავიდან აცილების მიზნით.

13.4.1. ელექტრული მემბრანის აღნაგობა

ელექტროლიზის ჩასატარებლად ელექტროდებს უშვებენ ელექტროლიტის ხსნარში ან ნალღობში და აერთებენ მუდმივი დენის წყაროსთან. ხელსაწყოს, რომელშიც ატარებენ ელექტროლიზს – **ელექტროლიზერი** ან **საელექტროლიზო აბაზანა** ეწოდება.

იმ შემთხვევაში, როცა აუცილებელია ანოდზე და კათოდზე წარმოქმნილი ელექტროლიზის პროდუქტების ურთიერთქმედების გამორიცხვა, ელექტროლიზერში შეყავთ ფოროვანი ტიხარი – **მემბრანა**, რომელიც მას ყოფს მინიმუმ ორ – ანოდურ და კათოდურ სივრცედ. ხსნარს ანოდურ სივრცეში ეწოდება ანოლიტი, ხოლო კათოდურში – კათოლიტი. მემბრანები არის ჩაძირული და გამფილტრავი სახის. ჩაძირულ მემბრანებს უნდა ქონდეთ დიდი დიფუზიური

წინაღობა და სელექტიურად უნდა ატარებდნენ მხოლოდ ელექტროლიტის იონებს, მაგრამ უნდა შეაჩერონ ელექტროლიზის პროდუქტები. გამფილტრავ მემბრანებს, რომელთაც დაბალი დიფუზური წინაღობა აქვთ, იყენებენ იმ შემთხვევაში, როცა ელექტროლიზს ატარებენ უკუდენით. ელექტროლიტი გაედინება მემბრანაში ერთი ელექტროდული სივრციდან მეორეში იონთა მოძრაობის საწინააღმდეგოდ, რომლებიც განაპირობებენ ხსნარის ელგამტარობას.

მემბრანები უნდა ხასიათდებოდნენ მაღალი ქიმიური მდგრადობით ელექტროლიზის პროცესში და საკმაო მექანიკური სიმტკიცით. მემბრანებს ამზადებენ ასბესტისაგან, კერამიკისაგან, პლასტმასებისაგან. ზოგ შემთხვევაში, მაგალითად, ნალღობთა ელექტროლიზის დროს, იყენებენ ლითონურ მემბრანებს. ასევე ხმარობენ იონიტურ მემბრანებს, რომლებიც მხოლოდ ერთი სახის მუხტის (კათიონის ან ანიონის) გამტარია. მემბრანები არა მხოლოდ ეწინააღმდეგება ელექტროლიზის პროდუქტების ურთიერთქმედებას, არამედ უნარი აქვთ ხელი შეუშალონ ან შეამცირონ ელექტროდებზე გამოყოფილი პროდუქტების შექცევადი დაჟანგვა ან აღდგენა. ამ შემთხვევაში იყენებენ ჩადირულ ან იონიტურ მემბრანებს.

მემბრანები ხასიათდება მოცულობითი ფორიანობით - g და გადენის უნარით. g ხასიათდება ფორების მოცულობითი წილით მემბრანის მთელ მოცულობასთან შედარებით და განისაზღვრება ტოლობით

$$g = 1 - d_{\text{მოჩვ}} / d_{\text{ქეშ}}$$

სადაც $d_{\text{მოჩვ}}$ - მემბრანის მოჩვენებითი სიმკვრივეა, $d_{\text{ქეშ}}$ - ჭეშმარიტი სიმკვრივე.

მოცულობითი ფორიანობა იზომება წილადური რიცხვით, ან პროცენტებით.

მემბრანის გადენის უნარი P დამოკიდებულია მემბრანის გამფილტრავ ზედაპირზე S (სმ^2), სისქეზე δ (სმ), ჰიდროსტატიკური წნევაზე h ($\text{სმ. H}_2\text{O}$), სიბლანტეზე η (სპუაზი) და გატარების დროზე τ (სთ)

$$P = K \frac{Sh\tau}{\delta\eta}$$

სადაც K - გამტარობის კოეფიციენტი, რომელიც დამახასიათებელია მოცემული სახის მემბრანისათვის.

13.4.2. ელექტროლიზი და პოლარობა

ელექტროლიზი ცვლის სისტემაში ელექტროდების პოლარობას. იმ რეაქციების ნაცვლად, რომლებიც თავისთავად მიმდინარეობს ელექტროდებზე, გარე ენერგიის მიწოდება იწვევს შეცვლად რეაქციებს. ამრიგად, აღდგენისათვის ელექტრონები იძულებით მიდიან კათოდთან ელექტროლიტურ რეაქციაში. კათოდი ჯერ კიდევ აღდგენის ადგილია, მაგრამ ელექტროლიზის დროს ის უარყოფითად არის დამუხტული, რადგან გარე ენერგიის მიწოდება აიძულებს ელექტრონებს იმოძრაონ რეაქციის ადგილისაკენ. ანოდი ჯერ კიდევ აღდგენის ადგილია, ის დადებითად არის დამუხტული. მასალის იძულებით დაჟანგვისას გარე ენერგია უზიდავს ელექტრონებს მოშორდნენ ჟანგვის რეაქციის ადგილს.

13.5. ელექტროლიზი და სტექიომეტრია

13.5.1. დენი და მუხტი

როდესაც დენი იზომება ელექტრულ წრედში, აკვირდებიან მუხტის მოძრაობას დენის ძირითადი ერთეული, ამპერი (ა) არის კომბინირებული ერთეული, რომელიც იზომება როგორც ერთი კულონი წამში $1\text{ ა} = 1\text{ კლ/წ}^{-1}$. დენს ზომავენ ამპერმეტრით. თუ ცნობილი დენი გადის წრედში ცნობილ დროში, მუხტი ადვილად გამოითვლება

მუხტი=დენი×დრო

$$Q = I \times t$$

როგორც წესი, Q გამოისახება კულონებში, I – ამპერებში (კულონი×წამი) და t წამებში. ჩვენ უკვე შემოვიტანეთ ფარადეის მუდმივა, რომელიც არის ერთი მოლი ელექტრონების მუხტი: $F = 96,485$ კალ მოლ σ^{-1} . ასე რომ, იმისათვის, რომ

გამოვთვალოთ მუხტის რაოდენობა, რომელიც გადის ელექტროლიტურ უჯრედში, უნდა ვიცოდეთ გამავალი ელექტრონების მოლების რიცხვი. თუ დავუშვებთ, რომ ცნობილია იმ ელექტრონების რაოდენობა, რაც საჭიროა თითოეული მუხტის კათიონის აღდგენისათვის, ადვილად გამოვთვლით დამფარავი მასალის მოლების რიცხვს. ამის ცოდნა აუცილებელია რკინა-ნაკეთობების გალვანური დაფარვის დროს.