

УДК 547.222 : 541.6

КОЛЬЦЕГРАННЫЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ МОЛЕКУЛ ХЛОРУГЛЕРОДОВ. 1. ЧЕТЫРЕХХЛОРИСТЫЙ УГЛЕРОД

¹ М.С. Салахов, ¹ Б.Г. Багманов, ¹ О.Т. Гречкина, ² Н.А. Кадырова

¹Институт полимерных материалов Национальной АН Азербайджана

²Бакинский государственный университет

e-mail: ipoma@science.az

Предлагается способ изготовления кольцеградской модели для визуализации молекулы четыреххлористого углерода.

Согласно квантово-химической теории строения вещества, основными параметрами, определяющими индивидуальность молекулы, является электронное строение, которое определяется стереохимической конфигурацией данной молекулы [1]. Обычно для визуализации конфигурации молекул используют различные механические модели: тетраэдрические [2], шаростержневые [3], модель Дрейдинга [4] и Стюарта-Бриггеба [5]. Каждая из этих моделей сыграла огромное значение при визуализации пространственного строения органических молекул, их конфигурации и конформации.

Однако ни одна из этих моделей не иллюстрирует электронную конфигурацию составляющих молекулу атомов, и поэтому не отражает их истинную пространственную структуру.

В последние годы разработана концепция создания и использования комплекса кольцеградных учебных моделей атомов и молекул для изучения строения веществ, а также графические программы для составления методических рекомендаций по производству наборов моделей кольцеградников [6], где отражаются электронные орбитали каждого атома.

Кольцеградную модель атома впервые предложил К.Снелсон в 1960 г. [7], и независимо от него такую же модель атомов предложил А.Кушилев [8].

Кольцеградные модели электронных поверхностей химических соединений

являются необходимым дополнением к традиционным шаростержневым и полусферическим моделям, демонстрирующим своим образованием закономерности формообразования молекулы.

В настоящее время изготовлены кольцеградные модели, визуализирующие распределение электронов атомов H, C, Li, N, O, F, Ne и молекул HF, H₂O, CH₄, HCl, NaCl, SCl₂, PCl₃, AlCl₃, H₂Se, CO₂, а также схемы образования неполярных и полярных связей отдельных молекул [6].

Такие модели наглядно демонстрируют квантово-химическое понятие образования ковалентной связи и распределение электронной плотности в молекуле, что является определяющим фактором формирования пространственной структуры.

В литературе отсутствуют данные о кольцеградных моделях для визуализации молекул хлоруглеродов, обладающих особой стереохимической структурой [9], что обусловлено как сильным электроотрицательным характером атомов хлора, а также их большим объемом, стабилизирующим энергетически наиболее выгодную конформационную форму молекулы.

В данной работе впервые обсуждается изготовление кольцеградных моделей для CCl₄, являющимся первым представителем гомологического ряда предельных хлоруглеродов общей формулы C_nCl_{2n+2} [10].

Молекула четыреххлористого углерода так же как молекула метана обладает строго симметричной пространственной структурой,

обеспечивающей тетраэдрический угол $109^{\circ}28'$ между связями, длины которых равны 0.176 нм [10]. Эти факты позволяют построить кольцеванную модель, заменив атомы водорода в молекуле метана на атомы хлора.

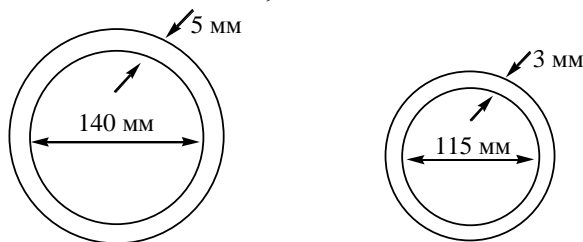
В соответствии с теорией отталкивания валентных электронов [11], молекула тетрахлорметана, так же как молекула метана, имеет точечную симметрию и поэтому сохраняется строгое тетраэдрическое расположение атомов хлора, хотя по данным рентгеноструктурного анализа [12] молекула CCl_4 в кристаллическом состоянии не сохраняет точечной симметрии.

В связи с этим для более детальной визуализации пространственного строения молекулы CCl_4 интересно рассмотреть геометрию этой молекулы в виде кольцеванной модели.

Поскольку атом хлора имеет 17 электронов, расположенных по схеме $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$, то объем его намного больше,

чем объем водорода и, следовательно, в тетраэдрическом расположении атомов в CCl_4 их взаимодействие друг с другом будет отличаться от взаимодействия водородных атомов в молекуле метана. Такое отличие открывает новые возможности для более детальной демонстрации электронной структуры и моделирования молекулы CCl_4 .

Используя отличительные особенности электронной структуры атомов хлора, нами изготовлен набор для сборки кольцеванной модели молекул хлоруглеродов из полимерной трубки. Для того чтобы из этих трубочек сделать кольца, их концы объединялись за счет стержневых палочек длиной около 1 см. Для зеленых колец, символизирующих атом хлора ($R_{ион} = 1.81 \text{ \AA}$), длина трубочек 140 мм, а для атомов углерода - кольца черного цвета ($R_{ион} = 0.63 \text{ \AA}$) - длина трубочек 115 мм [13] (рис.1).



хлор - зеленый цвет

углерод - черный цвет

Из таких колец составлена модель молекулы четыреххлористого углерода, которая представлена на рис.2.



Рис. 1. Кольцеванная модель CCl_4

Электронные оболочки сложных атомов составлены из нескольких электронов, изображаемых кольцами. Эти кольца окружают ядро и взаимодействуют друг с другом: они притягиваются к ядру, и отталкиваются друг от друга. В зависимости от числа электронов, образуются разное количество оболочек.

Представим себе, каким образом могут располагаться одноименно заряженные

кольца вокруг общего центра притяжения. Два кольца будут располагаться в параллельных плоскостях. Так как кольца определяют плоскости своим положением, то композиции более чем из двух колец похожи на многогранники: 4 кольца - 4 грани - тетраэдр; 8 колец - 8 граней – октаэдр.

Также нами были собраны модели хлоруглеродов из готовых металлических колец с соответствующими параметрами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Сигал Дж. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. М. 1980. 216 с.
2. Дроздов С.Н. // Химия в школе. 1982. №3. С. 52-54.
3. Шевченко С.М.// Химия и жизнь. 1985. № 4. С.8.
4. Потапов В.М. /Стереохимия. М. 1976. С. 17-27.
5. Илиел Э. /Стереохимия соединений углерода. Пер. с англ. М. 1965. С. 20-21.
6. Кожевников Д.Н. Автореф. дисс. на соискание уч. степени канд. педаг. наук. М. 2004. 21 с.
7. Goedon A.J. // J.Chem. Educ. 1970. № 47. P.30-32.
8. Кушелев А.Ю. Энциклопедия "Наномир" (электронное издание) - <http://subscribe.ru/archive/science.news.nanoworldnews/200612/23132400.html>
9. Salakhov M.S., Guseinov M.M.// Y.Chem.Tech. 1978. P. 44-51.
10. Zefirov N.S., Shestakova T.G., Kirpichenok M.A. Chemistry of hexachlorocyclopentadiene and related compounds. M.G.U. 1985. P. 15.
11. Гиллеспии Р. / Геометрическая молекула. Под ред. Ю.А. Пентина. М.:Мир. 1975. С. 175.
12. Parameswaren J., Ellist D. // J. Chem. Phys. 1973. v. 58. № 5. P.2088-2095.
13. Кожевников Д.Н. Моделирование форм электронных оболочек атомов и молекул химических соединений с помощью упрощенной модели электрона в виде замкнутого контура с током.//Сб. науч. ст. (Материалы Международного Научного Конгресса 22-27.06. 1998г.) СПб.: Изд-во Политехника. 1999. С.40-47.

XLORKARBON MOLEKULLARININ VIZUALLAŞMASI ÜÇÜN HƏLQƏÜZLÜ MODELLƏR. 1. DÖRDXLORLU KARBON

M.S.Salahov, B.T.Bağmanov, O.T.Qreçkina, N.A.Qədirova

Xlorkarbon molekullarının vizuallaşmasında həlqəüzlü modellərin üstünlüyü müzakirə olunmuş və dördxorlu karbon molekulu üçün hazırlanma yolları köstərilmişdir

RINGHEDRAL MODELS FOR VISUALIZATION OF MOLECULES OF CHLOROCARBONS. 1.CARBON TETRACHLORIDE

M.S.Salakhov, B.G. Bagmanov, O.T.Grechkina, N.A.Kadyrova

A method of the development of ringhedral model for visualization of the molecules carbon tetrachloride has been offered.