

UOT 541.621.22

FULLEREN MOLEKULLARINDA KİMYƏVİ RABİTƏ SAYLARI PROBLEMI

M.S.Salahov, B.T.Bağmanov, Z.S.Abbasov

AMEA-nın Polimer Materialları İnstitutu
AZ 5004 Sumqayıt, S.Burğun küç.,124; e-mail:ipoma@science.az

Məqalə J_n -fullerenlərdə kimyəvi rabitələrin ümumi sayı, onların müxtəlif növlərinə uyğun miqdarların tapılması üçün riyazi üsulun tətbiqinə həsr olunmuşdur.

Açar sözlər:fulleren, kimyəvi rabitə

Kimyəvi birləşmələrdə rabitə saylarının riyazi üsulla, qrafik formullardan istifadə etmədən hesablanma qaydası haqqında əvvəlki məqalələrimizdə məlumat vermişdik [1-3]. Məlumdur ki, fərqli saylarda karbon atomları olan fulleren molekulları qapalı fəzavi quruluşa malik olduqları üçün, onlarda rabitələrin ümumi sayı və ayrı-ayrı rabitə növləri saylarının qrafik formullar vasitəsi ilə hesablanması bu quruluşların vizuallaşmasının çətinlikləri baxımından müəyyən problemlər yaradır. Tərəfimizdən təklif edilmiş düsturların modifikasiya olunması vasitəsilə bu tip

birləşmələrdə ümumi və müxtəlif rabitə saylarını az bir vaxtda, dəqiq hesablamaq mümkündür.

Bundan ötrü müxtəlif sayda karbon atomları olan J_n fulleren molekullarının özünəməxsus fəzavi quruluşu və həndəsi xüsusiyyətləri nəzərə alınmaqla kimyəvi rabitə saylarının riyazi yolla hesablanması üçün tərəfimizdən ilk dəfə təklif olunmuş düsturların tətbiqi uğurlu nəticələr verdi.

Aşağıda verilmiş düsturdan istifadə etməklə fulleren (J_{60}) və fulleren (J_{540}) molekullarında ümumi rabitə saylarının hesablanması qaydasını nəzərdən keçirək.

$$A_{(\text{üm})} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} \quad (1)$$

burada: $A_{(\text{üm})}$ - molekuldakı kimyəvi rabitələrin ümumi sayı, a_1, a_2 -müxtəlif element atomlarının sayı, e_1, e_2 -müvafiq olaraq həmin elementlərin kimyəvi rabitə yaranmasına sərf

etdikləri valent elektronlarının sayıdır. Düsturun fulleren J_{60} və J_{540} -a tətbiqi aşağıdakı nəticəni verir:

$$A_{(\text{üm})[C_{60}]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{60 \cdot 4}{2} = 120$$

$$A_{(\text{üm})[C_{540}]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{540 \cdot 4}{2} = 1080$$

Qeyd etmək lazımdır ki, fulleren molekullarının törəmələrində (fulleritlərdə) karbon atomları ilə yanaşı digər element atomlarının da iştirakı mümkündür. Lakin bəsit

maddə kimi yalnız bir növ atomdan – karbon atomlarından ibarət olan fulleren molekulları üçün yuxarıda verilən düsturu (1) aşağıdakı kimi sadə şəkildə ifadə etmək olar:

$$A_{(\text{üm})} = \frac{a_{(c)} \cdot 4}{2} = 2a_{(c)} \quad (2)$$

Burada fulleren molekullarında karbon atomlarının kimyəvi rabitə yaranmasına dörd valent elektronu sərf etdiyi nəzərə alınmışdır. Bu

formuldan istifadə etməklə fulleren J_{60} , J_{80} və J_{540} molekullarında ümumi rabitə saylarının hesablanması aşağıdakı nəticələr verir:

$$A_{(\text{üm})[C_{60}]} = 2a_s = 2 \cdot 60 = 120$$

$$A_{(\text{üm})[C_{80}]} = 2a_s = 2 \cdot 80 = 160$$

$$A_{(\text{üm})[C_{540}]} = 2a_s = 2 \cdot 540 = 1080$$

Məlumdur ki, fulleren molekulları beş və altı karbonlu tsiklik quruluşlardan əmələ gəlmişdir. Bunu nəzərə almaqla fulleren

molekullarında karbon atomlarının sayı ilə beş və altı bucaqlı həndəsi fiqurların sayı arasında asılılığı aşağıdakı kimi ifadə etmək olar:

$$a_{(c)} = \frac{60 + 6b}{3} = \frac{6(10 + b)}{3} = 2(10 + b) \quad (3)$$

Fulleren molekullarında siqma (σ) rabitə saylarını hesabladığımızda nəzərə almaq lazımdır ki, bu molekullar karbon atomlarından ibarət 12

ədəd beşbucaqlı və dəyişik sayda altıbucaqlı həndəsi quruluşlardan təşkil olunur. Belə olduğu üçün məlum düstur [4] aşağıdakı şəkil alır:

$$A_{(\sigma)} = \frac{60 + 6b}{2} = \frac{6(10 + b)}{2} = 3(10 + b) \quad (4)$$

burada: $A_{(\sigma)}$ - molekuldakı siqma (σ) rabitələrin ümumi sayı, b - altıbucaqlı həndəsi fiqurların sayıdır. (3) düsturundan « b »-nin qiymətini tapıb

(4) düsturunda yerinə yazsaq, siqma (σ) rabitə saylarını hesablamaq üçün əlverişli düstur alınır:

$$a_{(c)} = 2(10 + b)$$

$$10 + b = \frac{a_{(c)}}{2}$$

$$b = \frac{a_{(c)}}{2} - 10 = \frac{a_{(c)} - 20}{2}$$

$$A_{(\sigma)} = 3(10 + b) = 3 \left(10 + \frac{a_{(c)} - 20}{2} \right) = 3 \frac{20 + a_{(c)} - 20}{2} = \frac{3}{2} a_{(c)}$$

$$A_{(\sigma)} = \frac{3}{2} a_{(c)} \quad (5)$$

Beləliklə, məsələn fulleren (J_{100}) molekulunda siqma (σ) rabitə sayları aşağıdakı düsturla hesablanabilir.

$$A_{(\sigma)[C_{100}]} = \frac{3}{2} \cdot 100 = 150$$

Nəticə olaraq, müxtəlif sayda karbon atomları olan istənilən fulleren molekullarında (σ) rabitə saylarını düstur vasitəsilə çox az bir vaxtda və dəqiq hesablamaq mümkün olur.

π -Rabitə sayları isə ümumi ($A_{\text{üm}}$) və σ -rabitə sayları fərqi bərabər olduğu üçün onların sayı aşağıdakı qaydada tapılmalıdır:

$$A_{(\pi)} = 2a_{(c)} - \frac{3}{2} a_{(c)} = \frac{4a_{(c)} - 3a_{(c)}}{2} = \frac{a_{(c)}}{2}$$

$$A_{(\pi)} = \frac{a_{(c)}}{2} \quad (6)$$

J_{60} və J_{540} fulleren molekullarında π -rabitə sayları aşağıda verilmiş düsturlarla hesablanabilir:

$$A_{(\pi)[C_{60}]} = \frac{a_{(c)}}{2} = \frac{60}{2} = 30$$

$$A_{(\pi)[C_{540}]} = \frac{a_{(c)}}{2} = \frac{540}{2} = 270$$

Beləliklə, tərəfimizdən ilk dəfə müxtəlif sayda karbon atomları olan fulleren molekullarında ümumi, siqma (σ) və pi (π) rabitə sayla-

rının təklif olunan düsturlar vasitəsilə az bir vaxtda, dəqiq hesablanmasının nə qədər əlverişli olması təcrübə olaraq təsdiq olunur.

ƏDƏBİYYAT

1. Салахов М.С., Багманов Б.Т., Аббасов З.С., Математическое выражение количества связей в химических соединениях. // Ж. «Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук». Москва. 2010. №8. С.41-44.
2. Salahov M.S., Bagmanov B.T., Abbasov Z.S. Kimyəvi birləşmələrdə rəbitə saylarının riyazi ifadəsi. Pedaqoji Universitetin xəbərləri, Təbiət elmləri seriyası, 2008. №5. səh.12-17.
3. Salahov M.S., Abbasov V.M., Bagmanov B.T., Abbasov Z.S., Molekullarda kimyəvi rəbitə saylarının hesablanması problemi. // Kimya məktəbdə jurnalı. 2008. №3. səh.3-12.
4. Салахов М.С., Багманов Б.Т., Гречкина О.Т., Аббасов З.С., Перспективы расчетных методов в установлении пространственной структуры в ряду норборнедикарбоновых кислот.// Материалы VII Международной конференции «Наука и инновация». Болгария. 2011. С.59-67.

ПРОБЛЕМА РАСЧЕТА КОЛИЧЕСТВА ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ В МОЛЕКУЛАХ ФУЛЛЕРЕНОВ

М.С.Салахов, Б.Т.Багманов, З.С.Аббасов

Статья посвящена применению математического метода для нахождения общего количества химических связей и их различных типов в молекулах фуллеренов C_n .

Ключевые слова: фуллерен, химическая связь

PROBLEM OF CALCULATION OF THE QUANTITY OF CHEMICAL BONDS IN FULLERENE MOLECULES

M.S.Salakhov, B.T.Bagmanov, Z.S.Abbasov

The paper has been devoted to the application of mathematical method for identification of total quantity of chemical bonds and their various types in C_n fullerene molecules.

Keywords: fullerene, chemical bonds.

Redaksiyaya daxil olub 17.04.2012.