

Azərbaycan Kooperasiya Universiteti

Ziyafət Abbasov

**KİMYƏVİ RABİTƏ SAYLARININ HESABLAMA
NƏZƏRİYYƏSİ: DÜSTURLAR VƏ ONLARIN
EKSPERİMENTAL TƏSDİQİ**

*Azərbaycan Kooperasiya Universitetinin
Elmi Şurasının 12 sentyabr 2025-ci il tarixli 01 sayılı
iclasının qərarı ilə çapa tövsiyə olunur.*

Bakı - 2025

Elmi Redaktor:

Əli Zal oğlu Zalov

Kimya elmləri doktoru, professor

**Tərtibat və texniki
redaktə:**

Tural Kamran oğlu Şahbazov

*(Düsturların texniki tərtibatı,
mətnin redaktəsi və kitabın ümumi
dizaynı üzrə)*

Rəyçilər:

Kərim Əvəz oğlu Quliyev

Kimya elmləri doktoru, dosent

Sultan Qəşəm oğlu Əliyev

Kimya elmləri namizədi, dosent

Ziyafət Sabir oğlu Abbasov.

**Kimyəvi rabitə saylarının hesablama nəzəriyyəsi:
Düsturlar və onların eksperimental təsdiqi. Bakı-2025. ADPU-
nəşriyyatı. 192 s.**

Bu dərs vəsaitində kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsullarla hesablanması və onların tədris prosesində tətbiqi yollarını izah etmişəm. Burada təqdim etdiyim düsturlar vasitəsilə müxtəlif kimyəvi birləşmələrdə ümumi, siqma və pi rabitələrinin sayını qrafik formuldan istifadə etmədən hesablamaq mümkündür. Mən kimya və riyaziyyat fənlərinin integrasiyasına əsaslanan bu yanaşma ilə kimyəvi rabitələrin mahiyyətini daha aydın və dəqiq şəkildə izah etməyə çalışmışam. Bu vəsait müəllimlərə, tələbələrə və kimya elminə maraq göstərən hər bir oxucuya praktiki və nəzəri baxımdan kömək məqsədilə hazırlanmışdır. Buradakı izahlar və nümunələr dərslərin daha anlaşılan və tətbiq yönümlü keçirilməsinə, kimya elminin riyazi əsaslarla öyrənilməsinə və elmi düşüncənin inkişafına xidmət edir.

© Ziyafət Abbasov

REDAKTORDAN

Bu gün təhsilin qarşısında duran əsas məqsədlərdən biri elmi bilikləri şagird və tələbələrə sadə, anlaşılan və effektiv yollarla çatdırmaqdır. Elm və texnologiyanın inkişafı bizdən tələb edir ki, tədris prosesində **yenilikçi yanaşmalar, praktik üsullar və fənlər-arası əlaqələr** daha çox tətbiq olunsun.

Ziyafət Abbasov Sabir oğlunun müəllifi olduğu “Kimyəvi rabitə saylarının hesablama nəzəriyyəsi: düsturlar və onların eksperimental təsdiqi” adlı dərs vəsaiti məhz bu çağırışlara cavab verir. Müəllif burada kimya fənninin ən əsas mövzularından biri olan **kimyəvi rabitələrin** sadəcə sxematik deyil, **riyazi yollarla necə təhlil və hesablandığını** ətraflı və praktiki şəkildə izah edir.

Kimyəvi rabitələrin riyazi yolla ifadə olunması, təkcə kimya elminin deyil, eyni zamanda riyaziyyatın da imkanlarını səfərbər edərək bu iki sahənin qarşılıqlı vəhdətini nümayiş etdirir. Bu yanaşma yalnız mövcud bilikləri sistemləşdirməklə kifayətlənmir, həm də fənlərarası əlaqələrin tətbiqinə əsaslanaraq tədrisdə və elmi tədqiqatlarda yeni imkanlar yaradır.

Burada təqdim olunan **formullar, nümunələr və izahlar**, dərslərin interaktiv və məntiqə əsaslanan şəkildə qurulmasına yardımçı olacaq. Bu isə kimya fənninə marağı artıracaq və elmi təfəkkürün inkişafına real töhfə verəcəkdir.

Ziyafət Abbasovun bu işi yalnız dərs vəsaiti deyil, həm də **təhsilin bütün pillələrində tətbiq oluna biləcək metodik bir təklif**, elmi yanaşmadır.

Bu kitab həm **Azərbaycan təhsil sisteminə**, həm də **beynəlxalq metodik bazaya** töhfə verə biləcək səviyyədə ciddi və yenilikçi yanaşmalarla zəngindir. Mən müəllifin bu elmi təşəbbüsünü yüksək qiymətləndirir və kimya fənnini daha dərinləndirən öyrənmək istəyən hər kəsə bu əsəri diqqətlə oxumağı tövsiyə edirəm.

Redaktor: Ked, prof. Əli Zal oğlu Zalov

Ön Söz

Hörmətli şagirdlər, tələbələr, müəllimlər və kimya elminə maraqlı oxucular!

Əlinizdəki bu dərs vəsaiti “Kimyəvi rabitə saylarının hesablama nəzəriyyəsi: düsturlar və onların eksperimental təsdiqi” müxtəlif təhsil pillələri üzrə kimya fənninin daha səmərəli və müasir formada öyrənilməsini və tədrisini təmin etmək məqsədilə hazırlanmışdır.

Kimya elminin əsas anlayışlarından biri olan kimyəvi rabitə yalnız qrafik və şərti göstəricilərlə deyil, **hesablamaya əsaslanan riyazi yanaşmalarla** da izah oluna bilər. Bu yanaşma, həm ümum-təhsil məktəblərində təməl anlayışların aydınlaşdırılması, həm də **ali təhsil müəssisələrində** dərin elmi təhlil və modelləşdirmə baxımından çox mühüm əhəmiyyətə malikdir.

Bu dərs vəsaitində təqdim olunan riyazi düsturlar, formullar və misallar vasitəsilə:

- Orta məktəb şagirdləri rabitələrin hesablanması **sadə və tətbiq edilə bilən şəkildə** öyrəni biləcək,
- Kimya müəllimləri bu dərs vəsaitindən **tədris və metodiki material kimi** istifadə edəcək,
- Ali məktəb tələbələri və müəllimləri isə **elmi və praktiki tədqiqatlarda tətbiq oluna biləcək sistemli model** əldə edəcəklər.

İnanırıq ki, bu kitab yalnız kimyanın öyrənilməsini deyil, həm də riyaziyyatla sintezini təşviq etməklə **təfəkkürün inkişafı** və **elmi təfərrüatların qavranması** üçün mükəmməl vasitə olacaq.

Burada verilən nümunələr, formullar və izahlar, istər tədris, istərsə də elmi tədqiqatlar zamanı sizə **praktik və dəqiq istiqamət** göstərəcəkdir.

Uğurlar arzulayırıq!

**Dərin hörmətlə,
Ziyafət Abbasov Sabir oğlu**

GİRİŞ

 *Kimya və Riyaziyyatın Kəşfdiyi Yerdə Təhsil və Tədqiqat Üçün Yeni Bir Baxış*

Müasir dövrdə elm və texnologiyanın yüksək tempə inkişafı, təbiət elmlərinin xüsusilə də kimya fənninin daha dərinə, sistemli və integrasiyalı şəkildə öyrənilməsinə zəruri etmişdir. Kimya elmi uzun müddət ərzində əsasən müşahidələrə və qrafik modellərə əsaslansa da, günümüzdə **dəqiq hesablamalara, riyazi modellərə və formullaşdırılmış yanaşmalara** əsaslanan tədris və tədqiqat metodları ön plana çıxmaqdadır.

Kimyəvi birləşmələrin quruluşu, xassələri və davranışlarını düzgün anlamaq üçün onların daxilindəki **kimyəvi rabitələrin sayı və növləri** haqqında dolğun təsəvvür formalaşdırmaq vacibdir. Bu rabitələr, atomları bir-birinə bağlayan əsas qüvvələr olmaqla, maddələrin fiziki və kimyəvi xassələrinə birbaşa təsir göstərir. Ona görə də bu rabitələrin yalnız təsviri şəkildə deyil, **daha dəqiq riyazi üsullarla və düsturlarla hesablanaraq öyrədilməsi** zəruridir.

Kimyəvi birləşmələrdə rabitələrin sayını müəyyənləşdirmək üçün praktik və elmi cəhətdən əsaslandırılmış yanaşmanın təqdim edilməsi bu dərş vəsaitinin başlıca məqsədini təşkil edir. Bu yanaşma vasitəsilə müxtəlif molekul quruluşlarında mövcud olan ümumi rabitə, siqma və pi (π) rabitələrinin miqdarını sadə riyazi düsturlar əsasında hesablamaq mümkündür. Ən önəmlisi isə odur ki, bu üsul molekulun qrafik formuluna müraciət etmədən, yalnız kimyəvi tərkibə əsaslanaraq dəqiq nəticələr əldə etməyə imkan verir. Beləliklə, təqdim edilən metodika kimyanın nəzəri aspektlərini daha əlçatan və sistemli şəkildə öyrənməyə şərait yaradır.

Bu yanaşma yalnız bir tədris vasitəsi olaraq deyil, həm də **tədqiqatçılar üçün mühüm bir elmi metodoloji baza** rolunu oynayır. Dərş vəsaitində təqdim olunan riyazi düsturlar molekulaların quruluşunun modelləşdirilməsi, yeni kimyəvi birləşmələrin proqnozlaşdırılması və **riyazi kimya** istiqamətində innovativ tətbiqlərin işlənib hazırlanması üçün geniş imkanlar yaradır.

Bu dərs vəsaiti müxtəlif auditoriyalar üçün istifadəyə uyğundur:

- **Orta məktəb şagirdləri və müəllimləri üçün:** Kimyəvi rabitələrin əsas növlərini öyrənmək və onları sadə riyazi dusturlarla hesablamağı mənimsəmək üçün;
- **Ali məktəb tələbə və müəllimləri üçün:** Dərinləşdirilmiş və sistemli yanaşma ilə rabitələrin hesablanması, molekulyar strukturların analizi və elmi tədqiqatlarda tətbiqi üçün;
- **Kimya üzrə tədqiqatçılar və metodistlər üçün:** Təhsil prosesində və elmi mühidə tətbiq edilə biləcək yeni, çevik və dəqiq model kimi.

Bu yanaşma eyni zamanda **kimya ilə riyaziyyat fənninin integrasiyasını** [1] gücləndirir, bu iki fundamental sahənin vəhdətini real nümunələrlə nümayiş etdirir. Hər bir oxucu burada öz səviyyəsinə uyğun məlumat tapacaq, tətbiq olunan formullarla həm tədris, həm də araşdırma baxımından praktik nəticələr əldə edəcəkdir.

Bu dərs vəsaiti müəllifin 2022-ci ildə müdafiə etdiyi “Ümumtəhsil məktəblərində kimyanın tədrisi zamanı kimyəvi rabitə saylarının riyazi hesablanması tətbiqi yolları.” [1]. adlı dissertasiya işi əsasında hazırlanmışdır. Kitabda istifadə olunan bəzi fikirlər və mətn hissələri dissertasiyadan götürülmüş və genişləndirilmiş formada təqdim olunmuşdur.

Ümid edirik ki, bu dərs vəsaiti sizə kimyanın tədrisində, öyrənilməsində və tətbiqində yeni baxış formalaşdıracaq və elmə olan marağınızı daha da artıracaq.

I FƏSİL. KİMYƏVİ RABİTƏLƏRİN TƏDRİSİ VƏ RİYAZİ YANAŞMALARIN TƏTBİQİ

1.1. Kimyəvi rabitələrin xüsusiyyətləri

Atomlar maddələrin quruluşunun əsasını təşkil edir və onlar bir-biri ilə birləşərək ya eyni, ya da müxtəlif növlü maddələr əmələ gətirirlər. Əgər bir maddə yalnız bir növ elementin atomlarından ibarətdirsə, bu cür maddələrə **sadə maddələr** deyilir. Əksinə, iki və ya daha çox müxtəlif elementin atomları birləşərsə, **mürəkkəb maddələr** yaranır [1]. Hər iki halda atomlar arasında **kimyəvi rabitələr** əmələ gəlir və bu rabitələr maddələrin sabitliyini və xassələrini müəyyən edir.

Kimyəvi rabitənin yaranması bir sıra amillərlə sıx bağlıdır [1]. Bunlara atom radiusu, ionlaşma enerjisi, elektrona meyllilik (elektrona hərislik) və elektromənfilik daxildir [1]. Bu parametrlər **Dövri sistem** daxilində özünəməxsus qanunauyğunluqlarla dəyişir.

Atomun radiusu nüvə ilə ən uzaq elektron arasındakı məsafə dövrlər və qruplar üzrə fərqli ədədi qiymətlər alır. Dövri cədvəldə **soldan sağa doğru** hərəkət etdikdə protonların sayı artır, nəticədə nüvənin cazibəsi güclənir və elektronlar daha sıx şəkildə nüvəyə çəkilir. Bu səbəbdən atom radiusu **azalır**. Eyni zamanda, **elektromənfilik** və **ionlaşma enerjisi** artır [1]. Əksinə, **qrup daxilində yuxarıdan aşağıya** doğru getdikcə, atomun həcmi artır və radius **böyüyür**, elektromənfilik və ionlaşma enerjisi isə **azalır** [1].

İonlaşma enerjisi [41] neytral atomdan bir elektronun ayrılması üçün tələb olunan enerji atomun xarakterik xüsusiyyətlərindən biridir [1]. Bu enerji nə qədər yüksəkdirsə, atomdan elektron qoparmaq bir o qədər çətin olur. **İonlaşma prosesi endotermikdir**, yəni enerji sərfi tələb edir. Əgər ionlaşma enerjisi azdırsa, bu, həmin atomun **metal xarakteri** güclü olması deməkdir [1].

Elektrona hərislik isə əksinə, atom əlavə bir elektron qəbul edərkən **enerji ayrılması baş verir** [1]. Radius kiçik olduqca, nüvənin cazibə qüvvəsi artdığı üçün atom əlavə elektronu daha güclü cəlb edir və bu zaman ayrılan enerji çox olur.

Atomların kimyəvi rabitə elektronlarını nə dərəcədə cəzb etməsini müəyyən edən göstərici **elektromənfilik** adlanır. Bu parametr **Litium elementi** əsasında standartlaşdırılıb. Dövrəldə soldan sağa irəlilədikcə elektromənfilik artır, qruplarda isə yuxarıdan aşağıya doğru azalır.

Müxtəlif elektromənfilik fərqlərinə görə atomlar arasında fərqli növ rabitələr formalaşır:

Qeyri-polyar kovalent rabitə: Eyni və ya oxşar elektromənfiliyə malik qeyri-metal atomları arasında yaranır (məsələn: O_2 , N_2).

Polyar kovalent rabitə: Elektromənfilik fərqi az olan qeyri-metal atomları arasında yaranır (məsələn: HCl , CO_2) [1].

İon rabitəsi: Elektromənfilik fərqi yüksək olan metal və qeyri-metal atomları arasında baş verir (məsələn: $NaCl$, $Fe(OH)_3$) [1].

Müasir kimya elmi yalnız rabitələrin növlərini təsnif etməklə kifayətlənmir. Bununla yanaşı, bu rabitələrin sayının və növünün riyazi üsullarla müəyyən olunması da mümkündür. Məsələn, bir molekulda neçə **sigma** və neçə **pi** rabitəsinin olduğunu analiz edərək molekulun qrafik formulu, sabilliyi və reaktivliyi haqqında məlumat əldə etmək olur.

Ənənəvi dərsliklərdə dörd əsas rabitə növü (ion, kovalent, hidrogen və metal rabitələri) öyrədilsə də, bu yeni yanaşma üsulu daha dərinə gedərək molekul daxili rabitələrin sayının riyazi hesablanmasına yönəlmişdir. Bu isə kimyəvi maddələrin daha dərinədən başa düşülməsinə və modelləşdirilməsinə şərait yaradır.

1.2. Kimyanın tədrisində riyazi hesablamaların tədrisə inteqrasiyası

Kovalent rabitə, birləşməni təşkil edən atomların valent elektronlarının iştirakı ilə yaranır. Bu səbəbdən kimyəvi rabitənin xüsusiyyətləri, onu meydana gətirən atomların xarici elektron təbəqələrinin quruluşu ilə sıx bağlıdır [1, 8].

Elektronların orbitallarda yerləşməsi, elementlərin hansı qruplara (s, p, d) aid olmasını müəyyən edir. "s" və "p" elementlərində valent elektronları yalnız xarici (sonuncu) təbəqədə yerləşir, "d" elementlərində isə həm xarici, həm də daxili enerji səviyyələrində valent elektronları mövcuddur [1].

Kimyəvi rabitə əmələ gələn zaman valent elektronlar ya tam, ya da qismən iştirak edə bilirlər [1]. Birləşmələrdə atomun rabitə yaradılmasına sərf etdiyi elektronların sayına əsasən elementlər müxtəlif valentlik göstərə bilirlər.

Energetik təbəqələrində həm qoşa elektronlar, həm də boş orbitalları olan atomlar asanlıqla həyəcanlanmağa meyllidirlər [1]. Məsələn, xlor atomu xarici energetik təbəqəsində yeddi valent elektron və boş orbitallara sahibdir və həyəcanlanma vəziyyətinə bağlı olaraq üç, beş və ya yeddi valentli birləşmələr əmələ gətirə bilər.

"s" və "p" elementlərindən fərqli olaraq, "d" elementləri kimyəvi rabitə əmələ gəlməsi prosesində həm xarici, həm də daxili energetik səviyyədə yerləşən elektronlardan istifadə edə bilirlər [1]. Bu qrupa dəmir, xrom, manqan və digər oxşar elementlər daxildir [1].

Kimyəvi birləşmələr yaranarkən, rabitə əmələ gətirən elementin elektron quruluşu adətən ya dublet (məsələn, $1s^2$ elektron quruluşu kimi, H^- , Li^+ , Be^{2+} , B^{3+} ionlarında olduğu kimi) ya da oktet ($ns^2 np^6$) halına çatır (məsələn, C^{-4} , B^{-3} , S^{-2} , Cl^- kimi ionlarda). Bu vəziyyət elementlərin stabil elektron quruluşunu təmin etmək üçün baş verir [1].

Kimyəvi rabitələr əsasən iki növə ayrılır: tək elektronların cütləşməsi ilə yaranan kovalent rabitə və elektronların tam olaraq bir atomdan digərinə keçməsi nəticəsində əmələ gələn ion rabitəsi [1, 7, 15]. Bunlar aşağıdakılardır:

1. Elektromənfilikləri eyni olan qeyri-metal atomları arasında ümumi elektron cütü vasitəsilə yaranan qeyri-polyar kovalent rabitə, çox atomlu sadə maddələrdə H_2 , N_2 , O_2 , F_2 , Cl_2 , J_2 , P_4 , S_8) və üzvi birləşmələrdə, əsasən karbon atomları ara-

sında meydana gəlir (məsələn, $\text{H}_3\text{C} : \text{CH}_3$; $\text{H}_2\text{C} :: \text{CH}_2$ və s) [1].

2. Elektromənfilik dəyərləri bir-birinə yaxın olan iki fərqli qeyri-metal atomu arasında yaranan və ortaq elektron cütü ilə qurulan rabitələrə polyar kovalent rabitələr deyilir. Məsələn, $\text{H}-\text{Cl}$ və ya $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ kimi molekullarda belə rabitələr müşahidə olunur. [1].
3. Metal və qeyri-metal atomlarının elektromənfilik fərqi böyük olduqda, aralarında ion rabitəsi yaranır. Bu zaman metalın valent elektronları tam olaraq qeyri-metal atomuna ötürülür və nəticədə müsbət yüklü metal kationu ilə mənfi yüklü anion yaranır. Bu əks yüklü ionlar arasında elektrostatik cazibə qüvvəsi meydana gəlir və beləliklə ion rabitəsi formalaşır. [1].

Beləliklə, müxtəlif elementlərin kimyəvi rabitə yaratma xüsusiyyətlərinin araşdırılması göstərir ki, həm qeyri-üzvi həm də üzvi birləşmələrin molekullarında **ümumi**, **siqma** və **pi** rabitələrinin sayının hesablanması məsələsi uzun müddət ərzində əsasən qrafik formullarla izah olunmuşdur. Lakin maddənin qrafik formulu verilmədən onun rabitə saylarının **riyazi üsullarla** müəyyən edilməsi ilə bağlı tədris materiallarında sistemli yanaşmalar çox az yer tutmuşdur [1, 12].

Ümumi, **siqma** və **pi** rabitələrinin sayının hesablanması üçün istifadə olunan formullar aşağıdakılardır [1].

$$A_{\text{üm}} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} \quad (1.2.1)$$

Bu ifadədə, $A_{\text{üm}}$ – birləşmədəki ümumi rabitə sayını göstərir, a_1, a_2, a_n – isə müvafiq olaraq molekulda iştirak edən müxtəlif element atomlarının sayını, e_1, e_2, e_n – həmin elementlərin valentliklərini ifadə edir [1, 2].

$$A_{\sigma} = N_{\text{üm}} + S - 1 \quad (1.2.2)$$

Bu ifadədə, A_{σ} – kimyəvi birləşmədə mövcud olan σ -rabitələrinin ümumi miqdarını, $N_{\text{üm}}$ - molekulda iştirak edən atomların ümumi sayını, S - isə molekul daxilindəki tsiklik quruluşların, vəziyyətlərin sayını ifadə edir [1, 2].

$$A_{\text{üm.komp.}} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n + |mk|}{2} \quad (1.2.3)$$

Bu ifadədə, $A_{\text{üm.komp.}}$ - kompleks birləşmədə mövcud olan ümumi kimyəvi rabitələrin sayını göstərir, a_1, a_2, a_n - birləşmədə iştirak edən müxtəlif element atomlarının sayını, e_1, e_2, e_n - isə həmin elementlərin birləşmədəki valentliklərinin ədədi qiymətlərini ifadə edir., m - kompleks birləşmənin daxilindəki daxili sferaların sayını, k - isə bu daxili sferanın yükünün ədədi dəyərini göstərmək üçün istifadə olunur [1, 2].

$$S = n(e - 1) - m + 1 \quad (1.2.4)$$

Bu ifadədə, S - duzlarda tsikliklik say, n - metal atomlarının ümumi miqdarı, e - həmin metalların valentliyi və m - turşu qalığı və hidroksid qruplarının ümumi sayıdır [1, 2].

Əgər (1.2.2) düsturunu tsiklik quruluşlu birləşmələrə tətbiq etsək, bütün duzlarda siqma rabitələrinin sayını hesablamaq üçün ümumi, praktik bir ifadə əldə etmək mümkündür. Bu yanaşma, kimyəvi quruluşun dəyərləndirilməsində və rabitə növlərinin dəqiq müəyyən edilməsində sistemli yanaşmanı təmin edir.

$$A_{\sigma} = N_{\text{üm}} + S - 1 = N_{\text{üm}} + n(e - 1) - m + 1 - 1 = N_{\text{üm}} + n(e - 1) - m$$

$$A_{\sigma} = N_{\text{üm}} + n(e - 1) - m \quad (1.2.5)$$

Bu ifadədə, A_{σ} – duzlarda əmələ gələn siqma rabitələrinin ümumi sayını, $N_{\text{üm}}$ – birləşmədə iştirak edən ümumi atom sayını,

n - metal atomlarının miqdarını, e – həmin metal atomlarının valentliyini, m isə turşu qalığı və ya hidrokسيد qruplarının sayını ifadə edir [1, 2].

$$A_{\pi} = \frac{a_1(e_1-2)+a_2(e_2-2)+\dots+a_n(e_n-2)+2(1-S)}{2} \quad (1.2.6)$$

Bu ifadədə, A_{π} – molekulundakı π (pi)- rabitələrinin ümumi sayını göstərir, a_1, a_2, a_n – müxtəlif kimyəvi element atomlarının molekuldakı miqdarını ifadə edir, e_1, e_2, e_n – müvafiq olaraq həmin elementlərin valentliklərinin ədədi qiymətlərini bildirir, S – molekulda mövcud olan tsikllərin sayını göstərir [1, 2].

$$A'_{\sigma} = N_{\text{üm}} + S - (1 + D) \quad (1.2.7)$$

Bu ifadədə, A'_{σ} – çoxüzlü quruluşa və fırlanma simmetriyasına malik molekularda mövcud olan σ - tipli rabitələrin ümumi miqdarı, $N_{\text{üm}}$ - birləşməni təşkil edən atomların ümumi sayı, S - molekulda mövcud olan tsikllərin (qapalı strukturların) sayı, D isə çoxüzlü və ya fırlanma cismlərinin sayını ifadə edir [1, 2].

$$S = \frac{a_c(C_{\sigma} - 2) + 4}{2} \quad (1.2.8)$$

Bu ifadədə, S - kimyəvi birləşmə molekulundakı tsiklik quruluşların sayını, a_c - molekuldakı karbon atomlarının ümumi miqdarını, C_{σ} - isə hər bir karbon atomuna bağlı olan və tsiklik vəziyyətin formalaşmasında iştirak edən siqma rabitələrinin sayını ifadə edir [1, 2].

Çoxüzlü və fırlanma cismi tipli həndəsi quruluşa malik olan mürəkkəb birləşmələrdə π (pi)- rabitələrin sayını dəqiq müəyyən-ləşdirmək üçün (1.2.6) düsturuna da əlavə “D” parametri daxil edilməlidir. Bu parametr çoxüzlü və ya fırlanma cismlərinin sayını göstərir. Beləliklə, strukturun həndəsi mürəkkəbliyi π (pi)- rabitə-

lərin sayına təsir etdiyindən, hesablama zamanı bu amil nəzərə alınmalıdır [1, 2].

$$A'_\pi = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 + D - S)}{2} \quad (1.2.9)$$

Burada $A'_\pi - \pi$ (pi) rabitələrin ümumi sayı, a_1, a_2, a_n – müxtəlif element atomlarının sayı, e_1, e_2, e_n – müvafiq olaraq həmin elementlərin valentliyi, S – tsiklik saydır.

$$\Delta A_{\text{üm}} = \frac{a_1(e'_1 - e_1) + a_2(e'_2 - e_2) + \dots + a_n(e'_n - e_n)}{2} \quad (1.2.10)$$

Bu ifadədə, $\Delta A_{\text{üm}}$ – reaksiyanın sağ və ya sol tərəfindəki kimyəvi rabitələrin sayları arasındakı fərqi ifadə edir, a_1, a_2, a_n – isə reaksiya zamanı valentliyini dəyişən element atomlarının sayını göstərir, e_1, e_2, e_n – isə həmin elementlərin reaksiyanın sol tərəfindəki valentliklərinin ədədi qiymətləridir, e'_1, e'_2, e'_n – isə reaksiyanın sağ tərəfindəki valentliklərini ifadə edir [1, 2].

$$\Delta A_\sigma = n + S' - (n' + S) \quad (1.2.11)$$

Burada, ΔA_σ – reaksiyanın sağ və sol tərəflərində mövcud olan siqma rabitələrinin sayları arasındakı fərqi göstərir, n, n' – isə reaksiyanın sol və sağ tərəflərində iştirak edən maddələrin əmsallarının cəmini ifadə edir, S, S' – isə reaksiyaya daxil olan və reaksiyanın məhsulu olan maddələrin molekullarındakı tsikl sayını bildirir [1, 2].

Rabitə saylarının hesablanmasına dair yuxarıda qeyd olunan düsturlar (formullar) müxtəlif birləşmə tipləri üçün tətbiq edilə bilər və bu düsturların hər biri barədə ətraflı izahlar kitabın növbəti bölmlərində təqdim olunacaq [1].

II FƏSİL. QEYRİ-ÜZVİ MADDƏLƏRDƏ KİMYƏVİ RABİTƏLƏRİN SAYININ RİYAZİ METODLARLA TƏHLİLİ

2.1. Oksidlərdə kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması

Kimyəvi elementlərin oksigenlə əmələ gətirdiyi birləşmələr oksidlər adlanır. Oksidlərdə oksigen elementinin oksidləşmə dərəcəsi -2 olur [1].

Oksidlər xassələrinə görə aşağıdakı qruplara bölünür:

Əsasi oksidlər (məsələn, natrium oksid, dəmir(II) oksid, mis(I) oksid və s.)

Amfoter oksidlər

Qarışıq oksidlər

Turşu xassəli oksidlər

Əsasi və amfoter oksidlər adətən müxtəlif metallarla oksigenin birləşməsindən yaranır. Turşu oksidləri isə qeyri-metallar və oksidləşmə dərəcəsi $+5$ -dən yuxarı olan metallarla oksigenin reaksiyası nəticəsində əmələ gəlir.

Oksidlərdə və digər kimyəvi birləşmələrdə atomlar oksigenlə siqma və pi rabitələri vasitəsilə birləşir. Atomlar arasında:

tək rabitələr – yalnız σ rabitə,

ikiqat rabitələr – bir σ və bir π rabitə,

üçqat rabitələr – bir σ və iki π rabitə əmələ gətirir.

Kimyəvi rabitə atomları birləşdirən, molekulun qrafik quruluşunu və maddənin fiziki-kimyəvi xassələrini müəyyən edən əsas anlayışlardan biridir [1, 28, 30, 31].

Atomlar arasında yaranan rabitənin növü onların xarici elektron təbəqələrinin quruluşundan asılıdır [1, 44]. Rabitənin əmələ gəlməsində iştirak edən elektronlar valent elektronları adlanır.

“s” və “p” elementlərində bu elektronlar yalnız xarici təbəqədə yerləşir.

“d” elementlərində isə həm xarici, həm də daxili təbəqədə

yerləşə bilər.

Kimyəvi rabitə zamanı atomların xarici energetik səviyyələri tamamlanır. Bu tamamlanma:

adətən oktet (8 elektronluq) səviyyəyə ($\dots ns^2 np^6$),

bəzən isə dublet (2 elektronluq) səviyyəyə ($1s^2$) uyğun olur.

Elektromənfilik fərqiə görə kimyəvi rabitələr aşağıdakı üç əsas tipə ayrılır [1, 32]:

Eyni elektromənfiliyə malik atomlar arasında məsələn, N_2 ($N \equiv N$), O_2 ($O=O$), Cl_2 ($Cl-Cl$) və s [1].

Az fərqi olan elektromənfiliyə malik atomlar arasında məsələn, H_2O ($H-O-H$), HCl ($H-Cl$) və s [1].

Çox fərqi olan elektromənfiliyə malik atomlar arasında məsələn, NaF ($Na-F$), $LiCl$ ($Li-Cl$) və s. [1, 14].

Kimyəvi rabitələr əsasən iki tipə ayrılır:

Siqma rabitələr – atom nüvələri arasında düz xətt boyunca yaranır [1, 43],

Pi rabitələr – p-orbitalların müstəvi üzrə üst-üstə düşməsi ilə yaranır [1, 42].

Siqma rabitələrin yaranmasında həm eyni, həm də müxtəlif formalı (trayektoriyalı) orbitallar iştirak edə bilər [1, 39].



s—s



s—p



p—p



sp^3-s

sp^2-s

$sp-s$



sp^3-sp^3

sp^2-sp^2

$sp-sp$

sp^3-sp^2

sp^3-sp

sp^2-sp

π -rabitə, p-elektron buludlarının müstəvinin sağ və sol tərəfindən qismən örtüşməsi ilə yaranır [1, 40].



Məlumdur ki, iki atom arasında yaranan birqat rabitə yalnız siqma rabitədən ibarət olur, halbuki ikiqat və üçqat rabitələrdə bir siqma ilə yanaşı, pi rabitələr də mövcuddur [1, 51].

Kimyəvi reaksiyaların istilik effekti, entalpiyası, maddələrin yanma və əmələgəlmə istilikləri, rabitələrin enerjisi və tərkibi, doymuşluq səviyyəsi və digər xüsusiyyətlər molekulları təşkil edən atomlar arasında mövcud olan kimyəvi rabitələrin sayından birbaşa asılıdır [1, 9].

Kimyəvi birləşmələrdə ümumi rabitə sayını hesablamaq üçün (1.2.1) düsturundan istifadə olunur [1].

İndi isə qeyri-üzvi birləşmələrin müxtəlif siniflərində qrafik formuldan istifadə etmədən, riyazi üsulla ümumi rabitə saylarının hesablanması metodikasına baxaq [1].

$$A_{üm [P_2O_5]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{2 \cdot 5 + 5 \cdot 2}{2} = \frac{10 + 10}{2} = 10$$

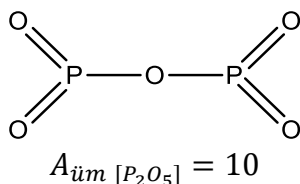
Çoxsaylı nümunələri əhatə edən oksidlər sinfi əsasi, amfoter, qarışıq və turşu oksidləri olmaqla müxtəlif qruplara ayrılır. Bu müxtəlif qruplara aid oksidlərdə ümumi rabitə, həmçinin siqma və pi rabitə saylarının təyin edilməsi kimya sahəsində tez-tez qarşılaşılan məsələlərdəndir [1].

Məsələn, difosfor-pentaoksid (fosfor (V) oksid) molekulunda qrafik formuldan istifadə etmədən ümumi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması aşağıdakı kimi aparılır:

Məlumdur ki, bu birləşmədə iki fosfor atomu (a_1) beşvalentli (e_1), beş oksigen atomu (a_2) isə ikivalentli (e_2) olur.

Bu cür riyazi yanaşmanın düzgünlüyünü yoxlamaq üçün molekulun qrafik formulunu tərtib etməklə əldə edilən nəticələri müqayisə etmək mümkündür. Difosfor-pentaoksidin qrafik struk-

turunun qurulması zamanı nəzərə almaq lazımdır ki, oksid əmələ gətirən elementlərin atomlarının sayı iki olduqda, onlar oksigen atomu vasitəsilə bir-birinə birləşirlər.



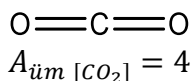
Karbon (IV) oksid və fosfor (III) oksid molekullarında rabitə quruluşuna baxaq və ümumi rabitə saylarını riyazi yolla hesablayaq.

$$A_{üm} [CO_2] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{1 \cdot 4 + 2 \cdot 2}{2} = \frac{4 + 4}{2} = 4$$

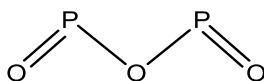
$$A_{üm} [P_2O_3] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{2 \cdot 3 + 3 \cdot 2}{2} = \frac{6 + 6}{2} = 6$$

Əgər molekulların qrafik formullarını tərtib edib kimyəvi rabitə saylarını müəyyən etsək, riyazi üsulla aparılan hesablamalardakı nəticələrlə üst-üstə düşdüyünü müşahidə edərik.

Karbon-dioksiddə molekulyar isə karbon atomu “sp” hibridləşmə vəziyyətində olduğuna görə molekul düz xətt (xətti) quruluşa malik olur.



Difosfor-trioksiddə molekulyar fosfor atomları oksigen atomları vasitəsilə bir-birinə bağlanaraq aşağıdakı quruluşu əmələ gətirir.



$$A_{\text{üm}} [P_2O_3] = 6$$

VI və VII qrupların əsas yarımqrup elementləri tərəfindən əmələ gətirilən kükürd-trioksid (kükürd (VI) oksid) və dixlor-heptaoksid (xlor (VII) oksid) molekullarında qrafik formoldan istifadə etmədən, ümumi rabitə saylarını necə riyazi yolla hesablamaq mümkün olduğuna baxaq.

$$A_{\text{üm}} [SO_3] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{1 \cdot 6 + 3 \cdot 2}{2} = \frac{6 + 6}{2} = 6$$

Dixlor-heptaoksid (xlor (VII) oksid) molekulunda xlor atomları oksigen atomları vasitəsilə birləşmişdir və bu zaman xlor atomlarının oksidləşmə dərəcəsi və valentliyi yeddiyə bərabər olur [1].

Bu birləşmədə iştirak edən hər bir atomun sayını onun valentlik ədədi ilə vurduqda alınan hasil atomların molekulu yaratmaq üçün sərf etdiyi valent elektronların ümumi miqdarını göstərir.

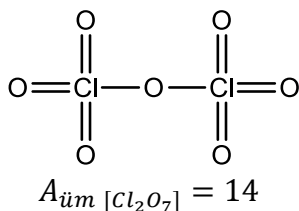
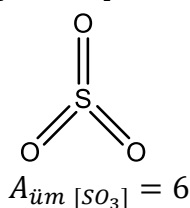
Qeyd edək ki, kimyəvi rabitələr, atomların orbitallarında yerləşən qoşalaşmamış valent elektronlarının qismən örtülməsi nəticəsində yaranır və bu zaman qeyri-polyar və ya polyar kovalent rabitələr formalaşa bilər.

Hər hansı iki eyni və ya fərqli atom arasında kimyəvi rabitənin qurulması üçün iki valent elektronun iştirakı zəruridir. Bu elektronlar birgə istifadə edilərək rabitənin yaranmasına səbəb olur. Bu səbəbdən də molekulun qurulmasında sərf olunan ümumi valent elektronların sayı 2-yə bölünərək həmin molekulda formalaşan rabitələrin ümumi sayını hesablamaq mümkündür.

$$A_{\text{üm}} [Cl_2O_7] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{2 \cdot 7 + 7 \cdot 2}{2} = \frac{14 + 14}{2} = 14$$

Əgər molekulların qrafik formullarını tərtib edib hər birindəki ümumi kimyəvi rabitə sayını hesablasaq, bu zaman riyazi yolla əldə olunan nəticələrin nə qədər dəqiq və uyğun olduğunu

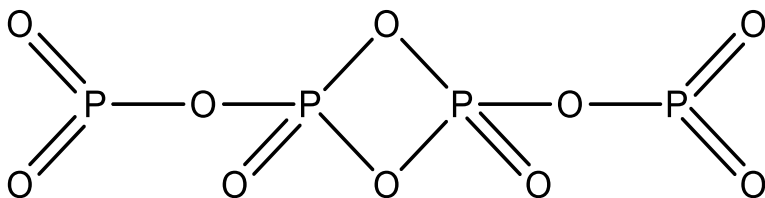
asanlıqla təsdiq etmək mümkündür.

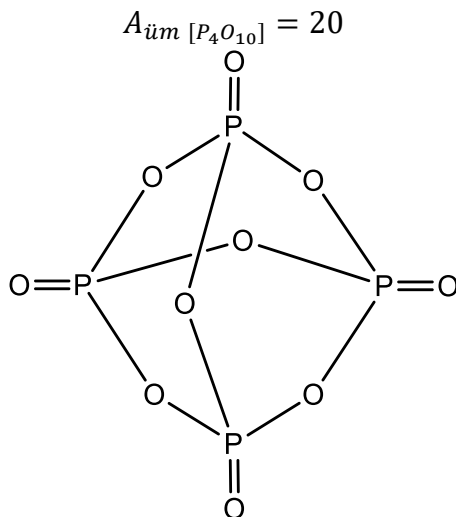


Difosfor-pentaoksid (fosfor (V) oksid) molekulunun dimer forması, eləcə də qarışıq valentlikli Fe_3O_4 , Mn_3O_4 və Pb_2O_3 oksidləri üzərində riyazi üsulla ümumi kimyəvi rabitə saylarını hesablamaq mümkündür. Bu yanaşma qrafik formuldan istifadə etmədən, yalnız atomların valentlik ədədləri və sayları əsasında aparılır və nəticədə birləşmədəki rabitələrin ümumi miqdarını dəqiq müəyyən etməyə imkan verir [1, 26].

$$A_{\text{üm}} [P_4O_{10}] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{4 \cdot 5 + 10 \cdot 2}{2} = \frac{20 + 20}{2} = 20$$

Eyni molekul üçün bir neçə fərqli qrafik formul qurmaq mümkündür. Difosfor-pentaoksid (P_2O_5) dimer molekulunun iki müxtəlif qrafik quruluşunu tərtib etdikdə, hər birində siqma və pi rabitələrinin sayı fərqli olsa da, ümumi kimyəvi rabitə sayı dəyişmir. Məsələn, birinci quruluşda 14 siqma və 6 π rabitə olduğu halda, ikinci quruluşda bu saylar 16 siqma və 4 π kimi qeydə alınır. Bu fakt, riyazi hesablamanın molekuldakı ümumi rabitə sayını müəyyən etməkdə nə qədər dəqiq və etibarlı olduğunu göstərir.





$$A_{üm} [P_4O_{10}] = 20$$

$$A_{üm} [Fe_3O_4] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{1 \cdot 2 + 2 \cdot 3 + 4 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 6 + 8}{2} = 8$$

Qeyd etmək lazımdır ki, Dəmir (II) oksid (FeO) əsasi xassəli, Dəmir (III) oksid (Fe₂O₃) isə amfoter xassəli birləşmələrə aiddir. Amfoter maddələr həm turşularla, həm də əsaslarla reaksiyaya girə bilirlər. Bu cür maddələr ikili kimyəvi xassəyə malik olduqları üçün, onların reaksiya məhsulları qarşılaşdıqları reagentin növündən asılı olaraq dəyişir. Məsələn, Fe₂O₃ həm turşularla, həm də qələvilərlə reaksiya verə bilər.

$$A_{üm} [Mn_3O_4] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{2 \cdot 2 + 1 \cdot 4 + 4 \cdot 2}{2} = \frac{4 + 4 + 8}{2} = 8$$

Mn₃O₄ qarışıq oksidində üç manqan atomundan ikisi +2 (ikivalentli), biri isə +4 (dördvalentli) oksidləşmə dərəcəsinə malikdir. Bu birləşmə tərkibinə görə 2MnO·MnO₂ formasında təsvir olunur. Kimyəvi rabitələrin riyazi üsulla hesablanması zamanı

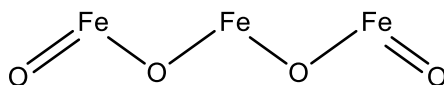
birləşməni təşkil edən hər bir atomun sayı və onların valentlik ədədi mütləq şəkildə nəzərə alınmalıdır. Belə yanaşma nəticəsində ümumi rabitə saylarını qrafik formuldən istifadə etmədən dəqiq müəyyən etmək mümkündür [1].

$$A_{üm [Pb_2O_3]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{1 \cdot 2 + 1 \cdot 4 + 3 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 4 + 6}{2} = 6$$

Qarışıq oksidlərdə metal atomları müxtəlif oksidləşmə dərəcələrinə malik ola bilər. Məsələn, Pb_2O_3 birləşməsindəki qurğuşun atomlarından biri +2 (ikivalentli), digəri isə +4 (dördvalentli) vəziyyətdədir. Bu səbəbdən birləşmə $PbO \cdot PbO_2$ tərkibində təqdim olunur.

Fe_3O_4 molekulunda da bənzər bir vəziyyət müşahidə olunur. Bu qarışıq oksid tərkibində dəmir atomlarından biri +2, qalan iki atom isə +3 oksidləşmə dərəcəsinədir. Nəticədə, Fe_3O_4 birləşməsi FeO və Fe_2O_3 birləşmələrinin birləşməsindən ibarət kimi qəbul edilir və $FeO \cdot Fe_2O_3$ kimi ifadə olunur.

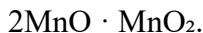
Bu tip birləşmələrdə kimyəvi rabitələrin sayını riyazi üsulla hesablamaq üçün, hər bir metal və qeyri-metal atomunun miqdarı və valentliyi əsas götürülməlidir. Bu yanaşma rabitə saylarının müəyyən edilməsində qrafik formul tərtibinə ehtiyac olmadan dəqiq nəticə əldə etməyə imkan verir.



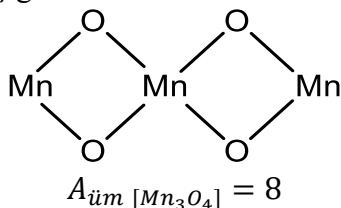
$$A_{üm [Fe_3O_4]} = 8$$

Mn_3O_4 qarışıq oksidinin qrafik formulunu tərtib edərkən, metal atomlarının bir-biri ilə birləşmədiyini, əksinə, oksigen atomu ilə birləşməli olduğunu nəzərə almaq vacibdir. Bu birləşmə tərkibindəki manqan atomlarından ikisi +2 oksidləşmə dərəcəsinə malik olduğu üçün MnO (manqan (II) oksid) kimi birləşmə əmələ gətirir, digər manqan atomu isə +4 oksidləşmə dərəcəsi ilə MnO_2 (manqan (IV) oksid) tərkibində olur. Bu səbəbdən Mn_3O_4 birləşməsi

aşağıdakı formada təmsil edilir [1]:



Qrafik formul tərtib edərkən, hər bir manqan atomunun oksigen ilə birləşməsi prinsipinə əsaslanaraq, iki MnO və bir MnO₂ birləşmələrinin qarışığı alınır.

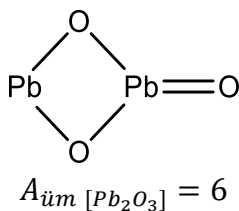


Pb₂O₃ birləşməsi qurğuşun (Pb) metalının iki fərqli oksidləşmə dərəcəsinə malik olan atomları tərəfindən əmələ gətirilir: biri +2, digəri isə +4 oksidləşmə dərəcəsinə malikdir. Bu birləşmədəki iki fərqli qurğuşun atomu, bir-biri ilə deyil, oksigen atomları ilə birləşərək PbO (qurğuşun (II) oksid) və PbO₂ (qurğuşun (IV) oksid) tərkibindəki oksidləri əmələ gətirir.

Qarışıq oksid Pb₂O₃ birləşməsini tərtib edərkən aşağıdakı struktur ortaya çıxır:



Pb₂O₃ birləşməsinin əsas xüsusiyyəti onun amfoter xassəli olmasıdır. Yəni, bu oksid həm turşu, həm də əsaslarla reaksiyaya girə bilər. Qurğuşun (Pb) metalı amfoter xüsusiyyətə malik olduğu üçün, onun oksidləri də bu xüsusiyyəti nümayiş etdirir. Bu xüsusiyyət, qurğuşunun həm turşular, həm də əsaslar ilə reaksiyaya daxil olmasına imkan verir.



Peroksidlərdə, məsələn H₂O₂, Na₂O₂, CaO₂, oksigen

atomlarının oksidləşmə dərəcəsi “-1” olub, bu atomlar ikivalentlidir. Oksidlərdən fərqli olaraq, peroksidlərdə oksigen atomları arasında qeyri-polyar kovalent rabitə yaranır. Kalsium-peroksid və hidrogen-peroksid molekullarında kimyəvi rabitələrin ümumi saylarını riyazi üsulla hesablamaq mümkündür. Bu birləşmələrdə oksigen atomları arasında qeyri-polyar kovalent rabitə ilə yanaşı, peroksid qrupları da mövcuddur.

$$A_{\text{üm}} [H_2O_2] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{2 \cdot 1 + 2 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 4}{2} = 3$$

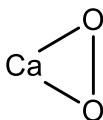
$$A_{\text{üm}} [CaO_2] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{1 \cdot 2 + 2 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 4}{2} = 3$$

Kimyəvi birləşmələrin qrafik formullarında, riyazi hesablamadan əldə olunan ədədi nəticələr eyni qiymətləri göstərir.



$$A_{\text{üm}} [H_2O_2] = 3$$

Kalsium elementi iki valentli olduğundan, onun peroksid birləşməsində molekullar arasında tsiklik struktur meydana gəlir. Bu, kalsium atomunun oksigenlə birləşərək sabit bir struktur formalaşdırmasına imkan verir.



$$A_{\text{üm}} [CaO_2] = 3$$

Karbon-monooksid (karbon (II) oksid) – CO, Xrom (VI) oksid – CrO₃, və Alüminium-oksidi – Al₂O₃ birləşmələrində rabitə saylarını riyazi metodla hesabladıqda, hər bir elementin valentlik ədədi və molekulun struktur quruluşu nəzərə alınır. Bu birləşmələrdə atomlar arasında yaranan kimyəvi rabitələrin sayı, atomların oksidləşmə dərəcələrinə uyğun olaraq müəyyən edilir.

$$A_{\text{üm [CO]}} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{1 \cdot 3 + 1 \cdot 3}{2} = \frac{3 + 3}{2} = \frac{6}{2} = 3$$

$$A_{\text{üm [CrO}_3\text{]}} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{1 \cdot 6 + 3 \cdot 2}{2} = \frac{6 + 6}{2} = \frac{12}{2} = 6$$

$$A_{\text{üm [Al}_2\text{O}_3\text{]}} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{2 \cdot 3 + 3 \cdot 2}{2} = \frac{6 + 6}{2} = \frac{12}{2} = 6$$

Kimyəvi birləşmələrin quruluşunu dərinlən anlamaq üçün onların qrafik formullarını tətib etmək və bu formullar əsasında rabitə saylarını hesablamaq olduqca əhəmiyyətliədir. Bu yanaşma sayəsində aparılan riyazi hesablamalarla əldə olunan ədədi nəticələrin reallıqla üst-üstə düşdüyü müşahidə olunur. Dövri sistemdə elementlər soldan sağa doğru irəlilədikcə, onların əmələ gətirdiyi oksidlərdə göstərdikləri valentlik dərəcəsi tədricən artır və bu dəyişmə əsasən 1-dən 7-yə qədər davam edir.

Əsas yarımqrupa aid olan hər bir elementin oksidlərindəki valentlik dərəcəsi, adətən, həmin elementin cədvəldə yerləşdiyi qrupun nömrəsi ilə üst-üstə düşür. Bu qanunauyğunluq, elementlərin quruluş və davranışlarını öyrənmək baxımından mühüm əhəmiyyət daşıyır. Beləliklə, oksid və peroksid birləşmələrində mövcud olan kimyəvi rabitələrin ümumi sayını xüsusi düsturlar vasitəsilə riyazi olaraq hesablamaq və əldə olunan nəticələri qrafik formullarla müqayisə edərək təsdiqləmək elmi yanaşmanın doğruluğunu və dəqiqliyini sübut edir [1].

2.2. Qeyri-üzvi turşularda kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması

Turşular tərkibində metal atomları ilə əvəz oluna bilən hidrogen atomları və turşu qalığı (məsələn, SO_4^{2-} , NO_3^- , PO_4^{3-} və s.) olan mürəkkəb birləşmələrdir.

Məlum olduğu kimi, turşular aşağıdakı iki əsas meyara görə təsnif olunur:

a) Tərkibinə görə;

• Oksigenli turşular (məsələn: HNO_3 , H_2SO_4 , H_3PO_4);

- Oksigensiz turşular (məsələn: HCl, H₂S).

b) Əsaslıq dərəcəsinə görə, yəni molekuldakı metal ilə əvəz olunma qabiliyyətinə malik hidrogen atomlarının sayına əsasən:

- Birəsaslı turşular (HCl, HNO₃ və s.);
- İkiəsaslı turşular (H₂S, H₂SO₃ və s.);
- Üçəsaslı turşular (H₃PO₄ və s.);
- Dördəsaslı turşular (H₄P₂O₇).

Əlavə olaraq qeyd etmək lazımdır ki, bəzi turşularda molekulda olan hidrogen atomlarının sayı ilə onların əsaslıq dərəcəsi eyni olmaya bilər. Məsələn:

- Fosfit turşusunda (H₃PO₃) üç hidrogen atomu olsa da, yalnız ikisi metal atomu ilə əvəz oluna bilər. Bunun səbəbi, hidrogen atomlarından birinin fosfor atomu ilə birbaşa rabitədə olmasıdır – bu səbəbdən fosfit turşusu ikiəsaslı sayılır.

- Hipofosfit turşusunda (H₃PO₂) isə üç hidrogendən yalnız biri metal ilə əvəz oluna bilər, çünki digərləri fosforla birbaşa birləşmişdir – nəticədə bu turşu birəsaslı olur.

Belə turşularda əsaslıq dərəcəsi ilə molekuldakı ümumi hidrogen atomlarının sayı fərqli ola bilər. Lakin bu hallarda belə, kimyəvi rabitə saylarının dəqiq riyazi hesablanması mümkündür.

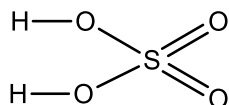
Misal üçün, aşağıdakı turşuların – sulfat turşusu (H₂SO₄), ortofosfat turşusu (H₃PO₄) və karbonat turşusu (H₂CO₃) molekullarında rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması mümkündür və bu üsul onların quruluşunu daha dəqiq anlamağa imkan verir.

$$A_{\text{üm}} [H_2SO_4] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{2 \cdot 1 + 1 \cdot 6 + 4 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 6 + 8}{2} = 8$$

Məlum olduğu kimi, sulfat turşusunun (H₂SO₄) molekulunda iki hidrogen atomu (a_1) birvalentli (e_1), bir kükürd atomu (a_2) altıvalentli (e_2), dörd oksigen atomu (a_3) isə ikivalentli (e_3) olur və bu qiymətlər riyazi hesablama da tam uyğunluq təşkil edir.

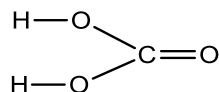
Əgər sulfat turşusunun molekulyar quruluşunu qrafik formada göstərsək, riyazi üsulla aparılan hesablamaların tam

dəqiqliklə nəticə verdiyini aydın şəkildə müşahidə edərik. İkiəsaslı olan sulfat turşusu molekulunda hidrogen atomları kükürd atomuna birbaşa deyil, oksigen atomları vasitəsilə bağlanır. Kükürdün digər iki oksigen atomu ilə olan rabitəsi isə yalnız sadə siqma rabitəsi ilə kifayətlənmir, eyni zamanda pi rabitəsi də iştirak edir. Bu da molekulun quruluşunda çoxsaylı rabitələrin mövcudluğunu və onların riyazi olaraq düzgün şəkildə izah oluna bildiyini göstərir [1].



$$A_{\text{üm}} [\text{H}_2\text{SO}_4] = 8$$

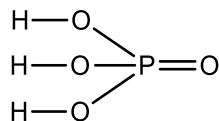
$$A_{\text{üm}} [\text{H}_2\text{CO}_3] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{2 \cdot 1 + 1 \cdot 4 + 3 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 4 + 6}{2} = 6$$



$$A_{\text{üm}} [\text{H}_2\text{CO}_3] = 6$$

$$A_{\text{üm}} [\text{H}_3\text{PO}_4] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{3 \cdot 1 + 1 \cdot 5 + 4 \cdot 2}{2} = \frac{3 + 5 + 8}{2} = 8$$

Ortofosfat turşusu (H_3PO_4) üçəsaslı olduğuna görə, onun tərkibindəki üç hidrogen atomunun hər biri fosfor atomuna birbaşa deyil, oksigen atomları vasitəsilə bağlanır.



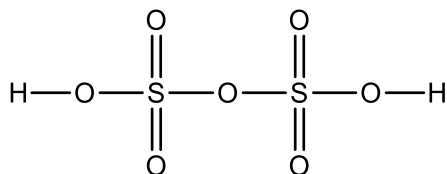
$$A_{\text{üm}} [\text{H}_3\text{PO}_4] = 8$$

Pirosulfat ($\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$) və pirofosfat ($\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7$) turşularının

molekullarında ümumi rabitə sayları riyazi üsulla aşağıdakı kimi hesablanmışdır.

$$A_{üm [H_2S_2O_7]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{2 \cdot 1 + 2 \cdot 6 + 7 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 12 + 14}{2} = 14$$

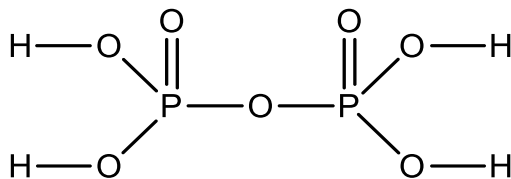
Molekulun qrafik quruluşunda müəyyən olunan ümumi rabitə sayı riyazi hesablamaların verdiyi nəticə ilə tam üst-üstə düşür. Sulfat və sulfat turşularından fərqli olaraq, pirosulfat (disulfat) molekulunda iki kükürd atomu mövcuddur və bu atomlar bir-biri ilə oksigen atomu vasitəsilə birləşərək fərqli bir quruluş yaradırlar.



$$A_{üm [H_2S_2O_7]} = 14$$

$$A_{üm [H_4P_2O_7]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{4 \cdot 1 + 2 \cdot 5 + 7 \cdot 2}{2} = \frac{4 + 10 + 14}{2} = 14$$

Dördəsaslı pirofosfat (difosfat) turşusu molekulunda hidrogen və fosfor atomları birbaşa deyil, oksigen atomları vasitəsilə qarşılıqlı əlaqəyə girirlər.



$$A_{üm [H_4P_2O_7]} = 14$$

Qeyd olunmalıdır ki, yuxarıda sadalanan turşu molekullarında atomların oksidləşmə dərəcələri ilə onların valentliklərinin ədədi

qiymətləri bir-birinə mütləq qiymət baxımından uyğundur. Məsələn, pirosulfat və pirofosfat turşularında uyğun olaraq kükürd və fosfor atomlarının oksidləşmə dərəcələri müəyyən edilərək, həmin elementlərin valentliklərinin ədədi qiymətləri də təyin oluna bilər.

$$\begin{array}{r} +1 \quad x \quad -2 \\ \text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7 \\ 2 \cdot 1 + 2x + 7 \cdot (-2) = 0 \\ 2 + 2x - 14 = 0 \\ 2x = 12 \\ x = 6 \end{array}$$

$$\begin{array}{r} +1 \quad x \quad -2 \\ \text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7 \\ 4 \cdot 1 + 2x + 7 \cdot (-2) = 0 \\ 4 + 2x - 14 = 0 \\ 2x = 10 \\ x = 5 \end{array}$$

Fosfor elementinin iştirak etdiyi daha mürəkkəb quruluşlu turşu molekullarında kimyəvi rabitələrin ümumi sayını qrafik formul tərtib etmədən, yalnız riyazi üsulla hesablamaq mümkündür və bunu birlikdə araşdıraraq.

$$\begin{array}{r} +1 \quad x \quad -2 \\ \text{H}_5\text{P}_3\text{O}_{10} \\ 5 \cdot 1 + 3x + 10 \cdot (-2) = 0 \\ 5 + 3x - 20 = 0 \\ 3x = 15 \\ x = 5 \end{array}$$

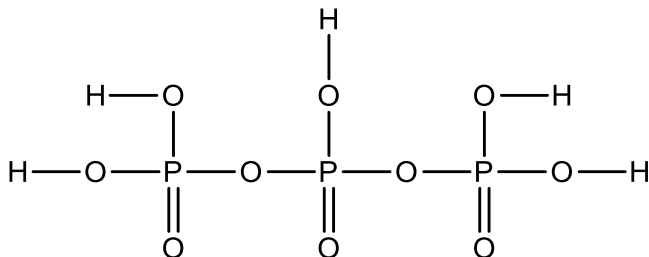
$$\begin{array}{r} +1 \quad x \quad -2 \\ \text{H}_6\text{P}_4\text{O}_{13} \\ 6 \cdot 1 + 4x + 13 \cdot (-2) = 0 \\ 6 + 4x - 26 = 0 \\ 4x = 20 \\ x = 5 \end{array}$$

$$A_{\text{üm}} [\text{H}_5\text{P}_3\text{O}_{10}] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{5 \cdot 1 + 3 \cdot 5 + 10 \cdot 2}{2} = \frac{5 + 15 + 20}{2} = 20$$

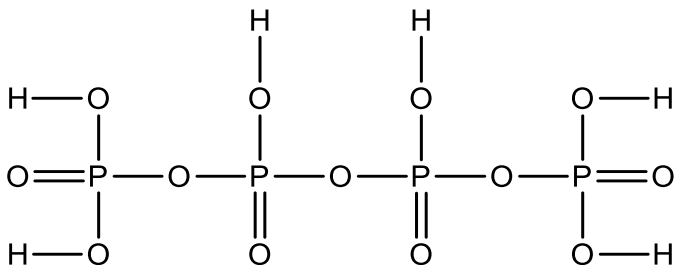
$$A_{\text{üm}} [\text{H}_6\text{P}_4\text{O}_{13}] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{6 \cdot 1 + 4 \cdot 5 + 13 \cdot 2}{2} = \frac{6 + 20 + 26}{2} = 26$$

Kimyəvi birləşmələrin tərkibindəki fosfor atomlarının oksidləşmə dərəcəsini müəyyən etməklə onların valentliyinin ədədi qiymətini də hesablamaq mümkündür. Qeyd edildiyi kimi, bu cür hallarda fosforun oksidləşmə dərəcəsi ilə valentliyi arasında birbaşa uyğunluq mövcuddur. Əgər həmin maddələrin qrafik formulunu qurub hər birindəki kimyəvi rabitələrin ümumi sayını hesablasaq, əldə olunan riyazi nəticələrin nəzəri qiymətlərlə uyğunluq təşkil

etdiyini müşahidə edərək [1, 49, 56].



$$A_{üm} [H_5P_3O_{10}] = 20$$

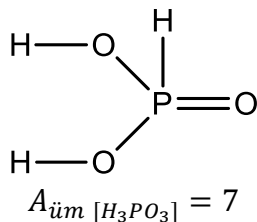


$$A_{üm} [H_6P_4O_{13}] = 26$$

Fosfit (H_3PO_3) və hipofosfit (H_3PO_2) turşuları hidrogen atomlarının sayının turşunun əsaslığının ədədi qiymətilə uyğun gəl-mədiyi qeyri-üzvi turşulara nümunə təşkil edir. Lakin bu turşuların molekulalarında aparılan riyazi hesablamalar dəqiq nəticələr verir.

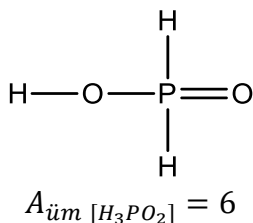
$$A_{üm} [H_3PO_3] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{3 \cdot 1 + 1 \cdot 5 + 3 \cdot 2}{2} = \frac{3 + 5 + 6}{2} = 7$$

Molekulun qrafik formulunun tərtib edilməsi və riyazi he-sablamaların nəticələrinin müqayisəsi, alınan ədədi qiymətlərin də-qiqliyini təsdiq etməyə imkan verir. Bununla yanaşı, qeyd etmək va-cibdir ki, fosfit turşusu molekulunda hidrogen atomlarından biri fos-forla birbaşa bağlandığı üçün bu turşu ikiəsaslı hesab olunur.



$$A_{\text{üm}} [H_3PO_2] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{3 \cdot 1 + 1 \cdot 5 + 2 \cdot 2}{2} = \frac{3 + 5 + 4}{2} = 6$$

Hipofosfit turşusunun (H_3PO_2) molekulunda yalnız bir hidrogen atomu fosfor ilə oksigen vasitəsilə bağlandığı üçün bu turşu birəsaslı hesab olunur. Turşunun əsaslığı, molekulundakı metallarla əvəz oluna bilən hidrogen atomlarının sayına görə müəyyən edilir. Riyazi hesablamalarla əldə edilən ədədi qiymət qrafik formolda da öz əksini tapır.

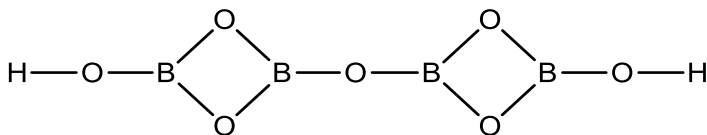


Fosfor elementinin iştirak etdiyi turşu molekullarında fosfor atomları beşvalentlik göstərir. Daha mürəkkəb quruluşa sahib olan tetraborat turşusunun molekulunda isə ümumi rabitə saylarının riyazi hesablanması nəzərdən keçirək:

$$A_{\text{üm}} [H_2B_4O_7] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{2 \cdot 1 + 4 \cdot 3 + 7 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 12 + 14}{2} = 14$$

Molekulun qrafik formulu, riyazi hesablamaların düzgün nəticələr verdiyini bir daha göstərir [1, 43]. Tetraborat turşusu molekulunda sp^2 hibridləşməsi vəziyyətində olan dörd bor atomu, iki tsiklik quruluşun yaranmasına səbəb olur və bu quruluş qrafik

formulda əksini tapır..



$$A_{üm [H_2B_4O_7]} = 14$$

Manqanat- H_2MnO_4 və Dixromat- $H_2Cr_2O_7$ turşularında rabitələrin ümumi sayını riyazi yolla hesablanmasına baxaq:

$$A_{üm [H_2MnO_4]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{2 \cdot 1 + 1 \cdot 6 + 4 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 6 + 8}{2} = \frac{16}{2} = 8$$

$$A_{üm [H_2Cr_2O_7]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{2 \cdot 1 + 2 \cdot 6 + 7 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 12 + 14}{2} = \frac{28}{2} = 14$$

Birləşmələrin qrafik formullarını tərtib edərək kimyəvi rabitə saylarını hesabladıqda, riyazi hesablamalarla əldə edilən nəticələrin eyni olduğu müşahidə olunur. Buna görə də, qeyri-üzvi turşu molekulalarında qrafik formullardan istifadə etmədən kimyəvi rabitələrin ümumi sayının riyazi üsullarla hesablanması, bu mövzunun tədris səviyyəsini daha da yüksəltməyə imkan verir [1].

Qeyri-üzvi turşularda siqma rabitə saylarının riyazi hesablanma metodikası, bu tip rabitələrin eyni və ya fərqli atomlar arasında, nüvələri birləşdirən düz xətt boyunca yönəldiyini nəzərə alır. Bu səbəbdən, iki atom arasında yalnız bir siqma rabitə yarana bilər. Siqma rabitələr birləşdirdiyi atomların növündən asılı olaraq, uzunluğu, enerjisi və digər xüsusiyyətləri ilə fərqlənə bilər [1].

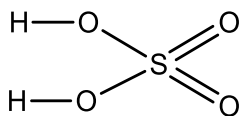
Ənənəvi yanaşmaya əsasən, turşu molekularındakı siqma rabitələrinin sayını müəyyən etmək üçün adətən qrafik formulların təhlilinə müraciət olunur [1, 42, 43]. Bu üsul geniş istifadə olunsada, müəyyən hallarda praktiki çətinliklər yarada bilər. Lakin təqdim olunan elmi araşdırmalar zamanı təklif edilən və (1.2.2) nömrəli düstur kimi tanınan yeni riyazi yanaşma bu sahədə mühüm irəliləyiş hesab olunur. Belə ki, təqdim edilən bu düstur həm üzvi, həm də

qeyri-üzvi turşu molekullarında siqma rabitələrinin sayını qrafik formuluna ehtiyac olmadan, yalnız molekulun tərkibindən çıxış edərək hesablamağa imkan verir. Bu, təkcə hesablamalarda dəqiqliyi artırmaqla qalmır, həm də zaman baxımından səmərəli yanaşma təqdim edir. Dissertasiya işi çərçivəsində formalaşdırılan bu düstur, kimyəvi rabitələrin riyazi metodlarla hesablanması sahəsində yeni bir mərhələ kimi qiymətləndirilə bilər.

Məsələn, sulfat (H_2SO_4), ortofosfat (H_3PO_4) və karbonat (H_2CO_3) turşularında siqma rabitə saylarını (1.2.2) düsturundan istifadə edərək riyazi şəkildə hesablamalar aşağıda göstərilmişdir.

$$A_{\sigma [H_2SO_4]} = N_{üm} + S - 1 = 7 + 0 - 1 = 6$$

Sulfat turşusu (H_2SO_4) molekulunun quruluşuna nəzər saldıqda, onun yeddi atomdan ibarət olduğu aydın görünür. Bu molekulda hər hansı bir tsiklik quruluş müşahidə olunmur. Maddənin quruluş formulu təsvir edildikdə, atomlar arasında altı ədəd siqma kovalent rabitənin əmələ gəldiyi müəyyən olunur. Bu nəticə molekulun struktur xüsusiyyətləri ilə tam uyğunluq təşkil edir və sulfat turşusunun kimyəvi rabitələrini izah etmək baxımından əhəmiyyətli göstəricidir.



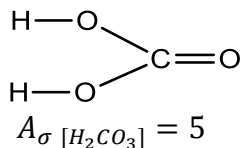
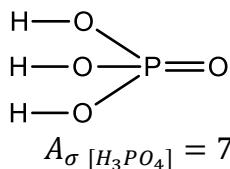
$$A_{\sigma [H_2SO_4]} = 6$$

Ümumi səkkiz atomdan ibarət olan üçəsaslı ortofosfat turşusunda riyazi hesablamalar nəticəsində tsiklik quruluşun mövcud olmadığı aydın şəkildə müəyyən edilmişdir.

$$A_{\sigma [H_3PO_4]} = N_{üm} + S - 1 = 8 + 0 - 1 = 7$$

$$A_{\sigma [H_2CO_3]} = N_{üm} + S - 1 = 6 + 0 - 1 = 5$$

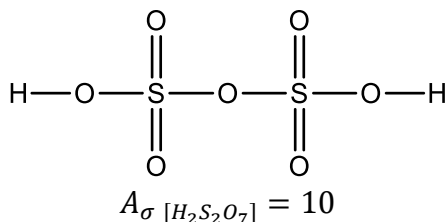
Molekulların qrafik formullarında müəyyən olunan siqma-rabitələrin sayı, aparılan riyazi hesablamaların nəticələri ilə tam uyğunluq təşkil edir.



Gəlin pirosulfat ($\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$) və pirofosfat ($\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7$) turşularının molekul quruluşunda əmələ gələn siqma rabitələrinin sayını riyazi üsulla təhlil edək. Bu yanaşma, molekulun daxili quruluşunu və atomlararası əlaqələrin xüsusiyyətlərini daha dəqiq anlamağa imkan verir.

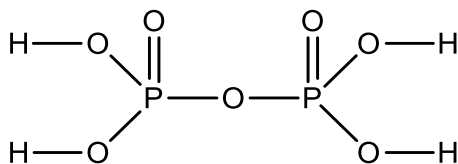
$$A_{\sigma} [\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 11 + 0 - 1 = 10$$

Molekulun qrafik quruluşunu tərtib etdikdə, orada ümumi 10 ədəd siqma rabitəsinin mövcud olduğunu müşahidə etmək olar. Qeyd edilməlidir ki, bütün sadə (təqəqat) rabitələr siqma rabitəsi ilə xarakterizə olunur. Əgər molekulda ikiqat rabitə mövcuddursa, onlardan biri siqma, digəri isə pi rabitəsi olur. Bu, molekuldakı rabitə növlərinin müəyyən edilməsində əsas prinsip kimi qəbul edilir.



$$A_{\sigma} [\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 13 + 0 - 1 = 12$$

Hidrogen atomunun yalnız bir elektronla iştirak etdiyi kimyəvi rabitələr onun sadəcə bir istiqamətli rabitə yaratmasına şərait yaradır. Məhz bu səbəbdən, hidrogen atomu yalnız bir növ - siqma tipli rabitələr qurmaq imkanına malikdir. Pirofosfat (və ya difosfat) turşusunun molekul quruluşunda isə fosfor və oksigen atomları arasında səkkiz siqma rabitə və iki pi rabitə formalaşır. Bu quruluş pirofosfat turşusunun mürəkkəb elektron quruluşunu və rabitə sistemini əks etdirir.



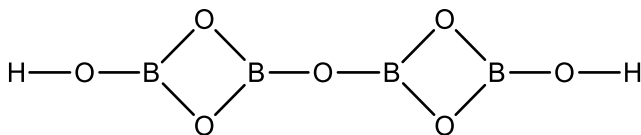
$$A_{\sigma} [H_4P_2O_7] = 12$$

Tərkibində iki qapalı halqa (tsikl) mövcud olan tetraborat turşusu ($H_2B_4O_7$) molekulunda siqma rabitələrinin sayını riyazi yolla müəyyənləşdirmə prosesini nəzərdən keçirək [1, 2]:

$$A_{\sigma} [H_2B_4O_7] = N_{im} + S - 1 = 13 + 2 - 1 = 14$$

Molekulun qrafik formulunda riyazi yolla hesablanan ədədi göstəricilər tam uyğunluq təşkil edir. Üçüncü dövrün III (A) qrupunda yerləşən bor elementinin elektron konfigurasiyası $...3s^2, 3p^1$ şəklində təqdim olunur. Bu təbəqədə yerləşən qoşa “s” elektronlarından biri “p” yarımşəviyyəsinə keçərək “ sp^2 ” hibridləşmə vəziyyətinə keçir.

Qeyd etmək lazımdır ki, “ sp^2 ” hibridləşməsində əmələ gələn orbitalar bir-birinə qarşı 120° bucaq altında yerləşir və müstəvi quruluşa malikdirlər [1, 2, 11]. Nəticə etibarilə, tetraborat turşusu molekulunda dörd bor atomunun oksigen atomları ilə qarşılıqlı təsiri nəticəsində iki ayrı-ayrı halqavari (tsiklik) quruluş formalaşır.



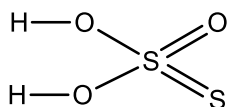
$$A_{\sigma} [H_2B_4O_7] = 14$$

Tiosulfat ($H_2S_2O_3$) və tetrasyonat ($H_2S_4O_6$) turşularının molekullarında siqma rabitələrinin sayını müəyyənləşdirmək məqsədilə onların tərkibindəki elementlərin valetlikləri və atom sayları nəzərə alınmaqla riyazi hesablama aparılır.

$$A_{\sigma} [H_2S_2O_3] = N_{üm} + S - 1 = 7 + 0 - 1 = 6$$

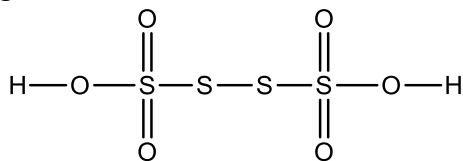
$$A_{\sigma} [H_2S_4O_6] = N_{üm} + S - 1 = 12 + 0 - 1 = 11$$

Molekulların qrafik formullarını tərtib edərək, riyazi hesablamaların düzgün nəticə verdiyini təsdiq etmək mümkündür. Tiosulfat turşusu molekulunda, kükürd atomlarının oksidləşmə dərəcəsi və valentlik ədədləri arasında fərqliliklər mövcuddur.



$$A_{\sigma} [H_2S_2O_3] = 6$$

Tetrationat turşusu ikiəsaslı turşudur və onun molekul quruluşunda dörd kükürd atomunun bir-biri ilə zəncirvari bağlandığı müşahidə olunur. Bu kükürd atomları arasında yaranan əlaqələr molekulun sabitliyini və kimyəvi xüsusiyyətlərini müəyyən edir. Struktur baxımından, belə bir quruluş turşunun ionlaşma qabiliyyətinə və reaksiya girdiyi maddələrlə qarşılıqlı təsirinə bilavasitə təsir göstərir.

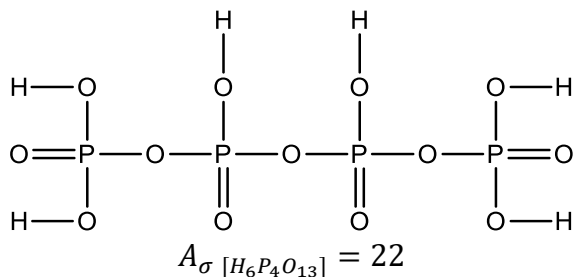


$$A_{\sigma} [H_2S_4O_6] = 11$$

Fosfor elementinin $H_6P_4O_{13}$ tərkibli turşu molekulunda sıqma rabitə saylarının riyazi hesablanması aşağıda təqdim edilmişdir. Qeyd etmək lazımdır ki, verilən turşu molekulunda qapalı (tsiklik) strukturlar mövcud deyil.

$$A_{\sigma} [H_6P_4O_{13}] = N_{üm} + S - 1 = 23 + 0 - 1 = 22$$

Molekulun qrafik formulası üzərində siqma rabitələrinin sayını hesablasaq, eyni nəticəni əldə edərək. Turşu molekulunun qrafik forması tərtib edilərkən, fosfor atomlarının bir-biri ilə oksigen atomları vasitəsilə birləşməsi nəzərə alınmalıdır.



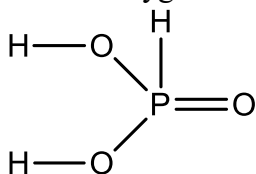
Qrafik formulda müəyyən edilən siqma rabitə saylarının riyazi hesablamalarla əldə olunan ədədi nəticələrlə uyğunluğu, tətbiq edilən düsturun (formulun) dəqiqliyini və əhəmiyyətini nümayiş etdirir.

Hipofosfit (H_3PO_2) və fosfit (H_3PO_3) turşularının molekullarında əsaslıq ilə hidrogen atomlarının sayının fərqliliyi, onların siqma rabitə saylarının riyazi şəkildə hesablanmasında xüsusi diqqət tələb edir.

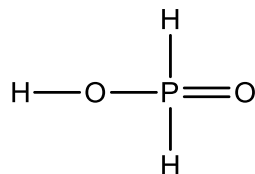
$$A_{\sigma} [H_3PO_2] = N_{üm} + S - 1 = 6 + 0 - 1 = 5$$

$$A_{\sigma} [H_3PO_3] = N_{üm} + S - 1 = 7 + 0 - 1 = 6$$

Molekulların qrafik formullarını tərtib etdikdə, əldə edilən nəticələrin bir-birinə uyğun olduğunu müşahidə etmək olar.



$$A_{\sigma} [H_3PO_3] = 6$$



$$A_{\sigma} [H_3PO_2] = 5$$

Xromat (H_2CrO_4) və permanqanat ($HMnO_4$) turşularının

molekullarında siqma rabitə saylarının riyazi üsullarla hesablanmasını araşdırmaq.

$$A_{\sigma [H_2CrO_4]} = N_{üm} + S - 1 = 7 + 0 - 1 = 6$$

$$A_{\sigma [HMnO_4]} = N_{üm} + S - 1 = 6 + 0 - 1 = 5$$

Birləşmələrin qrafik formullarını tərtib edərək kimyəvi rabitə saylarını hesabladığımızda, riyazi metodla əldə olunan nəticələrin bu formullar vasitəsilə tapılan ədədi qiymətlərlə tam uyğun olduğu açıq şəkildə görünür.

2.3. Duzlarda kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması

Duzlar, tərkibinə əsasən normal, turşu, əsasi, ikiqat, qarışıq və kompleks duzlar kimi müxtəlif kateqoriyalara ayrılır. Normal duzlar, metal atomu və ya ammonium ionu ilə turşu qalığından ibarət olan birləşmələrdir. Məsələn, alüminium-sulfidi (Al_2S_3) və ammonium-ortofosfatı ($(NH_4)_3PO_4$) normal duzlara misal ola bilər [1, 2].

Turş duzlar, turşu molekullarının hidrogen atomlarının qismən metallarla əvəz olunması nəticəsində yaranan mürəkkəb maddələrdir. Bu kateqoriyaya nümunə olaraq natrium-dihidroortofosfatı (NaH_2PO_4) və dəmir(III) hidrosulfiti ($Fe(HSO_3)_3$) göstərilə bilər [1].

Əsasi duzlar, iki və ya üç turşulu əsaslarda hidroksid qruplarının qismən turşu qalığı ilə əvəz olunması ilə əmələ gələn mürəkkəb maddələrdir. Xrom (II) hidroksoxlorid ($Cr(OH)Cl$) və manqan (III) dihidroksonitrat ($Mn(OH)_2NO_3$) bu növə aid edilə bilər.

Qarışıq duzlar, metal atomu və müxtəlif turşu qalıqlarından ibarət mürəkkəb birləşmələrdir. Məsələn, barium-xlorid hipoklorit ($BaCl(ClO)$) və nikel (III) xlorid-sulfit ($NiCl(SO_3)$) qarışıq duzlara misaldır.

İkiqat duzlar, turşu qalığı ilə müxtəlif metal atomlarının birləşməsi nəticəsində yaranan kimyəvi birləşmələrdir. Bu növə natrium-kalium ortofosfatı (Na_2KPO_4) və kalium-xrom (III) sulfatı ($KCr(SO_4)_2$) daxildir.

Kompleks duzlar - tərkibində sadə ionlarla yanaşı, daha mü-

rəkkəb quruluşa malik kompleks ionlar da olan kristallik maddələrdir. Bu tip duzların molekulyar quruluşunda əsas fərqləndirici cəhət kompleks ionların iştirakı ilə əlaqədardır. Belə maddələrdə, adətən, bir mərkəzi metal atomu ətrafında yerləşmiş bir neçə liqandla (bağlayıcı qrupla) sabitləşmiş kompleks ion formalaşır.

Məsələn, kalium-heksasianoferrat (III) - gündəlik həyat və kimyada "qırmızı qan duzu" kimi tanınan birləşmə, tipik kompleks duzlara nümunə ola bilər. Onun kimyəvi formulu $K_3[Fe(CN)_6]$ şəklində yazılır. Burada dəmir (III) ionu mərkəzi atom rolunu oynayır və altı siyanid (CN^-) ionu ilə əhatə olunaraq kompleks anion meydana gətirir. Bu kompleks anion, kristal qəfəsində kalium kationları ilə birlikdə sabit bir struktur təşkil edir. Beləliklə, kompleks duzlar sadəcə ion birləşməsi deyil, həm də özündə spesifik və mürəkkəb koordinasiya quruluşunu birləşdirən maddələrdir.

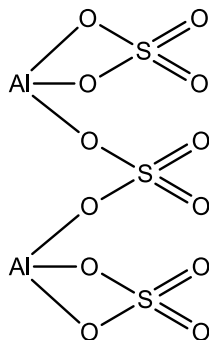
Duzlar, əsasən ion və polyar kovalent rabitələrlə təşkil olunur.

Kimyəvi rabitə saylarının hesablanması, molekulun xüsusiyyətlərindən biri olub, qrafik formullar vasitəsilə həyata keçirilir. Mürəkkəb birləşmələrin qrafik formullarının hazırlanması bəzi çətinliklər yaratmaqla yanaşı, vaxt tələb edir.

Nümunə olaraq, alüminium sulfat ($Al_2(SO_4)_3$), kalsium ortofosfat ($Ca_3(PO_4)_2$) və dəmir (III) karbonat ($Fe_2(CO_3)_3$) normal duzlarının ümumi rabitə saylarını riyazi üsullarla hesablamaq mümkündür.

$$A_{üm} [Al_2(SO_4)_3] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{2 \cdot 3 + 3 \cdot 6 + 12 \cdot 2}{2} = \frac{6 + 18 + 24}{2} = 24$$

Alüminium-sulfat birləşməsinin tərkibində iki alüminium atomu üçvalentli, üç kükürd atomu altıvalentli və on iki oksigen atomu isə ikivalentli olur ki, bu da hesablamada öz əksini tapır. Birləşmənin qrafik formulası tərtib edildikdə, ümumi kimyəvi rabitə sayının 24 olduğu aydın şəkildə müşahidə edilə bilər [1].

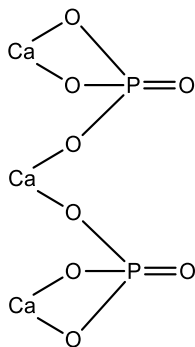


$$A_{\text{üm}} [Al_2(SO_4)_3] = 24$$

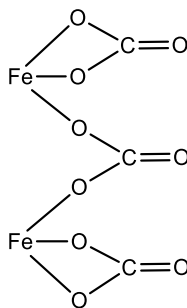
$$A_{\text{üm}} [Ca_3(PO_4)_2] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{3 \cdot 2 + 2 \cdot 5 + 8 \cdot 2}{2} = \frac{6 + 10 + 16}{2} = 16$$

$$A_{\text{üm}} [Fe_2(CO_3)_3] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{2 \cdot 3 + 3 \cdot 4 + 9 \cdot 2}{2} = \frac{6 + 12 + 18}{2} = 18$$

Qrafik formul əsasında hesablanmış ümumi rabitə sayları, riyazi hesablamadan əldə edilən ədədi qiymətə uyğun gəlir. Üçəsaslı ortofosfat turşusunun kalsiumla reaksiyaya girərək əmələ gətirdiyi normal duzda σ - və π - rabitələrinin sayı müvafiq olaraq 14 və 2-dir. Ümumi rabitə sayı, bu iki rabitə növünün cəmi olaraq 16-a bərabərdir.



$$A_{\text{üm}} [Ca_3(PO_4)_2] = 16$$

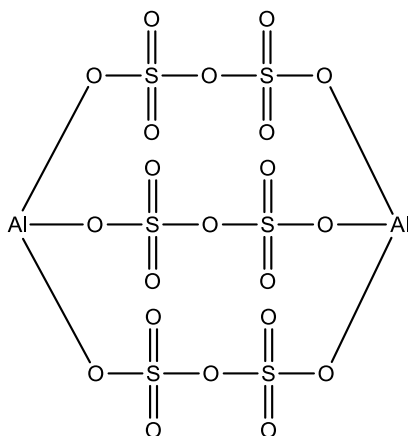


$$A_{\text{üm}} [Fe_2(CO_3)_3] = 18$$

Riyazi hesablamalar və qrafik formulun nəticələri bir-birini təsdiq edir. Alüminium-pirosulfat ($\text{Al}_2(\text{S}_2\text{O}_7)_3$) və xrom (III) pirofosfat ($\text{Cr}_4(\text{P}_2\text{O}_7)_3$) normal duzlarının ümumi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması aşağıda təqdim olunmuşdur.

$$A_{\text{üm}} [\text{Al}_2(\text{S}_2\text{O}_7)_3] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{2 \cdot 3 + 6 \cdot 6 + 21 \cdot 2}{2} = \frac{6 + 36 + 42}{2} = 42$$

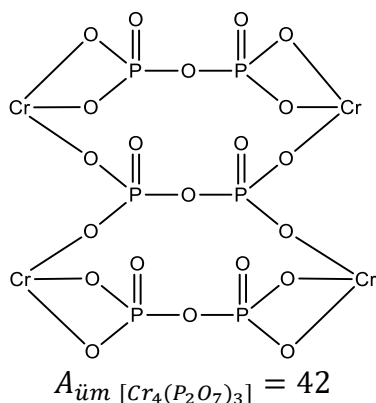
Kimyəvi birləşmənin qrafik formulu yazılıb ümumi kimyəvi rabitə sayları hesablandıqda, riyazi üsulla əldə edilən ədədi qiymətlərlə eyni nəticələr əldə edilir.



$$A_{\text{üm}} [\text{Al}_2(\text{S}_2\text{O}_7)_3] = 42$$

$$A_{\text{üm}} [\text{Cr}_4(\text{P}_2\text{O}_7)_3] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{4 \cdot 3 + 6 \cdot 5 + 21 \cdot 2}{2} = \frac{12 + 30 + 42}{2} = 42$$

Qrafik formulda kimyəvi rabitələrin ümumi sayının riyazi üsulla hesablanan ədədi qiymətə uyğun gəlməsi, hesablamanın düzgünlüyünü təsdiq edir.

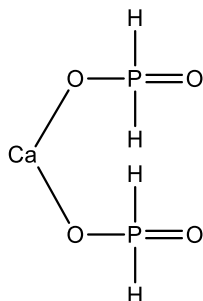


Hipofosfit (H_3PO_2) və fosfit (H_3PO_3) turşularının əsaslığı ilə hidrogen atomlarının sayı uyğun gəlmədiyindən, onların əmələ gətirdiyi normal duzların ümumi kimyəvi rabitə saylarının riyazi hesablanması aşağıda verilmişdir. Məsələn, $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_2)_2$ - kalsium hipofosfit və $\text{Al}_2(\text{HPO}_3)_3$ - alüminium fosfit duzlarının ümumi kimyəvi rabitə saylarının hesablanmasını nəzərdən keçirək.

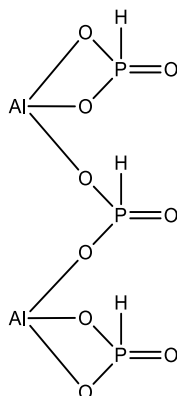
$$A_{\text{üm}} [\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_2)_2] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{1 \cdot 2 + 4 \cdot 1 + 2 \cdot 5 + 4 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 4 + 10 + 8}{2} = 12$$

$$A_{\text{üm}} [\text{Al}_2(\text{HPO}_3)_3] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{2 \cdot 3 + 3 \cdot 1 + 3 \cdot 5 + 9 \cdot 2}{2} = \frac{6 + 3 + 15 + 18}{2} = 21$$

Birləşmələrin qrafik formullarında kimyəvi rabitə saylarının riyazi hesablamalarla əldə olunan ədədi qiymətlərlə uyğunluq təşkil etdiyi açıq şəkildə müşahidə olunur. Hipofosfit və fosfit turşuları bir və ikiesashlı olduqları üçün, bu turşuların kalsium və alüminium ilə reaksiyaya girərək yaratdıqları birləşmələr, adətən, normal duzlar kateqoriyasına daxildir.



$$A_{\text{üm}} [\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2] = 12$$



$$A_{\text{üm}} [\text{Al}_2(\text{HPO}_4)_3] = 21$$

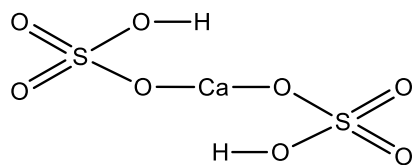
Turşu molekulunda mövcud olan hidrogen atomlarının yalnız bir qismi metal və ya ammonium ionları ilə əvəz olunduqda, nəticədə tam neytrallaşmamış duzlar – yəni turş duzlar yaranır. Belə birləşmələrdə turşunun neytrallaşma prosesi sona çatmadığından, molekul tərkibində hələ də ionlaşma qabiliyyətinə malik hidrogen atomları qalır. Bu cür duzlar həm turşunun, həm də yaranmış duzun xüsusiyyətlərini daşıyaraq, kimyəvi reaksiyalarda spesifik xüsusiyyət nümayiş etdirirlər.

Qeyd edilməlidir ki, birəsaslı turşular (məsələn, HCl , HNO_3) turş duzlar əmələ gətirmirlər. İkiəsaslı turşular (məsələn, H_2SO_4 , H_2CO_3) bir molekul hidrogen saxlayan hidroduzlar, üçəsaslı turşular isə həm hidro, həm də dihidroduzlar əmələ gətirə bilirlər.

Məsələn, natrium-hidrokarbonat (NaHCO_3), kalsium-hidro-sulfat ($\text{Ca}(\text{HSO}_4)_2$) və dəmir(III) dihidroortofosfat ($\text{Fe}(\text{H}_2\text{PO}_4)_3$) kimi birləşmələr turş duzlara nümunədir.

$\text{Ca}(\text{HSO}_4)_2$ və $\text{Fe}(\text{H}_2\text{PO}_4)_3$ turş duzlarında ümumi kimyəvi rabitə saylarını riyazi üsulla hesablamaq məqsəduyğun olar.

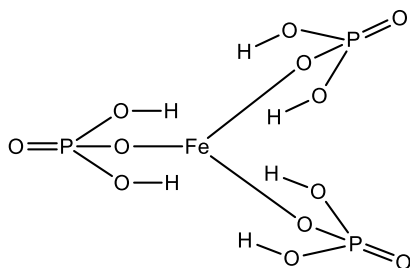
$$A_{\text{üm}} [\text{Ca}(\text{HSO}_4)_2] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{1 \cdot 2 + 2 \cdot 1 + 2 \cdot 6 + 8 \cdot 2}{2} = \frac{2 + 2 + 12 + 16}{2} = 16$$



$$A_{\text{üm}} [\text{Ca}(\text{HSO}_4)_2] = 16$$

Dəmir (III) dihidroortofosfat duzunun tərkibində yer alan elementlərin valentlikləri hesablamalarda nəzərə alınaraq müəyyən edilmişdir: dəmir – üçvalentli, hidrogen – birvalentli, fosfor – beşvalentli, oksigen isə iki valentli kimi qəbul olunur.

$$A_{\text{üm}} [\text{Fe}(\text{H}_2\text{PO}_4)_3] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{1 \cdot 3 + 6 \cdot 1 + 3 \cdot 5 + 12 \cdot 2}{2} = \frac{3 + 6 + 15 + 24}{2} = 24$$



$$A_{\text{üm}} [\text{Fe}(\text{H}_2\text{PO}_4)_3] = 24$$

Kalsium hidrosulfat və dəmir (III) dihidroortofosfat kimi turş duzların qrafik formulları tərtib olunduqda, molekul daxilindəki kimyəvi rabitələrin ümumi sayının riyazi üsulla hesablanan ədədi qiymətlərlə üst-üstə düşdüyü müşahidə olunur.

Çoxturşulu əsaslarla əmələ gələn bir sıra duzlar onların quruluşundakı hidroksid (–OH) qruplarının bir hissəsinin metal atomları ilə əvəz olunması nəticəsində yaranır və bu cür duzlar kimyada əsasi duzlar adlanır. İkiturşulu əsasların bu cür qarşılıqlı təsirindən sadəcə bir tip – hidrokso duzlar meydana çıxır. Əgər əsas üçturşulu olarsa, bu zaman sistem daha zəngin variasiya nümayiş

etdirir həm hidrokso, həm də dihidrokso duzların əmələ gəlməsi mümkündür. Bu cür quruluşlar əsas duzların müxtəlifliyini və onların kimyəvi çevikliklərini artıraraq, mürəkkəb bir qarşılıqlı əlaqə sisteminin yaranmasına şərait yaradır.

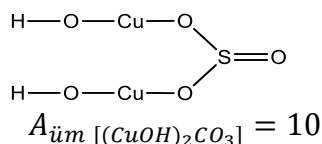
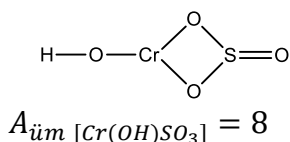
Bu kateqoriyaya aid nümunə kimi maqnezium-hidroksoklorid – $Mg(OH)Cl$ və manqan (III) dihidroksobromid – $Mn(OH)_2Br$ göstərilə bilər.

Eyni zamanda, xrom (III) hidrososulfit və mis (II) hidrosokarbonat (malaxit) kimi əsasi duzların tərkibində olan ümumi kimyəvi rabitələrin sayını riyazi üsulla hesablamaq mümkündür və bu cür yanaşma kimyəvi quruluşun daha dərindən öyrənilməsinə şərait yaradır.

$$A_{üm [Cr(OH)SO_3]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{1 \cdot 3 + 4 \cdot 2 + 1 \cdot 1 + 1 \cdot 4}{2} = \frac{3 + 8 + 1 + 4}{2} = 8$$

$$A_{üm [(CuOH)_2CO_3]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{2 \cdot 2 + 5 \cdot 2 + 2 \cdot 1 + 1 \cdot 4}{2} = \frac{4 + 10 + 2 + 4}{2} = 10$$

Əgər qeyd olunan əsasi duzların qrafik quruluşlarını tərtib edib, ümumi kimyəvi rabitə saylarını hesablasaq, alınan riyazi nəticələrin struktur formul ilə tam uyğunluq təşkil etdiyi müşahidə olunur.



Turşu molekulunda mövcud olan hidrogen atomlarının müxtəlif metal ionları (məsələn, Na^+ , K^+ və ya NH_4^+ kimi) ilə əvəz olunması nəticəsində ikiqat duzlar alınır. Qeyd edilməlidir ki, belə duzlar yalnız çoxəsaslı turşulardan əmələ gələ bilər, çünki birəsaslı turşularda yalnız bir hidrogen atomu mövcud olduğundan onların tərkibində iki müxtəlif metal ionunun iştirakı mümkün deyil. İkiqat duzlara nümunə olaraq natrium-kalium ortofosfat (Na_2KPO_4) və litium-xrom(III) sulfat ($LiCr(SO_4)_2$) göstərilə bilər.

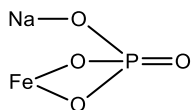
Natrium-ferrium (II) ortofosfat və kalium-xrom (III) sulfat kimi ikiqat duzlarda ümumi kimyəvi rabitə saylarının riyazi yolla hesablanması aşağıdakı nümunələr üzərində izah olunur.

$$A_{üm [NaFePO_4]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{1 \cdot 1 + 1 \cdot 2 + 1 \cdot 5 + 4 \cdot 2}{2} = \frac{1 + 2 + 5 + 8}{2} = 8$$

Kalium-xrom(III) sulfat birləşməsinin tərkibində dəyişkən valentlik göstərə bilən xrom atomu üçvalentli, kükürd atomu isə altıvalentli kimi nəzərə alınmalı və bu xüsusiyyətlər riyazi hesablamalarda mütləq şəkildə əks etdirilməlidir.

$$A_{üm [KCr(SO_4)_2]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{1 \cdot 1 + 1 \cdot 3 + 2 \cdot 6 + 8 \cdot 2}{2} = \frac{1 + 3 + 12 + 16}{2} = 16$$

Kimyəvi birləşmələrin qrafik formul əsasında müəyyən olunan ümumi rabitə saylarının riyazi üsulla aparılan hesablamalarla üst-üstə düşməsi, tətbiq olunan riyazi yanaşmanın düzgünlüyünü və etibarlılığını təsdiq edir.



$$A_{üm [NaFePO_4]} = 8$$

Çoxturşulu əsaslar müxtəlif turşularla qarşılıqlı təsirə girdikdə, onların tərkibindəki hidrokسيد (OH⁻) qruplarının müxtəlif turşu qalığı ilə əvəz olunması nəticəsində mürəkkəb tərkibli qarışıq duzlar əmələ gəlir. Belə birləşmələr qarışıq duzlar adlanır və onlar həm tərkib, həm də quruluş baxımından xüsusi maraq doğurur. Məsələn, alüminiumun xlorid və sulfat turşu qalığı ilə əmələ gətirdiyi AlCl(SO₄) duzu və ya kalsiumun ortofosfat və flüor ionları ilə birləşərək əmələ gətirdiyi Ca₅(PO₄)₃F duzu bu tip birləşmələrə aiddir.

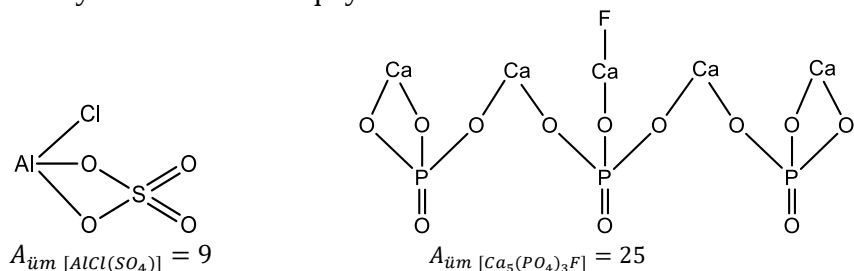
Bu cür qarışıq duzlar yalnız qeyri-üzvi kimyada deyil, həm də texnoloji proseslərdə və bioloji sistemlərdə əhəmiyyətli rol oynayır. Mürəkkəb strukturlu bu duzların molekulunda mövcud olan kimyəvi rabitələrin sayını və növünü riyazi üsullarla müəyyən-

ləşdirmək mümkündür. Bu cür birləşmələrdəki rabitələrin sayını necə hesablamağın mümkün olduğunu nəzərdən keçirək və bununla da onların quruluş mexanizmini daha dərinlən anlamağa çalışaq.

$$A_{\text{üm}} [AlCl(SO_4)] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{1 \cdot 3 + 1 \cdot 6 + 4 \cdot 2 + 1 \cdot 1}{2} = \frac{3 + 6 + 8 + 1}{2} = 9$$

$$A_{\text{üm}} [Ca_5(PO_4)_3F] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{5 \cdot 2 + 3 \cdot 5 + 12 \cdot 2 + 1 \cdot 1}{2} = \frac{10 + 15 + 24 + 1}{2} = 25$$

Əgər birləşmələrin qrafik formulları tərtib edilərək atomlar arasındakı ümumi rabitə sayı müəyyənəşdirilərsə, bu zaman əldə olunan nəticələrin riyazi hesablamalarla üst-üstə düşdüyü müşahidə olunur. Bu isə tətbiq edilən riyazi üsulun dəqiq və etibarlı nəticələr verdiyini bir daha təsdiqləyir.



Ammonium-xlorid (NH_4Cl), ammonium-sulfat ($(NH_4)_2SO_4$) və ammonium-ortofosfat ($(NH_4)_3PO_4$) kimi kompleks duzlarda mövcud olan kimyəvi rabitələrin ümumi sayının riyazi üsulla hesablanması xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Bu birləşmələr üzərində aparılan hesablamalar rabitə strukturlarının daha aydın anlaşılması və molekulun quruluş xüsusiyyətlərinin müəyyənəşdirilməsi baxımından mühüm əhəmiyyət daşıyır. Gəlin, qeyd olunan duz nümunələri əsasında bu prosesə ətraflı şəkildə nəzər salaq.

$$A_{\text{üm.komp.}} [NH_4]Cl = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n + |mk|}{2} = \frac{1 \cdot 4 + 4 \cdot 1 + 1 \cdot 1 + |1 \cdot 1|}{2} = \frac{4 + 4 + 1 + 1}{2} = 5$$

$$A_{\text{üm.komp.}[NH_4]_2SO_4} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n + |mk|}{2} = \frac{2 \cdot 4 + 8 \cdot 1 + 1 \cdot 6 + 4 \cdot 2 + |2 \cdot 1|}{2} = \frac{8 + 8 + 6 + 8 + 2}{2} = 16$$

Məlum olduğu kimi, kompleks birləşmələr strukturuna görə iki əsas qrupa – kation komplekslərə və anion komplekslərə ayrılır. Bu tip birləşmələrdə kompleks ionla xarici sfera arasında əmələ gələn kimyəvi rabitələr, əsasən, elektrostatik cazibə qüvvələri vasitəsilə baş verir. Bu rabitələrin formalaşmasında valent elektron cütləri birbaşa iştirak etmədiyindən, belə rabitələrin sayının hesablanmasında klassik yanaşma kifayət etmir və mövcud düstura əlavə parametrlərin daxil edilməsi zərurəti yaranır.

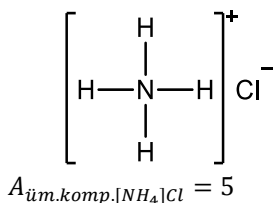
Bu məqsədlə (1.2.1) nömrəli düsturda yeni bir parametr – “m” və “k” ədədi qiymətlərinin hasilinin mütləq qiyməti nəzərə alınmalıdır. Bu əlavə sayəsində kompleks birləşmələrdə rabitələrinin ümumi sayını dəqiq hesablamaq mümkündür [1, 2].

Məsələn, ammonium-sulfat duzunda NH_4^+ ionları ilə SO_4^{2-} turşu qalığı arasında iki ion rabitəsi elektrostatik qarşılıqlı təsir hesabına yaranır. Bundan əlavə, birləşmənin tərkibində ümumilikdə on iki polyar-kovalent rabitə mövcuddur. Azot və hidrogen atomları arasında formalaşan bu rabitələrin ikisi donor-akseptor mexanizmi ilə əmələ gəlir. Bu cür yanaşma kompleks birləşmələrin kimyəvi quruluşunu və rabitə tiplərini daha əhatəli şəkildə izah etməyə imkan verir.

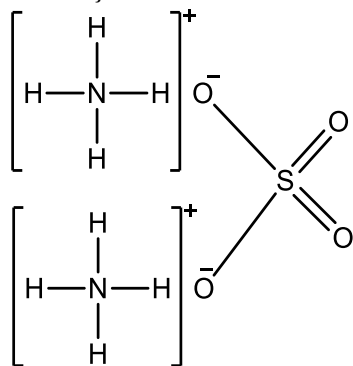
$$A_{\text{üm.komp.}[NH_4]_3PO_4} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n + |mk|}{2} = \frac{3 \cdot 4 + 12 \cdot 1 + 1 \cdot 5 + 4 \cdot 2 + |3 \cdot 1|}{2} = \frac{12 + 12 + 5 + 8 + 3}{2} = 20$$

Ammonium-ortofosfat birləşməsində ammonium ionları ilə turşu qalığı arasında üç ion rabitə mövcuddur. Bundan əlavə, qeyri-metal atomları arasında on yeddi polyar kovalent rabitə yaranır. Birləşmələrin qrafik formullarını tərtib etməklə kimyəvi rabitə saylarını müəyyən etmək və riyazi hesablamlar əsasında əldə olunan ədədi nəticələrin düzgünlüyünü təsdiqləmək mümkündür. Ammonium-xlorid duzunun strukturunda isə dörd polyar kovalent

və bir ion rabitəsi aşkar edilir.



İki müsbət yüklü ammonium kationu ilə mənfi yüklü sulfat ionu arasında elektrostatik cazibə qüvvələri vasitəsilə rabitə yaranır. Nəticədə, molekulun strukturunun formalaşmasında 14 polyar kovalent və 2 ion rabitəsi iştirak edir.

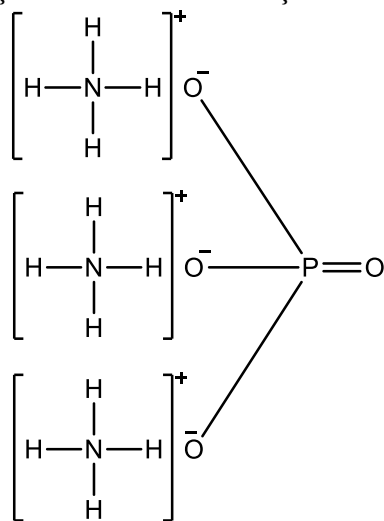


$$A_{\text{üm.komp.}}[NH_4]_2SO_4 = 16$$

İon rabitə, müxtəlif elektrik yüklərinə sahib olan zərrəciklər arasında elektrostatik cazibə qüvvəsinin təsiri ilə meydana gəlir və burada valent elektronların birbaşa iştirakı müşahidə olunmur. Bu səbəbdən, ammonium-ortofosfat kompleks duzunun tərkibində hidrogen, azot və oksigen atomları cəmi 34 valent elektron istifadə edərək 17 ədəd polyar kovalent rabitə yaradırlar. Eyni zamanda, müsbət və mənfi yüklü ionlar arasında elektrostatik cazibə nəticəsində 3 ədəd ion rabitəsi formalaşır.

Qeyd edilməlidir ki, ammonium duzlarının kovalent-polyar

rabitələrinin sayını hesablamaq zamanı “m” və “k” kimi parametrlər nəzərə alınmır və ümumi hesab qaydası tətbiq edilir. Nəticədə, molekulun quruluşunda cəmi 20 rabitə iştirak edir.



$$A_{\text{üm.komp.}}[NH_4]_3PO_4 = 20$$

Kimyəvi birləşmələrdə σ -rabitələrinin sayını riyazi yolla hesablamaq üçün tsiklik (yəni, qapalı) sayın dəqiq müəyyən olunması vacib şərtlərdəndir. Qeyd etmək lazımdır ki, birturşulu əsaslar və birəsaslı turşulardan əmələ gələn duzlarda tsiklik strukturlar mövcud olmur.

Oksigenli turşu qalığı ilə metal atomları arasında kimyəvi rabitələrin yaranması nəticəsində duzlar əmələ gəlir. Bu zaman kationların müsbət yükünün miqdarından asılı olaraq müəyyən sayda tsiklik (qapalı vəziyyət) quruluşların formalaşması mümkündür. Müxtəlif təsnifat qruplarına aid olan duzların yaranması zamanı əmələ gələn tsiklik sayını hesablamaq üçün (1.2.4) düsturundan istifadə edilir.

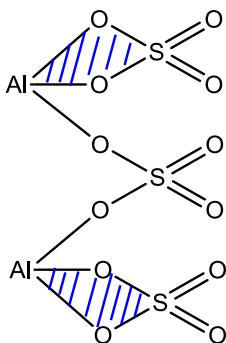
İndi alüminium-sulfat və dəmir(III) hidroortosfat duzlarının σ -rabitələrinin sayının riyazi üsulla hesablanmasına nəzər salaq.

$$A_{\sigma[Al_2(SO_4)_3]} = N_{\text{üm}} + n(e - 1) - m = 17 + 2(3 - 1) - 3 = 17 + 4 - 3 = 18$$

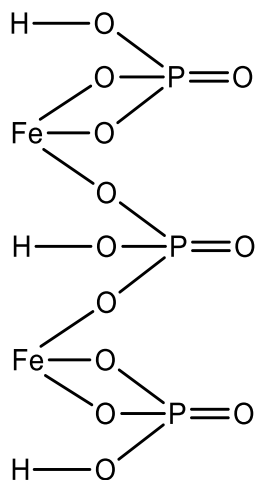
Alüminium-sulfat duzunun tərkibində ümumilikdə 17 atom mövcuddur ($N_{\text{üm}}$). Bu birləşmədə metal atomlarının sayı (n) 2-dir, onların valentliyi isə (e) 3-ə bərabərdir.

$$A_{\sigma[Fe_2(HPO_4)_3]} = N_{\text{üm}} + n(e - 1) - m = 20 + 2(3 - 1) - 3 = 21$$

Alüminium-sulfat və Dəmir (III) hidroortosfat duzlarının qrafik formullarını tərtib etdikdə, onların tərkibindəki siqma rabitələrinin sayı müəyyən edilərək riyazi hesablama nəticələri ilə müqayisə edilir. Nəticədə, əldə olunan ədədi qiymətlərin tam uyğun gəldiyi müşahidə olunur. Bu riyazi metodların kimyəvi quruluşun təhlilində dəqiqliklə tətbiq oluna biləcəyini göstərir.



$$A_{\sigma[Al_2(SO_4)_3]} = 18$$



$$A_{\sigma[Fe_2(HPO_4)_3]} = 21$$

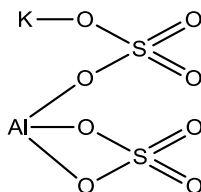
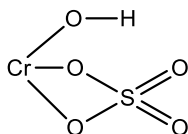
Əsasi və ikiqat duzlar kateqoriyasına daxil olan Xrom (III) hidrosulfat və Kalium-alüminium-sulfat birləşmələrində σ (siq-

ma) rabitələrinin sayı riyazi üsullarla hesablanması aşağıdakı şəkildə təqdim olunmuşdur:

$$A_{\sigma[Cr(OH)SO_4]} = N_{\text{üm}} + n(e - 1) - m = 8 + 1(3 - 1) - 1 = 8 + 2 - 2 = 8$$

$$A_{\sigma[KAl(SO_4)_2]} = N_{\text{üm}} + n(e - 1) - m = 12 + 1(3 - 1) - 2 = 12 + 2 - 2 = 12$$

Duzların qrafik formullarına əsaslanaraq, onların siqma rabitələrinin sayını müəyyən etdikdə, əldə olunan nəticələrin riyazi hesablamalarla tam uyğun olduğunu müşahidə etmək mümkündür.



$$A_{\sigma[Cr(OH)SO_4]} = 8$$

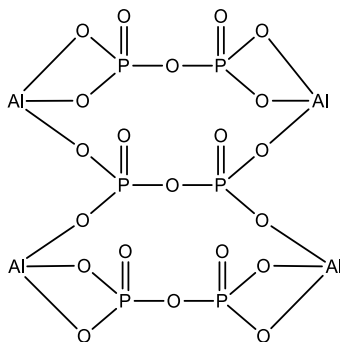
$$A_{\sigma[KAl(SO_4)_2]} = 12$$

Qeyd etmək lazımdır ki, düsturda verilən “e-1” ifadəsi, müsbət yüklü kationlarda (+1) sıfır qiymətini aldığı üçün hesablama nəzərə alınmır.

Daha mürəkkəb qrafik formulu olan Alüminium-difosfat (Alüminium-pirofosfat) duzunun siqma rabitələrinin sayını hesablamaq üçün (1.2.5) düsturundan istifadə edək:

$$A_{\sigma[Al_4(P_2O_7)_3]} = N_{\text{üm}} + n(e - 1) - m = 31 + 4(3 - 1) - 3 = 31 + 8 - 3 = 36$$

Alüminium-pirofosfat duzunun qrafik formulu hazırladıqda və oradakı siqma rabitələrinin sayını müəyyənləşdirdikdə, əldə olunan riyazi nəticələrin dəqiq və etibarlı olduğu aşkar olunur. Bu, hesablamaların nəzəri əsaslarla tam uyğun gəldiyini göstərir.



$$A_{\sigma}[Al_4(P_2O_7)_3] = 36$$

Duzların qrafik formullarını hazırlayıb orada mövcud olan siqma rabitələrinin sayını müəyyən etdikdə, əldə olunan nəticələrin riyazi hesablamalarla tapılan dəyərlərlə tam uyğun gəldiyi müşahidə olunur.

Duzların tsiklik sayını və siqma rabitələrinin sayını aşağıda verilmiş düsturlar vasitəsilə hesablamaq da mümkündür.

$$S = -[m(k + 1) + n - 1]$$

Burada S - kimyəvi birləşmədə tsiklik quruluşların sayını göstərir, m - turşu qalıqlarının ümumi sayını ifadə edir, k - turşu qalıqlarının mənfi yükünün miqdarıdır, n isə metal atomlarının və ammonium ionlarının sayını bildirir.

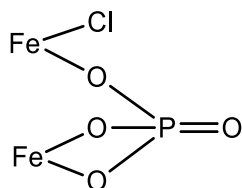
(1.2.2) formulundakı tsiklik sayı tətbiq etdikdə, duzların bütün növləri üçün siqma rabitələrinin sayını hesablamağa imkan verən ümumi bir düstur əldə edilir.

$$A_{\sigma} = N_{\text{üm}} - m(k + 1) - n$$

Dəmir (II) xlorid-ortofosfat qarışıq duzunda olan siqma rabitələrinin sayının hesablanması prosesi aşağıdakı kimi izah olunur:

$$A_{\sigma}[Fe_2(Cl)PO_4] = N_{\text{üm}} - m(k + 1) - n = 8 - (-3 + 1) - 2 = 8 + 2 - 2 = 8$$

Birləşmənin qrafik formulu əsasında siqma rabitələrinin sayını müəyyən etdikdə, hesablamaların düzgünlüyü təsdiqlənir və dəqiq nəticələr əldə olunur.



$$A_{\sigma[Fe_2(Cl)PO_4]} = 8$$

Qeyd edilməlidir ki, düsturda yer alan “k+1” ifadəsi “-1” yüklü ionlarda sıfır kimi qiymətləndirilir və buna görə də hesablama zamanı nəzərə alınmır.

Bu düsturların tətbiqi ilə həm üzvi, həm də qeyri-üzvi birləşmələrin molekullarında qrafik formullardan istifadə etmədən ümumi, siqma və pi rabitələrin riyazi hesablanması mümkün olur. Belə yanaşma kimya fənninin ali məktəb səviyyəsində tədrisində əhəmiyyətli dərəcədə inkişafı təmin edir. Eyni zamanda, bu metod kimyanın tədrisini təkmilləşdirərək riyaziyyat, biologiya və həndəsə fənləri ilə integrasiyanı da gücləndirə bilər [1, 2].

Nəticə olaraq, normal, turş, əsas, ikiqat, qarışıq və kompleks duzlarda kimyəvi rabitələrin sayının qrafik formul tərtib etmədən, birbaşa riyazi üsullarla hesablanması prinsipləri bu fəsildə ətraflı şəkildə izah olunmuşdur.

Qeyd etmək lazımdır ki, kompleks duzlarda ion rabitələrinin formalaşması elektrostatik cazibə qüvvələrinin təsiri ilə baş verir. Bu səbəbdən valent elektronların ion rabitələrinin yaranmasında birbaşa rolu olmadığı üçün ümumi rabitə saylarının riyazi hesablanmasında daxili sferanın yükü nəzərə alınmışdır.

2.4. Kimyəvi birləşmələrdə siqma rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması

Molekulu təşkil edən atom nüvələri arasında yönəlmiş elektron orbitallarının qismən örtülməsi nəticəsində siqma rabitəsi formalaşır [1, 2, 34, 37]. Bildiyimiz kimi, iki atom arasında yalnız

bir σ rabitə yarana bilər, çünki iki nöqtədən yalnız bir düz xətt keçirmək mümkündür. Bundan əlavə, σ rabitələr həm eyni trayektoriyalı, həm də fərqli trayektoriyalı elektron orbitallarının qismən örtülməsi ilə yaranır [1, 2, 48].

Hidrogen molekulunda isə σ rabitə eyni trayektoriyalı, lakin fərqli spinli “s” elektron orbitallarının örtülməsi nəticəsində əmələ gəlir. Hidrogen-xlorid molekulunda atomlar arasındakı σ rabitə “s” və “p” elektron orbitallarının qismən örtülməsi ilə meydana gəlir və buna “s-p örtülməsi” deyilir. Xlor molekulunda isə σ rabitə yalnız “p” orbitallarının örtülməsi nəticəsində yaranır və bu, “p-p örtülməsi” adlanır.

Bəzi molekularda siqma rabitəsinin formalaşmasında hibridləşmiş elektron orbitallarının rolu mühümdür. Məsələn, sp^2 -s, sp -s, sp^2 -p və sp -p orbitallarının örtülməsi nəticəsində yaranan σ rabitələr buna misal ola bilər [1].

Maddələrin fiziki və kimyəvi xüsusiyyətlərinin öyrənilməsində, molekulun qrafik formulunun və onun fəza quruluşunun tədqiqində, həmçinin σ rabitə sayları və onların birləşmə ardıcılığı mühüm rol oynayır [1, 24, 25, 33].

Ümumiyyətlə, σ rabitə saylarının hesablanması da digər rabitə növlərinin tapılması kimi qeyri-üzvi birləşmələrin qrafik formulları vasitəsilə həyata keçirilir. Lakin çoxatomlu mürəkkəb molekulaların qrafik formulunun hazırlanması həm çətin, həm də vaxt aparan proses ola bilər [1, 47].

Bu çətinliyin aradan qaldırılması məqsədilə aparılan tədqiqatlar uğurlu nəticə vermişdir. Belə ki, kimyəvi birləşmələrin qrafik formulunu istifadə etmədən σ rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması mümkün olmuşdur [1, 6, 13, 15]. Bu məqsədlə (1.2.2) düsturundan istifadə etmək tövsiyə edilir [1, 23].

İndi isə oksidlərdə σ rabitə saylarının riyazi hesablanmasını nəzərdən keçirək. Məsələn, Alüminium-oksidi (Al_2O_3), Karbon-dioksidi (CO_2), Difosfor-pentaoksidi (P_2O_5), Kükürd-trioksidi (SO_3) və Dixlor-heptaoksidi (Cl_2O_7) molekullarında σ rabitələrinin sayının qrafik formul olmadan riyazi üsulla hesablanması metodunu təqdim edək.

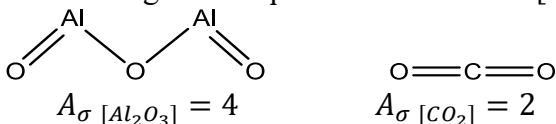
$$A_{\sigma [Al_2O_3]} = N_{üm} + S - 1 = 5 + 0 - 1 = 4$$

$$A_{\sigma [CO_2]} = N_{üm} + S - 1 = 3 + 0 - 1 = 2$$

Yuxarıda qeyd olunan birləşmələrdə molekulyar strukturda hər hansı bir tsiklik (qapalı) quruluşa rast gəlinmir [1, 57].

Məsələn, Alüminium oksid (Al_2O_3) birləşməsində ümumi atom sayı beşdir və strukturunda tsiklik quruluş müşahidə olunmur (tsiklik say – 0). Eyni hal karbon dioksid (CO_2) molekulunda da müşahidə olunur – burada atomların ümumi sayı üç, tsiklik göstərici isə sıfıra bərabərdir [1].

Qeyd edilən nümunələrin qrafik formullarının qurulması və onların riyazi üsullarla analiz edilməsi nəticəsində, hesablamaların dəqiqliyini və etibarlılığını təsdiq etmək mümkündür [1, 52, 54].

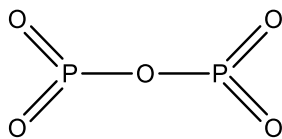


$$A_{\sigma [P_2O_5]} = N_{üm} + S - 1 = 7 + 0 - 1 = 6$$

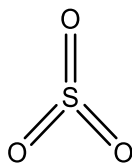
$$A_{\sigma [SO_3]} = N_{üm} + S - 1 = 4 + 0 - 1 = 3$$

Karbon (IV) oksid, kükürd (VI) oksid və xlor (VII) oksid kimi birləşmələrdə qeyri-metal elementlərinin valentlikləri onların oksidləşmə dərəcələrinin ədədi qiymətləri ilə üst-üstə düşür. Bu uyğunluq sözügedən birləşmələrin qrafik formulalarında da aydın şəkildə görünür.

Fosfor, kükürd, oksigen və xlor elementlərinin elektromənfilikləri müvafiq olaraq 2,2; 2,55; 3,5 və 3,0 təşkil edir. Oksigen elementi daha yüksək elektromənfiliyə malik olduğuna görə, bu tip oksidlərin tərkibində mənfi oksidləşmə dərəcəsinə malik olur. Əvəzində, fosfor, kükürd və xlor kimi qeyri-metallar isə müvafiq olaraq +5, +6 və +7 oksidləşmə dərəcələri göstərilir. Bu göstəricilər, həmin elementlərin oksigenlə əmələ gətirdiyi birləşmələrdə onların elektronvermə qabiliyyətini və oksidləşmə xarakterini əks etdirir [1].

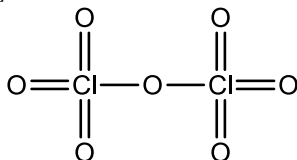


$$A_{\sigma} [P_2O_5] = 6$$



$$A_{\sigma} [SO_3] = 3$$

$$A_{\sigma} [Cl_2O_7] = N_{üm} + S - 1 = 9 + 0 - 1 = 8$$



$$A_{\sigma} [Cl_2O_7] = 8$$

Yuxarıda qeyd olunan molekularda aparılan riyazi hesablamaların nəticələri onların qrafik quruluşlarında da öz əksini tapır.

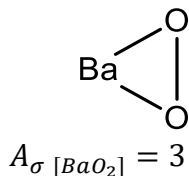
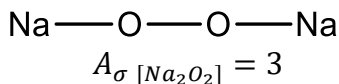
Natrium peroksid (Na_2O_2) və barium-peroksid (BaO_2) birləşmələri üçün siqma rabitələrinin sayının riyazi yolla hesablanması aşağıdakı verilmişdir [1].

Qeyd etmək lazımdır ki, natrium peroksid birləşməsində sadə quruluş müşahidə olunduğu halda, barium peroksid molekulunda fərqli olaraq bir ədəd qapalı halqa tsiklik quruluş mövcuddur. Bu isə onun qrafik təsvirində açıq şəkildə görünür [1].

$$A_{\sigma} [Na_2O_2] = N_{üm} + S - 1 = 4 + 0 - 1 = 3$$

$$A_{\sigma} [BaO_2] = N_{üm} + S - 1 = 3 + 1 - 1 = 3$$

Kimyəvi birləşmələrin qrafik formulunu tərtib etməklə onların siqma rabitələrinin sayını dəqiqliklə müəyyənləşdirmək mümkündür və bu, ümumi rabitə sayının hesablanmasında doğru nəticə verir. Xüsusilə vurğulanmalıdır ki, natrium və kalsium peroksid kimi birləşmələrdə pi rabitələrinin mövcud olmaması səbəbilə bu maddələrin ümumi ilə siqma rabitə sayları bərabər olur və bu göstəricilər ədədi baxımdan üst-üstə düşür.



Peroksid birləşmələrində hidrogen atomları bir-biri ilə birləşdiyindən, oksigenin oksidləşmə dərəcəsi "-1", valentliyi isə II olaraq qəbul edilir. Kalsium və barium kimi elementlər peroksidlərində üç ədəd siqma rabitə yaratdıqları üçün bu birləşmələrdə tsiklik quruluş müşahidə olunur [1].

Oksid və peroksidlərdəki σ -rabitələrin sayının riyazi üsulla müəyyən olunması, bu hesablamaların düzgünlüyünün müvafiq qrafik quruluşlarla əsaslandırılması fəsilə ətraflı şəkildə izah edilmişdir. Bu yanaşma, müvafiq birləşmələrin quruluşunun elmi cəhətdən izahında və tədrisində mühüm əhəmiyyət daşıyır.

2.5. Kimyəvi birləşmələrdə $\pi(\text{pi})$ - rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması

Kimyəvi rabitələrin təbiətini daha dərinədən anlamaq üçün siqma və pi rabitələrinin yaranma mexanizmini nəzərdən keçirmək vacibdir. İki atom arasında yaranan birinci rabitə adətən siqma xarakterli olur. Lakin atomlar arasında əlavə rabitələr meydana gəldikdə, bu artıq pi rabitələrlə ifadə olunur. Belə rabitələr əsasən hibridləşməmiş "p" orbitallarının bir-biri ilə yanaşı örtülməsi nəticəsində yaranır. Məsələn, ikiqat rabitədə bir π , üçqat rabitədə isə iki π -rabitə mövcud olur [1].

Əgər bir molekulda iki π -rabitə yaranarsa, bu rabitələr bir-birinə qarşılıqlı perpendikulyar vəziyyətdə yerləşirlər. Bu hal, xüsusilə N_2 molekulunda azot atomları arasında və alkinlərdə karbon atomları arasında baş verən üçqat rabitələrdə müşahidə olunur.

Siqma rabitələr struktur baxımdan daha sabit və möhkəm olduqlarından, doymamış karbohidrogenlərin müxtəlif birləşmə

reaksiyalarında iştirak etdikdə π -rabitələr nisbətən zəif olduqları üçün asanlıqla qırılırlar.

Kimyəvi birləşmələrin ümumi rabitə sayı ($A_{\text{üm}}$) və siqma rabitələrinin sayı (A_{σ}) riyazi yolla müəyyən edildikdən sonra, π -rabitələrin sayını hesablamaq üçün bu iki göstərici arasındakı fərqi tapmaq kifayətdir [1]:

$$A_{\pi} = A_{\text{üm}} - A_{\sigma}$$

Bu yanaşma vasitəsilə molekularda π -rabitələrin dəqiq sayını təyin etmək mümkündür. [1, 8].

$$A_{\pi} = A_{\text{üm}} - A_{\sigma} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} - (N_{\text{üm}} + S - 1)$$

$$N_{\text{üm}} = a_1 + a_2 + \dots + a_n$$

$$\begin{aligned} A_{\pi} &= \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} - (a_1 + a_2 + \dots + a_n + S - 1) = \\ &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) - 2S + 2}{2} = \\ &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} \end{aligned}$$

Beləliklə,

$$A_{\pi} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2}$$

Burada, A_{π} – verilmiş kimyəvi birləşmədə π rabitələrinin sayını göstərir; a_1, a_2, a_n – birləşmədə iştirak edən müxtəlif elementlərin atom saylarını ifadə edir, e_1, e_2, e_n – müvafiq olaraq həmin elementlərin valentliklərini göstərir; S – birləşmənin strukturunda mövcud olan tsikllərin sayını bildirir [1].

Oksidlər sinfinə aid olan karbon–dioksid (karbon (IV) oksid) – CO_2 , difosfor–pentaoksid (fosfor (V) oksid) – P_2O_5 və dixlor–heptaoksid (xlor (VII) oksid) – Cl_2O_7 kimi birləşmələrdə π rabitələrinin sayını riyazi üsulla təyin etmək mümkündür. Bu

maddələrin molekul formullarına əsaslanaraq, π rabitələrinin sayının necə hesablandığını nəzərdən keçirək.

$$A_{\pi[CO_2]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{1(4 - 2) + 2(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{2 + 0 + 2}{2} = 2$$

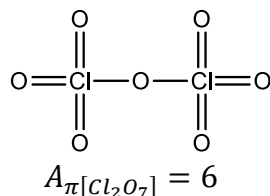
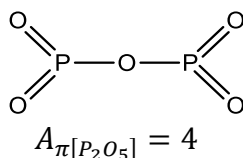
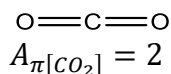
$$A_{\pi[P_2O_5]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{2(5 - 2) + 5(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{6 + 0 + 2}{2} = 4$$

$$A_{\pi[Cl_2O_7]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{2(7 - 2) + 2(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{10 + 0 + 2}{2} = 6$$

Məlum olduğu kimi, yuxarıda qeyd olunan oksid molekullarının quruluşunda tsiklik (qapalı) birləşmələr müşahidə edilmir. Bu birləşmələrin qrafik formullarını tərtib etdikdə və π rabitələrinin sayını təyin etdikdə, aparılan riyazi hesablamaların doğruluğu və dəqiqliyi açıq şəkildə özünü göstərir.



İkinci dövrün IV(A) qrup elementlərindən olan karbonun normal (stasionar) vəziyyətində “p” yarımşəviyyəsində iki qoşalaşmamış elektron və bir boş orbital mövcuddur. Bu halda ikinci təbəqədə yerləşən qoşalaşmış “s” elektronlarından biri enerji qəbul edərək “p” yarımşəviyyəsinin boş orbitalına keçir. Nəticədə

karbon atomu “sp³” hibridləşməsinə uğrayır və dördvalentli birləşmə əmələ gətirmək qabiliyyəti qazanır.

Üçüncü dövrün V(A) qrup elementi olan fosfor, sonuncu enerji təbəqəsində yerləşən “s” orbitalında olan bir elektronu enerji udaraq boş “d” orbitalına keçirir. Beləliklə, fosfor beşvalentli hala keçir və bu vəziyyətdə difosfor-pentaoksid (P₂O₅) kimi birləşmələr əmələ gətirə bilir.

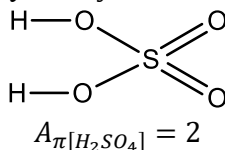
Üçüncü dövrün VII(A) qrup elementi olan xlorun stasionar vəziyyətində “p” yarımsəviyyəsində bir qoşalaşmamış elektron olur. Enerji qəbul etdikdən sonra son enerji səviyyəsindəki “s” və “p” orbitalında yerləşən qoşalaşmış elektronlardan biri boş “d” orbitalına keçir. Bunun nəticəsində xlor atomu yeddi valentli hala keçir və xlor (VII) oksid (Cl₂O₇) birləşməsinə əmələ gətirir.

H₂SO₄, H₄P₂O₇ və H₂S₂O₇ kimi oksigenli turşu molekullarında π-rabitələrin sayını müəyyən etmək üçün (1.2.6) düsturundan istifadə etməklə riyazi hesablama aparmaq mümkündür. Qeyd olunmalıdır ki, bəzi turşu molekullarında yalnız siqma tipli rabitələr əmələ gəlir və pi rabitəsi yaranmır. Bu tip turşulara misal olaraq hidrogen-halogenidlər (HCl, HF və s.) göstərilə bilər [1].

$$A_{\pi[H_2SO_4]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2(1 - 2) + 1(6 - 2) + 4(2 - 2) + 2(1 - 0)} =$$

$$= \frac{-2 + 4 + 0 + 2}{2} = 2$$

Əgər molekulun qrafik formulu tərtib edib, oradakı pi rabitələrinin sayını müəyyən etsək, riyazi üsulla əldə olunan ədədi nəticənin həmin qrafik quruluşla tam uyğunluq təşkil etdiyini müşahidə edərik. Bu isə hesablamaların dəqiqliyini və tətbiq edilən metodun elmi əsaslara söykəndiyini bir daha sübut edir.



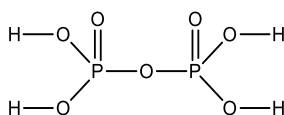
Pirofosfat (və ya difosfat) turşusu molekulunda iki fosfor atomu mövcuddur. Bu birləşmədə pi rabitələrin miqdarını riyazi üsulla müəyyən etmək mümkündür. Gəlin, bu turşunun quruluşuna əsaslanaraq pi rabitələrinin sayını hesablayaraq molekulun elektron quruluşuna dair dəqiq təsəvvür formalaşdıraraq.

$$A_{\pi[H_4P_2O_7]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{4(1 - 2) + 2(5 - 2) + 7(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2}$$

$$= \frac{-4 + 6 + 0 + 2}{2} = 2$$

Qrafik formul əsasında aparılan riyazi hesablamalar nəticəsində əldə olunan göstəricilər molekulun quruluşunu dəqiq şəkildə əks etdirir. Bu, verilənlərin elmi əsaslara uyğunluğunu və hesablama-ların düzgün aparıldığını təsdiq edir.

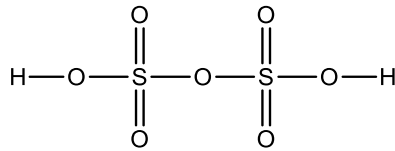


$$A_{\pi[H_2S_2O_7]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{2(1 - 2) + 2(6 - 2) + 7(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2}$$

$$= \frac{-2 + 8 + 0 + 2}{2} = 4$$

Molekulun struktur quruluşu nəzərdən keçirildikdə, pi rabitələrinin ümumi sayının dörd olduğu açıq şəkildə müşahidə olunur. Bu göstərici maddənin elektron quruluşu və kimyəvi rabitələrinin xarakterini dəqiq şəkildə əks etdirir.



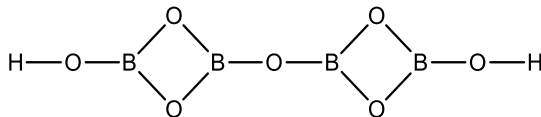
$$A_{\pi[H_2S_2O_7]} = 4$$

Pirofosfat ($H_4P_2O_7$) və pirosulfat ($H_2S_2O_7$) turşularının molekulyar quruluşunda, oksigen atomları ilə fosfor və kükürd atomları arasında həm siqma, həm də pi növü kimyəvi rabitələr mövcuddur. Bu π rabitələri, molekulların stabilliyini və xüsusiyyətlərini müəyyən edən əsas əlaqələrdən biridir.

İki tsiklik quruluşa malik olan tetraborat turşusu ($H_2B_4O_7$) molekulunun qrafik strukturunu araşdıraraq, burada pi rabitələrinin sayının riyazi üsulla hesablanmasını müzakirə edək.

$$\begin{aligned} A_{\pi[H_2B_4O_7]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{2(1 - 2) + 4(3 - 2) + 7(2 - 2) + 2(1 - 2)}{2} = \\ &= \frac{-2 + 4 + 0 - 2}{2} = 0 \end{aligned}$$

Tetraborat turşusu ($H_2B_4O_7$) molekulunda aparılan riyazi hesablamalar göstərir ki, pi tipli rabitələr mövcud deyil. Bu nəticə molekulun qrafik formulunda da aydın şəkildə əks olunur və təsdiqini tapır.



$H_6P_4O_{13}$ turşusunun molekulu nisbətən mürəkkəb quruluşa malikdir. Bu səbəbdən, molekulda mövcud olan π -rabitələrin sayını

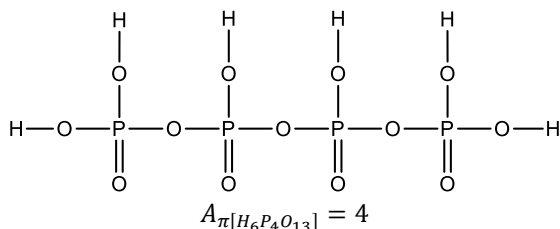
müəyyən etmək üçün xüsusi hesablamalar aparmaq lazımdır. Bu turşunun strukturunda π -rabitələrin sayını araşdıraraq və riyazi yanaşma tətbiq edək.

$$A_{\pi[H_6P_4O_{13}]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{6(1 - 2) + 4(5 - 2) + 13(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} =$$

$$= \frac{-6 + 12 + 0 + 2}{2} = 4$$

Molekulun qrafik formülünü yazaraq, π -rabitələrinin sayının dördə bərabər olduğunu görmək olar.



Hipofosfit (H_3PO_2) və fosfit (H_3PO_3) turşularında hidrogen atomlarının ümumi sayı ilə turşunun əsaslığı arasında fərq müşahidə olunsa da, bu birləşmələrin molekul quruluşunda pi rabitələrin sayının riyazi yolla müəyyən olunması tam dəqiqliklə aparıla bilər. Beləliklə, əsaslıq və hidrogen atomlarının sayındakı uyğunsuzluq hesablamaların düzgünlüyünə təsir etmir.

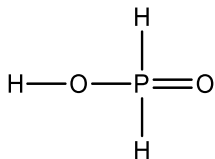
$$A_{\pi[H_3PO_2]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{3(1 - 2) + 1(5 - 2) + 2(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} =$$

$$= \frac{-3 + 3 + 0 + 2}{2} = 1$$

Molekulun qrafik quruluşuna nəzər saldıqda, pi rabitələrinin sayının bir olduğu aydın şəkildə müşahidə olunur. Bu xüsusiyyət, ortofosfat turşusunun elektron quruluşunu və rabitə tiplərini daha

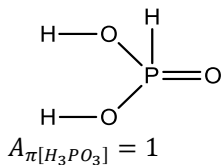
dəqiq anlamağa imkan verir.



$$A_{\pi[\text{H}_3\text{PO}_2]} = 1$$

$$\begin{aligned} A_{\pi[\text{H}_3\text{PO}_3]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{3(1 - 2) + 1(5 - 2) + 3(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{-3 + 3 + 0 + 2}{2} = 1 \end{aligned}$$

Qrafik formul üzərində aparılan təhlil göstərir ki, riyazi yolla əldə olunan ədədi göstəricilər molekulun quruluşunda tam uyğunluq təşkil edir. Başqa sözlə, hesablamalar nəticəsində müəyyən edilən qiymətlər maddənin qrafik strukturunda öz əksini tapır və onun quruluşunu aydın şəkildə izah edir.



$$A_{\pi[\text{H}_3\text{PO}_3]} = 1$$

$\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ - Dəmir (III) sulfat və $\text{Cr}_2(\text{HPO}_4)_3$ - Xrom (III) hidroorto-fosfat duzlarında pi rabitələrinin sayının riyazi üsulla hesablanması təhlil edək.

Bu duzların molekul quruluşunda oksigen atomları ilə mərkəzi atomlar arasında əmələ gələn ikiqat rabitələr, yəni π -rabitələr mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Məhz bu cür rabitələrin müəyyən edilməsi və sayının düzgün hesablanması mürəkkəb birləşmələrin elektron quruluşunu dərk etməyə və onların kimyəvi xassələrini daha dəqiq izah etməyə imkan verir.

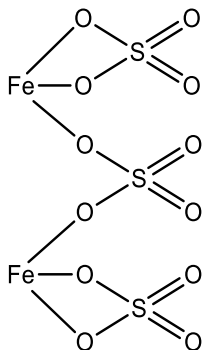
Növbəti mərhələdə hər bir duz üçün ayrılıqda struktur elementlərinin valentlik qiymətinə əsasən π -rabitə sayları hesablanacaqdır.

$$\begin{aligned}
 A_{\pi[Fe_2(SO_4)_3]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\
 &= \frac{2(3 - 2) + 3(6 - 2) + 12(2 - 2) + 2(1 - 2)}{2} = \\
 &= \frac{2 + 12 + 0 - 2}{2} = 6
 \end{aligned}$$

Məlum olduğu kimi, dəmir (III) sulfat – $Fe_2(SO_4)_3$ birləşməsinin tərkibində iki ayrı tsiklik vəziyyət müşahidə olunur. Bu halı daha dəqiq müəyyənləşdirmək üçün (1.2.4) düsturundan istifadə etmək məqsədəuyğundur. Bu yanaşma vasitəsilə birləşmənin struktur xüsusiyyətlərini və rabitə əlaqələrini aydın şəkildə təhlil etmək mümkündür.

$$S_{[Fe_2(SO_4)_3]} = n(e - 1) - m + 1 = 2(3 - 1) - 3 + 1 = 4 - 3 + 1 = 2$$

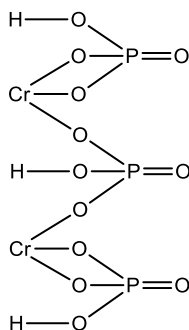
Kimyəvi birləşmənin qrafik formülünü hazırlamaqla, riyazi hesablamaların düzgünlüyü təsdiqlənə bilər. Dəmir (III) sulfatın normal duzunda, iki tsiklik quruluş kükürd, oksigen və dəmir atomlarının qarşılıqlı əlaqəsi nəticəsində formalaşır.



$$\begin{aligned}
 A_{\pi[Fe_2(SO_4)_3]} &= 6 \quad S_{[Fe_2(SO_4)_3]} = 2 \\
 A_{\pi[Cr_2(HPO_4)_3]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =
 \end{aligned}$$

$$= \frac{2(3-2) + 3(1-2) + 3(5-2) + 12(2-2) + 2(1-2)}{2} = \frac{2-3+9+0-2}{2} = 3$$

Qrafik formulda iki tsiklik strukturun mövcudluğu və üç pi rabitəsinin varlığı aydın şəkildə müşahidə olunur. Bu tsiklik quruluş xrom, oksigen və fosfor atomlarının qarşılıqlı təsiri və birləşməsi nəticəsində yaranır. Belə birləşmə molekulun stabilliyini təmin edir və onun kimyəvi xüsusiyyətlərinə təsir göstərir.



$$A_{\pi[Cr_2(HPO_4)]_3} = 3 \quad S_{[Cr_2(HPO_4)]_3} = 2$$

Alüminium-difosfat ($Al_4(P_2O_7)_3$) və manqan(III) piro-sulfat ($Mn_2(S_2O_7)_3$) duzlarında mövcud olan tsiklik quruluşların və pi rabitələrinin sayının riyazi yolla müəyyənəndirilməsi aşağıda ətraflı şəkildə izah edilmişdir. Bu birləşmələrdəki kimyəvi rabitələrin quruluşu və qarşılıqlı əlaqələri onların molekul quruluşuna uyğun olaraq sistemli şəkildə təhlil olunmuşdur.

$$S_{[Al_4(P_2O_7)_3]} = n(e-1) - m + 1 = 4(3-1) - 3 + 1 = 8 - 3 + 1 = 6$$

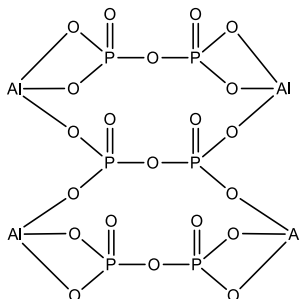
Kimyəvi birləşmədə tsiklik quruluşların sayı əvvəlcədən müəyyən edildikdə, pi rabitələrin ümumi sayını qrafik formulan istifadə etmədən, riyazi üsullarla hesablamaq mümkündür. Bu yanaşma, qrafik formulların çəkilməsinə ehtiyac qalmadan, molekulun daxilindəki ikiqat rabitələrin sayını dəqiq müəyyən

etməyə imkan verir.

$$A_{\pi[Al_4(P_2O_7)_3]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{4(3 - 2) + 6(5 - 2) + 21(2 - 2) + 2(1 - 6)}{2} = \frac{4 + 18 + 0 - 10}{2} = 6$$

Kimyəvi birləşmənin qrafik formulunda alüminium, oksigen və fosfor atomlarının qarşılıqlı əlaqəsi nəticəsində tsiklik quruluşun əmələ gəldiyi aydın müşahidə olunur. Bu tsiklik sistem daxilində həm alüminium-oksigen, həm də fosfor-oksigen əlaqələri özünü göstərir və yaranan pi rabitələrinin ümumi sayı altıya bərabərdir.



$$A_{\pi[Al_4(P_2O_7)_3]} = 6 \quad S_{[Al_4(P_2O_7)_3]} = 6$$

$$S_{[Mn_2(S_2O_7)_3]} = n(e - 1) - m + 1 = 2(3 - 1) - 3 + 1 = 4 - 3 + 1 = 2$$

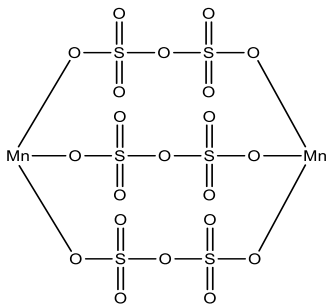
Tsiklik sayın (S) ədədi qiymətini aşağıdakı düstura tətbiq edərək π (pi)- rabitə saylarını riyazi metodla hesablayaq [1, 2]:

$$A_{\pi[Mn_2(S_2O_7)_3]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{2(3 - 2) + 6(6 - 2) + 21(2 - 2) + 2(1 - 2)}{2} =$$

$$= \frac{2 + 24 + 0 - 2}{2} = 12$$

Qrafik formulda riyazi hesablamadan alınan ədədi qiymətlər öz ifadəsini tapır [1, 2]:



$$A_{\pi[Mn_2(S_2O_7)_3]} = 12 \quad S_{[Mn_2(S_2O_7)_3]} = 2$$

Əsasi duzlara aid olan mis (II) hidrososulfat $(CuOH)_2SO_4$ və ikiqat duz natrium-xrom (III) sulfat duzlarında π (pi)- rabitə saylarını riyazi üsulla hesablayaq [1, 2]:

$$\begin{aligned} A_{\pi[(CuOH)_2SO_4]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{2(2 - 2) + 2(1 - 2) + 1(6 - 2) + 6(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \\ &= \frac{0 - 2 + 4 + 0 + 2}{2} = \frac{4}{2} = 2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{\pi[NaCr(SO_4)_2]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{1(1 - 2) + 1(3 - 2) + 2(6 - 2) + 8(2 - 2) + 2(1 - 1)}{2} = \\ &= \frac{-1 + 1 + 8 + 0 + 0}{2} = \frac{8}{2} = 4 \end{aligned}$$

Əgər molekulun qrafik formulu tərtib olunaraq π (pi)-rabitələrin sayı təyin edilsə, aparılan riyazi hesablama nəticə-lərinin bu strukturla tam uyğunluq təşkil etdiyi müşahidə olunar. Bu isə riyazi yanaşmanın düzgünlüyünü və molekul quruluşunun real vəziyyətə uyğun modelləşdirildiyini bir daha sübut edir [1, 2].

III FƏSİL. ÜZVİ BİRLƏŞMƏLƏR ÜÇÜN RABİTƏ SAYLARININ HESABLANMASINDA RİYAZİ YANAŞMA

3.1. Karbohidrogenlərin kimyəvi rabitələrinin – ümumi, siqma və pi (π) – riyazi üsullarla hesablanması

Karbohidrogenlər öz kimyəvi quruluş və xassələrinə əsasən müxtəlif siniflərə ayrılır: alkanlar (doymuş karbohidrogenlər), alkenlər (etilen sırası), alkadienlər, alkinlər (asetilen sırası) və arenlər (aromatik karbohidrogenlər) [1, 9; 50].

Bu siniflərə daxil olan birləşmələrin quruluşu, alınma üsulları, fiziki və kimyəvi xassələri, həmçinin onların praktiki tətbiqi haqqında məlumatlar ümumtəhsil məktəblərinin 9-cu sinif kimya proqramında "Doymuş karbohidrogenlər (alkanlar)", "Doymamış karbohidrogenlər – Alkenlər", "Asetilen və dienlər", "Tsiklik karbohidrogenlər – tsikloalkanlar və aromatik birləşmələr" mövzuları çərçivəsində öyrənilir [1].

Alkanların molekulyar quruluşunda karbon atomları bir-birilə qeyri-polar siqma rabitələri vasitəsilə, karbon və hidrogen atomları isə polar kovalent rabitələrlə birləşmişdir [1].

Alkenlərdə, digər bir ifadə ilə etilen sırası karbohidrogenlərdə, karbon atomları arasında bir σ -rabitə ilə yanaşı, hibridləşməmiş "p" orbitallarının qismən örtülməsi nəticəsində bir pi rabitəsi də formalaşır [1,]

Alkadien molekullarında isə iki pi rabitəsi müşahidə olunur. Bu rabitələr, hibridləşməmiş "p" orbitallarının müəyyən sahələrdə örtülməsi ilə əmələ gəlir və σ -rabitələrlə birlikdə molekulun sabitliyini təmin edir [1].

Alkinlərdə isə iki π -rabitə birbaşa eyni iki karbon atomu arasında formalaşır ki, bu xüsusiyyət onları alkadienlərdən fərqləndirir [1].

Karbohidrogenlərin hər sinfi üçün ümumi və siqma rabitələrin sayını hesablamaq xüsusi yanaşma tələb edir. Belə ümumi düstur hələlik bütün üzvi birləşmələrə aid şəkildə formalaşdırılmamışdır [1].

Eyni sinfə aid fərqli molekullar üçün vahid bir hesablamanın tətbiqi isə bəzən dəqiq nəticə vermir. Məsələn, aromatik karbohidrogenlər – benzol (C_6H_6), naftalin ($C_{10}H_8$), antrasen ($C_{14}H_{10}$) və digər analogi birləşmələrdə rabitə saylarının hesablanması üçün müxtəlif metodlar və formullar tələb olunur [1].

Bu məsələnin elmi əsaslarla həlli üçün aparılan araşdırmalar nəticəsində, artıq üzvi molekulların da – qeyri-üzvi birləşmələrdə olduğu kimi – ümumi, siqma və π rabitə saylarının qrafik formuldan istifadə etmədən, yalnız riyazi düsturlarla hesablanması mümkün olmuşdur [1, 20; 21].

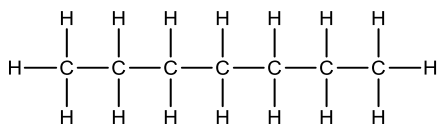
Alkan və tsikloalkanlarda kimyəvi rabitələrin riyazi üsullarla hesablanması metodları [1]

“(1.2.1)” düsturundan istifadə etməklə n-heptan (C_7H_{16}) və 1-etil-3-izopropilsikloheksan ($C_{11}H_{22}$) molekullarında ümumi rabitə sayının riyazi yolla müəyyənləşdirilməsi aşağıdakı nümunələrdə göstərilmişdir [1].

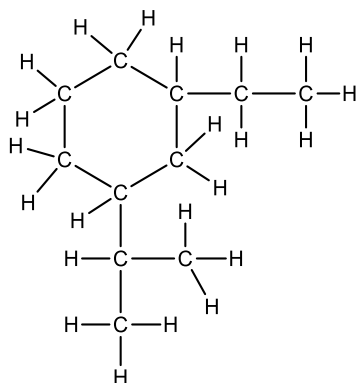
$$A_{üm[C_7H_{16}]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{7 \cdot 4 + 16 \cdot 1}{2} = \frac{28 + 16}{2} = 22$$

$$A_{üm[C_{11}H_{22}]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{11 \cdot 4 + 22 \cdot 1}{2} = \frac{44 + 22}{2} = 33$$

Əgər molekulların qrafik strukturunu tərtib edib onların ümumi kimyəvi rabitə sayını müəyyən etsək, əldə olunan nəticələrin riyazi hesablamalardan alınan ədədi göstəricilərlə uyğunluq təşkil etdiyinin şahidi olarıq. Bu isə riyazi yanaşmanın molekulun quruluşuna dair düzgün təsəvvür formalaşdırdığını bir daha sübut edir [1].



$$A_{üm[C_7H_{16}]} = 22$$



$$A_{\text{üm}}[C_{11}H_{22}] = 33$$

Alkanlar və tsikloalkanlar tərkibində həm qeyri-polyar, həm də polyar kovalent rabitələr daşıyan üzvi birləşmələrdir. Bu birləşmələrdə karbon atomları arasında qeyri-polyar kovalent, karbon və hidrogen atomları arasında isə polyar kovalent rabitələr formalaşır.

Alifatik quruluşa malik alkan molekullarında qeyri-polyar kovalent rabitələrin ümumi sayı “ $n-1$ ” düsturu ilə müəyyən olunur. Burada “ n ” karbon atomlarının sayını ifadə edir. Polyar kovalent rabitələrin sayı isə “ $2n + 2$ ” ilə hesablanır.

Tsikloalkan molekullarında isə karbon atomları halqa şəklində bağlandığından, qeyri-polyar kovalent rabitələrin sayı birbaşa karbon atomlarının sayına, yəni “ n ”-ə bərabər olur.

Nəticə etibarilə, karbon atomlarının sayı eyni olan alkan və tsikloalkan molekullarında qeyri-polyar kovalent rabitələrin miqdarı arasında bir vahid fərq müşahidə olunur. Bu fərq alkan molekulunun açıq zəncirli, tsikloalkanın isə halqavari quruluşa malik olması ilə əlaqədardır.

Alkanlar və tsikloalkanlarda siqma rabitələrinin riyazi hesablanma üsulları [1]

I fəsildə təqdim edilən qeyri-üzvi birləşmələrə aid siqma

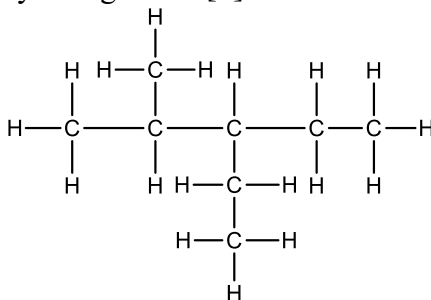
rabitələrinin sayını hesablamaq üçün istifadə olunan (1.2.2) düsturundan üzvi birləşmələrə də tətbiq etməklə, bu birləşmələrdəki siqma rabitə saylarını qrafik formuldan istifadə etmədən, yalnız riyazi yolla, ümumi bir qayda əsasında müəyyənləşdirmək mümkündür. Qeyd edilməlidir ki, bu günə qədər müxtəlif siniflərə aid üzvi birləşmələrdə siqma rabitələrin sayı əsasən fərqli yanaşmalarla hesablanmış, bir sıra siniflər üçün isə ümumiyyətlə konkret hesablama qaydası müəyyən edilməmişdir [1, 9].

İndi isə 2-metil-3-etilpentan (C_8H_{18}) və 1-metil-3-izobutilsikloheksan ($C_{11}H_{22}$) molekulları nümunəsində siqma rabitə saylarının riyazi üsulla necə hesablandığını təhlil edək [1].

$$A_{\sigma[C_8H_{18}]} = N_{üm} + S - 1 = 26 + 0 - 1 = 25$$

Məlumdur ki, 2-metil-3-etilpentan molekulunda tsiklik strukturun mövcud olmaması riyazi hesablama nəticələrində öz əksini tapmışdır [1].

Qrafik formul vasitəsilə müəyyən edilən siqma rabitələrinin sayı riyazi hesablama ilə əldə olunan qiymətlərlə uyğunluq təşkil edir və nəticələr eynilik göstərir [1].



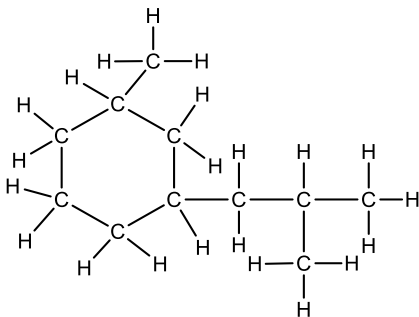
$$A_{\sigma[C_8H_{18}]} = 25$$

1-metil-3-izobutilsikloheksan ($C_{11}H_{22}$) molekulunda tsiklik quruluşun mövcudluğu riyazi hesablamalar zamanı xüsusi olaraq nəzərə alınmalıdır [1]. Tsiklik hal strukturun hesablanmasında

mühüm rol oynayır və molekulun ümumi xüsusiyyətlərinin dəqiq təyin edilməsinə təsir edir. Buna görə də, hesablama prosesində tsiklik vəziyyətlərin sayı diqqətə alınmalıdır [1].

$$A_{\sigma[C_{11}H_{22}]} = N_{\ddot{u}m} + S - 1 = 33 + 1 - 1 = 33$$

Riyazi hesablamalar nəticəsində əldə olunan ədədi dəyərlər qrafik formulda əks olunur. Bu, molekulun struktur quruluşunu dəqiq göstərir və kimyəvi rabitələrin sayını təsdiqləyir [1].



$$A_{\sigma[C_{11}H_{22}]} = 33$$

Alkanlar və tsikloalkanların flüorlu, xlorlu və digər törəmələrində ümumi (1.2.1) və siqma- (1.2.2) rabitə saylarının riyazi üsullarla hesablanması üsulu eynidir [1, 2].

Məsələn, bitsiklo (2,2,0) heksan (C_6H_{10}) və bitsiklo (3,2,0) heptan (C_7H_{12}) molekullarında ümumi rabitə sayı ($A_{üm}$) və siqma rabitə sayılarının riyazi hesablanması nümunəsini araşdıraraq [1, 2].

$$A_{\ddot{u}m[C_6H_{10}]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 10 \cdot 1}{2} = \frac{24 + 10}{2} = 17$$

$$A_{im[C_7H_{12}]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{7 \cdot 4 + 12 \cdot 1}{2} = \frac{28 + 12}{2} = 20$$

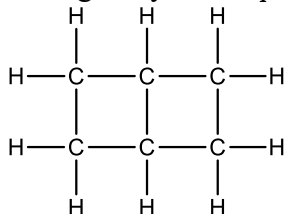
Bitsiklo birləşmələrdə siqma rabitələrinin sayını riyazi üsulla hesablamaq zamanı molekulda iki ədəd tsiklik vəziyyətin (S)

mövcudluğu nəzərə alınmalıdır. Bu halda, hesablamalar aparılarkən molekulun iki tsiklik struktura malik olduğu xüsusilə vurğulanmalıdır. [1, 2, 6]:

$$A_{\sigma[C_6H_{10}]} = N_{üm} + S - 1 = 16 + 2 - 1 = 17$$

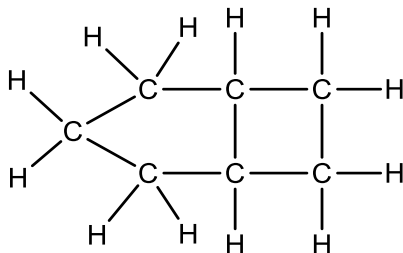
$$A_{\sigma[C_7H_{22}]} = N_{üm} + S - 1 = 19 + 2 - 1 = 20$$

Molekulların qrafik formulalarını tərtib edib və kimyəvi rabitə saylarını müəyyənləşdirdikdə, riyazi hesablamalarla əldə olunan ədədi nəticələrin düzgünlüyü təsdiq olunur.



$$A_{üm[C_6H_{10}]} = A_{\sigma[C_6H_{10}]} = 17$$

İki tsiklik strukturda olan karbohidrogenlərdə karbon atomları arasında mövcud olan siqma rabitələrinin sayı ümumiyyətlə “n+1” formuluna uyğun gəlir. Burada “n” karbon atomlarının sayını göstərir. Bu xüsusiyyət, molekulun tsiklik quruluşundan irəli gəlir və karbohidrogenlərin kimyəvi xüsusiyyətlərinin müəyyənləşdirilməsində önəmli rol oynayır [1].



$$A_{üm[C_7H_{22}]} = A_{\sigma[C_7H_{22}]} = 20$$

Alkenlər (etilen tipli karbohidrogenlər) və alkadienlərdə kimyəvi rabitələrin riyazi hesablanma metodları [1].

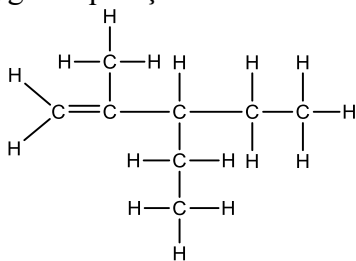
Alkenlərdə karbon atomları arasında yalnız siqma rabitələri deyil, əlavə olaraq bir ədəd pi rabitəsi də mövcuddur. Alkadienlərdə isə karbonlar arasında iki ədəd π rabitəsi yaranır.

Alkenlər qrupuna aid olan 2-metil-3-etilpenten (C_8H_{16}) və alkadienlər sinfinə daxil olan 2-metil-butadien-1,3 (izopren) (C_5H_8) molekullarında ümumi rabitə saylarının riyazi hesablanması aşağıdakı kimi təqdim olunur: [1, 2].

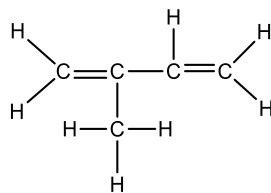
$$A_{\text{üm}}[C_8H_{16}] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{8 \cdot 4 + 16 \cdot 1}{2} = \frac{32 + 16}{2} = 24$$

$$A_{\text{üm}}[C_5H_8] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{5 \cdot 4 + 8 \cdot 1}{2} = \frac{20 + 8}{2} = 14$$

Qrafik formullarda ümumi rabitə sayları müəyyən edildikdə, riyazi hesablamalar nəticəsində əldə olunan ədədi dəyərlərlə tam uyğunluq müşahidə olunur.



$$A_{\text{üm}}[C_8H_{16}] = 24$$



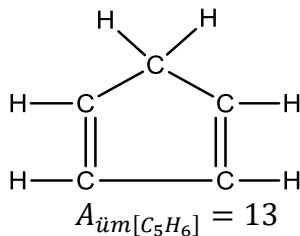
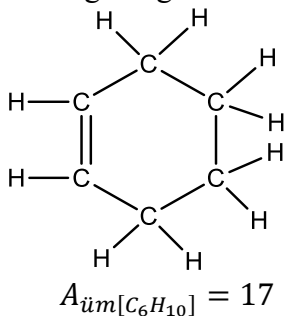
$$A_{\text{üm}}[C_5H_8] = 14$$

Verilən düsturdan istifadə etməklə doymamış tsiklokarbohidrogenlərin ümumi rabitə saylarının hesablanması məsələsini nəzərdən keçirək. Bu yanaşma vasitəsilə, doymamış tsiklokarbohidrogenlərdəki kimyəvi rabitələrin ümumi sayını hesablamaq mümkün olur. Mövzunun daha dərinədən başa düşülməsi üçün bu hesablamalar diqqətlə araşdırılmalıdır.

$$A_{\text{üm}}[C_6H_{10}] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 10 \cdot 1}{2} = \frac{24 + 10}{2} = 17$$

$$A_{\text{üm}}[C_5H_6] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{5 \cdot 4 + 6 \cdot 1}{2} = \frac{20 + 6}{2} = 13$$

Tsikloheksen (C_6H_{10}) molekulunda bir pi rabitə, tsiklopentadien-1,3 (C_5H_6) molekulunda iki π rabitəsi mövcuddur. Əgər bu molekulların qrafik strukturlarını hazırlayıb rabitələrin sayını hesablasaq, əldə olunan riyazi nəticələrin tam dəqiqliklə uyğun olduğunu görürük.



Alken və alkadien molekullarında siqma rabitələrinin sayına dair riyazi yanaşma [1].

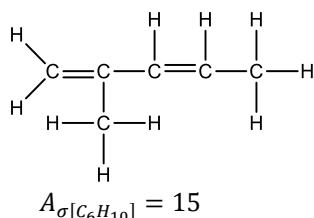
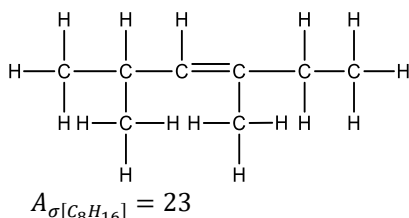
Alkenlər sinfinə aid olan 2,4-dimetilheksen-3 (C_8H_{16}) və alkadienlərə daxil edilən 2-metilpentadien-1,3 (C_6H_{10}) birləşmələrinin siqma rabitələrinin miqdarının riyazi üsulla hesablanması aşağıdakı şəkildə təqdim olunur. Qeyd edilməlidir ki, göstərilən molekullar tsiklik quruluşa malik deyildir. Bu səbəbdən onların bütün rabitələri açıq zəncirli strukturlar üzrə qiymətləndirilmişdir [1].

$$A_{\sigma}[C_8H_{16}] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 24 + 0 - 1 = 23$$

$$A_{\sigma}[C_6H_{10}] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 16 + 0 - 1 = 15$$

Əgər molekulların qrafik struktur formulları tərtib olunaraq siqma rabitələrinin sayı müəyyənləşdirilsə, riyazi yolla aparılan hesablamalarla əldə edilən ədədi göstəricilərin bu nəticələrlə tam uyğunluq təşkil etdiyi müşahidə olunur. Bu da onu göstərir ki, kimyəvi rabitələrin sayının riyazi üsulla hesablanması etibarlı və

dəqiq yanaşmadır.



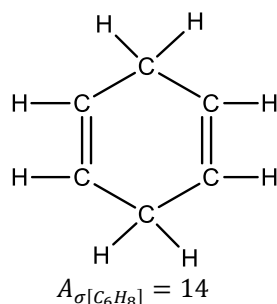
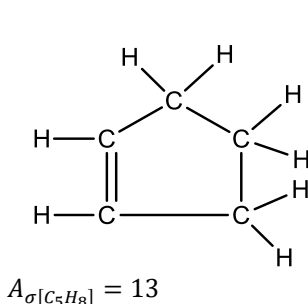
Alkenlərin quruluşunda karbon atomları əsasən “sp²” və “sp³” hibridləşmə vəziyyətində olurlar. Lakin alkadienlərin bəzi növlərində, xüsusilə bir karbon atomu üzərində iki pi rabitə yerləşdikdə, həmin karbon “sp” hibridləşmə vəziyyətində olur. Bu hal, adətən, kumulen strukturuna malik birləşmələrdə müşahidə edilir.

Doymamış tsiklik karbohidrogenlərin ümumi rabitə sayının riyazi üsulla hesablanmasında tsiklik quruluşun mövcudluğu mütləq nəzərə alınmalıdır. Bu zaman molekulun tsiklik quruluşuna uyğun olaraq “S” — tsiklik say kimi qəbul edilir. Məsələn, tsiklopenten (C₅H₈) və 1,4-tsikloheksadien (C₆H₈) molekullarında bir tsiklik quruluş olduğu üçün bu parametrlə hesablamalarda nəzərə alınmalıdır.

$$A_{\sigma[C_5H_8]} = N_{üm} + S - 1 = 13 + 1 - 1 = 13$$

$$A_{\sigma[C_6H_8]} = N_{üm} + S - 1 = 14 + 1 - 1 = 14$$

Molekulların qrafik strukturlarında siqma rabitələrinin sayı müəyyən edildikdə, bu rəqəmlərin riyazi hesablamalarla əldə olunan nəticələrlə tam uyğun gəldiyi müşahidə olunur.



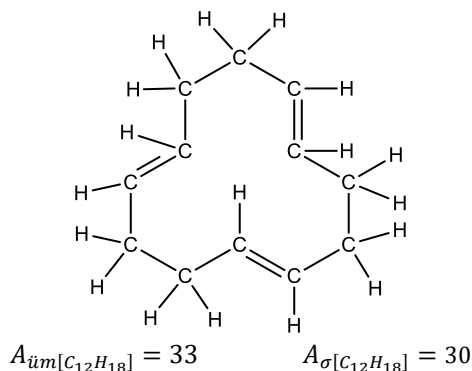
Tsiklododekatrien ($C_{12}H_{18}$) molekulunda ümumi ($A_{\text{üm}}$) və siqma rabitələrinin sayını riyazi üsulla hesablamaq mümkündür. Aşağıda bu molekul üçün müvafiq hesablamalar təqdim olunur. Bu cür yanaşma, kimyəvi quruluşun təhlilinə və molekuldakı rabitə növlərinin dəqiq müəyyən edilməsinə şərait yaradır.

$$A_{\text{üm}[C_{12}H_{18}]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{12 \cdot 4 + 18 \cdot 1}{2} = \frac{48 + 18}{2} = 33$$

$$A_{\sigma[C_{12}H_{18}]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 30 + 1 - 1 = 30$$

Riyazi hesablamalar nəticəsində əldə olunan ədədi göstəricilər molekulun qrafik quruluşunda tam dəqiqliklə əks olunur.

Başqa sözlə, struktur formula üzərində aparılan təhlil, əvvəlcədən müəyyən edilmiş ədədi qiymətlərlə tam uyğunluq təşkil edir.

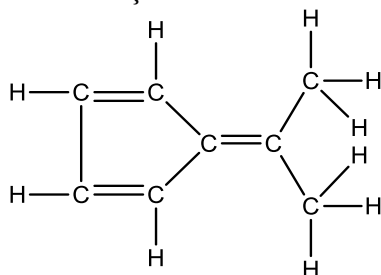


Dimetilfulven (C_8H_{10}) molekulunda kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanmasını araşdıraraq [1].

$$A_{üm}[C_8H_{10}] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{8 \cdot 4 + 10 \cdot 1}{2} = \frac{32 + 10}{2} = 21$$

$$A_{\sigma}[C_8H_{10}] = N_{üm} + S - 1 = 18 + 1 - 1 = 18$$

Əgər molekulun qrafik struktur formulunda kimyəvi rabitə saylarını təyin etsək, aparılan riyazi hesablamaların doğruluğunu və dəqiqliyini aydın şəkildə müşahidə edə bilərik.



$$A_{üm}[C_8H_{10}] = 21 \quad A_{\sigma}[C_8H_{10}] = 18$$

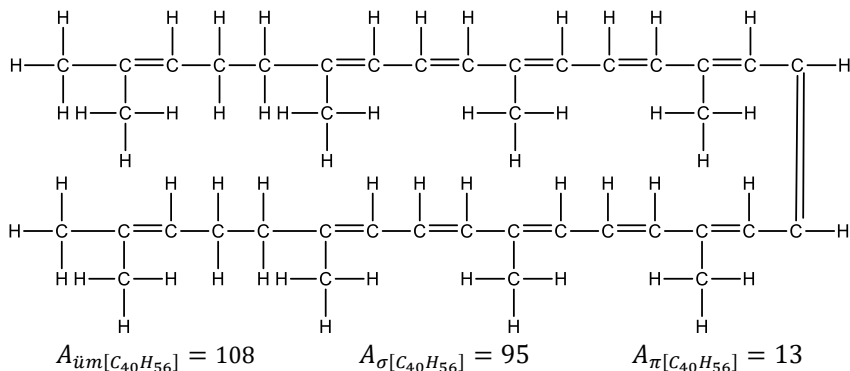
Bəzi karbohidrogenlərin molekulları çoxlu sayda ikiqat rabitələrin ardıcıl şəkildə birləşməsi nəticəsində yaranır. Bu tip birləşmələrə misal olaraq pomidor bitkisində mövcud olan likopin ($C_{40}H_{56}$) karbohidrogenini göstərmək olar. Likopin molekulundakı kimyəvi rabitələrin sayının riyazi üsulla hesablanması aşağıda təqdim olunur [1].

$$A_{üm}[C_{40}H_{56}] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{40 \cdot 4 + 56 \cdot 1}{2} = \frac{160 + 56}{2} = 108$$

$$A_{\sigma}[C_{40}H_{56}] = N_{üm} + S - 1 = 96 + 0 - 1 = 95$$

$$\begin{aligned} A_{\pi}[C_{40}H_{56}] &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{40(4 - 2) + 56(1 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{80 - 56 + 2}{2} = 13 \end{aligned}$$

Molekulun qrafik quruluşunda aparılan riyazi hesablamalar düsturlar vasitəsi ilə əldə olunan ədədi göstəricilərlə tam eynilik təşkil edir.



Çoxüzlü və fırlanma cismi kimi fəza quruluşuna malik molekularda kimyəvi rabitə saylarının hesablanması digər mürəkkəb birləşmələrdə tətbiq olunan qaydalar əsasında aparılır. Lakin bu tip molekularda siqma rabitələrinin dəqiq hesablanması üçün onların həndəsi quruluşunda iştirak edən çoxüzlü və ya fırlanma cismi fiqurlarının miqdarını nəzərə almaq vacibdir. Bu məqsədlə, “D” ilə işarələnən və həmin fiqurların sayını əks etdirən parametr (1.2.2) formuluna daxil edilir və nəticədə təkmilləşdirilmiş (1.2.7) düsturu əldə olunur [1, 45].

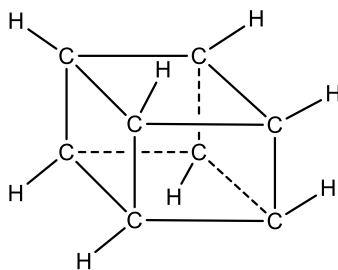
$$A'_{\sigma} = N_{\text{üm}} + S - (1 + D)$$

Heksaedr (kub) həndəsi quruluşuna malik olan kuban (C_8H_8) molekulunda [57] ümumi ($A_{\text{üm}}$) və siqma (A'_{σ}) rabitə saylarının qrafik formoldan istifadə etmədən riyazi metodlarla hesablanması aşağıdakı kimi verilmişdir [1]:

$$A_{\text{üm}}[C_8H_8] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{8 \cdot 4 + 8 \cdot 1}{2} = \frac{32 + 8}{2} = 20$$

Kuban molekulunda karbon atomlarının valentliyi digər üzvi birləşmələrdə olduğu kimi dördə bərabərdir. Molekulun tərkibində altı tsiklik vəziyyət mövcuddur və bütövlükdə bir çoxüzrlü həndəsi fiqur təşkil edir. [1]:

$$A'_{\sigma[C_8H_8]} = N_{üm} + S - (1 + D) = 16 + 6 - (1 + 1) = 22 - 2 = 20$$



$$A_{üm[C_8H_8]} = A'_{\sigma[C_8H_8]} = 20$$

Fulleren $[C_{60}]$ molekulunda ümumi rabitə sayı ($A_{üm}$), siqma rabitələrinin sayı (A_{σ}) və pi rabitələrinin sayı (A_{π}) müvafiq olaraq [1, 2, 36] olaraq aşağıdakı riyazi hesablamalarda təqdim olunmuşdur. Bu göstəricilər əsasında molekulun rabitə quruluşunun riyazi təhlili aparılır.

$$A_{üm[C_{60}]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{60 \cdot 4}{2} = \frac{240}{2} = 120$$

Yuxarıda qeyd edildiyi kimi, siqma rabitələrinin riyazi yolla hesablanması zamanı molekulun strukturundakı tsikllərin (halqaların) sayı nəzərə alınmalıdır. Sferik quruluşlu fulleren tipli molekularda [46] tsikl sayının müəyyən olunması üçün (1.2.8) düsturundan istifadə edilir. Bu düstur aparılan elmi-tədqiqat işlərinin nəticəsi olaraq formalaşdırılmışdır və fulleren molekulalarının quruluşunun öyrənilməsində tətbiq imkanları ilə seçilən mühüm yanaşmalardan biridir [1].

Fulleren (C_{60}) molekulunda tsikl sayının riyazi yolla müəyyənəşdirilməsi aşağıdakı kimi izah olunur: [1, 2]:

$$S_{[C_{60}]} = \frac{a_c(C_\sigma - 2) + 4}{2} = \frac{60(3 - 2) + 4}{2} = \frac{60 + 4}{2} = 32$$

Birləşmədə tsiklik say müəyyən edildikdən sonra siqma rabitələrinin sayını hesablamaq mümkündür [1].

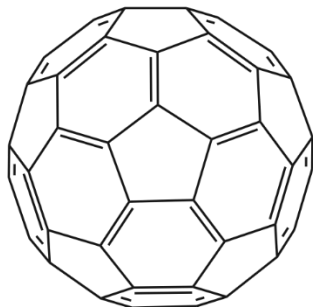
$$A'_{\sigma[C_{60}]} = N_{üm} + S - (1 + S) = 60 + 32 - (1 + 1) = 90$$

Çoxüzrlü və fırlanan cisim şəklində olan fəza quruluşlu molekularda pi rabitələrinin sayını hesablamaq üçün (1.2.6) düsturuna həmin həndəsi fiqurların sayını göstərən “D” parametri əlavə edilir və nəticədə (1.2.9) düsturu əldə olunur[1].

$$A'_\pi = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 + D - S)}{2}$$

Fulleren (C_{60}) molekulundakı π (pi)-rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması məsələsini aşağıdakı şəkildə nəzərdən keçirək [1, 22]:

$$\begin{aligned} A'_{\pi[C_{60}]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 + D - S)}{2} = \\ &= \frac{60(4 - 2) + 2(1 + 1 - 32)}{2} = \frac{120 - 60}{2} = 30 \end{aligned}$$



Fuleren (C₆₀)

Fulleren (C₈₀) molekulunda kimyəvi rabitələrin sayının riyazi hesablanması aşağıdakı şəkildə təqdim olunmuşdur [1]:

$$A_{\text{üm}[C_{80}]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{80 \cdot 4}{2} = \frac{320}{2} = 160$$

$$S_{[C_{80}]} = \frac{a_c(c_\sigma - 2) + 4}{2} = \frac{80(3 - 2) + 4}{2} = \frac{80 + 4}{2} = 42$$

$$A'_{\sigma[C_{80}]} = N_{\text{üm}} + S - (1 + D) = 80 + 42 - (1 + 1) = 122 - 2 = 120$$

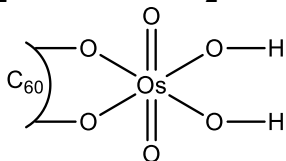
$$\begin{aligned} A'_{\pi[C_{80}]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 + D - S)}{2} = \\ &= \frac{80(4 - 2) + 2(1 + 1 - 42)}{2} = \frac{160 - 80}{2} = 40 \end{aligned}$$

C₆₀H₂O₆Os tərkibli fulleren birləşməsində mövcud olan kimyəvi rabitələrin ümumi sayının riyazi üsulla hesablanmasına baxaq. Bu hesablama vasitəsilə molekulun daxili quruluşunda atomlararası əlaqələrin sayı və xarakteri müəyyən edilir [1].

$$\begin{aligned} A_{\text{üm}[C_{60}H_2O_6Os]} &= \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{60 \cdot 4 + 2 \cdot 1 + 6 \cdot 2 + 1 \cdot 8}{2} = \\ &= \frac{60 \cdot 4 + 2 \cdot 1 + 6 \cdot 2 + 1 \cdot 8}{2} = \frac{240 + 2 + 12 + 8}{2} = 131 \end{aligned}$$

$$A_{\sigma[C_{60}H_2O_6Os]} = N_{\text{üm}} + S - (1 + D) = 69 + 33 - (1 + 1) = 102 - 2 = 100$$

$$\begin{aligned}
 A_{\pi[C_{60}H_2O_6Os]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 1) + 2(1 + D - S)}{2} = \\
 &= \frac{60(4 - 2) + 2(1 - 2) + 6(2 - 2) + 1(8 - 2) + 2(1 + 1 - 33)}{2} = \\
 &= \frac{120 - 2 + 0 + 6 - 62}{2} = \frac{126 - 64}{2} = 31
 \end{aligned}$$



$$A_{\text{üm}}[C_{60}H_2O_6Os] = 131$$

$$A_{\sigma}[C_{60}H_2O_6Os] = 100$$

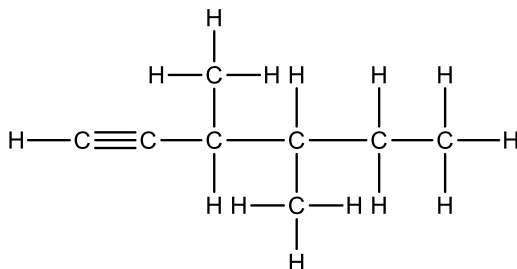
$$A_{\pi}[C_{60}H_2O_6Os] = 31$$

Alkinlər və Arenlərin Kimyəvi Rabitə Saylarının Riyazi Yolla Müəyyənləşdirilməsi.

Alkinlər sinfinə daxil olan 3-metil-4-etilheksin-1 (C₉H₁₆) birləşməsində ümumi kimyəvi rabitələrin və siqma rabitələrinin sayının riyazi üsulla müəyyənləşdirilməsi aşağıda təqdim olunur [1]:

$$A_{\text{üm}}[C_9H_{16}] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{9 \cdot 4 + 16 \cdot 1}{2} = \frac{36 + 16}{2} = 26$$

$$A_{\sigma}[C_9H_{16}] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 25 + 0 - 1 = 24$$



$$A_{\text{üm}}[C_9H_{16}] = 26$$

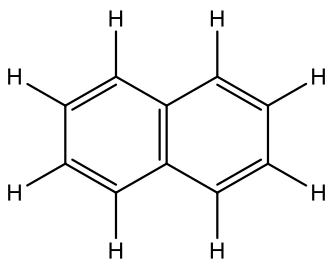
$$A_{\sigma}[C_9H_{16}] = 24$$

Naftalin ($C_{10}H_8$) molekulunda ümumi siqma rabitələrinin, eləcə də yalnız karbon atomları arasında yaranan siqma rabitələrinin ($A_{\sigma(C-C)}$) sayının riyazi üsulla hesablanması prosesini araşdırıq.

$$A_{\sigma[C_{10}H_8]} = N_{üm} + S - 1 = 18 + 2 - 1 = 19$$

$$A_{\sigma(C-C)[C_{10}H_8]} = N_C + S - 1 = 10 + 2 - 1 = 11$$

Naftalin molekulunun qrafik quruluşu göstərir ki, ümumi siqma (A_{σ}) rabitələrinin sayı 19, karbon atomları arasında olan siqma rabitələrinin ümumi sayı isə 11-dir. Bu nəticə struktur formul əsasında aydın şəkildə müəyyən edilir.



$$A_{\sigma[C_{10}H_8]} = 19 \quad A_{\sigma(C-C)[C_{10}H_8]} = 11$$

Antrasen ($C_{14}H_{10}$) molekulunda üç ədəddən ibarət kondensləşmiş aromatik nüvələr mövcuddur. Bu birləşmədəki ümumi rabitə sayını, siqma rabitələrinin (A_{σ}) ümumi miqdarını və yalnız karbon atomları arasında əmələ gələn siqma rabitələrinin ($A_{\sigma(C-C)}$) sayını riyazi yolla hesablayaq.

$$A_{\sigma[C_{14}H_{10}]} = N_{üm} + S - 1 = 24 + 3 - 1 = 26$$

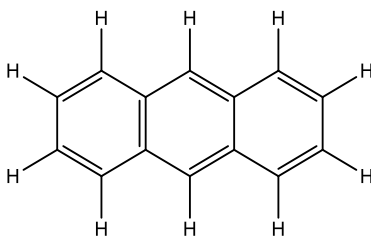
Benzol (C_6H_6) molekulunda bütün karbon atomları 0,140 nm məsafədə yerləşərək “ sp^2 ” hibridləşməsi əmələ gətirir. Bu hibridləşmə nəticəsində hər bir karbon atomunda bir “p” orbitalı sərbəst qalır və bu orbitaların bir-biri ilə qismən üst-üstə düşməsi

nəticəsində vahid delokalizasiya olunmuş “ π ” rabitə sistemi formalaşır.

Antrasen molekulunda isə üç benzol halqası birləşmiş şəkildə yerləşdiyindən, burada üç müstəqil “ π ” elektron sistemi mövcuddur.

$$A_{\sigma(C-C)[C_{14}H_{10}]} = N_C + S - 1 = 14 + 3 - 1 = 16$$

Antrasen molekulu mürəkkəb quruluşa malik olduğundan, onun ümumi rabitə sayını və karbon atomları arasında mövcud olan siqma rabitələrinin sayını müəyyən etmək üçün əvvəlcə maddənin qrafik struktur formülünü tərtib etmək lazımdır. Hesablamalar nəticəsində bu göstəricilərin müvafiq olaraq 26 və 16 olduğu aydın şəkildə sübut olunur.



$$A_{\sigma[C_{14}H_{10}]} = 26$$

$$A_{\sigma(C-C)[C_{14}H_{10}]} = 16$$

Piren ($C_{16}H_{10}$) və pirilen ($C_{20}H_{12}$) kimi kondensləşmiş aromatik karbohidrogenlərdə ümumi siqma (A_{σ}) rabitələrinin, eləcə də karbon atomları arasındakı siqma ($A_{\sigma(C-C)}$) rabitələrinin riyazi hesablanması aşağıdakı kimi aparılır.

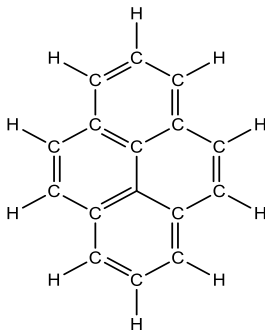
Dörd benzol halqasının kondensləşdiyi piren molekulunda iki fərqli növ siqma rabitəsi mövcuddur: karbon-karbon arasında və karbon-hidrogen arasında yaranan rabitələr. Bunlar müvafiq olaraq “ sp^2-sp^2 ” və “ sp^2-s ” elektron orbitallarının örtüşməsi nəticəsində formalaşır.

Hesablama prosesində piren molekulunun dörd tsiklik quruluşa malik olması xüsusilə nəzərə alınır.

$$A_{\sigma[C_{16}H_{10}]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 26 + 4 - 1 = 29$$

$$A_{\sigma(C-C)[C_{16}H_{10}]} = N_C + S - 1 = 16 + 4 - 1 = 19$$

Molekulun qrafik strukturunda ümumi rabitə sayı ilə karbon atomları arasındakı siqma rabitələrinin sayı müəyyən edildikdə, əldə olunan nəticələrin riyazi hesablamalarla tam uyğun gəldiyini müşahidə etmək mümkündür.



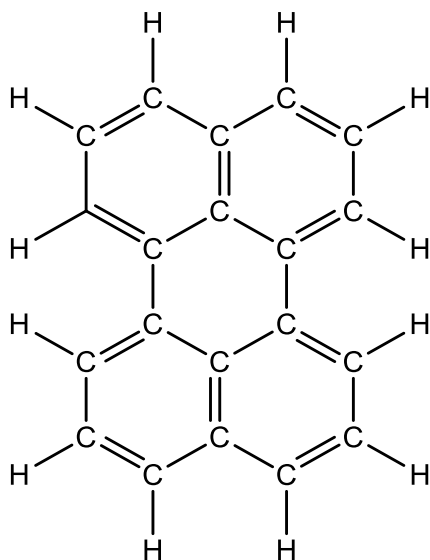
$$A_{\sigma[C_{16}H_{10}]} = 29 \quad A_{\sigma(C-C)[C_{16}H_8]} = 19$$

Pirilen molekulu beş tsiklik quruluşun birləşməsindən ibarət olduğunu nəzərə alıb onun ümumi rabitə və karbon atomları arasındakı siqma rabitələrinin saylarını riyazi metodlarla hesablayaq:

$$A_{\sigma[C_{20}H_{12}]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 32 + 5 - 1 = 36$$

$$A_{\sigma(C-C)[C_{20}H_{12}]} = N_C + S - 1 = 20 + 5 - 1 = 24$$

Beş benzol halqasının kondensləşməsi nəticəsində əmələ gələn pirilen molekulunda, karbon atomları arasında mövcud olan ümumi siqma rabitələrinin sayı 36, ümumi rabitə sayı isə 24 olaraq müəyyən edilir. Bu nəticə, molekulun qrafik formulunu tərtib edib müvafiq hesablamalar aparmaqla dəqiq şəkildə təsdiqlənə bilər.



$$A_{\sigma[C_{20}H_{12}]} = 36 \quad A_{\sigma(C-C)[C_{20}H_{12}]} = 24$$

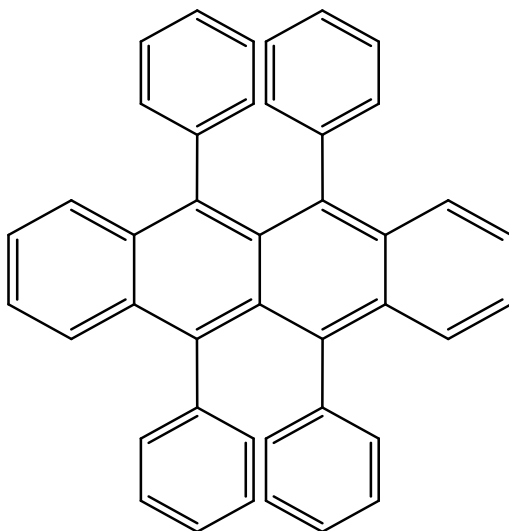
9, 10, 11, 12-tetrafeniltetrasen və ya rubren molekulu ($C_{42}H_{28}$) mürəkkəb quruluşa malikdir və kondensləşmiş benzol halqaları ilə fenil qruplarından ibarətdir [1, 53; 55].

Bu kimyəvi birləşmələrin müxtəlif tərkib və strukturuna baxmayaraq, siqma rabitələrinin sayının qrafik formullara müraciət etmədən, riyazi üsullarla dəqiq hesablanması mümkündür [1].

$$A_{\sigma[C_{42}H_{28}]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 70 + 8 - 1 = 77$$

$$A_{\sigma(C-C)[C_{42}H_{28}]} = N_C + S - 1 = 42 + 8 - 1 = 49$$

Molekulun strukturunda riyazi hesablamalar nəticəsində əldə edilən ədədi göstəricilər öz əksini tapır. Qeyd etmək lazımdır ki, kondensləşmiş benzol halqaları və fenil ($C_6H_5^-$) radikallarından ibarət mürəkkəb quruluşa malik rubren molekulunun qrafik təsvirində hidrogen atomları göstərilmədiyi üçün, ümumi və “C-H” siqma rabitələrinin hesablanmasında 28 hidrogen atomunun mövcudluğu nəzərə alınmalıdır [1].



$$A_{\sigma[C_{42}H_{28}]} = 77 \quad A_{\sigma(C-C)[C_{42}H_{28}]} = 49$$

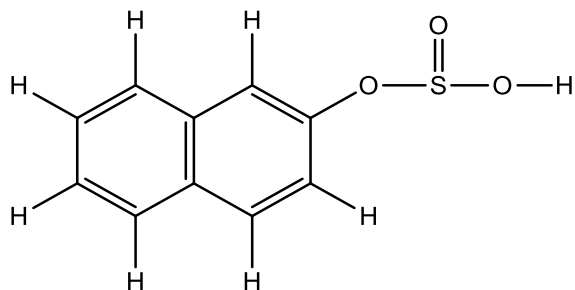
Hidrogen atomlarının əvəz olunması nəticəsində kondensləşmiş aromatik karbohidrogenlərin bir sıra əhəmiyyətli törəmələri yaranır. Temperatur şəraitindən asılı olaraq, naftalinlə sulfat turşusunun reaksiyası nəticəsində həm α -, həm də β -naftalinsulfoturşu əmələ gəlir. Bu birləşmələrdə kimyəvi rabitələrin sayının hesablanması prosesi, kondensləşmiş aromatik nüvələrə sahib karbohidrogenlərdə tətbiq edilən üsullara bənzər şəkildə aparılır. Riyazi metodlardan istifadə olunaraq, molekular daxilində mövcud olan rabitələrin sayı dəqiq və sistemli şəkildə müəyyən edilir. Bu yanaşma, struktur xüsusiyyətlərin və elektron paylanması analizində mühüm rol oynayır və kimyəvi tərkibin anlaşılmasına əsas yaradır [1].

Məsələn, β -naftalinsulfoturşu ($C_{10}H_8O_3S$) molekulunda ümumi siqma (A_{σ}) və karbon atomları arasındakı siqma rabitə sayları ($A_{\sigma(C-C)}$) hesablanması aşağıda verilmişdir [1].

$$A_{\sigma[C_{10}H_8O_3S]} = N_{üm} + S - 1 = 22 + 2 - 1 = 23$$

$$A_{\sigma(C-C)[C_{10}H_8O_3S]} = N_C + S - 1 = 10 + 2 - 1 = 11$$

Molekulun qrafik formullarını çəkib kimyəvi rabitə saylarını müəyyən etdikdə, əldə olunan nəticələrin riyazi hesablamalarla tapılan ədədi dəyərlərlə tam uyğun gəldiyini müşahidə etmək mümkündür.



$$A_{\sigma}[C_{10}H_8O_3S] = 23$$

$$A_{\sigma(C-C)}[C_{10}H_8O_3S] = 11$$

Üzvi birləşmələrin əsas qruplarından sayılan doymuş, doymamış və aromatik karbohidrogenlərdə ümumi ($A_{\text{üm}}$), siqma (A_{σ}) və pi (A_{π}) rabitələrin sayı, qrafik formul çəkmədən riyazi üsullarla hesablanaraq dəqiqliklə müəyyən edilir və bu proses dəqiq şəkildə təsvir olunmuşdur. Həmçinin, çoxüzlü və fırlanan cisim formasında olan həndəsi strukturlu molekularda kimyəvi rabitələrin sayının riyazi hesablama metodları da fəsilə geniş şəkildə şərh edilmişdir.

3.2. Oksigen tərkibli üzvi birləşmələrdə kimyəvi rabitələrin riyazi hesablanması

Tərkibində oksigen atomu olan üzvi birləşmələrə aid spirtlər, hidroksil qruplarının sayına görə biratomlu, ikiatomlu, üçatomlu və sair kateqoriyalara bölünür. Doymuş spirt molekullarında isə atomlar arasındakı rabitələr yalnız siqma rabitələridir. Aldehid turşu molekullarında karbon və oksigen atomları arasında siqmadan əlavə əlavə bir pi rabitəsi də mövcuddur. Doymamış aldehid və turşu molekullarında yalnız karbonil qrupu deyil, həm də karbon zəncirində əlavə pi rabitələri mövcuddur. Bu əlavə pi rabitələri molekulun kimyəvi xassələrinə

əhəmiyyətli dərəcədə təsir edir. Belə strukturlar, molekulların elektron buludlarının paylanması fərqlilik yaradır və onların kimyəvi reaksiyalarda iştirakını müəyyən edir. Məsələn, akril və olein turşularının molekullarında karbon atomları arasında yalnız bir pi rabitəsi mövcuddur, halbuki linol və linolendə karbon zəncirində müvafiq olaraq iki və üç pi rabitəsi yaranır [1]. Bu fərqlilik onların kimyəvi xüsusiyyətlərinə təsir göstərir.

Qeyd etmək lazımdır ki, oksigenli üzvi birləşmələrin bəzi siniflərində kimyəvi rabitə saylarının hesablanması üçün müəyyən formulalar mövcuddur, lakin bu formulalar bütün oksigenli birləşmələri əhatə etmir. Belə ki, oksigenli birləşmələrə aid olan “Doymuş biratomlu spirtlər” [3], “Birəsaslı karboksil turşuları” [5], “Aldehidlər” [4] kimi mövzular 11-ci sinif kimya proqramında tədris edilir [1].

Spirtlər, karbohidrogenlərin molekulunda bəzi hidrogen atomlarının hidroksil ($-OH$) qrupları ilə əvəz olunması nəticəsində yaranan üzvi birləşmələrdir. Onların növü hidroksil qruplarının sayına görə fərqlənir və bu səbəbdən spirtlər biratomlu və ya çoxatomlu ola bilərlər. Bundan əlavə, spirtlərin tərkibindəki radikalın quruluşundan asılı olaraq, onları doymuş və doymamış kateqoriyalara ayırmaq mümkündür [1]. Bu xüsusiyyətlər spirtlərin kimyəvi və fiziki xassələrinə təsir göstərir və onları geniş istifadəyə malik maddələr qrupuna çevirir.

Oksigenli və azotlu üzvi birləşmələrdə kimyəvi rabitə saylarının hesablanması üçün formulalar mövcud deyil. Lakin I fəsilə qeyd olunan düsturlar vasitəsilə oksigenli və azotlu birləşmələrdə ümumi ($A_{\text{üm}}$), siqma (A_{σ}) və pi (A_{π}) rabitə saylarını riyazi metodlarla hesablamaq mümkündür [1].

Spirt və sadə efir qruplarında rabitə saylarının hesablanma qaydaları

Doymuş spirtlərin molekul quruluşunda karbon atomları arasında qeyri-polyar, karbon-hidrogen, karbon-oksigen və oksigen-hidrogen atomları arasında isə polyar kovalent rabitələrin yaranması müşahidə olunur. Sadə spirtlərlə müqayisədə daha

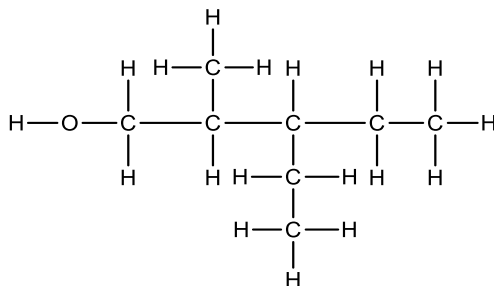
mürəkkəb quruluşlu birləşmələrdə kimyəvi rabitələrin sayının riyazi üsullarla müəyyən edilməsi daha məqsədəuyğun hesab olunur.

Doymuş biratomlu spirtlər qrupuna aid olan 2-metil-3-etil-pentanol-1 molekulunun ümumi ($A_{\text{üm}}$) və siqma rabitələrinin (A_{σ}) sayının hesablanması aşağıdakı kimi həyata keçirilir:

$$A_{\text{üm}}[C_8H_{17}OH] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{8 \cdot 4 + 18 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} = \frac{32 + 18 + 2}{2} = 26$$

$$A_{\sigma}[C_8H_{17}OH] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 27 + 0 - 1 = 26$$

Molekulun qrafik strukturunu tərtib etməklə aparılan riyazi hesablamalarda əldə olunan ədədi göstəricilərin düzgünlüyünü yoxlamaq mümkündür.



$$A_{\text{üm}}[C_8H_{17}OH] = 26 \quad A_{\sigma}[C_8H_{17}OH] = 26$$

2,3-dimetilbutandiol-2,3 ($C_6H_{12}(OH)_2$) molekulunda kimyəvi rabitələrin ümumi sayını hesablayaraq və ikiatomlu spirtin molekulyar quruluşunu araşdıraraq.

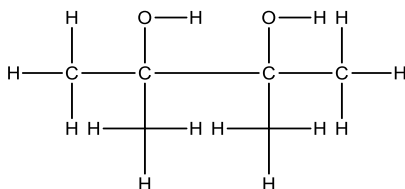
$$A_{\text{üm}}[C_6H_{12}(OH)_2] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 14 \cdot 1 + 2 \cdot 2}{2} = \frac{24 + 14 + 4}{2} = 21$$

Üçatomlu spirtlər sinfinə daxil olan qliserin molekulunda

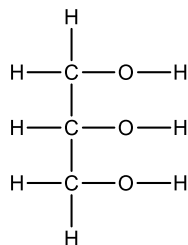
ümumi kimyəvi rabitələrin sayını riyazi üsulla təyin etmə imkanını araşdıraraq.

$$A_{\text{üm}}[C_3H_5(OH)_3] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{3 \cdot 4 + 8 \cdot 1 + 3 \cdot 2}{2} = \frac{12 + 8 + 6}{2} = 13$$

Əgər 2,3-dimetilbutandiol-2,3 və qliserin molekullarının qrafik quruluşlarını tərtib edib, kimyəvi rabitə saylarını hesablasaq, əldə edilən ədədi nəticələrin riyazi yanaşma ilə tam uyğun gəldiyini müşahidə edərik. Qeyd edilməlidir ki, çoxatomlu spirtlərin qrafik strukturunu qurarkən –OH qruplarının müxtəlif karbon atomlarına birləşməsi əsas şərtlərdən biridir.



$$A_{\text{üm}}[C_4H_{10}(OH)_2] = 13$$



$$A_{\text{üm}}[C_3H_8(OH)_3] = 21$$

Doymamış spirtlərin molekulyar quruluşunda doymuş spirtlərdən fərqli olaraq, “p” orbitallarının qismən üst-üstə düşməsi nəticəsində bir və ya bir neçə pi rabitəsi meydana gəlir. Bu cür quruluşa malik spirtlərə allil spirti və butindiol misal göstərilə bilər. Allil spirtində bir, butindiol molekulunda isə karbon atomları arasında iki π rabitəsi yaranır.

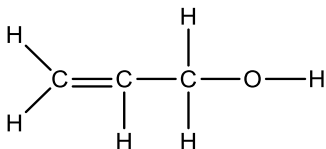
Allil spirti (C_3H_5OH) molekulunda bir, butindiol ($C_4H_4(OH)_2$) molekulunda isə iki hidroksil qrupu mövcuddur və bu qruplar fərqli karbon atomlarına bağlanmışdır. Hər iki molekulda olan ümumi rabitələrin ($A_{\text{üm}}$), siqma (A_{σ}) və pi (A_{π}) rabitələrinin sayını riyazi yolla hesablamaq mümkündür.

$$A_{\text{üm}[C_3H_5OH]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{3 \cdot 4 + 6 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} =$$

$$= \frac{12 + 6 + 2}{2} = 10$$

$$A_{\sigma[C_3H_5OH]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 10 + 0 - 1 = 9$$

Əgər molekulun qrafik quruluşu tərtib olunaraq kimyəvi rabitələrin sayı müəyyən edilsə, riyazi hesablamalarla əldə olunan ədədi nəticələrin doğruluğu aydın şəkildə təsdiqlənmiş olar.



$$A_{\text{üm}[C_3H_5OH]} = 10 \quad A_{\sigma[C_3H_5OH]} = 9$$

Doymamış ikiatomlu spirt olan butindiol molekulunda kimyəvi rabitələrin sayının riyazi üsulla hesablanmasını araşdıraraq:

$$A_{\text{üm}[C_4H_6O_2]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{4 \cdot 4 + 6 \cdot 1 + 2 \cdot 2}{2} =$$

$$= \frac{16 + 6 + 4}{2} = 13$$

$$A_{\sigma[C_4H_6O_2]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 12 + 0 - 1 = 11$$

Butindiol molekulunda tsiklik quruluşun mövcud olmaması riyazi hesablamalara daxil edilərək sıfır kimi qiymətləndirilmişdir.

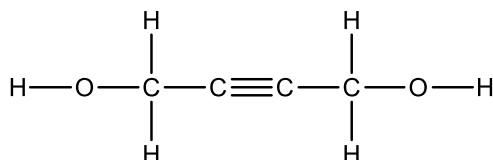
$$A_{\pi[C_4H_6O_2]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{4(4 - 2) + 6(1 - 2) + 2(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} =$$

$$= \frac{8 - 6 + 0 + 2}{2} = 2$$

Riyazi hesablamalar zamanı ümumi rabitə sayının 13, sıqma rabitələrinin sayının 11, və pi rabitələrinin sayının 2 olduğu

müəyyən edilir. Bu nəticələrin doğruluğunu təsdiqləmək üçün molekulun qrafik strukturunu çəkərək hesablamalarla müqayisə aparmaq vacibdir.



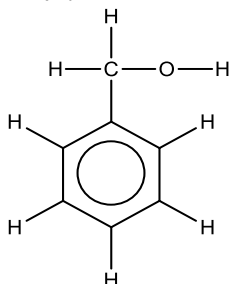
$$A_{\text{üm}}[\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2] = 13$$

$$A_{\sigma}[\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2] = 11$$

$$A_{\pi}[\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2] = 2$$

Benzil spirti, aromatik spirtlər qrupuna aid olan bir birləşmə kimi, molekul daxilindəki siqma rabitələrinin sayının riyazi hesablanması xüsusi metodlarla həyata keçirilir. Bu prosesdə molekulun strukturu və atomların bir-biri ilə bağlanma növləri diqqətlə təhlil olunur və siqma rabitələrinin ümumi sayı dəqiq şəkildə müəyyən edilir. Nəticədə, benzil spirti molekulundakı kimyəvi rabitələrin hesablanması, onun kimyəvi xüsusiyyətlərinin anlaşılması üçün əsaslı bir baza yaradır. Benzil spirti molekulunda siqma rabitələrinin hesablanması zamanı, molekulun tərkibində bir tsiklik quruluşun mövcudluğu da nəzərə alınmalıdır ki, nəticə dəqiq və düzgün olsun.

$$A_{\sigma}[\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 16 + 1 - 1 = 16$$



$$A_{\sigma}[\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}] = 16$$

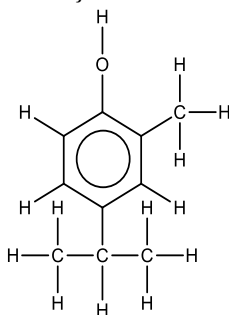
2-metil-4-izopropilfenol ($\text{C}_{10}\text{H}_{13}\text{OH}$) molekulunda, spirtlərə

bənzər funksional qrup mövcuddur. Gəlin, bu molekulda ümumi rabitə sayı ilə yanaşı, karbon atomları arasında mövcud olan siqma rabitələrinin sayını riyazi üsullarla hesablayıb təhlil edək.

$$A_{\sigma[C_{10}H_{13}OH]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 25 + 1 - 1 = 25$$

$$A_{\sigma(C-C)[C_{10}H_{13}OH]} = N_C + S - 1 = 10 + 1 - 1 = 10$$

Fenol birləşməsinin molekulunda benzol halqası mövcuddur və burada ümumilikdə 25 rabitə, o cümlədən karbon atomları arasında 10 ədəd siqma rabitə vardır. Bu quruluş maddənin qrafik formulunda dəqiq əks olunmuşdur.



$$A_{\sigma[C_{10}H_{13}OH]} = 25$$

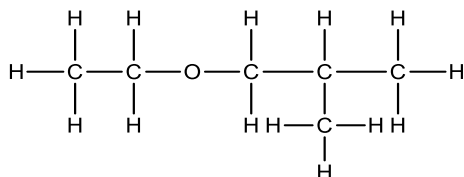
$$A_{\sigma(C-C)[C_{10}H_{13}OH]} = 10$$

Sadə efirlər, oksigen atomunun köməyi ilə iki müxtəlif radikalın birləşməsi nəticəsində əmələ gələn mürəkkəb kimyəvi birləşmələrdir. Bu birləşmələrdə oksigen atomu, radikalları birbirinə bağlayan körpü funksiyasını yerinə yetirir və onların kimyəvi xüsusiyyətlərini müəyyən edir. Onlar doymuş biratomlu spirtlərin siniflərarası izomerləridir. Ancaq metanol (metil spirtinin) kimi birinci nümunə olan doymuş biratomlu spirtin sadə efirə uyğun siniflərarası izomeri mövcud deyil, çünki sadə efir molekulunda ən azı iki karbon atomu olmalıdır. İndi isə etil-izobutil ($C_6H_{14}O$) və izopropil-üçlü butil ($C_7H_{16}O$) molekullarının kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanmasına nəzər salaq.

$$A_{\text{üm}}[C_6H_{14}O] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 14 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} = \frac{24 + 14 + 2}{2} = 20$$

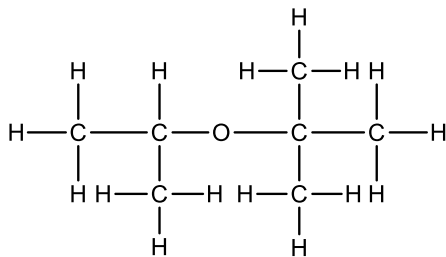
$$A_{\text{üm}}[C_7H_{16}O] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{7 \cdot 4 + 16 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} = \frac{28 + 16 + 2}{2} = 23$$

Qeyd etmək vacibdir ki, bu molekulların quruluşunda yalnız siqma rabitələri iştirak etdiyindən, ümumi rabitə sayı ($A_{\text{üm}}$) ilə siqma rabitələrinin sayı (A_{σ}) eyni olur. Molekulların qrafik formullarını tərtib edib kimyəvi rabitə saylarını hesablasaq, riyazi hesablamaların dəqiqliyinə əmin olmaq mümkündür.



$$A_{\text{üm}}[C_6H_{14}O] = 20$$

Beş metil (CH_3 -) qrupundan ibarət izopropil-üçlü butil molekulu, qeyri-simmetrik quruluşu ilə sadə efirlər sinfinə daxildir.



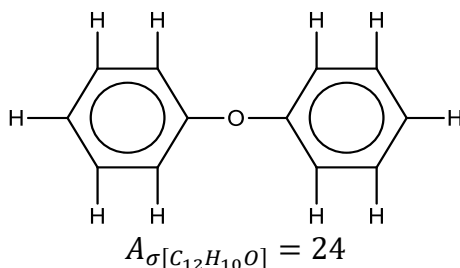
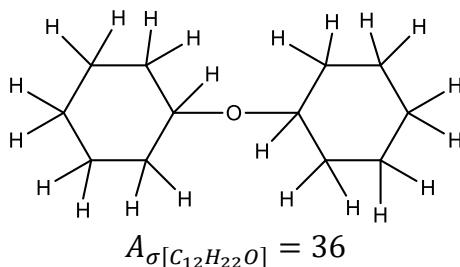
$$A_{\text{üm}}[C_7H_{16}O] = 23$$

Tsiklik quruluşa malik radikallarda oksigen atomu vasitəsilə birləşərək sadə efirlər əmələ gətirirlər. Məsələn, ditsikloheksil və aromatik difenil molekullarında mövcud olan siqma (A_{σ}) rabitələrinin sayını hesablayacağıq:

$$A_{\sigma[C_{12}H_{22}O]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 35 + 2 - 1 = 36$$

$$A_{\sigma[C_{12}H_{10}O]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 23 + 2 - 1 = 24$$

Molekulların qrafik formullarını hazırlayıb siqma (A_{σ}) rabitələrinin sayını təyin etdikdə, riyazi hesablamalarla əldə olunan ədədi nəticələrin tam uyğun olduğunu müşahidə etmək mümkündür.



Aldehid, keton və karbon turşularında kimyəvi rabitələrin sayının riyazi üsulla hesablanması.

Karbonil qrupuna hidrogen atomu və karbohidrogen radikalının birləşməsi nəticəsində aldehidlər əmələ gəlir. Aldehidlər, karbohidrogen radikalının növündən asılı olaraq doymuş (məsələn, etanal, propanal) və doymamış (məsələn, propenal, propinal və s.) tiplərə bölünür. Propenal molekulunda karbohidrogen zəncirində bir π rabitəsi mövcuddursa, propinalda iki π rabitəsi yaranır.

Ümumi formulu $C_nH_{2n}O$ olan aldehidlər və ketonlar

sınıflərarası izomerlərdir. Eyni sayda karbon atomuna malik aldehid və keton molekullarında ümumi ($A_{\text{üm}}$), siqma (A_{σ}) və pi (A_{π}) rabitələrinin sayı bərabər olur.

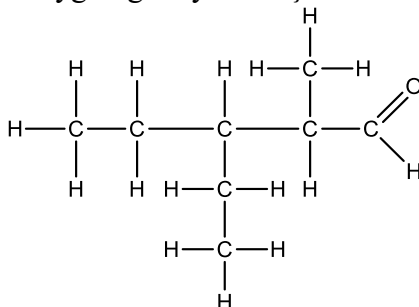
Qeyd etmək vacibdir ki, metanal (formaldehid, CH_2O) və etanal (asetaldehid) molekullarının ketonlarla izomerləşməsi mümkün deyil. Bunun səbəbi ketonların ən sadə növünün ən azı üç karbon atomundan ibarət olmasıdır. Buna görə də, iki karbonlu aldehidlər üçün keton izomerləri mövcud deyil.

Məsələn, 2-metil-3-etilpentanal molekulunda kimyəvi rabitələrin saylarının riyazi hesablanması aşağıdakı kimi həyata keçirilir:

$$A_{\text{üm}}[\text{C}_8\text{H}_{16}\text{O}] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{8 \cdot 4 + 16 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} = \frac{32 + 16 + 2}{2} = 25$$

$$A_{\sigma}[\text{C}_8\text{H}_{16}\text{O}] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 25 + 0 - 1 = 24$$

Molekulun qrafik formulunu hazırlayıb, ümumi və siqma rabitə saylarını müəyyən etdikdə, əldə olunan nəticələrin riyazi hesablamalarla tam uyğun gəldiyini müşahidə edirik.



$$A_{\text{üm}}[\text{C}_8\text{H}_{16}\text{O}] = 25$$

$$A_{\sigma}[\text{C}_8\text{H}_{16}\text{O}] = 24$$

Doymamış aldehid molekullarında karbon zəncirinin yaranmasında bir və ya bir neçə pi rabitə əmələ gələ bilər. Belə doymamış

aldehidlərə akrolein, sitral və digər nümunələr göstərmək mümkündür. Məsələn, sitral aldehidinin ($C_{10}H_{16}O$) molekulunda ümumi ($A_{üm}$), siqma (A_{σ}) və pi (A_{π}) rabitələrinin sayını müvafiq formulalar vasitəsilə hesablayaq:

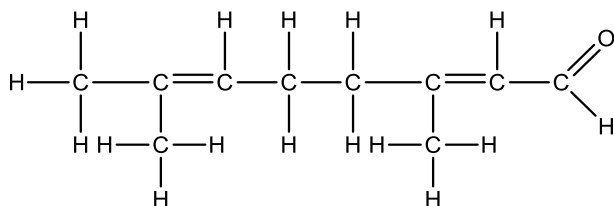
$$A_{üm[C_{10}H_{16}O]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{10 \cdot 4 + 16 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} = \frac{40 + 16 + 2}{2} = 29$$

Sitral aldehidi molekulunda halqasız (tsiklik olmayan) quruluşun olması, onun tərkibindəki siqma və pi rabitələrinin sayının riyazi yolla müəyyənləşdirilməsi zamanı mütləq nəzərə alınmalıdır.

$$A_{\sigma[C_{10}H_{16}O]} = N_{üm} + S - 1 = 27 + 0 - 1 = 26$$

$$A_{\pi[C_{10}H_{16}O]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \frac{10(4 - 2) + 16(1 - 2) + 1(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{20 - 16 + 0 + 2}{2} = 3$$

Molekulun qrafik quruluşunu tərtib etdikdə və kimyəvi rabitə saylarını təyin etdikdə, əldə olunan nəticələrin riyazi hesablamalarla tam uyğunluq təşkil etdiyini müşahidə edirik.

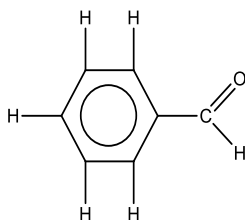


$$A_{üm[C_{10}H_{16}O]} = 29 \quad A_{\sigma[C_{10}H_{16}O]} = 26 \quad A_{\pi[C_{10}H_{16}O]} = 3$$

Aromatik aldehidlərdən olan benzaldehid (C_6H_5CHO) mole-

kulunda siqma rabitələrinin sayını hesablayarkən, molekulda mövcud olan bir tsiklik quruluşun (S) nəzərə alınması vacibdir.

$$A_{\sigma}[C_6H_5COH] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 14 + 1 - 1 = 14$$



$$A_{\sigma}[C_6H_5COH] = 14$$

Ketonlar karbonil qrupunun iki karbohidrogen radikali ilə birləşməsi nəticəsində əmələ gələn mürəkkəb üzvi birləşmələrdir. Bu radikalların quruluşu müxtəlif - doymuş, doymamış və tsiklik formalarda ola bilər. Məsələn, doymuş keton olan 2,4-dimetilheksanon-3 (izopropil-ikilibutil keton) molekulu üçün ümumi və siqma rabitələrinin sayını riyazi yolla hesablamaq mümkündür. Bu hesablamalar aşağıda təqdim olunur:

$$\begin{aligned} A_{\text{üm}}[C_8H_{16}O] &= \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{8 \cdot 4 + 16 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} = \\ &= \frac{32 + 16 + 2}{2} = 25 \end{aligned}$$

$$A_{\sigma}[C_8H_{16}O] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 25 + 0 - 1 = 24$$

Əgər molekulun qrafik quruluşunu tərtib edib kimyəvi rabitələrin sayını hesablasaq, riyazi üsulla əldə etdiyimiz nəticələrin doğruluğu bir daha təsdiqlənər.

Doymamış ketonların quruluşunda karbon zəncirinin formalaşmasında yalnız siqma rabitələr deyil, həm də π -rabitələr mühüm rol oynayır. Doymamış aldehidlər sinfinə aid olan psevdoinon ($C_{13}H_{20}O$) molekulunun kimyəvi rabitə saylarını riyazi

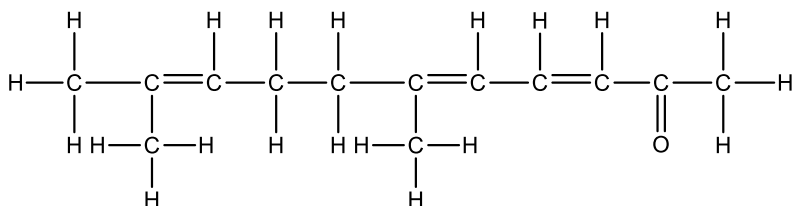
yolla hesablamaqla bu qanunauyğunluqları daha aydın şəkildə müşahidə edə bilərik.

$$A_{\text{üm}[C_{13}H_{20}O]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{13 \cdot 4 + 20 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} = \frac{52 + 20 + 2}{2} = 37$$

$$A_{\sigma[C_{13}H_{20}O]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 34 + 0 - 1 = 33$$

$$A_{\pi[C_{13}H_{20}O]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \frac{13(4 - 2) + 20(1 - 2) + 1(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{26 - 20 + 0 + 2}{2} = 4$$

Əgər molekulun struktur formulunu tərtib edib kimyəvi rabitələrin sayını hesablasaq, onda ümumi rabitə sayının 37, bunlardan 33-nün siqma, 4-nün isə pi rabitəsi olduğunu açıq şəkildə müşahidə etmək olar.



$$A_{\text{üm}[C_{13}H_{20}O]} = 37$$

$$A_{\sigma[C_{13}H_{20}O]} = 33$$

$$A_{\pi[C_{13}H_{20}O]} = 4$$

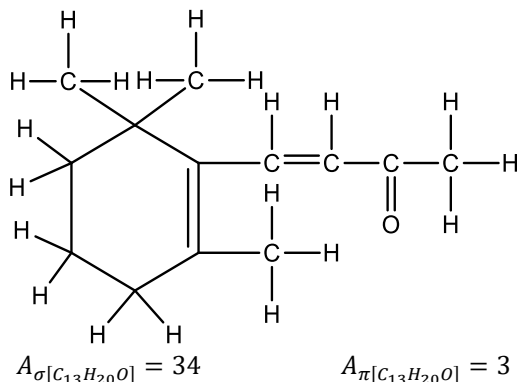
Psevdoinon birləşməsi oksigenin iştirakı ilə qızdırıldıqda, tsiklik quruluşa malik “α” və “β” ionon tipli kimyəvi maddələr əmələ gəlir. Alifatik quruluşlu maddələr tsiklik formaya keçdikdə, molekuldakı ümumi rabitə sayı ($A_{\text{üm}}$) dəyişməz qalır, lakin siqma (A_{σ}) və pi (A_{π}) rabitələrinin sayı dəyişir. Belə ki, tsiklik formalaşma nəticəsində siqma rabitələrinin sayı artır, pi rabitələrinin sayı isə azalır.

Məsələn, β -ionon molekulunda aparılan riyazi hesablama zamanı tsiklik quruluş xüsusilə nəzərə alınmalıdır.

$$A_{\sigma[C_{13}H_{20}O]} = N_{um} + S - 1 = 34 + 1 - 1 = 34$$

$$\begin{aligned} A_{\pi[C_{13}H_{20}O]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{13(4 - 2) + 20(1 - 2) + 1(2 - 2) + 2(1 - 1)}{2} = \\ &= \frac{26 - 20 + 0 + 0}{2} = 3 \end{aligned}$$

Əgər molekulun qrafik quruluşunu tərtib edib riyazi hesablamaqlarla əldə olunan ədədi göstəriciləri müqayisə etsək, nəticələrin üst-üstə düşdüyünü aydın şəkildə müşahidə edərik.



Tərkibində bir tsikl vəziyyət olan β -ionon molekulunda karbon atomları arasındakı siqma rabitələrin sayını riyazi yolla hesablayaq.

$$A_{\sigma(C-C)[C_{13}H_{20}O]} = N_C + S - 1 = 13 + 1 - 1 = 13$$

Molekulun qrafik quruluşundan aydın görünür ki, karbon atomları arasında ümumilikdə on üç siqma rabitə mövcuddur.

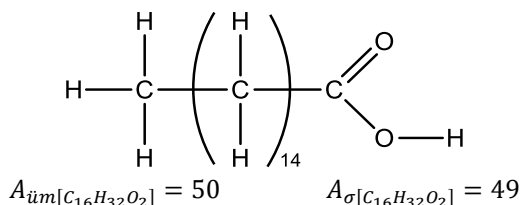
Karbonil qrupunun hidroksil qrupu və karbohidrogen radikalı ilə birləşməsi nəticəsində üzvi turşu molekulları yaranır. Bu birləşmə kimyəvi strukturda xüsusi funksional qrupun əmələ gəlməsinə səbəb olur ki, bu da üzvi turşuların xarakterik xüsusiyyətlərini müəyyən edir. Belə quruluşlar sənayedə geniş istifadə olunur və kimya elmi üçün mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Bu turşular karbohidrogen radikalının quruluşundan asılı olaraq doymuş, doymamış və ya aromatik ola bilər.

Doymuş birəsaslı üzvi turşuya nümunə kimi palmitin turşusu ($C_{15}H_{31}COOH$), doymamış turşuya isə linol turşusu ($C_{17}H_{31}COOH$) göstərilə bilər. İndi bu turşuların molekullarında kimyəvi rabitələrin sayını riyazi üsulla hesablayaraq təhlil edək.

$$A_{\text{üm}[C_{16}H_{32}O_2]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{16 \cdot 4 + 32 \cdot 1 + 2 \cdot 2}{2} = \frac{64 + 32 + 4}{2} = 50$$

$$A_{\sigma[C_{16}H_{32}O_2]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 50 + 0 - 1 = 49$$

Əgər molekulun qrafik quruluşunu tərtib edib kimyəvi rabitələrin sayını müəyyən etsək, riyazi hesablamalar nəticəsində əldə olunan ədədi göstəricilərin dəqiq və uyğun olduğunu aydın şəkildə müşahidə edə bilərik.



Linol turşusu doymamış üzvi turşular sinfinə aiddir və quruluşunda karboksil funksional qrupu ilə yanaşı, bir metil ($-CH_3$) qrupu və on iki metilen ($-CH_2-$) qrupu mövcuddur. Bu molekulun

quruluşu həm funksional qrupların müxtəlifliyinə, həm də zəncirindəki doymamış bağların mövcudluğuna görə fərqlənir. Linol turşusu həm bioloji cəhətdən əhəmiyyətli bir maddə kimi, həm də kimyəvi quruluş baxımından maraqlı bir molekul kimi diqqət çəkir. Onun zəncirvari quruluşda yerləşən metilen qrupları və karboksil qrupunun iştirakı bu birləşməyə xarakterik kimyəvi və fiziki xassələr qazandırır.

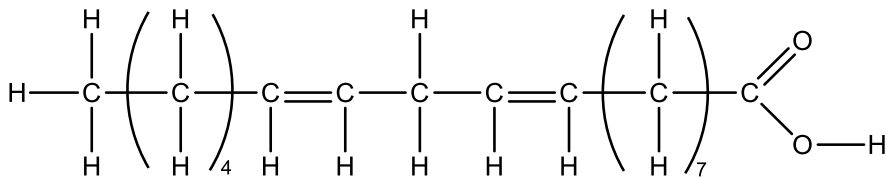
$$A_{\text{üm}[C_{18}H_{32}O_2]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{18 \cdot 4 + 32 \cdot 1 + 2 \cdot 2}{2} = \frac{72 + 32 + 4}{2} = 54$$

$$A_{\sigma[C_{18}H_{32}O_2]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 52 + 0 - 1 = 51$$

Linol turşusunun molekul quruluşunda tsiklik struktur müşahidə olunmur.

$$A_{\pi[C_{18}H_{32}O_2]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \frac{18(4 - 2) + 32(1 - 2) + 2(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{36 - 32 + 0 + 2}{2} = 3$$

Molekulun qrafik quruluşu göstərir ki, aparılan riyazi hesablamalar tam dəqiqliklə uyğunluq təşkil edir. Qeyd etmək lazımdır ki, molekulun tərkibində ümumilikdə on iki metilen qrupu yer alır və bu da strukturda aydın şəkildə müşahidə olunur.



$$A_{\text{üm}[C_{18}H_{32}O_2]} = 54$$

$$A_{\sigma[C_{18}H_{32}O_2]} = 51$$

$$A_{\pi[C_{18}H_{32}O_2]} = 3$$

Propinal (C_3H_2O) molekulunun doymamış aldehidlər sinfinə aid olması nəzərə alınaraq, onun tərkibindəki ümumi rabitə sayı, eləcə də siqma və pi rabitələrinin miqdarı riyazi metodlarla aşağıdakı kimi hesablanmışdır.

$$A_{\text{üm}[C_3H_2O]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{3 \cdot 4 + 2 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} = \frac{12 + 2 + 2}{2} = \frac{16}{2} = 8$$

$$A_{\sigma[C_3H_2O]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 6 + 0 - 1 = 5$$

$$A_{\pi[C_3H_2O]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \frac{3(4 - 2) + 2(1 - 2) + 1(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{6 - 2 + 0 + 2}{2} = 3$$

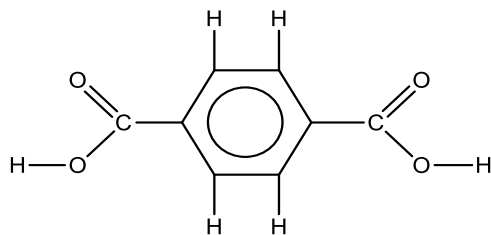
Doymuş və doymamış alifatik turşulardan fərqli olaraq, aromatik turşuların quruluşunda tsiklik benzol halqası mühüm rol oynayır. Tereftal molekulu, aromatik turşular sinfinə aid olaraq, ümumi rabitə sayı ($A_{\text{üm}}$) və karbon atomları arasında olan siqma rabitələrinin ($A_{\sigma(C-C)}$) riyazi hesablamaları aşağıda təqdim edilmişdir.

$$A_{\sigma[C_8H_6O_4]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 18 + 1 - 1 = 18$$

$$A_{\sigma(C-C)[C_8H_6O_4]} = N_C + S - 1 = 8 + 1 - 1 = 8$$

Molekulun qrafik formulu təsvir edib, kimyəvi rabitələrin sayını təyin etdikdə, riyazi hesablamaların nəticələrinin dəqiqliyi təsdiqlənir.

Həmçinin, benzol nüvəsinə birləşmiş iki karboksil qrupundan ibarət benzol-1,4-dikarbon turşusunun ikiəsəli aromatik turşu olduğu sübut edilməlidir.



$$A_{\sigma[C_8H_6O_4]} = 18$$

$$A_{\sigma(C-C)[C_8H_6O_4]} = 8$$

İkiəsəslı karbon turşuları qrupuna daxil olan 1,6-diheksan turşusu (adipin) molekulunda ümumi ($A_{\text{üm}}$), siqma (A_{σ}), karbon-karbon siqma ($A_{\sigma(C-C)}$) və pi (A_{π}) rabitələrinin riyazi hesablanması aşağıdakı şəkildə təqdim olunur:

$$A_{\text{üm}[C_6H_{10}O_4]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 10 \cdot 1 + 4 \cdot 2}{2} =$$

$$= \frac{24 + 10 + 8}{2} = 21$$

$$A_{\sigma[C_6H_{10}O_4]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 20 + 0 - 1 = 19$$

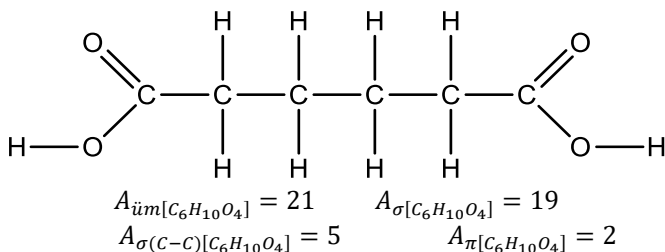
$$A_{\sigma(C-C)[C_6H_{10}O_4]} = N_C + S - 1 = 6 + 0 - 1 = 5$$

$$A_{\pi[C_6H_{10}O_4]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{6(4 - 2) + 10(1 - 2) + 4(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} =$$

$$= \frac{12 - 10 + 0 + 2}{2} = 2$$

Molekulun struktur sxemini çəkməklə riyazi hesablamalar nəticəsində əldə olunan ədədi göstəricilərin düzgünlüyü açıq şəkildə nümayiş olunur.



Mürəkkəb efir, yağ və karbohidrat molekullarında kimyəvi rabitələrin sayının riyazi üsulla təyin olunması [1].

Mürəkkəb efirlər, spirt və oksigenli turşuların reaksiyası nəticəsində əmələ gələn üzvi birləşmələrdir. Yağlar isə üç atomlu spirt olan 1,2,3-propantriol (qliserol) ilə müxtəlif doymuş və doymamış ali karbon turşularının qarşılıqlı təsirindən yaranan mürəkkəb efirlər qrupuna daxildir.

Doymuş ali karbon turşularından əmələ gələn yağlar bərk haldadır, doymamış karbon turşuları ilə əmələ gələn yağlar isə maye haldadır. Bərk yağların əsas komponentləri kimi oktadekan turşusu ($C_{17}H_{35}COOH$) — stearin və heksadekan turşusu ($C_{15}H_{31}COOH$) — palmitin göstərilə bilər. Maye yağların tərkibində isə olein turşusu ($C_{17}H_{33}COOH$), linol turşusu ($C_{17}H_{31}COOH$) və digər oxşar maddələr yer alır.

Maye yağlara hidrogen əlavə edildikdə, karbon zəncirindəki pi rabitələri qurulur və hidrogen atomları birləşərək bərk yağa çevrilir.

İndi isə izobutil-propanoat ($C_7H_{14}O_2$) adlı mürəkkəb efir molekulunun ümumi və siqma rabitələrinin sayını riyazi olaraq müəyyən edək.

$$\begin{aligned}
 A_{\text{üm}}[C_7H_{14}O_2] &= \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{7 \cdot 4 + 14 \cdot 1 + 2 \cdot 2}{2} = \\
 &= \frac{28 + 14 + 4}{2} = 23
 \end{aligned}$$

$$A_{\sigma}[C_7H_{14}O_2] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 23 + 0 - 1 = 22$$

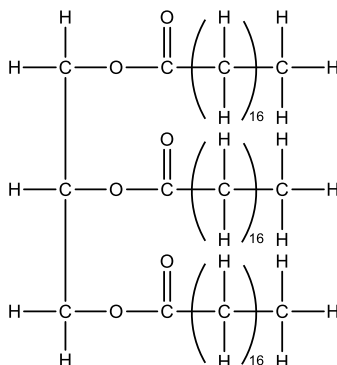
CCCC(=O)OCC(C)C

$$A_{\sigma[C_7H_{14}O_2]} = 22$$

$$A_{\ddot{u}m[C_{57}H_{110}O_6]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{57 \cdot 4 + 110 \cdot 1 + 6 \cdot 2}{2} = \frac{228 + 110 + 12}{2} = 175$$
$$A_{\sigma[C_{57}H_{110}O_6]} = N_{im} + S - 1 = 173 + 0 - 1 = 172$$

$$\begin{aligned}
& A_{\pi[C_{57}H_{110}O_6]} \\
&= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\
&= \frac{57(4 - 2) + 110(1 - 2) + 6(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \\
&= \frac{114 - 110 + 0 + 2}{2} = 3
\end{aligned}$$

Riyazi hesablamaların doğruluğu qrafik formolda dəqiq şəkildə ifadə olunur. Qrafik təsvirlərdə metilen qrupları (-CH₂-) ümumiləşdirilərək cəm halında göstərilir. Üçatomlu spirt qliserin ilə stearin turşusunun reaksiyası nəticəsində, spirt molekulundan bir hidrogen atomu, turşu molekulundan isə hidroksil qrupu (-OH) ayrılır. Bu prosesdə mürəkkəb efir formalaşır və eyni zamanda su molekulı yaranır.



$$A_{\text{üm}[C_{57}H_{110}O_6]} = 175$$

$$A_{\sigma}[C_{57}H_{110}O_6] = 172$$

$$A_{\pi}[C_{57}H_{110}O_6] = 3$$

Canlı orqanizmlərin həyat proseslərinin tənzimlənməsində enerji çevrilmələri xüsusi önəm daşıyır. Karbohidratlar, yağlar və zülallar əsas qida maddələri kimi fəaliyyət göstərir və canlıların enerji ehtiyaclarının ödənilməsində əsas mənbə rolunu oynayır. Yağların orqanizmdə parçalanması nəticəsində yaranan enerji miqdarı, karbohidratlar və zülalların parçalanmasından əldə olunan enerjidən xeyli artıqdır. Belə ki, eyni miqdarda yağla müqayisədə,

karbohidrat və zülallardan demək olar ki, iki dəfə az enerji alınır. Bu xüsusiyyətə görə yağlar bədənin ən səmərəli enerji mənbələrindən biri hesab olunur və uzunmüddətli enerji ehtiyatı kimi xüsusi əhəmiyyət daşıyır. Bu enerji miqdarı isə molekulları təşkil edən atomlar arasındakı kimyəvi rabitələrin sayından, növündən, enerjisindən və uzunluğundan birbaşa asılıdır. Buna görə də, kimyəvi birləşmələrdə rabitələrin sayını müəyyən etmək elmi baxımdan böyük əhəmiyyət kəsb edir.

Sadə molekullardan fərqli olaraq, mürəkkəb quruluşlu kimyəvi birləşmələrin qrafik formullarını hazırlamaq çətinlik yaradır. Bu səbəbdən kimyəvi rabitələrin sayının riyazi metodlarla hesablanması elmi tədqiqatlarda və praktiki təbiiqlərdə mühüm yer tutur.

Misal olaraq, maye yağ molekulunda ümumi, siqma və pi rabitələrinin sayını riyazi yolla hesablamaq önəmlidir və bu, kimyəvi quruluşun daha dərinə anlaşılmalarına kömək edir.

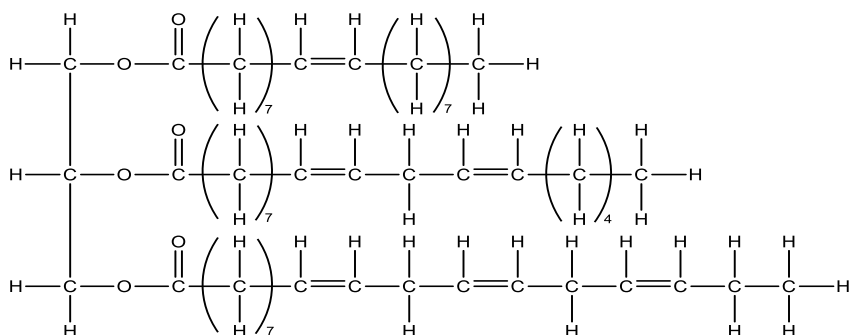
$$A_{\text{üm}[C_{57}H_{98}O_6]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{57 \cdot 4 + 98 \cdot 1 + 6 \cdot 2}{2} = \frac{228 + 98 + 12}{2} = 169$$

$$A_{\sigma[C_{57}H_{98}O_6]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 161 + 0 - 1 = 160$$

$$A_{\pi[C_{57}H_{98}O_6]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \frac{57(4 - 2) + 98(1 - 2) + 6(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{114 - 98 + 0 + 2}{2} = 9$$

Əgər molekulun qrafik strukturunu çəkib, əvvəlcə verilmiş kimyəvi rabitə saylarını hesablasaq, alınan nəticələrin riyazi hesablamlarla üst-üstə düşdüyü aşkar olar. Bu uyğunluq molekulun quruluşunun və rabitələrin təbiətinin dəqiq təsvirinə imkan verir. Eyni zamanda qeyd etmək lazımdır ki, maye halında olan yağlar, molekullar arasındakı pi rabitələrin qırılması nəticəsində bərk haldakı

yağlara çevrilir. Bu proses molekulların hərəkətliliyini məhdudlaşdıraraq, onların fiziki halını dəyişdirir.

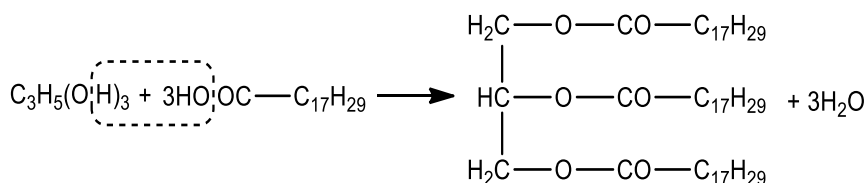


$$A_{\text{üm}}[C_{57}H_{98}O_6] = 169$$

$$A_{\sigma}[C_{57}H_{98}O_6] = 160$$

$$A_{\pi}[C_{57}H_{98}O_6] = 9$$

Maye halında olan bitki və bərk halda olan heyvan mənşəli yağlar, mürəkkəb efirlərdir. Maye yağlar, əsasən qliserin (propantriol-1,2,3) adlanan üçatomlu spirti ilə doymamış turşular arasında baş verən efirləşmə reaksiyasının məhsuludur. Maraqlıdır ki, maye yağların formalaşması yalnız müxtəlif növ doymamış turşuların iştirakı ilə deyil, eyni doymamış turşu növünün qliserinlə birləşməsi nəticəsində də baş verə bilər. Nəticədə alınan efir strukturları, yağların fiziki vəziyyətinə və xüsusiyyətlərinə birbaşa təsir göstərir. Bu cür quruluşlar xüsusilə otaq temperaturunda maye halında qalmaq qabiliyyəti ilə seçilir və bu da onların bioloji və sənaye əhəmiyyətini artırır.



Əmələ gələn yağ molekulunda mövcud olan kimyəvi rabitələrin sayını riyazi üsulla təhlil edək. Bu yanaşma bizə mole-

kulun struktur quruluşunu daha dəqiq anlamağa, onun daxilindəki elementlər arasındakı qarşılıqlı əlaqələri müəyyənləşdirməyə imkan verir. Kimyəvi rabitələrin növünü və miqdarını hesablamaqla molekulun sabitliyini, quruluşunun mürəkkəbliyini və reaksiyalardakı funksiyalarını elmi əsaslarla izah etmək mümkündür. Bu riyazi yanaşma təkcə nəzəri bilikləri dərinləşdirmir, eyni zamanda praktik kimya anlayış-larının formalaşmasına da xidmət edir.

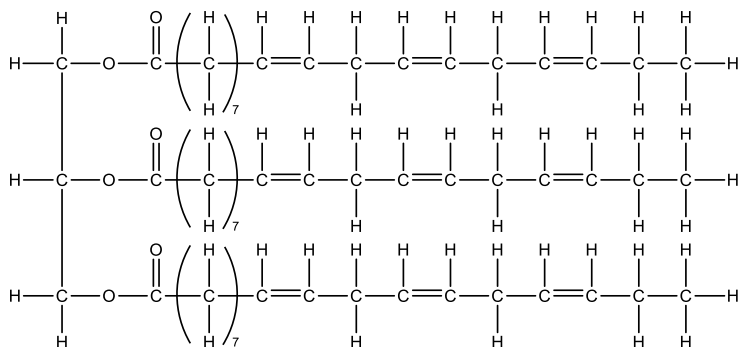
$$A_{\text{üm}[C_{57}H_{92}O_6]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{57 \cdot 4 + 92 \cdot 1 + 6 \cdot 2}{2} = \\ = \frac{228 + 92 + 12}{2} = 166$$

$$A_{\sigma[C_{57}H_{92}O_6]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 155 + 0 - 1 = 154$$

$$A_{\pi[C_{57}H_{92}O_6]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ = \frac{57(4 - 2) + 92(1 - 2) + 6(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \\ = \frac{114 - 92 + 0 + 2}{2} = 12$$

Qeyd etmək lazımdır ki, maye halında olan yağlara hidrogen əlavə olunduqda, onların tərkibindəki karbon zəncirində mövcud olan ikiqat pi rabitələr parçalanır və bu mövqelərə hidrogen atomları birləşir. Nəticədə karbon atomları arasındakı doymamış bağlar doymuş bağlara çevrilir. Bu kimyəvi prosesin nəticəsi olaraq, əvvəlcə maye vəziyyətdə olan yağlar bərkiyir və doymuş yağlara çevrilir.

Bu dəyişiklik molekulun struktur formuluna əsasən izlənə və riyazi baxımdan dəqiq şəkildə təsdiq oluna bilər. Aparılan hesablamalar göstərir ki, molekuldakı rabitə tiplərinin dəyişməsi nəticəsində fiziki xassələrdə baş verən dəyişikliklər tam elmi əsaslarla izah olunur.



$$A_{\text{üm}}[C_{57}H_{92}O_6] = 166$$

$$A_{\sigma}[C_{57}H_{92}O_6] = 154$$

$$A_{\pi}[C_{57}H_{92}O_6] = 12$$

Karbohidratlar müxtəlif quruluşa malik üzvi birləşmələrdir və onlar monosaxaridlər, disaxaridlər və polisaxaridlər olmaqla bir neçə əsas qrupa ayrılırlar. Bu maddələrin quruluş xüsusiyyətləri xətti və ya tsiklik formada olmaları onların kimyəvi xassələrinə və qarşılıqlı təsir mexanizmlərinə birbaşa təsir göstərir. Bu səbəbdən də karbohidrat molekullarında mövcud olan kimyəvi rabitələrin sayının riyazi yolla müəyyənəndirilməsi elmi baxımdan mühüm əhəmiyyət kəsb edir.

Məlumdur ki, bir çox üzvi siniflər üçün rabitə saylarının hesablanmasına dair ümumi qəbul edilmiş düsturlar mövcud olsa da, karbohidratlar üçün belə universal yanaşmalar demək olar ki, yoxdur. Onların molekul daxilindəki mürəkkəb quruluşu, xüsusilə də qlükoza kimi həm açıq zəncirli, həm də tsiklik formaya malik birləşmələrdə rabitələrin sayı və növü dəyişə bilər.

Bu kontekstdə, qlükoza molekulunun həm ümumi kimyəvi rabitələrinin ($A_{\text{üm}}$), həm də yalnız siqma rabitələrinin (A_{σ}) riyazi metodlarla necə hesablanı biləcəyini araşdırmaq aktual və nəzəri cəhətdən dəyərlidir. Bu cür yanaşma, karbohidratların quruluşunun dərin anlaşılmasına və onların molekulyar səviyyədə modelləşdirilməsinə geniş imkanlar açır.

$$A_{\text{üm}[C_6H_{12}O_6]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 12 \cdot 1 + 6 \cdot 2}{2} =$$

$$= \frac{24 + 12 + 12}{2} = 24$$

$$A_{\sigma[C_6H_{12}O_6]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 24 + 0 - 1 = 23$$

Qlükoza molekulunun tsiklik forması, onun strukturunda baş verən reaksiya nəticəsində əmələ gəlir. Bu formada molekul altı atomdan ibarət halqa quruluşu alır və bu quruluşun stabilliyi müəyyən stereokimyəvi amillərlə izah olunur. Tsiklik qlükoza molekulunda birinci və ikinci karbon atomlarına bağlanmış hidroksil qruplarının nisbi mövqelərinə görə iki müxtəlif forması – α və β izomerləri yaranır. Bu fərqlilik, molekulun fiziki və kimyəvi xassələrinə bilavasitə təsir göstərir.

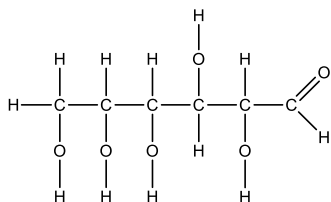
Strukturun bu spesifik quruluşu eyni zamanda kimyəvi rabitələrin, xüsusilə də siqma və pi (π) rabitələrinin sayının riyazi hesablanmasında da nəzərə alınmalıdır. Riyazi yanaşma ilə aparılan təhlillər nəticəsində xətti qlükoza molekulunun ümumi rabitə sayı 24, siqma rabitələrin sayı 23, π -rabitələrin isə 1-ə bərabər olduğu müəyyən edilir. Bu rəqəmlər molekulun qrafik strukturunda öz əksini tapır və onun daxilindəki əlaqələrin kompleks təbiətini əks etdirir.

Qeyd edilməlidir ki, bu tip mürəkkəb molekularda rabitələrin dəqiq sayını müəyyən etmək üçün onların quruluşu – yəni tsiklik və ya açıq zəncirli forma mütləq şəkildə nəzərə alınmalıdır. Bu yanaşma, maddənin kimyəvi xassələrini daha dərinlən anlamağa və onun reaksiya qabiliyyətini daha doğru qiymətləndirməyə imkan yaradır.

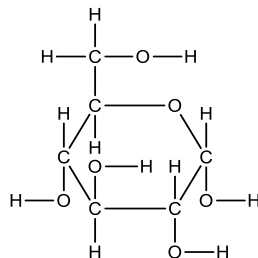
$$A_{\sigma[C_6H_{12}O_6]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 24 + 1 - 1 = 24$$

Molekulların tsiklik qrafik təsvirlərində aparılan riyazi hesablamalar nəticəsində ümumi və siqma rabitə saylarının 24-ə bərabər olduğu kimi müəyyən edilmişdir. Bu hesablama molekulyar

strukturların analizində mühüm rol oynayır və riyazi yanaşmanın dəqiqliyini təsdiqləyir.



$$A_{\text{üm}}[C_6H_{12}O_6] = 24$$



$$A_{\sigma}[C_6H_{12}O_6] = 24$$

Saxaroza ($C_{12}H_{22}O_{11}$) disaxaridlər sinfinə aid olan mürəkkəb karbohidratdır. Bu maddə iki monosaxarid – α -qlükoza və β -fruktoza molekulalarının birləşməsindən yaranır. Hər iki monosaxarid tsiklik quruluşa malik olduğundan, saxaroza molekulu da iki ayrı tsikli özündə birləşdirir.

Saxarozanın kimyəvi quruluşunun öyrənilməsi zamanı onun tərkibindəki kimyəvi rabitələrin sayı xüsusi diqqət tələb edir. Molekuldakı ümumi kimyəvi rabitələrin ($A_{\text{üm}}$) sayını hesablamaq üçün yalnız atomların valentliklərinə əsaslanmaq kifayət etsə də, yalnız siqma rabitələrin sayını müəyyən etmək istəyərkən tsikllərin mövcudluğu ayrıca nəzərə alınmalıdır. Çünki hər bir tsiklik quruluş əlavə siqma rabitələr əmələ gətirir.

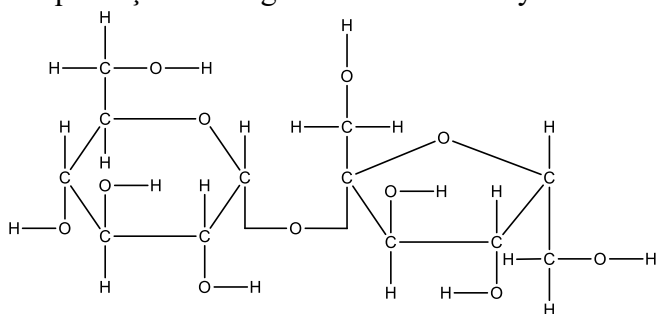
Beləliklə, saxaroza molekulunun quruluşu və rabitə növləri onun fiziki və kimyəvi xassələrini müəyyən edən əsas faktorlardandır. Aşağıda saxarozanın ümumi ($A_{\text{üm}}$) və siqma rabitələrinin (A_{σ}) sayının riyazi üsulla hesablanması nümunəsi verilmişdir.

$$\begin{aligned} A_{\text{üm}}[C_{12}H_{22}O_{11}] &= \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{12 \cdot 4 + 22 \cdot 1 + 11 \cdot 2}{2} = \\ &= \frac{48 + 22 + 22}{2} = 46 \end{aligned}$$

$$A_{\sigma}[C_{12}H_{22}O_{11}] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 45 + 2 - 1 = 46$$

Kimyəvi birləşmələrin quruluşu və rabitə növlərinin təhlili zamanı, əgər molekulda ümumi rabitələrin sayı ilə siqma rabitələrinin sayı eyni olarsa, bu hal həmin molekulda pi (π) rabitəsinin mövcud olmadığını göstərir.

Molekulun qrafik quruluşuna əsaslanaraq rabitələrin sayını müəyyən etdikdə, bu nəticələrin riyazi yolla aparılan hesablamalarla tam uyğunluq təşkil etməsi, tətbiq edilən üsulun dəqiqliyini və etibarlılığını bir daha təsdiqləyir. Beləliklə, riyazi analiz və struktur formullar əsasında əldə olunan məlumatlar bir-birini tamamlayaraq, molekulun quruluşunun düzgün təhlilinə imkan yaradır.



$$A_{\text{üm}}[C_{12}H_{22}O_{11}] = A_{\sigma}[C_{12}H_{22}O_{11}] = 46$$

Triasetilsellüloza polisaxaridlər sinfinə daxil olan və sellüloza ilə etan turşusunun reaksiyasından alınan mürəkkəb efirdir. Bu maddənin formalaşmasının əsasında sellüloza molekulunun quruluş halqalarında yerləşən üç hidrosil qrupunun kimyəvi çevrilməyə uğraması dayanır. Belə ki, hər bir quruluş vahidindəki bu üç hidrosil qrupu sirkə turşusu (etan turşusu) ilə reaksiyaya daxil olaraq ester bağları əmələ gətirir və nəticədə triasetilsellüloza adlanan mürəkkəb efir alınır.

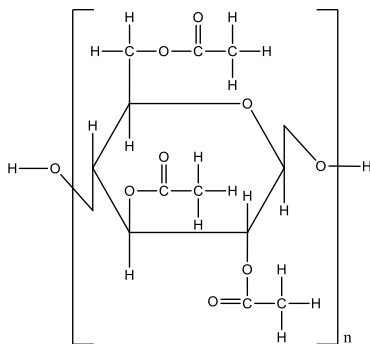
Triasetilsellüloza molekulunun ümumi kimyəvi formulu $[C_6H_7O_2(OCOCH_3)_3]_n$ şəklində ifadə olunur. Burada "n" polimerləşmə dərəcəsini göstərir və makromolekulda təkrarlanan quruluş vahidlərinin sayını əks etdirir. Bu səbəbdən triasetilsellülozanın tərkibindəki kimyəvi rabitələrin sayını hesablamaq üçün yalnız bir vahidin deyil, bütövlükdə polimer zəncirinin uzunluğu – yəni "n"

göstəricisi də nəzərə alınmalıdır.

Bu cür yanaşma kimyəvi quruluşun və rabitələrin sayının riyazi cəhətdən daha dəqiq qiymətləndirilməsinə imkan verir və polimer kimyasının əsas prinsiplərindən birini təşkil edir.

$$\begin{aligned}
 A_{\text{üm}}[HO(C_6H_7O_2(OCOCH_3)_3)_nH] &= \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} \\
 &= \frac{12n \cdot 4 + 16n \cdot 1 + 8n \cdot 2 + 2 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} = \\
 &= \frac{48n + 16n + 16n + 2 + 2}{2} = \frac{80n + 4}{2} \\
 &= 40n + 2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_{\sigma}[HO(C_6H_7O_2(OCOCH_3)_3)_nH] &= N_{\text{üm}} + S - 1 = 36n + 3 + n - 1 = \\
 &= 37n + 2
 \end{aligned}$$



$$A_{\text{üm}}[HO(C_6H_7O_2(OCOCH_3)_3)_nH] = 40n + 2$$

$$A_{\sigma}[HO(C_6H_7O_2(OCOCH_3)_3)_nH] = 37n + 2$$

Trimetoksiqlütər turşusu ($C_8H_{14}O_7$) molekulunun quruluşunda iki karboksil qrupu mövcuddur ki, bu da onun turşuluq xüsusiyyətlərini müəyyən edir. Molekulun kimyəvi quruluşunu təhlil etdikdə, ondakı bütün atomların qarşılıqlı əlaqələrini və rabitə saylarını müəyyən etmək üçün riyazi yanaşmadan istifadə etmək mümkündür. Bu üsul bizə molekulun daxilindəki atomlar arasında

formalaşan birləşmələrin sayını dəqiqliklə hesablamğa imkan verir. Trimetoksiqlutar turşusunun molekulyar quruluşu bu baxımdan maraqlı nümunədir və onun riyazi əsaslarla araşdırılması həm nəzəri, həm də tətbiqi kimya üçün əhəmiyyətlidir.

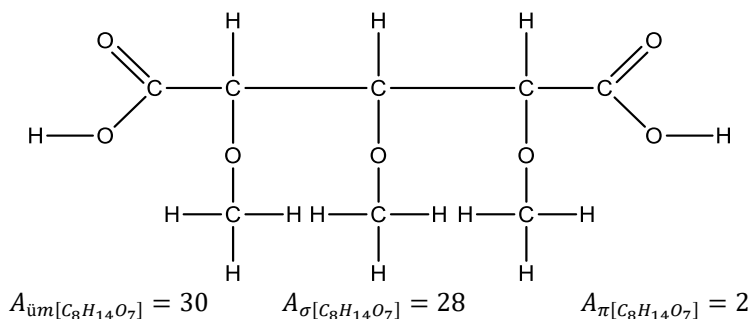
$$A_{\text{üm}[C_8H_{14}O_7]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{8 \cdot 4 + 14 \cdot 1 + 7 \cdot 2}{2} = \frac{32 + 14 + 14}{2} = 30$$

Bunu nəzərə almaq vacibdir ki, molekuldakı ümumi rabitə sayı ilə siqma rabitələrinin sayını müqayisə etməklə, fərq olaraq alınan ədədi qiyməti bizə pi rabitələrinin sayını müəyyən etməyə imkan verir. Bu π rabitələri, əsasən, hibridləşməyə məruz qalmamış "p" elektron orbitallarının qarşılıqlı örtüşməsi nəticəsində yaranır. Beləliklə, molekulun quruluşunda sadəcə birləşmələrin sayını deyil, həm də onların növünü və yaranma mexanizmini anlamaq mümkün olur.

$$A_{\sigma[C_8H_{14}O_7]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 29 + 0 - 1 = 28$$

$$A_{\pi[C_8H_{14}O_7]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \frac{8(4 - 2) + 14(1 - 2) + 7(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{16 - 14 + 0 + 2}{2} = 2$$

Əgər molekulun qrafik quruluşu əsasında onun daxilindəki kimyəvi rabitələrin sayını təyin etsək, bu zaman aparılmış riyazi hesablamaların düzgünlüyü və elmi əsaslara söykəndiyi bir daha aydın şəkildə sübuta yetirilmiş olar. Beləliklə, molekulun strukturu əsaslanan analiz, nəzəri yanaşmaların praktik nəticələrlə üst-üstə düşdüyünü göstərir və kimyəvi quruluşların öyrənilməsində riyazi metodların tətbiqinin etibarlılığını təsdiqləyir.



Canlı orqanizmlərin həyat fəaliyyəti – tənəffüs, hərəkət, maddələr mübadiləsi və digər bioloji proseslər fasiləsiz enerji tələbatı ilə müşayiət olunur. Bu enerjinin mənbəyi insanın gündəlik qida rasionunda yer alan əsas maddələrdən – zülallar, karbohidratlar və yağlardan alınır.

Karbohidratlar və yağlar, əsasən karbon (C), hidrogen (H) və oksigen (O) atomlarından ibarət mürəkkəb üzvi birləşmələrdir. Zülallar isə amin turşularının birləşməsi nəticəsində əmələ gələn və tərkibində əlavə olaraq azot (N), bəzən isə kükürd (S) və digər elementləri daşıyan biopolimerlərdir. Bu maddələr orqanizmdə enerji hasilatında mühüm rol oynayır və onların parçalanması zamanı əmələ gələn enerji, molekul daxilindəki kimyəvi rabitələrin növü və sayı ilə birbaşa əlaqədardır.

Müxtəlif fəaliyyət sahələrində çalışan insanların sutka ərzində sərf etdikləri enerji miqdarı fərqli olur. Məsələn, fiziki əmək tələb edən peşə sahibləri intellektual əmək sahiblərinə nisbətən daha çox enerji sərf edirlər. Orqanizmin sərf etdiyi bu enerjinin bərpası isə qida vasitəsilə mümkün olur. Beləliklə, qəbul edilən qidaların tərkibindəki kimyəvi rabitələrin sayının və gücünün müəyyənləşdirilməsi, bu enerjinin mənbəyini elmi cəhətdən əsaslandırmağa imkan verir.

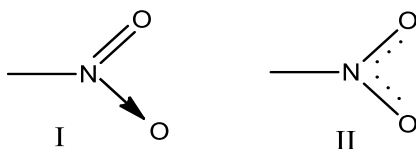
Bu kontekstdə kimyəvi rabitələrin sayının hesablanması yalnız təhsil prosesində deyil, həm də dietologiya və sağlam qidalanmanın planlaşdırılmasında tətbiq edilə bilər. Qida maddələrinin parçalanmasından əldə olunan enerjinin hesablanması,

onların strukturundakı rabitə növləri və bu rabitələrin enerjisi nəzərə alınmaqla həyata keçirilə bilər. Bu yanaşma, fərqli peşə və fəaliyyət sahələri üzrə insanların gündəlik enerji ehtiyacına uyğun qida miqdarının elmi əsaslarla müəyyənləşdirilməsinə şərait yaradır.

Digər tərəfdən, üzvi kimyanın geniş və əhatəli bir sahəsinə təşkil edən azotlu üzvi birləşmələr də bu kontekstdə xüsusi önəm daşıyır. Bu sinfə daxil olan maddələr – nitrobirləşmələr, aminlər, amin turşuları və digər azotlu molekullar – müxtəlif funksional qrupların iştirakı ilə formalaşır [1, 38]. Məsələn, aminlər ($-NH_2$), nitrobirləşmələr ($-NO_2$), və amin turşuları ($-NH_2$ və $-COOH$) funksional qrupları sayəsində kimyəvi və bioloji cəhətdən fərqli xüsusiyyətlərə malik olurlar.

Xüsusilə amin turşuları həm amin, həm də karboksil qrupuna malik olduğu üçün zülalların biosintezində mühüm rol oynayır və onların strukturundakı kimyəvi rabitələrin sayı bu molekulların enerji potensialını və funksional imkanlarını müəyyən edir. Bu funksional qrupların qrafik strukturu, onların molekul daxilindəki yerləşməsi və digər atomlarla olan rabitəsi, onların kimyəvi xassələrinin əsasını təşkil edir. Qeyd etmək lazımdır ki, nitro qrupu bəzi hallarda rezonans strukturlarla təmsil olunaraq daha sabit elektron quruluşa malik olur.

Nəticə etibarilə, kimyəvi rabitələrin riyazi yolla öyrənilməsi və bu rabitələrin enerjisini hesablamaqla, qida maddələrinin bioloji dəyərini və onların insan orqanizmi üçün enerji potensialını daha dəqiq təyin etmək mümkündür. Bu yanaşma həm elmi tədqiqatlar, həm də tədris prosesləri üçün yeni imkanlar yaradır.



Kimyəvi rabitələrin qurulma mexanizmləri molekulların strukturuna dərin təsir göstərir. Nitroqrupun formalaşması zamanı

bu xüsüs xüsusilə nəzərə çarpır. Belə ki, nitroqrupun yaranmasında iştirak edən rabitələrdən biri donor-akseptor təbiətlidir. Bu tip rabitədə azot atomu elektron cütünü verən donor, oksigen atomu isə həmin cütü qəbul edən akseptor rolunu oynayır.

Digər tərəfdən, nitroqrupun alternativ qrafik təsvirində azot və oksigen atomları arasında rabitənin delokallaşmış formada olduğu göstərilir. Bu strukturda elektron sıxlığı molekulun müəyyən hissələrində cəmlənmək əvəzinə, bir neçə atom arasında yayılır. Belə delokallaşma xüsusiyyəti molekulun sabitliyinə birbaşa təsir edir.

Maraqlıdır ki, molekul daxili rabitələrin bu cür müxtəlif formalarda yaranmasına baxmayaraq, istər donor-akseptor, istərsə də delokallaşmış rabitə növləri kimyəvi rabitə saylarının riyazi yolla hesablanmasına mane olmur. Ümumi ($A_{\text{üm}}$), siqma (A_{σ}) və pi (A_{π}) rabitə sayları kimi göstəricilər molekulun strukturuna uyğun şəkildə dəqiq və sistemli şəkildə təyin oluna bilər.

Bu prinsipi aydın şəkildə izah etmək üçün 2,3-dimetil-2-nitropentan ($C_7H_{15}NO_2$) molekulunu nümunə götürək. Bu molekulda fərqli növ kimyəvi rabitələrin riyazi baxımdan necə sayıldığını və molekulun elektron strukturuna necə uyğun gəldiyini təhlil etməklə, rabitələrin nəzəri hesablamalarının nə qədər dəqiq nəticələr verdiyini göstərmək mümkündür.

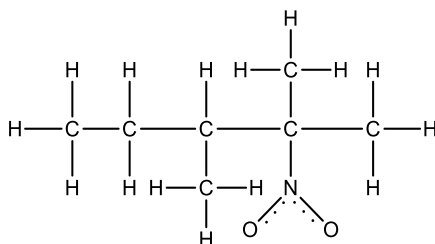
$$\begin{aligned} A_{\text{üm}}[C_7H_{15}NO_2] &= \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} \\ &= \frac{7 \cdot 4 + 15 \cdot 1 + 1 \cdot 4 + 2 \cdot 1,5}{2} = \\ &= \frac{28 + 15 + 4 + 3}{2} = 25 \end{aligned}$$

$$A_{\sigma}[C_7H_{15}NO_2] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 25 + 0 - 1 = 24$$

Nitrobirləşmələrdə azot atomunun oksidləşmə dərəcəsi “+3” -ə, valentliyi isə dördə bərabərdir: 2,3-dimetil-2-nitropentan adlı üzvi birləşmənin quruluşuna nəzər yetirdikdə, onun açıq

zəncirli, yəni tsiklik olmayan bir molekul olduğu aydın görünür. Bu maddənin quruluş formulu tərtib olunduqda, molekuldakı bütün atomlar arasında qurulan kimyəvi rabitələrin sayı və növü riyazi yolla aparılan hesablamaların nəticələri ilə tam uyğunluq təşkil edir.

Qeyd etmək lazımdır ki, nitroqrup tərkibli birləşmələrdə azot elementi spesifik elektron paylanmasına malikdir. Belə ki, bu halda azot atomunun oksidləşmə dərəcəsi +3-ə bərabər olur və o, ümumilikdə dörd kimyəvi rabitə qurmaq qabiliyyətinə sahibdir. Bu xüsusiyyət nitrobirləşmələrin kimyəvi xassələrinin və reaksiyaya meyilliliyinin müəyyən olunmasında mühüm rol oynayır.



$$A_{\text{üm}}[C_7H_{15}NO_2] = 25$$

$$A_{\sigma}[C_7H_{15}NO_2] = 24$$

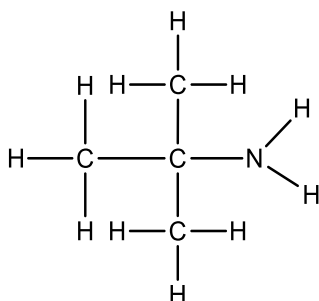
Aminlər – quruluşca ammoniyak molekuluna bənzər üzvi birləşmələrdir. Onların tərkibindəki hidrogen atomlarının radikallarla əvəz olunması nəticəsində müxtəlif tiplər meydana gəlir. Bu xüsusiyyətə əsasən aminlər radikalın sayından asılı olaraq birli, ikili və üçlü olmaqla üç əsas qrupa ayrılır.

Məsələn, birli aminlərə nümunə kimi göstərilə biləcək üçlübutilamin birləşməsində yalnız bir hidrogen atomu radikalla əvəz olunmuşdur. Molekulun quruluşu əsasında kimyəvi rabitələrin ümumi sayını müəyyən etmək mümkündür. Bu yanaşma təkcə maddənin quruluşunu daha yaxşı anlamağa deyil, həm də onun bəzi xüsusiyyətlərini qiymətləndirməyə imkan yaradır.

$$A_{\text{üm}}[C_4H_{11}N] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{4 \cdot 4 + 11 \cdot 1 + 1 \cdot 3}{2} = \frac{16 + 11 + 3}{2} = 15$$

Qrafik formula əsaslanaraq aparılan riyazi təhlil nəticəsində molekulda ümumi və siqma rabitələrinin sayının 15 olduğu müəyyən edilir.

Digər tərəfdən, aminlərə nəzər saldıqda görürük ki, onların tərkibindəki azot atomu -3 oksidləşmə dərəcəsinə malikdir. Bu, azotun kimyəvi aktivliyinin və elektron paylanması göstəricisidir. Eyni zamanda, azot atomunun valentliyi III-dür, yəni o mübadilə üsulu ilə üç kovalent rabitə əmələ gətirə bilər. Bu xüsusiyyətlər amin birləşmələrinin kimyəvi xassələrinə və molekulyar quruluşuna bilavasitə təsir edir.



$$A_{\text{üm}}[C_4H_{11}N] = 15$$

İkili aminlər sinfinə daxil olan etil-ikilibutilamin ($C_6H_{15}N$) və üçlü aminlərə məxsus etil-izopropil-izobutilamin ($C_9H_{21}N$) birləşmələri üzərində aparılan araşdırmalar göstərir ki, bu maddələrin molekullarında mövcud olan kimyəvi rabitələrin ümumi sayı riyazi metodlarla müəyyən edilə bilər.

Etil-ikilibutilaminin ikili aminlərə aid olduğu üçün onun molekulunda bir azot atomu ilə yanaşı, iki müxtəlif alkil qrupu – etil və ikilibutil – mövcuddur.

Digər tərəfdən, etil-izopropil-izobutilaminin molekulu daha mürəkkəb quruluşa malikdir və üçlü aminlərə aiddir. Burada azot atomu üç fərqli alkil qrupu ilə birləşərək üç kovalent rabitə əmələ gətirir.

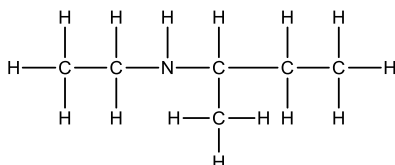
Bu cür strukturların kimyəvi rabitə sayları molekulun atom tərkibi və onların vaetlikləri əsasında riyazi yolla dəqiqliklə

hesablana bilər. Bu metod molekulyar quruluşların öyrənilməsində mühüm əhəmiyyət kəsb edir və maddənin kimyəvi xassələrinin daha dərindən başa düşülməsinə xidmət edir.

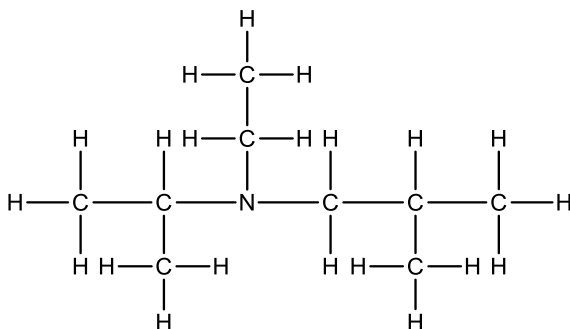
$$A_{\text{üm}}[C_6H_{15}N] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 15 \cdot 1 + 1 \cdot 3}{2} = \frac{24 + 15 + 3}{2} = 21$$

$$A_{\text{üm}}[C_9H_{21}N] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{9 \cdot 4 + 21 \cdot 1 + 1 \cdot 3}{2} = \frac{36 + 21 + 3}{2} = 30$$

Molekulların qrafik strukturlarını hazırlayaraq onların kimyəvi rabitə saylarını müəyyən etdikdə, riyazi hesablamalarla əldə olunan nəticələr tam dəqiqliklə təsdiqlənir. Xatırlatmaq lazımdır ki, bu molekulları təşkil edən atomlar arasında əlaqə yalnız siqma rabitələri vasitəsilə qurulur.



$$A_{\text{üm}}[C_6H_{15}N] = 21$$



$$A_{\text{üm}}[C_9H_{21}N] = 30$$

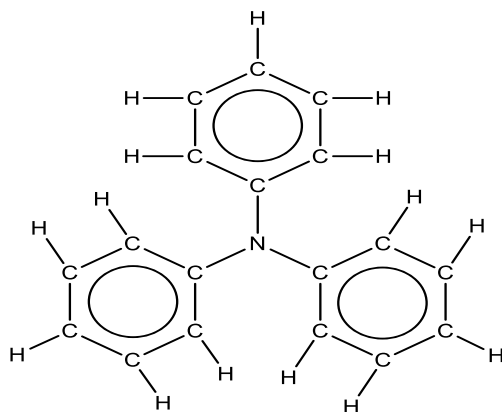
Etil-ikilibutilamin tərkibli birləşmədə ammoniyak molekul-

undakı iki hidrogen atomu karbohidrogen qrupları ilə əvəz olunur. Digər tərəfdən, etil-izopropil-izobutilamin birləşməsində isə ammoniyak molekulunun bütün hidrogen atomları karbohidrogen radikalları ilə əvəz edilmiş vəziyyətdədir.

Üç tsiklik quruluşa malik olan trifenilamin ($C_{18}H_{15}N$) molekulunda isə siqma (A_σ) rabitələrinin sayını qrafik formuldan istifadə etmədən, yalnız riyazi metodlar vasitəsilə hesablamağa imkan verən yanaşmanı araşdıraraq.

$$A_{\sigma[C_{18}H_{15}N]} = N_{üm} + S - 1 = 34 + 3 - 1 = 36$$

Trifenilamin molekulunu, quruluşuna görə üçlü aminlər sinfinə aiddir və onun quruluşunu qrafik şəkildə ifadə etdikdə, molekul daxilindəki siqma rabitələrinin ümumi sayını müəyyənləşdirmək mümkündür. Hər üç fenil halqası azot atomuna birbaşa siqma rabitə ilə birləşmişdir. Bu rabitələrin sayını hesablamaqla əldə olunan nəticə, molekulun elementar tərkibi və valenliklərinə əsaslanan riyazi hesablamalarla tam üst-üstə düşür. Bu da göstərir ki, molekulun qrafik quruluşu ilə nəzəri hesablama arasında tam uyğunluq mövcuddur.



$$A_{\sigma[C_{18}H_{15}N]} = 36$$

Aminturşular-tərkibində eyni zamanda həm amin qrupu

($-\text{NH}_2$), həm də karboksil qrupu ($-\text{COOH}$) olan üzvi maddələrdir. Bu iki funksional qrupun bir molekulda birləşməsi həmin maddəyə həm turşu, həm də əsas xüsusiyyətləri verir. Elə bu səbəbdən də aminturşular üzvi amfoter birləşmələr kimi tanınır və canlı orqanizmlərin quruluşunda mühüm rol oynayır.

Aminturşuların nümayəndələrindən biri olan 6-aminheksan turşusu ($\text{C}_6\text{H}_{13}\text{O}_2\text{N}$) molekulunun quruluşuna nəzər yetirdikdə, burada həm karbon skeleti, həm amin, həm də karboksil qruplarının yerləşməsi aydın görünür. Bu molekulda mövcud olan ümumi kimyəvi rabitələrin, o cümlədən siqma və pi rabitələrinin miqdarını riyazi metodla dəqiqliklə hesablamaq mümkündür. Belə bir yanaşma təkcə molekulun quruluşunu dərinlən anlamağa deyil, həm də onun kimyəvi və fiziki xassələrini izah etməyə imkan yaradır.

$$A_{\text{üm}[\text{C}_6\text{H}_{13}\text{O}_2\text{N}]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 13 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 1 \cdot 3}{2} = \\ = \frac{24 + 13 + 4 + 3}{2} = 22$$

6-aminheksan turşusu molekulunun quruluşunu təhlil edərkən, onun birbaşa və sadə zəncirli quruluşa malik olduğu müşahidə olunur. Bu birləşmədə tsiklik struktur formalaşmayıb, yəni molekul qapalı şəkildə deyil, demək olar ki, xətti quruluşdadır. Bu da onun rabitələrinin hesablanmasında müəyyən sadəlik yaradır.

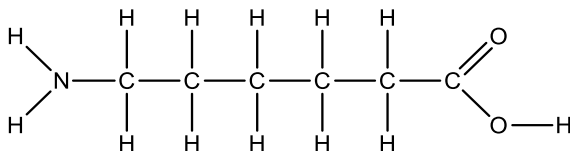
Kimyəvi quruluş baxımından molekulun tərkibindəki atomlar müxtəlif valentlik xüsusiyyətləri ilə seçilir. Karbon atomları ənənəvi olaraq dördvalentlidir və bu xüsusiyyətini bu molekulda da saxlayır. Hidrogen atomları birvalentli, yəni yalnız bir rabitədə iştirak edə bilər. Oksigen atomları iki rabitə qurma qabiliyyətinə malikdir, azot atomları isə üç rabitə ilə molekulun quruluşunda yer alır.

Molekul daxilindəki bütün siqma rabitələrin sayını dəqiq müəyyənləşdirmək üçün bu valentlik xüsusiyyətlərini və atomların molekuldakı yerləşməsini nəzərə almaq kifayətdir. Bu yanaşma ilə 6-aminheksan turşusunun quruluşu əsasında rabitələrin riyazi

hesablaması düzgün və elmi əsaslı şəkildə aparıla bilər.

$$A_{\sigma[C_6H_{13}O_2N]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 22 + 0 - 1 = 21$$

6-aminheksan turşusunun molekulyar quruluşu üzərində aparılan riyazi təhlillər nəticəsində əldə edilən ümumi və siqma rabitələrin sayı, müvafiq olaraq 22 və 21-dir. Bu ədədi göstəricilər molekulun qrafik təsvirində də öz təsdiqini tapır. Maddənin struktur quruluşu, atomlar arasındakı qarşılıqlı əlaqələr və rabitələrin yerləşməsi bu hesablamaların düzgünlüyünü aydın şəkildə ortaya qoyur.



$$A_{\text{üm}[C_6H_{13}O_2N]} = 22 \quad A_{\sigma[C_6H_{13}N_2O]} = 21 \quad A_{\pi[C_6H_{13}N_2O]} = 1$$

Histidin aminoturşusunun strukturunda fərqli xüsusiyyətlərə malik tsiklik halqa mövcuddur. Bu tsiklik quruluş, molekulun kimyəvi xassələrinə və reaksiyaya girmə qabiliyyətinə birbaşa təsir göstərir. Molekulun daxilindəki rabitələrin sayı və növləri, onun sabitliyi və funksional rolu baxımından mühüm əhəmiyyət daşıyır. Aşağıda histidin molekulundakı kimyəvi rabitələrin ümumi sayı riyazi yanaşma əsasında təhlil edilərək müəyyən edilmişdir. Bu yanaşma molekulun kimyəvi formuluna əsaslanaraq rabitələrin sayını dəqiq şəkildə hesablamağa imkan verir.

$$\begin{aligned} A_{\text{üm}[C_6H_9O_2N_3]} &= \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 9 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 3 \cdot 3}{2} = \\ &= \frac{24 + 9 + 4 + 9}{2} = 23 \end{aligned}$$

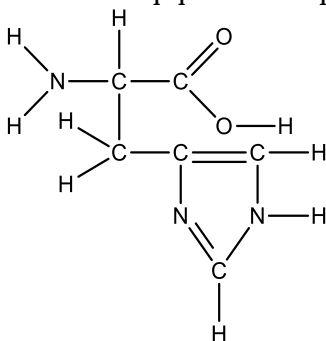
Histidin molekulunun kimyəvi quruluşu təhlil edilərkən, siqma rabitələrinin sayını riyazi üsullarla müəyyən etmək üçün

onun strukturundakı bütün xüsusiyyətlər diqqətə alınmalıdır. Xüsusilə, molekulda mövcud olan bir heterotsiklik vəziyyətin nəzərə alınması vacib amildir. Belə struktur elementləri molekulun elektron quruluşuna və rabitə sisteminə birbaşa təsir göstərir. Ona görə də, histidin molekulunda siqma rabitələrinin ümumi sayını hesablamaq istəyərkən bu heterotsiklik qrupun mövcudluğu ayrıca nəzərə alınmalı və hesablamaya daxil edilməlidir. Bu yanaşma daha dəqiq və elmi əsaslandırılmış nəticələrin əldə olunmasına imkan verir.

$$A_{\sigma[C_6H_9O_2N_3]} = N_{üm} + S - 1 = 20 + 1 - 1 = 20$$

$$\begin{aligned} A_{\pi[C_6H_9O_2N_3]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{6(4 - 2) + 9(1 - 2) + 2(2 - 2) + 3(3 - 2) + 2(1 - 1)}{2} = \\ &= \frac{12 - 9 + 0 + 3 + 0}{2} = 3 \end{aligned}$$

Riyazi hesablamalar vasitəsilə bu üzvi birləşmədə ümumi siqma və pi rabitə saylarının müvafiq olaraq 23, 20, 3 olduğu müəyyən edilmişdir. Bu hesablamaların doğruluğu molekulun qrafik strukturunun təhlili ilə dəqiqliklə təsdiqlənir.



$$A_{üm[C_6H_9O_2N_3]} = 23$$

$$A_{\sigma[C_6H_9O_2N_3]} = 20$$

$$A_{\pi[C_6H_9O_2N_3]} = 3$$

Aminturşuların molekullarında həm amin ($-\text{NH}_2$), həm də karboksil ($-\text{COOH}$) funksional qruplar mövcuddur ki, bu da onların müxtəlif sayda molekulların birləşməsinə şərait yaradır. Kimyəvi reaksiyalar zamanı bir aminturşunun karboksil qrupu ilə başqa molekulun amin qrupu arasında su molekulunun çıxması ilə birləşmə baş verir. Nəticədə, tetrapeptid, heksapeptid kimi mürəkkəb birləşmələr əmələ gəlir.

Məsələn, alanin amin turşusundan yaranan heksapeptid birləşməsində kimyəvi rabitələrin sayını qrafik formullardan istifadə etmədən, riyazi yanaşma vasitəsilə hesablamasını aşağıdakı kimi

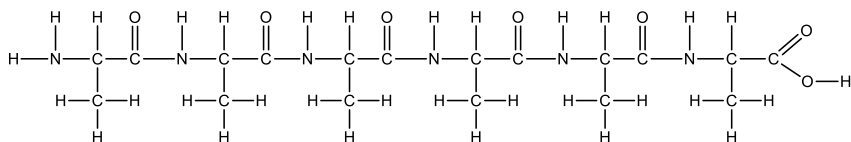
$$A_{\text{üm}}[\text{C}_{18}\text{H}_{32}\text{O}_7\text{N}_6] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{18 \cdot 4 + 32 \cdot 1 + 7 \cdot 2 + 6 \cdot 3}{2} = \frac{72 + 32 + 14 + 18}{2} = 68$$

Sigma rabitələrinin sayını hesablaması zamanı alanin heksapeptidinin molekulunda tsiklik quruluşun olmadığı nəzərə alınmalıdır.

$$A_{\sigma}[\text{C}_{18}\text{H}_{32}\text{O}_7\text{N}_6] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 63 + 0 - 1 = 62$$

$$A_{\pi}[\text{C}_{18}\text{H}_{32}\text{O}_7\text{N}_6] = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \frac{18(4 - 2) + 32(1 - 2) + 7(2 - 2) + 6(3 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{36 - 32 + 0 + 6 + 2}{2} = 6$$

Kimyəvi birləşmənin qrafik strukturunu hazırladıqda və oradakı rabitələrin sayını müəyyən etdikdə, əldə olunan nəticələrin riyazi hesablamalarla tam uyğun gəldiyi müşahidə olunur. Bu uyğunluq, həm strukturun düzgünlüyünü, həm də riyazi metodların etibarlılığını təsdiqləyir.



$$A_{\text{üm}}[C_{18}H_{32}O_7N_6] = 68$$

$$A_{\sigma}[C_{18}H_{32}O_7N_6] = 62$$

$$A_{\pi}[C_{18}H_{32}O_7N_6] = 6$$

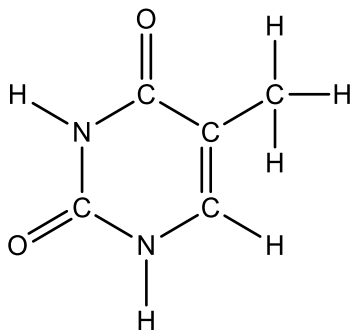
Primidin əsaslarından olan timin molekulunun kimyəvi rabitələrinin sayının riyazi yolla hesablanması aşağıdakı kimi izah olunur:

$$\begin{aligned} A_{\text{üm}}[C_5H_6O_2N_2] &= \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{5 \cdot 4 + 6 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 2 \cdot 3}{2} = \\ &= \frac{20 + 6 + 4 + 6}{2} = 18 \end{aligned}$$

Siqma rabitələrinin sayını hesablayarkən molekulun tsiklik quruluşa malik olması vacib amil kimi nəzərə alınmalıdır. Həmçinin, qeyd etmək lazımdır ki, timin pirimidin əsasları heterotsiklik birləşmələr qrupuna aid edilir. Bu xüsusiyyətlər molekulyar strukturun düzgün təsvir olunmasında və kimyəvi reaksiyaların başa düşülməsində mühüm rol oynayır.

$$A_{\sigma}[C_5H_6O_2N_2] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 15 + 1 - 1 = 15$$

$$\begin{aligned} A_{\pi}[C_5H_6O_2N_2] &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{5(4 - 2) + 6(1 - 2) + 2(2 - 2) + 2(3 - 2) + 2(1 - 1)}{2} = \\ &= \frac{10 - 6 + 0 + 2 + 0}{2} = 3 \end{aligned}$$



$$A_{\text{üm}}[C_5H_6O_2N_2] = 18$$

$$A_{\sigma}[C_5H_6O_2N_2] = 15$$

$$A_{\pi}[C_5H_6O_2N_2] = 3$$

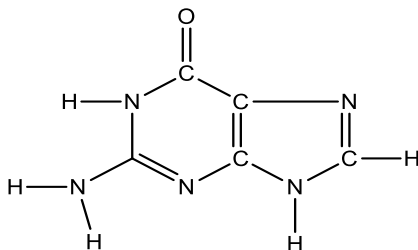
Quanin molekulunda ümumi, siqma və pi rabitə saylarını riyazi metodlarla müəyyən etmək mümkündür. Bu hesablama üsulu molekulun quruluşunu və rabitələrin paylanmasını dəqiq şəkildə təhlil etməyə imkan verir. Belə yanaşma, quanin molekulundakı atomlar arasında mövcud olan müxtəlif növ kimyəvi rabitələrin sayını sistemli və elmi əsaslarla qiymətləndirir.

$$A_{\text{üm}}[C_5H_5ON_5] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{5 \cdot 4 + 5 \cdot 1 + 1 \cdot 2 + 5 \cdot 3}{2} = \frac{20 + 5 + 2 + 15}{2} = 21$$

Quanin maddəsinin kimyəvi quruluşunda iki müxtəlif tsiklik forma mövcuddur.

$$A_{\sigma}[C_5H_5ON_5] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 16 + 2 - 1 = 17$$

$$A_{\pi}[C_5H_5ON_5] = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \frac{5(4 - 2) + 5(1 - 2) + 1(2 - 2) + 5(3 - 2) + 2(1 - 2)}{2} = \frac{10 - 5 + 0 + 5 - 2}{2} = 4$$



$$A_{\text{üm}}[C_5H_5ON_5] = 21 \quad A_{\sigma}[C_5H_5ON_5] = 17 \quad A_{\pi}[C_5H_5ON_5] = 4$$

Ribonukleotid və dezoksiribonukleotid kimi mürəkkəb kimyəvi birləşmələrin əmələ gəlməsində üç əsas komponent mühüm rol oynayır: pentoza şəkəri (riboz və ya dezoksiriboz), azotlu əsaslar (pirimidin və purin tipli) və ortofosfat turşusu.

Ribonukleotidlərin tərkibində kimyəvi rabitələrin sayının riyazi hesablanması prosesi aşağıdakı kimi təsvir olunur:

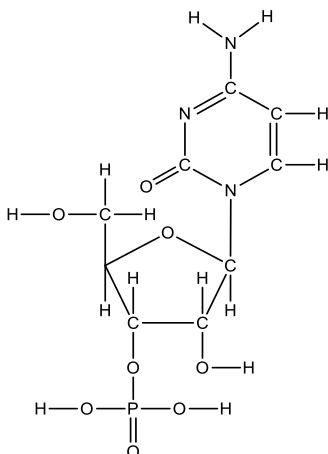
$$\begin{aligned} A_{\text{üm}}[C_9H_{14}O_8N_3P] &= \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \\ &= \frac{9 \cdot 4 + 14 \cdot 1 + 8 \cdot 2 + 3 \cdot 3 + 1 \cdot 5}{2} = \\ &= \frac{36 + 14 + 16 + 9 + 5}{2} = 40 \end{aligned}$$

Riboza və pirimidin əsasları tsiklik struktura malik olduqlarından, ribonukleotid birləşməsində iki ayrı tsiklik komponentin mövcudluğu nəzərə alınmalıdır. Bu xüsusiyyət kimyəvi hesablamalar zamanı önəmli yer tutur və molekulun quruluşunun düzgün təhlil edilməsində vacib hesab olunur.

$$A_{\sigma}[C_9H_{14}O_8N_3P] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 35 + 2 - 1 = 36$$

$$\begin{aligned} A_{\pi}[C_9H_{14}O_8N_3P] &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{9(4 - 2) + 14(1 - 2) + 8(2 - 2) + 3(3 - 2) + 1(5 - 2) + 2(1 - 2)}{2} = \end{aligned}$$

$$= \frac{18 - 14 + 0 + 3 + 3 - 2}{2} = 4$$



$$A_{\text{üm}}[C_9H_{14}O_8N_3P] = 40$$

$$A_{\sigma}[C_9H_{14}O_8N_3P] = 36$$

$$A_{\pi}[C_9H_{14}O_8N_3P] = 4$$

Üç tsiklik quruluşa sahib olan dezoksiribonukleotid molekulunda kimyəvi rabitələrin sayını müəyyən etmək məqsədilə, bu rabitələri riyazi üsullarla və müvafiq formulalar vasitəsilə hesablamaq mümkündür. Bu yanaşma molekulun struktur xüsusiyyətlərini nəzərə alaraq, rabitə növlərinin sayını dəqiq şəkildə təhlil etməyə imkan verir.

$$\begin{aligned} A_{\text{üm}}[C_{10}H_{14}O_7N_5P] &= \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} \\ &= \frac{10 \cdot 4 + 14 \cdot 1 + 7 \cdot 2 + 5 \cdot 3 + 1 \cdot 5}{2} = \\ &= \frac{40 + 14 + 14 + 15 + 5}{2} = 44 \end{aligned}$$

Molekulda ümumi rabitələrin sayından fərqli olaraq, siqma və pi rabitələrinin hesablanmasında xüsusi diqqət yetirilməlidir. Bu zaman, molekulun tərkibində mövcud olan dövrə (tsiklik) quruluşlar da riyazi üsullarla hesablamalarda dəqiq nəzərə alınmalıdır. Dövrə strukturun mövcudluğu rabitə saylarının müəyyən olunmasında mühüm rol oynayır və hesablama prosesinə uyğun şəkildə daxil

edilməlidir.

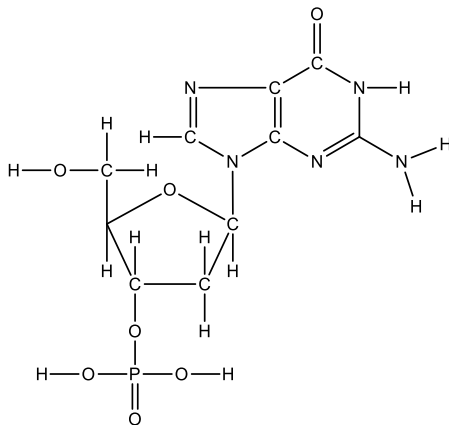
$$A_{\sigma[C_{10}H_{14}O_7N_5P]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 37 + 3 - 1 = 39$$

$$A_{\pi[C_{10}H_{14}O_7N_5P]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{10(4 - 2) + 14(1 - 2) + 7(2 - 2) + 5(3 - 2) + 1(5 - 2) + 2(1 - 3)}{2} =$$

$$= \frac{20 - 14 + 0 + 5 + 3 - 4}{2} = 5$$

Müvafiq birləşmənin qrafik strukturunu hazırlayıb kimyəvi rabitələrin sayını müəyyənləşdirdikdə, riyazi hesablamalarla əldə edilən nəticələr tam şəkildə təsdiqlənir. Bu, nəzəriyyə ilə praktikanın uyğunluğunu göstərərək, hesablamaların dəqiqliyini və etibarlılığını sübut edir.



$$A_{\text{üm}[C_{10}H_{14}O_7N_5P]} = 44$$

$$A_{\sigma[C_{10}H_{14}O_7N_5P]} = 39$$

$$A_{\pi[C_{10}H_{14}O_7N_5P]} = 5$$

Karbohidratlar insan orqanizmi üçün əsas enerji mənbəyidir və qidalanmada xüsusi yer tutur. Onlar əsasən üç növə ayrılır: monosaxaridlər, disaxaridlər və polisaxaridlər. Monosaxaridlərə qlükoza ($C_6H_{12}O_6$), riboza ($C_5H_{10}O_5$) disaxaridlərə saxaroza ($C_{12}H_{22}O_{11}$), polisaxaridlərə isə nişasta və sellüloza ($C_6H_{10}O_5$)_n karbohidratlarını misal göstərmək olar.

Fərqli karbohidrat molekullarında atomlar arasındakı kimyəvi rabitələrin növü və sayı, molekulyar formullar əsasında riyazi üsullarla təhlil edilə bilər. Bu cür hesablamalar vasitəsilə, karbohidratların parçalanması zamanı ortaya çıxan enerji miqdarını ədədi olaraq müəyyən etmək mümkündür. Bu məlumatlar, müxtəlif peşə sahiblərinin gündəlik enerji sərfiyyatını qarşılamaq üçün müxtəlif qidalardan və hansı miqdarda qəbul etmələrinin tövsiyə olunduğunu anlamağa kömək edir.

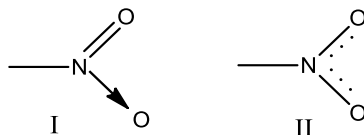
Ümumiyyətlə, oksigen tərkibli üzvi birləşmələrdə - spirtlərdə, aldehidlərdə, turşularda və mürəkkəb efirlərdə kimyəvi rabitələrin sayının riyazi yolla hesablanması və onların qrafik təsvirlərinin hazırlanması, nəticələrin dəqiqliklə təsdiqlənməsində əhəmiyyətli rol oynayır və bu sahə geniş tədqiq olunur.

3.3. Azot tərkibli üzvi maddələrdə kimyəvi rabitələrin sayının riyazi yolla müəyyənləşdirilməsi

Azot tərkibli üzvi birləşmələr üzvi kimyanın geniş və mühüm sahəsini təşkil edən mürəkkəb maddələr sırasına daxildir. Bu sinifə daxil olan əsas birləşmələr sırasında nitrobirləşmələr, aminlər, aminturşular və bu tip digər maddələri göstərmək olar [1, 38]. Belə birləşmələrin molekul quruluşunda azot atomu adətən müəyyən funksional qruplar – məsələn, nitro ($-\text{NO}_2$), amin ($-\text{NH}_2$), şəklində iştirak edir.

Azotlu üzvi maddələrin quruluş müxtəlifliyində xüsusilə aminturşular seçilir, çünki onların tərkibində eyni anda iki funksional qrupa – amin və karboksil qruplarına rast gəlinir. Bu cəhət aminturşuları digər azotlu üzvi birləşmələrdən məsələn, nitrobirləşmələr və aminlərdən fərqləndirən əsas xüsusiyyətlərdən biridir.

Qeyd etmək lazımdır ki, nitro funksional qrupu ($-\text{NO}_2$) digər qruplardan fərqli olaraq qrafik təsvirlərdə iki fərqli formada təqdim oluna bilər. Bu fərqlilik molekulun elektron quruluşu və rabitə tipləri ilə bağlıdır.



Nitroqrupun quruluşunu ifadə edən qrafik formullarda rabitənin yaranma mexanizmi müxtəlif üsullarla əks etdirilə bilər. Belə ki, birinci qrafik təsvirə əsasən, nitro qrupunda azot və oksigen atomları arasında bir rabitə donor-akseptor prinsipinə uyğun olaraq formalaşır; burada azot atomu elektron cütünü verən tərəf, yəni donor, oksigen isə onu qəbul edən, yəni akseptor rolunu oynayır.

İkinci qrafik formada isə nitro qrupunda azot və oksigen atomları arasında yaranan rabitə delokallaşma xarakteri daşıyır. Bu zaman elektronlar müəyyən bir rabitəyə aid olmaqdan çıxaraq, molekulun geniş bir hissəsində yerləşir və bu, molekulun daha sabit konfigurasiyaya malik olmasına şərait yaradır.

Bütün bu struktur fərqliliklərinə baxmayaraq, molekuldakı ümumi rabitələrin, siqma rabitələrinin və pi rabitələrinin riyazi hesablanması zamanı nəticələrin dəqiqliyi tam şəkildə təmin olunur. Rabitələrin yaranma mexanizmi istər donor-akseptor, istərsə də delokallaşmış formada olsun, riyazi yanaşma dəyişməz qalır və nəticə etibarı ilə sabit hesablama qaydaları tətbiq olunur.

Gəlin, bu prinsipləri 2,3-dimetil-2-nitropentan ($C_7H_{15}NO_2$) molekulunun nümunəsində kimyəvi rabitələrin riyazi hesablanması ilə aydınlaşdıraq.

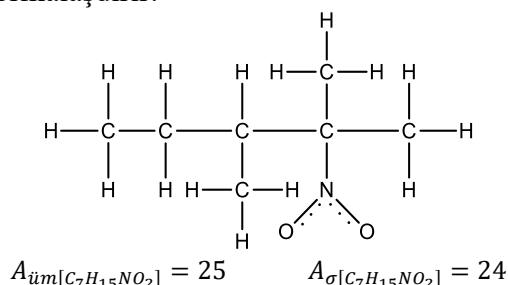
$$A_{\text{üm}}[C_7H_{15}NO_2] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{7 \cdot 4 + 15 \cdot 1 + 1 \cdot 4 + 2 \cdot 1,5}{2} = \frac{28 + 15 + 4 + 3}{2} = 25$$

$$A_{\sigma}[C_7H_{15}NO_2] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 25 + 0 - 1 = 24$$

2,3-dimetil-2-nitropentan molekulu struktur baxımından açıq zəncirli quruluşa malikdir və bu səbəbdən də tsiklik birləşmələrdə müşahidə olunan halqavari (tsiklik) vəziyyət burada

mövcud deyil. Molekulun qrafik formulunun qurulması və onun üzərində aparılan kimyəvi rabitələrin təhlili nəticəsində müəyyən olunur ki, alınan riyazi hesablamalar molekulun real quruluşuna tam uyğun gəlir.

Bu tip nitrobirləşmələr üçün səciyyəvi xüsusiyyətlərdən biri də azot atomunun "–NO₂" funksional qrupunda "+3" oksidləşmə dərəcəsinə malik olmasıdır. Azot burada dörd valentli kimi çıxış edir, yəni dörd kimyəvi rabitədə iştirak edərək molekulun ümumi sabitliyini təmin edir. Bu rabitələrin bəziləri kovalent, bəziləri isə donor-akseptor mexanizmi ilə yaranaraq molekulun elektron strukturunu formalaşdırır.



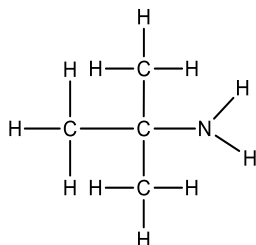
Aminlər quruluşca ammoniyak (NH₃) molekuluna bənzər maddələrdir. Bu birləşmələrdə ammoniyak molekulunun hidrogen atomları tədricən karbonlu radikallarla əvəz olunduqca, aminlər birli, ikili və üçlü tiplərə ayrılır. Bu təsnifat onların kimyəvi quruluşuna və funksional xüsusiyyətlərinə əsaslanır.

Məsələn, birli aminlər sinfinə daxil olan üçlübutilamin molekulunun kimyəvi rabitələrinin sayını hesablayaraq, onun struktur xüsusiyyətlərini daha dərinədən araşdıraraq.

$$A_{\text{üm}}[C_4H_{11}N] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{4 \cdot 4 + 11 \cdot 1 + 1 \cdot 3}{2} = \frac{16 + 11 + 3}{2} = 15$$

Qrafik formul əsasında aparılan hesablamalar nəticəsində, molekulda ümumi və siqma rabitələrinin sayının 15-ə çatdığı

müşahidə edilir. Aminlərdə azot atomunun oksidləşmə dərəcəsi -3-ə, valentliyi III-ə bərabərdir.



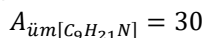
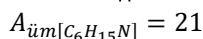
$$A_{\text{üm}}[C_4H_{11}N] = 15$$

İkili aminlər sinfinə aid olan etil-ikilibutilamin ($C_6H_{15}N$) və üçlü aminlər kateqoriyasına daxil olan etil-izopropil-izobutilamin ($C_9H_{21}N$) molekullarında kimyəvi rabitələrin sayının riyazi olaraq müəyyənləşdirilməsi prosesi aşağıdakı şəkildə izah edilmişdir:

$$A_{\text{üm}}[C_6H_{15}N] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 15 \cdot 1 + 1 \cdot 3}{2} = \frac{24 + 15 + 3}{2} = 21$$

$$A_{\text{üm}}[C_9H_{21}N] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{9 \cdot 4 + 21 \cdot 1 + 1 \cdot 3}{2} = \frac{36 + 21 + 3}{2} = 30$$

Əgər molekulların struktur formulları qurulub, onların kimyəvi rabitələrinin sayı müəyyənləşdirilsə, riyazi hesablamalarla əldə olunan ədədi nəticələr dəqiqliklə təsdiqini tapar. Vacib məqam odur ki, burada nəzərə alınan molekulları təşkil edən atomlar yalnız siqma rabitələri ilə bir-birinə bağlanmışdır.



Bəzi amin birləşmələrində müşahidə olunan maraqlı bir xüsusiyyət, ammonyak molekulunun tərkibindəki hidrogen atomlarının tədricən karbohidrogen radikalları ilə əvəz olunmasıdır. Məsələn, etil-ikilibutilamin kimi aminlərdə, ammonyakın iki hidrogeni karbohidrogen qrupları ilə əvəzlənmiş olur. Daha kompleks nümunə kimi etil-izopropil-izobutilamini göstərmək olar — burada isə artıq bütün hidrogenlər karbohidrogen radikalları ilə əvəz olunmuşdur. Bu cür quruluş dəyişiklikləri molekulun kimyəvi və fiziki xassələrinə əhəmiyyətli təsir göstərir.

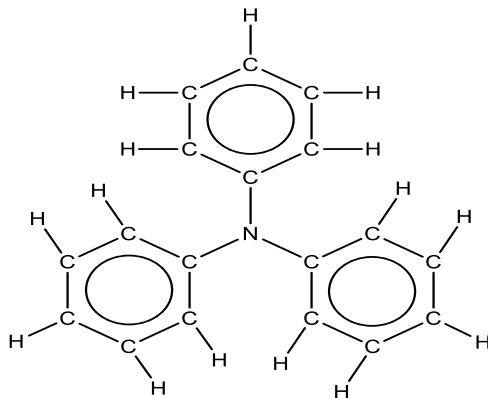
Digər maraqlı nümunə trifenilamin molekuludur ($C_{18}H_{15}N$). Bu birləşmə, strukturunda üç ədəd fenil halqasına malik olmaqla yanaşı, azot atomu ilə əlaqəli mürəkkəb quruluş əmələ gətirir. Trifenilaminin quruluşunda baş verən rabitə tiplərini analiz etdikdə, siqma (σ) rabitələrinin sayını müəyyən etmək vacib olur. Ənənəvi olaraq bu kimi hesablamalar molekulun qrafik quruluşuna əsaslanaraq aparılır. Lakin daha sistemli və ümumi yanaşma kimi riyazi üsullardan istifadə etmək mümkündür. Bu metod, molekulyar

formuladakı atomların və onların valentliklərinin nəzərə alınması ilə, hər hansı qrafik təsvirə ehtiyac duymadan σ -rabitə sayının hesablanmasına şərait yaradır.

Beləliklə, trifenilaminin siqma rabitə sayı onun atom tərkibindən və bu atomların birləşmə qaydalarından çıxış edərək, sadə və məntiqli riyazi üsulla təyin edilə bilər. Bu yanaşma, xüsusilə böyük və mürəkkəb molekulalar üçün zaman və dəqiqlik baxımından mühüm üstünlük yaradır.

$$A_{\sigma[C_{18}H_{15}N]} = N_{üm} + S - 1 = 34 + 3 - 1 = 36$$

Trifenilamin molekulunu araşdırarkən, onun üçlü aminlər sinfinə daxil olduğunu görürük. Molekulun qrafik quruluşu nəzərdən keçirildikdə, hər bir atom arasındakı σ (siqma) rabitələrinin sayını təyin etmək mümkündür. Bu rabitələrin cəmi üzərində aparılan analizlər, riyazi yolla hesablanan nəticələrlə üst-üstə düşür.



$$A_{\sigma[C_{18}H_{15}N]} = 36$$

Amin ($-NH_2$) və karboksil ($-COOH$) funksional qrupları bir molekulun tərkibinə daxil olan birləşmələr aminturşular adlanır. Struktur baxımından həm turşu, həm də əsas xassəsi daşıyan bu maddələr, üzvi amfoter birləşmələr qrupuna daxildir. Bu xüsusiyyət

onlarda həm proton qəbul etmə, həm də proton vermə qabiliyyəti yarađır, bu da onları kimyəvi reaksiyalarda aktivliyini təmin edir.

Aminoturşuların bir çoxu təbiətdə rast gəlinən və bioloji əhəmiyyət daşıyan maddələrdir. Onlardan biri – 6-aminheksan turşusu (molekulyar formulu: $C_6H_{13}O_2N$) – struktur baxımından maraqlı bir nümunədir. Bu molekulda yerləşən atomlar arasındakı kimyəvi rabitələrin sayını təhlil etdikdə, molekulun quruluşunu və xassələrini daha dərindən anlamaq mümkündür.

Bu birləşmədəki ümumi, siqma və pi rabitələrinin sayı kimi göstəricilərin necə hesablandığını nəzərdən keçirək. Bu cür riyazi təhlillər molekulun struktur quruluşu haqqında daha dəqiq təsəvvür yarađır və onun kimyəvi xassələrini izah etməyə kömək edir.

$$A_{üm[C_6H_{13}O_2N]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 13 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 1 \cdot 3}{2} = \frac{24 + 13 + 4 + 3}{2} = 22$$

6-aminheksan turşusu molekulunun quruluşunu və ondakı siqma rabitələrinin sayını hesablamaq üçün əvvəlcə molekulun əsas xüsusiyyətlərinə diqqət yetirmək zəruridir. Bu maddə tsiklik quruluşa malik deyildir və zəncirvari düzülüş göstərir. Onun tərkibindəki hər bir element özünəməxsus valentlik qiymətlərinə malikdir: karbon atomu dörd, hidrogen bir, oksigen iki, azot isə üç valentlidir.

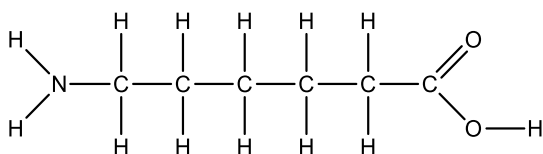
Molekulun strukturuna əsaslanaraq, rabitələrin formalaşmasında iştirak edən atomların sayını və onların bir-birilə necə birləşdiyini nəzərə almaq lazımdır. Siqma bağların hesablanması əsas məsələ iki atom arasında kovalent rabitənin bir siqma yaratmasıdır. Bu baxımdan, molekul daxilindəki atomlar arasındakı birləşmələr təhlil olunmalı, ikiqat və üçqat rabitələrin yalnız birinin siqma olması nəzərə alınmalıdır.

Beləliklə, molekulun xətti quruluşu və atomlararası birləşmələrə uyğun olaraq, 6-aminheksan turşusunun ümumi siqma rabitə sayı riyazi olaraq dəqiq şəkildə müəyyən edilə bilər. Bu yanaşma,

struktur kimyanın əsas qanunlarına əsaslanan sistemli və dəqiq bir metodologiyanı əks etdirir.

$$A_{\sigma[C_6H_{13}O_2N]} = N_{üm} + S - 1 = 22 + 0 - 1 = 21$$

Riyazi hesablamalar nəticəsində müəyyən edilmiş ümumi və siqma rabitələrin saylarının müvafiq olaraq 22 və 21 kimi ədədi göstəricilərlə ifadə olunması, təqdim olunan qrafik formül vasitəsilə vizual olaraq açıq şəkildə izlənilə bilər. Bu nəticə, molekulun daxili quruluşunun və rabitə sisteminin konkret ədədi əsaslarla izahına imkan yaradır. Qrafik formuldakı nümayiş isə bu rabitə növlərinin necə və hansı ardıcılıqla formalaşdığını əyani şəkildə ortaya qoyur, beləliklə nəzəri biliklərlə riyazi nəticələr arasında vəhdət yaradılır.



$$A_{üm[C_6H_{13}O_2N]} = 22$$

$$A_{\sigma[C_6H_{13}N_2O]} = 21$$

$$A_{\pi[C_6H_{13}N_2O]} = 1$$

Histidin aminturşusunun quruluş xüsusiyyətlərindən biri də onun tsiklik halqaya malik olmasıdır. Bu unikal quruluş, molekul daxilindəki kimyəvi rabitələrin sayı və xarakterinin müəyyənləşdirilməsini xüsusi əhəmiyyətə çevirir. Aşağıda, histidin molekulunda mövcud olan kimyəvi rabitələrin sayının dəqiq və sistemli şəkildə riyazi yolla hesablanmasına dair təhlil təqdim olunur.

$$\begin{aligned} A_{üm[C_6H_9O_2N_3]} &= \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 9 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 3 \cdot 3}{2} = \\ &= \frac{24 + 9 + 4 + 9}{2} = 23 \end{aligned}$$

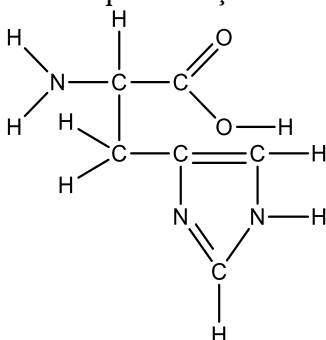
Histidin molekulunun strukturunu təhlil edərkən, onun daxilindəki rabitələrin sayını – xüsusilə də siqma rabitələrinin miqdarını riyazi metodlarla müəyyənləşdirmək vacibdir. Bu zaman bir mü-

hüm məqam xüsusi diqqət tələb edir: histidin molekulunun tərkibində bir ədəd heterotsiklik quruluş mövcuddur. Bu heterotsiklik halqa, molekulun ümumi quruluşunda və rabitə sistemində spesifikasiyadır və riyazi hesablamalarda mütləq nəzərə alınmalıdır.

$$A_{\sigma[C_6H_9O_2N_3]} = N_{üm} + S - 1 = 20 + 1 - 1 = 20$$

$$\begin{aligned} A_{\pi[C_6H_9O_2N_3]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{6(4 - 2) + 9(1 - 2) + 2(2 - 2) + 3(3 - 2) + 2(1 - 1)}{2} = \\ &= \frac{12 - 9 + 0 + 3 + 0}{2} = 3 \end{aligned}$$

Birləşmənin qrafik quruluşuna əsaslanaraq molekuldakı ümumi rabitə sayının 23, siqma rabitələrinin 20, pi rabitələrinin isə 3 olduğunu dəqiqliklə müəyyənəşdirmək mümkündür. Bu cür vizual təhlil, maddənin quruluşundakı rabitə növlərinin və saylarının aydın şəkildə müşahidə olunmasına imkan yaradır və nəzəri hesablamaların doğruluğunu təsdiqləmək üçün etibarlı üsullardan biridir.



$$A_{üm[C_6H_9O_2N_3]} = 23$$

$$A_{\sigma[C_6H_9O_2N_3]} = 20$$

$$A_{\pi[C_6H_9O_2N_3]} = 3$$

Aminturşular, quruluşlarında həm amin qrupu ($-NH_2$), həm də karboksil qrupu ($-COOH$) daşıdıqları üçün kimyəvi cəhətdən olduqca aktiv molekulardır. Bu iki funksional qrupun eyni molekul daxilində yer alması aminturşulara bir sıra digər molekularla və ya öz aralarında müxtəlif sayda bağlar qurmaq imkanı verir. Xüsusilə,

aminturşular birləşərək zəncirvari strukturlar əmələ gətirdikdə, bu proses adətən karboksil qrupunun bir aminturşuda, amin qrupunun isə digər aminturşuda iştirakı ilə baş verir. Bu zaman aradan bir su molekulu ayrılır və yaranan birləşmə peptid rabitəsi adlanır.

Bu cür reaksiyalar nəticəsində əmələ gələn molekulaların sayı və ölçüsü müxtəlif ola bilər. Məsələn, dörd aminturşu birləşdikdə tetrapeptid, altı aminturşudan ibarət struktur isə heksapeptid adlanır. Bu molekulalar zülal biosintezinin ilkin mərhələlərində mühüm rol oynayan birləşmələrdir.

Maraqlı cəhət ondan ibarətdir ki, bu cür peptid zəncirlərindəki kimyəvi rabitələrin ümumi sayını yalnız qrafik quruluşlara baxmadan, sadə riyazi üsullarla da hesablamaq mümkündür. Gəlin, alanin heksapeptidi nümunəsində bu yanaşmanı tətbiq edərək, molekul daxilindəki rabitə sayını riyazi yollarla necə müəyyən etmək olar – birlikdə araşdıraq.

$$A_{\text{üm}[C_{18}H_{32}O_7N_6]} = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{18 \cdot 4 + 32 \cdot 1 + 7 \cdot 2 + 6 \cdot 3}{2} = \frac{72 + 32 + 14 + 18}{2} = 68$$

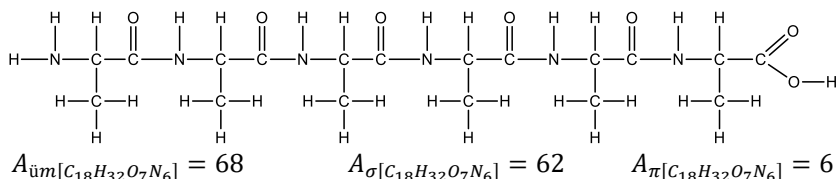
A_σ rabitələrinin sayını müəyyən edərkən nəzərə almaq vacibdir ki, alanin heksapeptidi strukturunda hər hansı bir tsiklik quruluşa rast gəlinmir. Bu səbəbdən də molekul xətti quruluş sərgiləyir və bu, onun kimyəvi rabitələrinin təhlilində mühüm əhəmiyyət kəsb edir.

$$A_{\sigma[C_{18}H_{32}O_7N_6]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 63 + 0 - 1 = 62$$

$$A_{\pi[C_{18}H_{32}O_7N_6]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \frac{18(4 - 2) + 32(1 - 2) + 7(2 - 2) + 6(3 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{36 - 32 + 0 + 6 + 2}{2} = 6$$

Kimyəvi birləşmənin qrafik strukturunu tərtib etdikdə və bu struktur əsasında birləşmədəki rabitə saylarını müəyyənləşdirdikdə,

əldə olunan nəticələrin riyazi hesablamalarla alınan ədədi göstəricilərlə tam uyğunluq təşkil etdiyini müşahidə edirik. Bu uyğunluq kimyəvi quruluşla riyazi yanaşmalar arasında möhkəm bir əlaqənin mövcud olduğunu sübut edir. Başqa sözlə desək, molekulun quruluşuna əsaslanan vizual yanaşma ilə riyazi metodların nəticələri bir-birini tamamlayır və bu da hesablamaların elmi əsaslara söykəndiyini təsdiqləyir.



Primidin əsasları arasında mühüm yer tutan timin molekulu, quruluş baxımından maraqlı və mürəkkəb bir kimyəvi molekuldur. Onun daxilində mövcud olan kimyəvi rabitələrin sayı və növləri, molekulun funksional xüsusiyyətlərini müəyyən edən əsas göstəricilərdən biridir. Bu baxımdan, timin molekulundakı rabitələrin riyazi üsullarla hesablanması, həm nəzəri kimya sahəsində, həm də molekulyar biologiyada praktik əhəmiyyət daşıyır.

Timinin quruluşunda iştirak edən atomlar arasında yaranan rabitələr, onların valentliklərinə əsaslanaraq müəyyən edilir. Bu hesablama prosesində, hər bir atomun birləşdiyi digər atomlarla yaratdığı siqma və pi rabitələrinin sayı ayrılıqda təhlil olunur. Nəticədə, molekulun ümumi rabitə sxemi tam dəqiqliklə ortaya qoyulur.

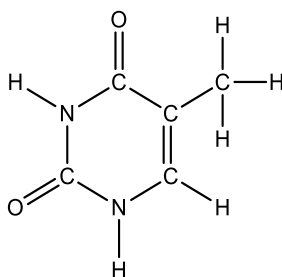
Bu cür riyazi hesablamalar molekulaların struktur xüsusiyyətlərinin öyrənilməsində mühüm vasitə rolunu oynayır və tədqiqatçılara onun bioloji funksiyalarını daha dərinlən anlamağa imkan verir.

$$A_{\text{üm}}[C_5H_6O_2N_2] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{5 \cdot 4 + 6 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 2 \cdot 3}{2} = \frac{20 + 6 + 4 + 6}{2} = 18$$

Molekuladakı siqma (A_{σ}) rabitələrinin sayını hesablayarkən, onun tsiklik quruluşa malik olub-olmaması xüsusi diqqətlə nəzərə alınmalıdır. Belə strukturlar, xüsusilə də tsiklik və heterotsiklik sistemlər, rabitə sayına birbaşa təsir göstərir və bu amil düzgün nəticə əldə etmək baxımından mühüm rol oynayır. Məsələn, timin adlı üzvi birləşmə pirimidin əsasına malikdir və struktur baxımından heterotsiklik birləşmələr qrupuna daxildir. Bu cür birləşmələrin quruluşundakı üzvi halqalar, həm atomlararası rabitələrin sayında, həm də onların yerləşmə qaydasında müəyyən fərqliliklər yaradır. Bu səbəbdən, siqma rabitələrinin hesablanması belə xüsusiyyətlərin nəzərə alınması zəruridir.

$$A_{\sigma[C_5H_6O_2N_2]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 15 + 1 - 1 = 15$$

$$\begin{aligned} A_{\pi[C_5H_6O_2N_2]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{5(4 - 2) + 6(1 - 2) + 2(2 - 2) + 2(3 - 2) + 2(1 - 1)}{2} = \\ &= \frac{10 - 6 + 0 + 2 + 0}{2} = 3 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} A_{\text{üm}[C_5H_6O_2N_2]} &= 18 & A_{\sigma[C_5H_6O_2N_2]} &= 15 \\ A_{\pi[C_5H_6O_2N_2]} &= 3 \end{aligned}$$

Quanin molekulunun kimyəvi quruluşunu təhlil edərkən, bu purin əsasının daxilindəki rabitələrin növ və sayını müəyyənləşdirmək mümkündür. Əvvəlcə qeyd edək ki, quanin iki ayrı aromatik

halqadan – birində beş, digərində altı üzvdən ibarət olan birləşmiş tsiklik sistemdən təşkil olunmuşdur. Bu isə molekulda iki tsiklik quruluşun olduğunu göstərir.

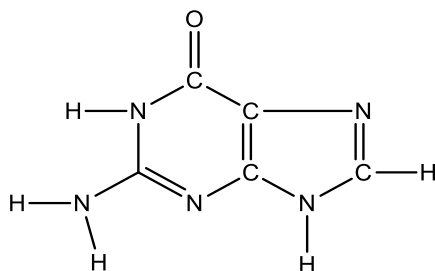
Riyazi hesablama vasitəsilə quanin molekulundakı ümumi rabitələrin sayı, həmçinin siqma və pi rabitələrinin miqdarı müəyyən edilə bilər. Əldə olunan hesablamaların dəqiqliyini yoxlamaq üçün molekulun struktur formulasını çəkmək kifayətdir. Qrafik nümayiş bu riyazi nəticələrin doğruluğunu vizual şəkildə təsdiqləyir və molekulun quruluşunda olan rabitələrin mahiyyətini daha aydın şəkildə ortaya qoyur.

Beləliklə, quanin molekulunun quruluş analizi göstərir ki, onun daxilindəki rabitə növləri molekulun funksional və aromatik xüsusiyyətlərini müəyyən edir. Bu cür yanaşma, üzvi molekulların elektron quruluşunu başa düşməkdə mühüm rol oynayır və kimyəvi biliklərin riyazi əsaslarla necə izah oluna biləcəyini nümayiş etdirir.

$$A_{\text{üm}}[C_5H_5ON_5] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{5 \cdot 4 + 5 \cdot 1 + 1 \cdot 2 + 5 \cdot 3}{2} = \frac{20 + 5 + 2 + 15}{2} = 21$$

$$A_{\sigma}[C_5H_5ON_5] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 16 + 2 - 1 = 17$$

$$A_{\pi}[C_5H_5ON_5] = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \frac{5(4 - 2) + 5(1 - 2) + 1(2 - 2) + 5(3 - 2) + 2(1 - 2)}{2} = \frac{10 - 5 + 0 + 5 - 2}{2} = 4$$



$$A_{\text{üm}}[C_5H_5ON_5] = 21$$

$$A_{\sigma}[C_5H_5ON_5] = 17$$

$$A_{\pi}[C_5H_5ON_5] = 4$$

Canlı orqanizmlərin genetik materialının qurulmasında mühüm rol oynayan ribonukleotidlər və deoksiribonukleotidlər mürəkkəb kimyəvi quruluşa malik molekullardır. Bu birləşmələrin sintezində əsasən üç əsas komponent iştirak edir: şəkər molekulu (riboza və ya dezoksiriboza), azotlu əsaslar (purin və pirimidin qrupları) və fosfor tərkibli ortofosfat turşusu.

Ribonukleotidlər bu komponentlərin birləşməsi nəticəsində yaranır və hər bir birləşmə mərhələsində spesifik kimyəvi rabitələr meydana gəlir. Bu rabitələrin sayı və növü onların quruluşunun riyazi baxımdan təhlil olunmasına imkan verir. Ribonukleotid molekulunun daxilindəki bu rabitələrin miqdarı və onların paylanması strukturun sabitliyinə və funksional xüsusiyyətlərinə təsir göstərir.

Bu tip birləşmələrin quruluşunu dərinlən anlamaq üçün kimyəvi rabitələrin riyazi hesablaması xüsusi əhəmiyyət daşıyır və bu mövzu üzrə aparılan analizlər molekulyar biologiya və biokimya sahəsində mühüm nəticələr verir.

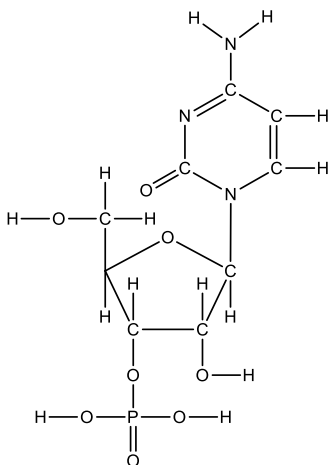
$$\begin{aligned} A_{\text{üm}}[C_9H_{14}O_8N_3P] &= \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \\ &= \frac{9 \cdot 4 + 14 \cdot 1 + 8 \cdot 2 + 3 \cdot 3 + 1 \cdot 5}{2} = \\ &= \frac{36 + 14 + 16 + 9 + 5}{2} = 40 \end{aligned}$$

Ribonukleotidlərin quruluşunu təhlil edərkən diqqət

yetirilməli əsas məqamlardan biri də onların tərkibində iki ayrı-ayrı halqavari (tsiklik) quruluşun mövcud olmasıdır. Bunlardan biri – riboza şəkəri – beş üzvlü tsiklik karbon strukturu ilə seçilir, digəri isə pirimidin əsasları adlanan azotlu birləşmələrdən ibarətdir. Hər iki komponentin tsiklik formaya malik olması, ribonukleotidlərin molekulyar kompleksliyini artırır və bu xüsusiyyət, kimyəvi hesablamalar zamanı nəzərə alınmalı mühüm amillərdən biri sayılır. Başqa sözlə, ribonukleotidin molekulunda iki ayrı tsiklik strukturun mövcudluğu, onun ümumi quruluş ilə xüsusiyyətlərinə birbaşa təsir edir və bu, nəzəri eyni zamanda praktik analizlərdə mütləq şəkildə əhatə olunmalıdır.

$$A_{\sigma[C_9H_{14}O_8N_3P]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 35 + 2 - 1 = 36$$

$$\begin{aligned} A_{\pi[C_9H_{14}O_8N_3P]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{9(4 - 2) + 14(1 - 2) + 8(2 - 2) + 3(3 - 2) + 1(5 - 2) + 2(1 - 2)}{2} = \\ &= \frac{18 - 14 + 0 + 3 + 3 - 2}{2} = 4 \end{aligned}$$



$$A_{\text{üm}}[C_9H_{14}O_8N_3P] = 40$$

$$A_{\sigma}[C_9H_{14}O_8N_3P] = 36$$

$$A_{\pi}[C_9H_{14}O_8N_3P] = 4$$

Kimyəvi birləşmələrin quruluşu və daxilindəki rabitələrin növləri onların xassələrini və funksiyalarını təyin edən əsas faktorlardandır. Dezoksiribonukleotiddə tsiklik quruluşa malik olan vəziyyət daha da əhəmiyyət kəsb edir. Belə ki, tsiklik sistemlər molekul daxilində xüsusi bağlanma formaları yaradır və bu da rabitələrin say və növünə təsir göstərir.

Əgər bir dezoksiribonukleotid üç tsiklik quruluş elementinə malikdirsə, onun daxilindəki siqma və pi (π) rabitələrinin sayı sadəcə atomlararası əlaqələrlə deyil, həm də bu tsikllərin mövcudluğu ilə müəyyən olunur. Bu səbəbdən də yalnız ümumi rabitələrin sayını hesablamaqla kifayətlənmək mümkün deyil - daha dəqiq nəticə əldə etmək üçün tsiklik strukturların təsiri xüsusi nəzərə alınmalıdır.

Bu məqsədlə riyazi modelləşdirməyə əsaslanan bir metod tətbiq edilir. Hər bir tsiklik quruluş, molekulun strukturuna əlavə rabitələr daxil edir və bu rabitələrin təhlili üçün formula xüsusi yanaşma tələb olunur. Hesablamalar zamanı tsikllərin sayını və onların növünü nəzərə alan formullar vasitəsilə həm siqma, həm də pi rabitələrinin sayı dəqiq təyin edilə bilər.

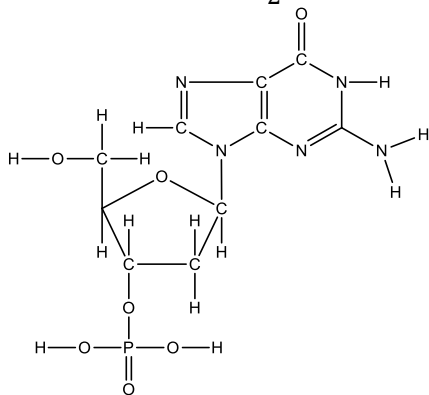
Əldə olunan riyazi nəticələrin doğruluğunu yoxlamaq üçün isə müvafiq birləşmənin struktur (qrafik) formulu çəkilərək onun üzərindəki kimyəvi rabitələr sayılır. Əgər qrafik modeldən çıxarılan rabitə sayları ilə riyazi hesablama nəticələri üst-üstə düşərsə, bu, tətbiq olunan metodun etibarlılığını və elmi əsasını təsdiqləmiş olur.

$$\begin{aligned} A_{\text{üm}[C_{10}H_{14}O_7N_5P]} &= \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} \\ &= \frac{10 \cdot 4 + 14 \cdot 1 + 7 \cdot 2 + 5 \cdot 3 + 1 \cdot 5}{2} = \\ &= \frac{40 + 14 + 14 + 15 + 5}{2} = 44 \end{aligned}$$

$$A_{\sigma[C_{10}H_{14}O_7N_5P]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 37 + 3 - 1 = 39$$

$$A_{\pi[C_{10}H_{14}O_7N_5P]} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} =$$

$$= \frac{10(4-2) + 14(1-2) + 7(2-2) + 5(3-2) + 1(5-2) + 2(1-3)}{2} = \frac{20 - 14 + 0 + 5 + 3 - 4}{2} = 5$$



$$A_{\text{üm}}[\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{O}_7\text{N}_5\text{P}] = 44$$

$$A_{\sigma}[\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{O}_7\text{N}_5\text{P}] = 39$$

$$A_{\pi}[\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{O}_7\text{N}_5\text{P}] = 5$$

İnsan orqanizminin enerji təminatında mühüm rol oynayan karbohidratlar qida maddələri arasında xüsusi yer tutur. Onlar orqanizmə həm asanlıqla çevrilə bilən enerji verir, həm də bir çox həyati proseslərin tənzimlənməsində iştirak edirlər. Kimyəvi quruluşuna görə karbohidratlar üç əsas sinfə ayrılır: monosaxaridlər, disaxaridlər və polisaxaridlər.

Ən sadə şəkər birləşmələri olan monosaxaridlərə qlükoza ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$) və riboza ($\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_5$) daxildir. Bu maddələr tək molekuldan ibarət olub, birbaşa enerji mənbəyi kimi istifadə olunur. İki monosaxaridin birləşməsi nəticəsində yaranan disaxaridlərə isə saxaroza ($\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$) nümunə göstərilə bilər. Daha mürəkkəb quruluşa malik polisaxaridlər, məsələn, nişasta və sellüloza isə ($\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5$)_n ümumi tərkibli zəncirvari molekul kimi enerji ehtiyatı funksiyasını yerinə yetirir.

Karbohidrat molekulalarının təşkil edən atomlar arasında yaranan kimyəvi rabitələrin növünü və sayını molekulyar formulalar əsasında riyazi metodlarla hesablamaq mümkündür. Bu yanaşma karbohidratların parçalanması zamanı ayrılan enerjinin miqdarını

müəyyən etməyə imkan verir. Belə hesablamalardan istifadə etməklə, müxtəlif peşə sahiblərinin gündəlik enerji sərfiyyatına uyğun olaraq hansı növ karbohidratlara və nə qədər miqdarda ehtiyac duyulduğunu dəqiq müəyyən etmək olar.

Bununla yanaşı, bu fəsildə yalnız karbohidratlarla məhdudlaşmayaraq, azotlu üzvi birləşmələr, o cümlədən nitrobirləşmələr, aminlər və aminturşular üzərində də dayanılmışdır. Bu maddələrdəki ümumi, siqma və pi rabitələrin sayları da riyazi düsturlar vasitəsilə hesablanı bilər.

Xüsusi əhəmiyyət daşıyan aminturşuların birləşərək yaratdığı polipeptid makromolekulları da bu baxımdan diqqətə layiqdir. Bu mürəkkəb molekulların strukturunda mövcud olan kimyəvi rabitələrin sayını və növünü müəyyən etmək, molekulyar quruluşun təhlili və funksional imkanlarının öyrənilməsi üçün geniş imkanlar yaradır. Beləliklə, bu metodologiya biokimyəvi analizlərin səmərəliliyini artırmaqla yanaşı, təcrübi və nəzəri tədqiqatlara da töhfə verir.

3.4. Polimerlərdə kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması

Kimya elminin mühüm sahələrindən biri olan makromolekulların yaranması prosesi, monomer adlı kiçik molekulların qarşılıqlı təsiri ilə baş verir. Bu proses iki əsas mexanizm – polimerləşmə və polikondensləşmə reaksiyaları vasitəsilə gerçəkləşir. Nəticədə mürəkkəb quruluşlu, yüksək molekul kütləsinə malik polimerlər meydana gəlir. Bu polimerlər təkcə struktur baxımından deyil, həm də kimyəvi rabitə baxımından olduqca mürəkkəb sistemlərdir.

Polimer maddələrin quruluşunu daha dərindən anlamaq üçün onların tərkibindəki kimyəvi rabitələrin sayını müəyyən etmək xüsusi əhəmiyyət daşıyır. Maraqlıdır ki, belə rabitə saylarının riyazi yolla hesablanması polimerləşmə dərəcəsi ilə sıx bağlıdır. Başqa sözlə, polimer zəncirindəki rabitələrin ümumi sayı onun struktur vahidində - yəni bir təkrarlanan həlqədəki rabitə sayının

polimerləşmə dərəcəsinə vurulması ilə əldə olunur.

Məsələn, təbii kauçukun əsas komponenti olan izopren polimerində bu qaydalar aydın müşahidə edilir. İzoprenin monomerləri müəyyən qayda ilə birləşərək uzun zəncirli makromolekul yaradırlar. Hər bir təkrarlanan vahiddə mövcud olan kovalent rabitələrin sayı əvvəlcədən müəyyən edilə bilər. Bu ədədi göstəriciləri polimerləşmə dərəcəsinə vurmaqla bütöv makromolekul boyunca ümumi kimyəvi rabitələrin sayı asanlıqla tapılır. Bu yanaşma polimerlərin strukturunu riyazi baxımdan modelləşdirmək və onların xüsusiyyətlərini əvvəlcədən təxmin etmək üçün mühüm əsas yaradır.

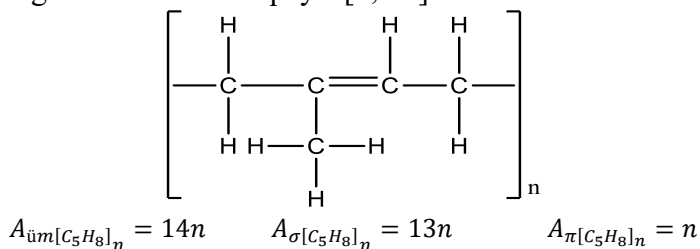
$$A_{\text{üm}[C_5H_8]_n} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{(5 \cdot 4 + 8 \cdot 1)n}{2} = \frac{(20 + 8)n}{2} = \frac{28n}{2} = 14n$$

İzopren kauçukunun molekul quruluşunda təkrarlanan vahidlərin tsiklik (halqavari) quruluşa malik olmaması məlumdur. Lakin makromolekulun ümumi quruluşu nəzərə alındıqda, hər bir struktur vahidin sonunda yerləşən natamam (0,5) rabitələr nəzərə çarpır. Bu natamam rabitələr, polimerin quruluşunda bütöv rabitə kimi nəzərə alınmalı olduğu üçün hesablamalarda bir tam tsiklik elementin mövcudluğu kimi qiymətləndirilməlidir. Əgər molekulun uclarında yerləşən bu 0,5 rabitələr birləşərək tam bir rabitə formalaşdırsa, o zaman makromolekul bağlanaraq qapalı, yəni tsiklik formaya düşər. Bu cür yanaşma izopren kauçukunun quruluşunun daha dəqiq və elmi əsaslarla modelləşdirilməsinə imkan verir.

$$A_{\sigma[C_5H_8]_n} = N_{\text{üm}} + S - 1 = [13 + 1 - 1]_n = 13n$$

$$A_{\pi[C_5H_8]_n} = \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \left[\frac{5(4 - 2) + 8(1 - 2) + 2(1 - 1)}{2} \right]_n = \left(\frac{10 - 8 + 0}{2} \right)_n = \left(\frac{2}{2} \right)_n = n$$

Əldə edilən ədədi nəticələrin dəqiqliyinə əmin olmaq üçün quruluş həlqəsinin qrafik təsvirindən istifadə edilməsi xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Bu yanaşma riyazi hesablamaların vizual əsaslarla üst-üstə düşdüyünü göstərməklə, alınan nəticələrin etibarlılığını bir daha təsdiqləyir [1, 57].



Təbii kauçukun sintetik analoqu kimi tanınan izopren kauçuku, polimerləşmə reaksiyası nəticəsində əldə edilir. Bu proses monomerlərin birbaşa birləşməsi ilə həyata keçirildiyindən, reaksiya zamanı heç bir aralıq məhsul, o cümlədən su və ya digər maddələr əmələ gəlmir. Sadə quruluşlu, birbaşa və sürətli bu kimyəvi çevrilmə, izopren molekullarının ardıcıl şəkildə bir-birinə birləşməsi ilə uzanan makromolekulyar zəncirin yaranması ilə müşahidə olunur.

Bunun əksinə olaraq, poliamid lifləri — gündəlik həyatda “neylon” adı ilə tanınan materiallar tamamilə fərqli bir sintez yolu ilə əldə edilir. Bu maddələrin alınması üçün polikondensləşmə adlanan reaksiya prosesi tətbiq olunur. Bu prosesdə iki və ya daha çox funksional qrupa malik monomerlər qarşılıqlı təsirə girərək uzun zəncirvari molekullar yaradır və eyni zamanda aralıq məhsul — adətən su ayrılır. Bu səbəbdən, poliamid liflərinin sintezi zamanı təkcə əsas məhsul deyil, həm də əlavə məhsulun ayrılması müşahidə olunur ki, bu da reaksiyanın kondensasiya xarakterli olmasını təsdiqləyir.

Poliamidlərin quruluşunda amid rabitələri mühüm rol oynayır. Bu rabitələr molekul zəncirindəki monomerləri bir-birinə bağlayaraq lifin mexaniki möhkəmliyini və istilik dayanıqlığını təmin edir. Belə mürəkkəb quruluşa malik molekullarda kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsullarla müəyyən edilməsi, həm maddənin

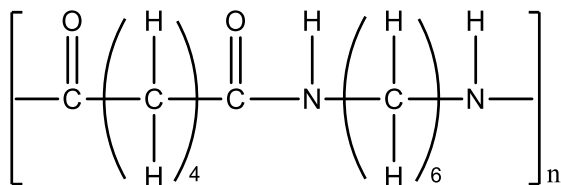
daxili strukturunu anlamaq, həm də onun xassələrini qabaqcadan təxmin etmək baxımından mühüm əhəmiyyət kəsb edir.

$$\begin{aligned} A_{\text{üm}[C_{12}H_{22}O_2N_2]_n} &= \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{\frac{2}{(12 \cdot 4 + 22 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 2 \cdot 3)n}} = \\ &= \frac{2}{(48 + 22 + 4 + 6)n} = \\ &= \frac{2}{2} = 40n \end{aligned}$$

$$A_{\sigma[C_{12}H_{22}O_2N_2]_n} = N_{\text{üm}} + S - 1 = [38 + 1 - 1]_n = 38n$$

$$\begin{aligned} A_{\pi[C_{12}H_{22}O_2N_2]_n} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{\frac{2}{[12(4 - 2) + 22(1 - 2) + 2(2 - 2) + 2(3 - 2) + 2(1 - 1)]_n}} = \\ &= \frac{2}{(24 - 22 + 0 + 2 + 0)_n} = \\ &= \frac{2}{2} = 2n \end{aligned}$$

Əgər amid (naylon) lifinin quruluşundakı halqanın qrafik formulasını təhlil etsək və buradakı ümumi kimyəvi, siqma və pi rabitələrinin sayını müəyyənləşdirsək, bu zaman əldə edilən nəticələrin riyazi yollarla aparılan hesablamalarla tam uyğunluq təşkil etdiyini müşahidə edərik. Bu uyğunluq bir daha göstərir ki, molekulun kimyəvi formuluna əsaslanan riyazi hesablama üsulu həm nəzəri, həm də praktiki baxımdan dəqiq və etibarlı bir yanaşmadır.



$$A_{\text{üm}[C_{12}H_{22}O_2N_2]_n} = 40n \quad A_{\sigma[C_{12}H_{22}O_2N_2]_n} = 38n \quad A_{\pi[C_{12}H_{22}O_2N_2]_n} = 2n$$

Amid (neylon) lifinin struktur formulu bəzi hallarda kiçik fərqliliklərlə təsvir edilir. Belə ki, makromolekulun başlanğıcında

hidrogen atomu, sonunda isə hidroksil qrupu yerləşdirilir. Bu səbəbdən, kimyəvi rabitələrin riyazi hesablanması aparılarkən, makromolekulun hər iki ucundakı bu əlavə atomlar – hidrogen və hidroksil qrupları mütləq nəzərə alınmalıdır.

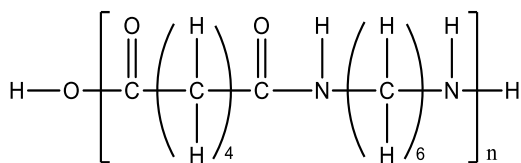
$$\begin{aligned} A_{\text{üm}}[OH(C_{12}H_{22}O_2N_2)_nH] &= \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \\ &= \frac{(12 \cdot 4 + 22 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 2 \cdot 3)_n + 2 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} = \\ &= \frac{(48 + 22 + 4 + 6)n + 4}{2} = \frac{80n + 4}{2} = 40n + 2 \end{aligned}$$

$$A_{\sigma}[HO(C_{12}H_{22}O_2N_2)_nH] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 38n + 3 + 0 - 1 = 38n + 2$$

$$\begin{aligned} A_{\pi}[HO(C_{12}H_{22}O_2N_2)_nH] &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{[12(4 - 2) + 22(1 - 2) + 2(2 - 2) + 2(3 - 2)]_n + 2(1 - 2) + 1(2 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \\ &= \frac{(24 - 22 + 0 + 2)_n - 2 + 0 + 2}{2} = 2n \end{aligned}$$

Əgər birləşmənin struktur formulu qurub kimyəvi rabitələrin sayını müəyyən edərsək, əldə etdiyimiz riyazi nəticələrin nə qədər düzgün olduğunu yoxlamaq mümkün olar. Bilinir ki, polimerləşmə və polikondensasiya reaksiyalarında iştirak edən monomer molekullarda ən azı bir pi rabitəsi və ya müəyyən funksional qruplar mövcud olmalıdır.

Bu prinsip reaksiya mexanizminin əsasını təşkil edir və polimerləşmə proseslərinin gedişatında kimyəvi rabitələrin rolu xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Beləliklə, molekulların quruluşuna dair qrafik analizlərin aparılması və rabitə saylarının hesablanması, reaksiyanın kimyəvi təbiətinin və nəticələrinin dəqiqliklə qiymətləndirilməsinə şərait yaradır.



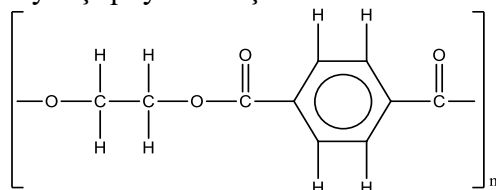
$$A_{\text{üm}}[\text{HO}(\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_2\text{N}_2)_n\text{H}] = 40n + 2 \quad A_{\sigma}[\text{HO}(\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_2\text{N}_2)_n\text{H}] = 38n + 2$$

$$A_{\pi}[\text{HO}(\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_2\text{N}_2)_n\text{H}] = 2n$$

Lavsan makromolekulunda poliefir liflərinə xas olan siqma rabitələrinin sayını riyazi metodlarla müəyyən etmək mövzusu geniş şəkildə araşdırılır. Bu sahədə əsas məqsəd, makromolekulun quruluşundakı siqma rabitələrinin dəqiq hesablanmasıdır ki, bu da materialın fiziki və kimyəvi xüsusiyyətlərinin anlaşılmasına kömək edir. Poliefir liflərinin tərkib hissəsi olan lavsan molekulunun siqma rabitə sayını riyazi üsulla hesablayaq.

$$A_{\sigma}[\text{C}_{10}\text{H}_8\text{O}_4]_n = N_{\text{üm}} + S - 1 = (22 + 2 - 1)n = 23n$$

Qrafik formul əsasında, siqma rabitələrinin sayının $23n$ ilə tam uyğun gəldiyi açıq-aydın müşahidə olunur.



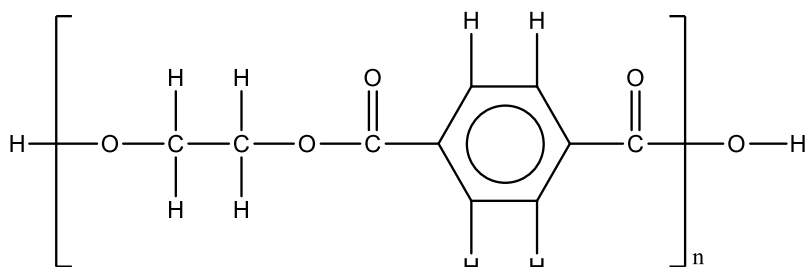
$$A_{\sigma}[\text{C}_{10}\text{H}_8\text{O}_4]_n = 23n$$

Lavsan liflərinin strukturunda bəzi mənbələrdə makromolekulun hər iki ucunda hidrogen atomu ilə yanaşı hidroksil qrupunun da olduğu təsvir edilir. Bu halda, siqma rabitələrinin sayının riyazi hesablanması prosesində həm hidrogen atomları, həm də hidroksil qrupları mütləq nəzərə alınmalıdır.

$$A_{\sigma}[\text{H}(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{O}_4)_n\text{OH}] = N_{\text{üm}} + S - 1 = (22 + 2 - 1)n + 3 + 0 - 1 = 23n + 2$$

Makromolekulun struktur formulasını qurub onun siqma

rabitələrinin sayını müəyyən etdikdə, əldə edilən nəticələr eyni olacaqdır.



$$A_{\sigma[H(C_{10}H_8O_4)_nOH]} = 23n + 2$$

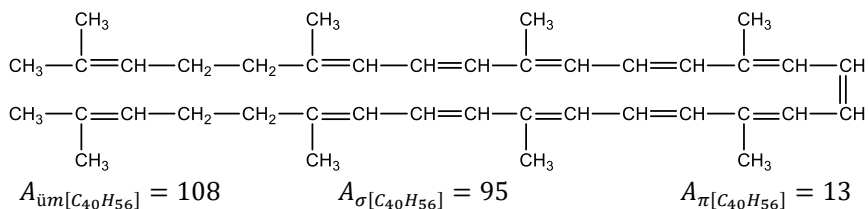
Əsasən mürəkkəb quruluşa malik olan likopin molekulunun ($C_{40}H_{56}$) kimyəvi rabitələrinin sayının qrafik formul vasitəsilə deyil, riyazi yanaşma ilə müəyyənləşdirilməsi olduqca vacibdir. Çünki likopinin qrafik formulunun hazırlanması həm mürəkkəbdir, həm də çox vaxt tələb edir. Bundan əlavə, bu molekulda yüz səksənə yaxın kimyəvi rabitənin hesablanması xüsusi çətinliklər yaradır.

Likopin molekulundakı ümumi, siqma və pi rabitələrinin sayını riyazi metodlar əsasında hesablamaq aşağıdakı kimi mümkündür:

$$A_{\text{üm}[C_{40}H_{56}]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{40 \cdot 4 + 56 \cdot 1}{2} = \frac{160 + 56}{2} = 108$$

$$A_{\sigma[C_{40}H_{56}]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 96 + 0 - 1 = 95$$

$$\begin{aligned} A_{\pi[C_{40}H_{56}]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{40(4 - 2) + 56(1 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{80 - 56 + 2}{2} = 13 \end{aligned}$$

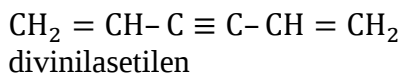
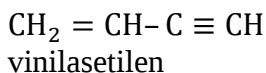


Təbii ki, karbohidrogenlərin tərkibində kimyəvi rabitələrin sayı və növü onların kimyəvi xüsusiyyətlərini müəyyən edir. Belə ki, molekulda tək bir ikiqat rabitə varsa, bu cür karbohidrogenlər alkenlər adlanır və onlar etilen qrupuna daxildir. Əgər molekulda iki ədəd ikiqat rabitə mövcuddursa, bu zaman belə karbohidrogenlər alkadienlər, yəni dien qrupuna aid olurlar.

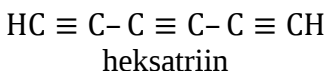
Digər tərəfdən, molekulda üçqat rabitə təkcə bir dəfə əmələ gəlsə, bu növ karbohidrogenlər alkinlər sinfinə daxildir və asetilen sırası karbohidrogenlər kimi tanınırlar.

Bəzi karbohidrogenlər isə həm ikiqat, həm də üçqat rabitələrə malik olur və onlar eninlər sinfi kimi xüsusi kateqoriyaya aid edilir. Bu sinfə daxil olan bir sıra nümunələrdə ikiqat və üçqat rabitələrin sayı fərqli ola bilər. Məsələn, vinilasetilen (C_4H_4) və divinilasetilen (C_6H_6) kimi birləşmələr bu kateqoriyaya aid nümunələrdəndir.

Beləliklə, karbohidrogenlərin növləri və onların molekulyar quruluşundakı rabitə sayının və növünün fərqliliyi onların kimyəvi xassələrinin müxtəlifliyinə səbəb olur.



Poliinlər — molekulunda iki və ya daha çox üçqat kimyəvi rabitələrin mövcud olduğu karbohidrogenlərdir. Məsələn, heksatriin (C_6H_2) bu qrupa aid nümunə kimi göstərilə bilər.



Müxtəlif sayda rabitələrə malik olan milyonlarla kimyəvi birləşmələrdə ümumi ($A_{\text{üm}}$), siqma (A_{σ}) və pi (A_{π})- rabitə saylarının riyazi metodla hesablanması çox əhəmiyyətlidir. Ona görə ki, riyazi üsulla kimyəvi rabitə saylarının hesablanması zamanı molekulların qrafik formullarından istifadə olunmur. Mürəkkəb kimyəvi birləşmələrin qrafik formullarının tərtibi müəyyən çətinliklər törətməklə bərabər xeyli vaxt tələb edir. Buna fulleren birləşmələrini misal göstərmək olar.

Divinilasetilen (C_6H_6) və heksatriin (C_6H_2) karbohidrogen molekullarında kimyəvi rabitə saylarını riyazi formullar vasitəsi ilə hesablanmasını nəzərdən keçirək:

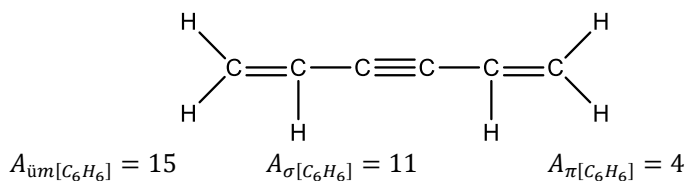
Kimyəvi birləşmələrin milyonlarla variantı mövcuddur və onların müxtəlif sayda kimyəvi rabitələri ola bilər. Bu rabitələrin ümumi sayı ($A_{\text{üm}}$), siqma (A_{σ}) və pi (A_{π}) rabitələrinin riyazi üsullarla hesablanması böyük əhəmiyyət kəsb edir. Belə ki, rabitələrin sayını müəyyən etmək üçün ənənəvi olaraq molekulların qrafik struktur formullarından istifadə olunur. Lakin mürəkkəb quruluşa malik birləşmələrin qrafik təsvirlərinin hazırlanması həm vaxt tələb edir, həm də bəzən praktiki olaraq mümkün olmur. Bu baxımdan, məsələn, fullerenlər kimi mürəkkəb strukturlu birləşmələr xüsusi diqqət tələb edir.

Divinilasetilen (C_6H_6) və heksatriin (C_6H_2) kimi karbohidrogenlər üzərində kimyəvi rabitələrin sayının riyazi düsturlar vasitəsilə hesablanmasını misal gətirək. Beləliklə, əvvəlcə divinilasetilen molekulunda ümumi, siqma və pi rabitələrinin riyazi yanaşma ilə təyini məsələsini nəzərdən keçirək.

$$A_{\text{üm}[C_6H_6]} = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 6 \cdot 1}{2} = \frac{24 + 6}{2} = 15$$

$$A_{\sigma[C_6H_6]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 12 + 0 - 1 = 11$$

$$\begin{aligned} A_{\pi[C_6H_6]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{6(4 - 2) + 6(1 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{12 - 6 + 2}{2} = 4 \end{aligned}$$

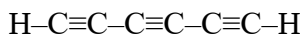


Poliinlər qrupuna aid olan heksatriin molekulunun kimyəvi rabitələrinin riyazi hesablanması aşağıdakı kimi təqdim olunur [1]. Heksatriinin qrafik strukturu tərtib edildikdə və oradakı kimyəvi rabitələrin sayı müəyyənləşdirildikdə, əldə olunan nəticələrin riyazi yolla aparılan hesablamalarla tam uyğun olduğu aşkar edilir. Bu uyğunsuzluq olmaması molekulun strukturunun və kimyəvi rabitələrinin doğru təhlil olunduğunu göstərir.

$$A_{\text{üm}}[C_6H_2] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{6 \cdot 4 + 2 \cdot 1}{2} = \frac{24 + 2}{2} = 13$$

$$A_{\sigma}[C_6H_2] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 8 + 0 - 1 = 7$$

$$\begin{aligned}
 A_{\pi}[C_6H_2] &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\
 &= \frac{6(4 - 2) + 2(1 - 2) + 2(1 - 0)}{2} = \frac{12 - 2 + 2}{2} = 6
 \end{aligned}$$



$$A_{\text{üm}}[C_6H_2] = 13$$

$$A_{\sigma}[C_6H_2] = 7$$

$$A_{\pi}[C_6H_2] = 6$$

Canlı orqanizmlərin həyati funksiyalarının davamlılığını təmin edən qida maddələri əsasən üç əsas qrupda toplanır: karbohidratlar, zülallar və yağlar. Bu maddələrin orqanizmdə parçalanması nəticəsində ayrılan enerji miqdarı, onları təşkil edən atomlar arasındakı kimyəvi rabitələrin sayına və növünə birbaşa bağlıdır.

Hər bir fərdin gündəlik enerji ehtiyacı isə onun məşğul olduğu peşə və fiziki fəaliyyət səviyyəsinə görə dəyişir. Beləliklə,

enerjinin tələbatını dəqiq müəyyən etmək üçün kimyəvi rabitələrin enerjisi və sayı əsasında riyazi hesablamaların aparılması olduqca vacibdir. Bu yanaşma sayəsində qida mənbələrinin növü və qəbul ediləcək miqdarı müəyyən edilə bilər.

Məsələn, Koferment A-nın (HSKoA) kimyəvi formulu $C_{21}H_{36}O_{16}N_7P_3S$ olmaqla, onun tərkibindəki ümumi, siqma və pi rabitələrinin sayını qrafik təsvirə ehtiyac olmadan, riyazi üsullarla hesablamaq mümkündür.

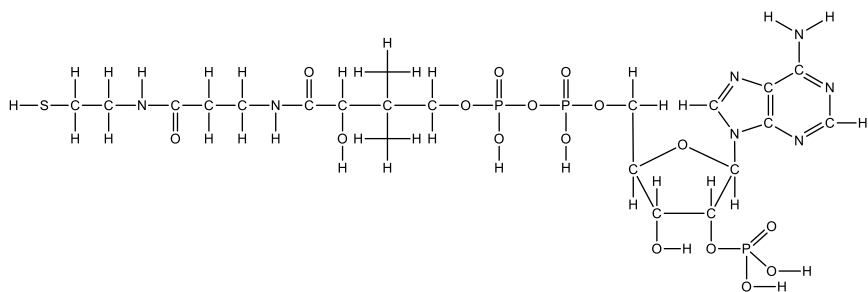
$$\begin{aligned} A_{\text{üm}[C_{21}H_{36}O_{16}N_7P_3S]} &= \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \\ &= \frac{21 \cdot 4 + 36 \cdot 1 + 16 \cdot 2 + 7 \cdot 3 + 3 \cdot 5 + 1 \cdot 2}{2} = \\ &= \frac{84 + 36 + 32 + 21 + 15 + 2}{2} = 95 \end{aligned}$$

Molekul daxilində siqma və pi rabitələrinin sayını müəyyən edərkən, tərkibində üç müxtəlif tsiklik quruluşun mövcudluğu nəzərə alınmalıdır. Bu tsiklik strukturların olması, rabitələrin ümumi sayının hesablanmasına təsir göstərir və doğru nəticələr əldə etmək üçün mütləq nəzərə alınmalıdır.

$$A_{\sigma[C_{21}H_{36}O_{16}N_7P_3S]} = N_{\text{üm}} + S - 1 = 84 + 3 - 1 = 86$$

$$\begin{aligned} A_{\pi[C_{21}H_{36}O_{16}N_7P_3S]} &= \frac{a_1(e_1 - 2) + a_2(e_2 - 2) + \dots + a_n(e_n - 2) + 2(1 - S)}{2} = \\ &= \frac{21(4 - 2) + 36(1 - 2) + 16(2 - 2) + 7(3 - 2) + 3(5 - 2) + 1(2 - 2) + 2(1 - 3)}{2} = \\ &= \frac{42 - 36 + 0 + 7 + 9 + 0 - 4}{2} = 9 \end{aligned}$$

Kimyəvi birləşmənin struktur qrafikini hazırlayıb onun ümumi, siqma və pi rabitələrinin sayını müəyyən etdikdə, əldə edilən riyazi hesablamaların tam dəqiqliklə nəticələndiyinə əmin olmaq mümkündür.



$$A_{\text{üm}}[C_{21}H_{36}O_{16}N_7P_3S] = 95 \quad A_{\sigma}[C_{21}H_{36}O_{16}N_7P_3S] = 86 \quad A_{\pi}[C_{21}H_{36}O_{16}N_7P_3S] = 9$$

Borneol ($C_{10}H_{18}O$) molekulunun qapalı halqalı strukturuna malik olması onun kimyəvi rabitələrinin sayının riyazi yolla hesablanmasını maraqlı və əhəmiyyətli edir. Bu birləşmədə mövcud olan müxtəlif növ rabitələrin təhlili və hesablanması üçün xüsusi riyazi metodlardan istifadə olunur ki, bu da onun molekulyar xüsusiyyətlərinin daha dərinlən anlaşılmasına imkan verir.

$$A_{\text{üm}}[C_{10}H_{18}O] = \frac{a_1e_1 + a_2e_2 + \dots + a_ne_n}{2} = \frac{10 \cdot 4 + 18 \cdot 1 + 1 \cdot 2}{2} = \frac{40 + 18 + 2}{2} = 30$$

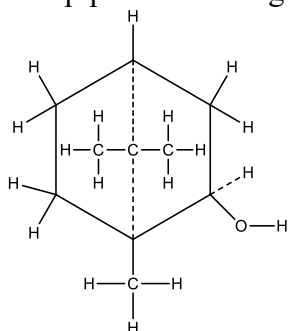
Borneol molekulunda iki fərqli tsiklik strukturun mövcudluğu nəzərə alınaraq, molekulda yerləşən siqma rabitələrinin sayı hesablanacaq. Bu hesablama hər bir tsiklik vəziyyət və ümumi siqma rabitələrinin tərkibi dəqiqliklə təhlil ediləcək.

$$A_{\sigma}[C_{10}H_{18}O] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 29 + 2 - 1 = 30$$

Əsasən bitsiklik quruluşlu borneol ($C_{10}H_{18}O$) kimi tanınan kimyəvi birləşmədə, ümumi rabitə sayı ilə siqma rabitə sayının bərabər olması, molekul daxilində pi rabitələrinin mövcud olmamasını ifadə edir. Bu isə deməkdir ki, birləşməni təşkil edən atomlar yalnız tək (siqma) rabitələrlə birləşir və ikiqat, üçqat rabitələr mövcud deyil.

Əgər bu birləşmənin qrafik formulu çəkilərək üzərində

ümumi və siqma rabitələrinin sayı hesablanarsa, əldə edilən nəticələrin riyazi yolla aparılan hesablamalarla tam uyğun olduğu müşahidə olunur. Bu uyğunluq molekulun kimyəvi strukturu və rabitə xüsusiyyətlərinin dəqiq və sabit olduğunu təsdiqləyir.



$$A_{\text{üm}}[\text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{O}] = A_{\sigma}[\text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{O}] = 30$$

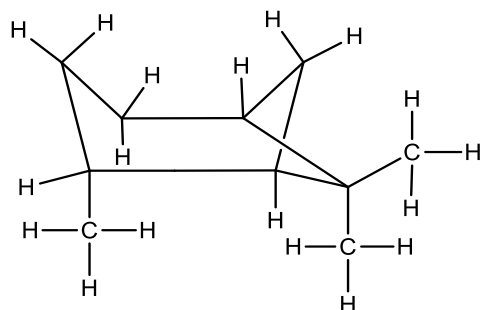
Kimyəvi birləşmələrin molekullarında hibridləşməmiş "p" orbitalının iştirakı ilə pi tipli rabitələrin yaranmaması halında, ümumi kimyəvi rabitə sayı ilə siqma (σ) rabitələrinin sayı arasında kəmiyyətcə heç bir fərq müşahidə olunmur.

Məsələn, Pinan ($\text{C}_{10}\text{H}_{17}$) molekulunun kimyəvi rabitələrinin sayının riyazi üsulla hesablanması nümunəsi aşağıda təqdim edilmişdir:

$$A_{\text{üm}}[\text{C}_{10}\text{H}_{18}] = \frac{a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n}{2} = \frac{10 \cdot 4 + 18 \cdot 1}{2} = \frac{40 + 18}{2} = 29$$

$$A_{\sigma}[\text{C}_{10}\text{H}_{18}] = N_{\text{üm}} + S - 1 = 28 + 2 - 1 = 29$$

Kimyəvi birləşmənin struktur formulundakı rabitələrin sayı müəyyən edildikdə, əldə olunan riyazi nəticə öz düzgünlüyünü praktiki şəkildə təsdiqləyir.



$$A_{\text{üm}}[C_{10}H_{18}] = A_{\sigma}[C_{10}H_{18}] = 29$$

Polimerləşmə və polikondensləşmə reaksiyaları nəticəsində əmələ gələn makromolekullarda kimyəvi rabitələrinin sayının, polimerləşmə dərəcəsi əsasında riyazi üsullarla hesablanması bu fəsilə geniş şəkildə izah edilmişdir. Polimerlərin quruluşunda kimyəvi rabitə sayları polimerləşmə dərəcəsinin artması ilə yüksək rəqəmlərə çatdığından, bu hesablamaların dəqiq və sistemli şəkildə aparılması mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Belə riyazi yanaşmalar polimerlərin xüsusiyyətlərinin müəyyənəşdirilməsində və onların tətbiqi sahələrində önəmli rol oynayır.

3.5. Kimyəvi reaksiyalar zamanı rabitə saylarının dəyişməsinin riyazi metodla hesablanması

Kimyəvi reaksiyalar zamanı əksər hallarda daxil olan və alınan maddə molekullarında olan ümumi rabitə saylarını müqayisə etdikdə fərq müşahidə olunur. İlkin maddələrin molekullarında olan kimyəvi rabitələr qırılır və bunun əvəzində yeni rabitələr yaranır. Bu proses nəticəsində reaksiya məhsulları əmələ gəlir. Reaksiya zamanı baş verən rabitə dəyişiklikləri isə enerjiyə – daha dəqiq desək, istilik effektinə və entalpiya dəyişikliyinə birbaşa təsir göstərir.

Xüsusilə üzvi kimyada doymamış birləşmələrin birləşmə reaksiyaları zamanı maraqlı bir hal müşahidə olunur: pi rabitəsinin qırılması və onun yerinə yeni siqma rabitələrinin yaranması.

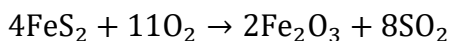
Məsələn, alkenlərin birləşmə reaksiyalarında bir π rabitəsi pozulur və iki yeni σ rabitəsi formalaşır. Bu da molekulun sabitliyini artırmaqla yanaşı, kimyəvi rabitələrin ümumi sayında da artıma səbəb olur. Belə dəyişikliklər yalnız maddənin quruluşuna deyil, həm də reaksiyanın istilik effektinə və entalpiyasına təsir göstərir.

Reaksiyalar zamanı baş verən bu rabitə dəyişikliklərinin təhlili, kimyəvi rabitələrin növü, sayı, valent bucaqları, uzunluqları, enerjiləri və rabitənin doymuşluq dərəcəsi kimi amillərlə sıx bağlıdır. Bu parametrlər termokimyəvi göstəricilərin, o cümlədən reaksiyanın entalpiyasının maddələrin əmələgəlmə və yanma istiliklərinin hesablanmasında əsas rol oynayır.

Kimyəvi reaksiyalarda rabitə saylarındakı dəyişikliklərin **qrafik formullardan istifadə olunmadan** riyazi üsullarla müəyyən olunması mümkün hesab edilir [1, 20; 21]. Bu məqsədlə (1.2.1) düsturundan istifadə olunur [1, 31].

Ənənəvi olaraq bu kimi analizlər molekulaların qrafik formuluna əsasən aparılsa da, müasir yanaşmalar bu dəyişikliklərin riyazi üsullarla dəqiq müəyyən edilməsini mümkün sayır. Belə yanaşmalardan biri də rabitə sayındakı dəyişməni riyazi metod vasitəsilə hesablamaqdır. İstifadə edilən düstur vasitəsilə alınan nəticə müsbət olarsa, bu, məhsul tərəfdə rabitələrin sayında artım olduğunu göstərir. Əgər nəticə mənfidirsə, bu, rabitə sayında azalma deməkdir. Nəticə sıfır olduqda isə reaksiya öncəsi və sonrası rabitələrin ümumi sayı eyni qalır.

Bu prinsipə uyğun olaraq, piritin (FeS_2) yanma reaksiyası nümunəsində kimyəvi rabitə sayındakı dəyişiklikləri qrafik formuldən istifadə etmədən, riyazi metod əsasında qiymətləndirmək mümkündür. Belə riyazi yanaşmaların tətbiqi kimyəvi reaksiyaların enerjisini əvvəlcədən proqnozlaşdırmaq və onların kinetikasi və termodinamikası haqqında daha ətraflı məlumat əldə etmək baxımından əhəmiyyətlidir.



Reaksiya prosesində valentlik ədədləri dəyişən əsas elementlər dəmir və kükürd atomlarıdır. Dəmir atomlarının ümumi sayı “ a_1 ” ilə ifadə olunur. Bu atomların reaksiyanın başlanğıcında, yəni sol tərəfdəki valentlik ədədi “ e_1 ”, reaksiyanın nəticəsində, sağ tərəfdə isə “ e'_1 ” kimi göstərilmişdir. Eyni qaydada, kükürd atomlarının sayı “ a_2 ”, ilə təyin edilir, onların sol tərəfdəki valentlik ədədi “ e_2 ”, sağ tərəfdəki isə “ e'_2 ” olaraq qəbul edilmişdir. Bu dəyişikliklər reaksiyanın kimyəvi tənliyində elementlərin oksidləşmə və ya reduksiya vəziyyətini göstərir.

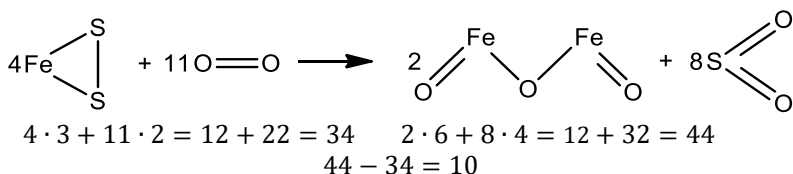
$$\Delta A_{\text{üm}} = \frac{a_1(e'_1 - e_1) + a_2(e'_2 - e_2) + \dots + a_n(e'_n - e_n)}{2} =$$

$$= \frac{4(3 - 2) + 8(4 - 2)}{2} = \frac{4 \cdot 1 + 8 \cdot 2}{2} = \frac{4 + 16}{2} = 10$$

Əgər reaksiya nəticəsində aparılan riyazi hesablamalar müsbət on nəticə verirsə, bu, o deməkdir ki, məhsul tərəfdəki maddələrdəki kimyəvi rabitələrin ümumi sayı ilkin maddələrlə müqayisədə on vahid artmışdır.

Əgər maddələrin struktur və qrafik formulları tərtib olunaraq, reaksiya əvvəlində və sonunda mövcud olan kimyəvi rabitələrin dəqiq sayı müəyyənləşdirilsə, o zaman bu riyazi nəticənin praktik olaraq da dəqiqliyini təsdiqləmək mümkün olar.

Başqa sözlə, tərtib olunan qrafik formullar üzərində hesablamalar aparsaq riyazi metodun dəqiqliyi üzə çıxar və bu da təklif olunan üsulun etibarlı və elmi əsaslı olduğunu nümayiş etdirər.

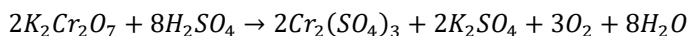


Kalium-dixromat ($K_2Cr_2O_7$) və sulfat turşusu (H_2SO_4) kimi maddələrin qarşılıqlı təsiri zamanı baş verən kimyəvi dəyişikliklər, yalnız reaksiyanın məhsullarına deyil, eyni zamanda molekul daxili rabitələrin sayı və tərkibinə də təsir edir. Bu cür reaksiyalarda

müşahidə olunan əsas məqam, atomlar arasında mövcud olan kimyəvi rabitələrin yenidən təşkili və onların sayında baş verən dəyişikliklərdir.

Sözəgədən birləşmə zamanı - yəni kalium dixromatın güclü oksidləşdirici xassəsi ilə sulfat turşusunun turşuluq xüsusiyyətlərinin birləşdiyi bu prosesdə - elektronların ötürülməsi baş verir ki, bu da molekulların quruluşunda sabit kimyəvi rabitələrin qırılmasına və yenilərinin yaranmasına gətirib çıxarır. Bu dəyişikliklər riyazi metodlarla izlənə və rabitə saylarındakı fərqlər dəqiq şəkildə hesablanı bilər.

Beləliklə, bu tip reaksiyalar təkcə məhsul alınması ilə yekunlaşmır; onlar həm də molekul daxilindəki rabitə sistemində ciddi dəyişikliklərə səbəb olur ki, bu da kimyanın riyazi aspektləri ilə maraqlanan tədqiqatçılar üçün mühüm əhəmiyyət kəsb edir.



Göstərilən kimyəvi reaksiyada yalnız xrom atomlarının valentlik ədədi qiymətləri dəyişdiyi məlumdur. Bu hal elektron mübadiləsi prosesində xromun əsas rol oynadığını göstərir. Reaksiyanın məhsulları tərəfində xrom atomlarının valentliyi III, başlanğıc maddələr tərəfində onların valentliyi VI-ya bərabərdir.

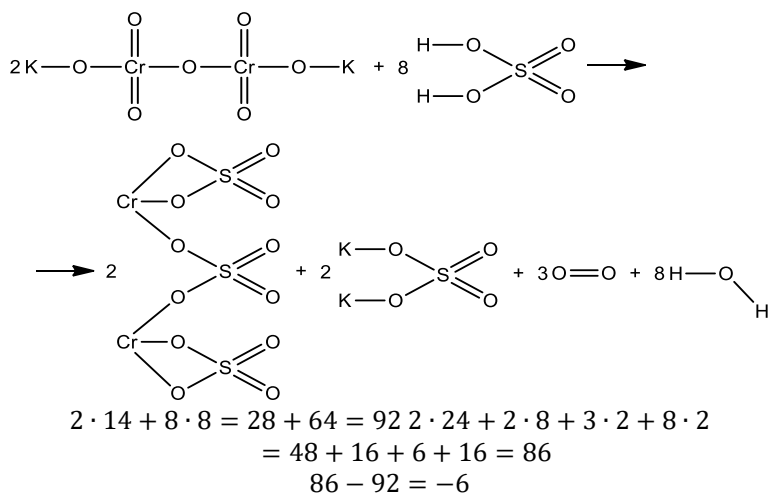
Bu dəyişiklik elektronların verilməsi ilə müşayiət olunur və atomlar arasında kimyəvi rabitələrin ümumi sayına birbaşa təsir edir. Xromun valentlik qiymətində baş verən bu fərq, rabitələrin dəyişmə dinamikasını müəyyən etmək üçün riyazi yanaşmaya əsaslanmağa imkan verir. Bu üsulla rabitə sayındakı dəyişikliklər dəqiqliklə hesablanı bilər.

Beləliklə, reaksiyada yalnız xrom atomları valentliyini dəyişdiyinə görə, kimyəvi rabitələrin ümumi sayındakı fərqi müəyyən etmək üçün əsas diqqət məhz bu elementə yönəldilir.

$$\Delta A_{üm} = \frac{a_1(e'_1 - e_1) + a_2(e'_2 - e_2) + \dots + a_n(e'_n - e_n)}{2} = \frac{4(3 - 6)}{2} = \frac{4 \cdot (-3)}{2} = -6$$

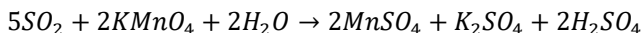
Kimyəvi reaksiyaların mahiyyətini daha dərindən anlamaq üçün, reaksiyanın əvvəlki və sonrakı mərhələlərində mövcud olan rabitə saylarının müqayisəsi mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Əgər aparılan riyazi analiz zamanı nəticə mənfi altı kimi çıxırsa, bu o deməkdir ki, məhsul tərəfdə, başlanğıc maddələrlə müqayisədə, ümumi rabitə sayı altı vahid azalmışdır.

Bu qənaətin etibarlılığını və elmi əsasını yoxlamaq üçün reaksiyada iştirak edən maddələrin qrafik (struktur) formullarını çəkmək və onların daxilindəki kimyəvi rabitələrin sayını dəqiq müəyyənləşdirmək gərəkdir. Belə bir yanaşma yalnız nəzəri deyil, eyni zamanda vizual və praktiki dəlillərlə dəstəklənmiş nəticələr təqdim edir. Bu üsulla əldə olunan rabitə fərqi, riyazi hesablamanın doğruluğunu təsdiqləyir və reaksiyanın mexanizmini daha aydın şəkildə anlamağa imkan verir.



Kimyəvi reaksiyalar zamanı maddələr arasındakı rabitələrdə baş verən dəyişikliklər müəyyən qaydalara əsaslanarsa da, ümumi rabitə sayında balansın qorunduğunu göstərən bir qanunauyğunluqda müşahidə olunur. Belə ki, istər reaksiya zamanı mövcud rabitələr qırılsın, istərsə də yeniləri yaransın, sistemin ümumi rabitə sayı dəyişməz qalır. Bu, riyazi baxımdan reaksiya öncəsi və sonrası

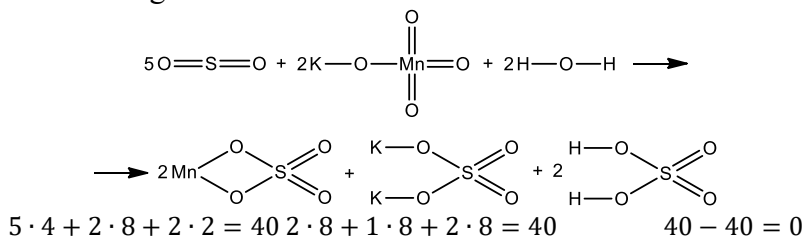
rabitə sayları fərqlərinin sıfıra bərabər olması ilə ifadə olunur. Nəticə etibarilə, reaksiyanın gedişindən asılı olmayaraq, maddələrin daxili strukturunda gedən dəyişikliklər ümumi rabitə balansını pozmur. Bu qanunauyğunluq aşağıda verilmiş reaksiya nümunəsində də aydın şəkildə öz təsdiqini tapır.



Reaksiya prosesində oksidləşmə və reduksiya hadisələrinin baş verdiyi müşahidə olunur. Bu zaman əsas dəyişikliklər kükürd və manqan elementlərinin valentlik qiymətlərində nəzərə çarpır. Belə ki, başlanğıc maddələr arasında kükürd dörd (IV), manqan isə yeddi (VII) valentlik göstərir. Reaksiya başa çatdıqdan sonra isə kükürd altı (VI) manqan atomları isə iki (II) valentli olurlar.

$$\Delta A_{üm} = \frac{a_1(e'_1 - e_1) + a_2(e'_2 - e_2) + \dots + a_n(e'_n - e_n)}{2} = \frac{5(6 - 4) + 2(2 - 7)}{2} = \frac{10 - 10}{2} = 0$$

Kimyəvi reaksiyada iştirak edən maddələrin qrafik formul şəklində təsvir olunması, aparılan riyazi hesablamaların dəqiqliyini və elmi əsasını daha aydın şəkildə üzə çıxarır. Bu vizual yanaşma, reaksiyadakı molekulların quruluşunu və qarşılıqlı təsirlərini daha dərinləndirən anlamağa imkan verir, nəticədə əldə olunan hesablamaların etibarlılığı sübut olunur.



Üzvi birləşmələrin oksidləşmə-reduksiya reaksiyalarında baş verən kimyəvi dəyişikliklərin dərin mahiyyətini anlamaq üçün onların daxilindəki rabitələrin necə dəyişdiyini izah etmək xüsusi

əhəmiyyət daşıyır. Etin molekulu bu baxımdan maraqlı nümunələrdən biridir. Güclü oksidləşdirici kimi tanınan kalium permanqanat məhlulu ilə reaksiyaya girdikdə, molekul daxilindəki kimyəvi rabitə strukturu dəyişir və bu dəyişikliklər riyazi yollarla analiz edilə bilər.

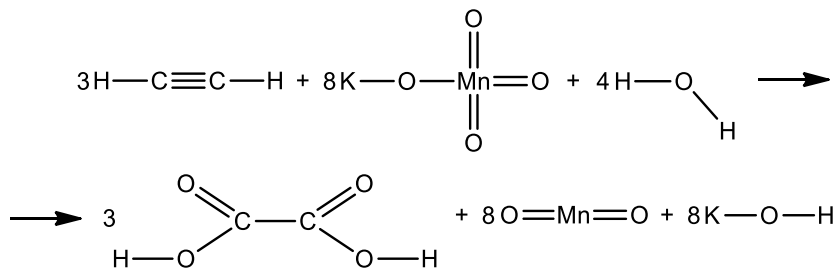
Bu reaksiya prosesində, etin molekulunda karbon atomları arasında mövcud olan üçqat rabitə mərhələli şəkildə qırılır və yeni məhsullar əmələ gəlir. Eyni zamanda, reaksiyada iştirak edən digər komponent - manqan elementi reduksiya olunur. Reaksiyanın balanslaşdırılması zamanı bu rabitə dəyişmələrinin sayca və mahiyyətə necə baş verdiyi xüsusi formul və üsullarla riyazi şəkildə hesablanır.



Burada manqan atomu valentlik ədədi qiymətini dəyişib.

$$\Delta A = \frac{a_1(e'_1 - e_1) + a_2(e'_2 - e_2) + \dots + a_n(e'_n - e_n)}{2} = \frac{8(4 - 7)}{2} = \frac{8(-3)}{2} = -12$$

Reaksiyanın məhsullarında kimyəvi rabitələrin sayı, reaksiyaya daxil olan maddələrlə müqayisədə 12 vahid azaldığını göstərən “-12” qiyməti, hesablamaların nəticəsi kimi ortaya çıxır. Bu, məhsulların strukturunda əvvəlki maddələrə nisbətən kimyəvi rabitələrin sayında əhəmiyyətli dərəcədə azalma olduğunu ifadə edir.

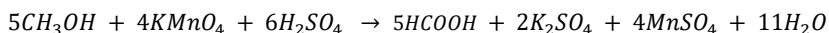


$$3 \cdot 5 + 8 \cdot 8 + 4 \cdot 2 = 15 + 64 + 8 = 87$$

$$3 \cdot 9 + 8 \cdot 4 + 8 \cdot 2 = 27 + 32 + 16 = 75$$

$$75 - 87 = -12$$

Metanolun kalium permanqanat və sulfat turşusu mühitində oksidləşmə prosesi nəticəsində etan turşusunun əmələ gəlməsi reaksiyasının ümumi kimyəvi rabitə saylarının dəyişməsinə riyazi metodlarla hesablayaraq araşdırıq.



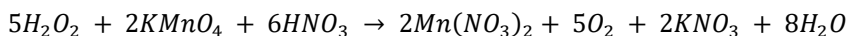
Kimyəvi reaksiya zamanı valentlik ədədi qiymətini dəyişən sadəcə "Mn" atomlarıdır.

$$\Delta A_{\text{üm}} = \frac{a_1(e'_1 - e_1) + a_2(e'_2 - e_2) + \dots + a_n(e'_n - e_n)}{2} = \frac{4(2 - 7)}{2} = \frac{4 \cdot (-5)}{2} = \frac{-20}{2} = -10$$

Riyazi hesablama zamanı "-10" qiymətinin alınması reaksiya məhsullarında rabitə saylarının on vahid azaldığını göstərir.

Oksidləşdirici xüsusiyyətə malik olan hidrogen peroksid, kalium permanqanat və nitrat turşusunun iştirakı ilə gedən reaksiyada rabitə saylarındakı dəyişikliklərin riyazi üsulla hesablanması aşağıda təqdim olunmuşdur. Bu reaksiyada xüsusilə qeyd etmək lazımdır ki, oksidləşmə dərəcəsinin dəyişməsi iki element – manqan və oksigen atomları tərəfindən həyata keçirilir. Hidrogen peroksid molekulundakı oksigen atomlarının oksidləşmə dərəcəsi "-1" olmasına baxmayaraq, onların valentliyi iki ilə bərabərdir.

Kimyəvi reaksiya zamanı valentlik qiymətini dəyişən yalnız manqan (Mn) atomları olduğu üçün riyazi hesablama həmin atomlara şamil olunur.



$$\Delta A_{\text{üm}} = \frac{a_1(e'_1 - e_1) + a_2(e'_2 - e_2) + \dots + a_n(e'_n - e_n)}{2} = \frac{2(2 - 7)}{2} = \frac{2 \cdot (-5)}{2} = \frac{-10}{2} = -5$$

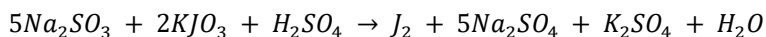
Kimyəvi reaksiyalar zamanı baş verən dəyişikliklərin

dərinliklərinə varmaq üçün yalnız keyfiyyət göstəriciləri ilə kifayətlənmək yetərli deyil. Bu prosesləri say etibarilə dəyərləndirmək, yəni riyazi yanaşma ilə təhlil etmək də son dərəcə vacibdir. Məsələn, reaksiyanın nəticəsində əldə edilən "-5" kimi bir nəticə bizə nə deyir? Bu, reaksiyadan sonra məhsul molekullarında mövcud olan kimyəvi rabitələrin ümumi sayının başlanğıc maddələrdəki ilə müqayisədə beş vahid azaldığını göstərir.

Xüsusilə bəsit maddələrin əmələ gəldiyi reaksiyalarda bu cür riyazi yanaşma daha da əhəmiyyət kəsb edir. Belə hallarda rabitə saylarının dəyişimi xüsusi formul əsasında hesablanır və bu, reaksiyanın mahiyyətini daha aydın görməyə imkan yaradır.

Gəlin bu prinsipi konkret nümunə üzərində nəzərdən keçirək. Kalium-yodat (KIO_3) birləşməsində yod atomu "+5" oksidləşmə dərəcəsinə və (V) valentliyə malikdir. Əgər bu yod atomu reduksiya olunaraq bəsit yod maddəsinə çevrilirsə, burada həm oksidləşmə dərəcəsi dəyişir, həm də molekuldakı rabitə quruluşu əsaslı şəkildə yenilənir.

Bu çevrilmə zamanı kimyəvi rabitələrin ümumi sayında baş verən dəyişiklik, əvvəlcədən müəyyən olunmuş düstur vasitəsilə dəqiq riyazi metodla hesablana bilər. Bu cür yanaşma, təkcə nəzəri biliklərin deyil, həm də praktik təhlil bacarıqlarının inkişafı üçün mühüm alət sayılır.



Reaksiyada oksidləşmə və reduksiya proseslərinə cəlb olunan əsas elementlər kükürd və yoddur. Reaksiyanın başlanğıcında, yəni sol tərəfində, kükürd atomu dörd valentli (IV), yod atomu isə beş valentli (V) birləşmə əmələ gətirir. Reaksiyanın sonunda isə, yəni sağ tərəfində, bu elementlərin valentlikləri dəyişir: kükürd altı valentlikli (VI) birləşmə formasında, yod isə bir valentlikli (I) birləşmədə təmsil olunur. Bu dəyişikliklər həmin elementlərin müvafiq olaraq oksidləşmə və reduksiya proseslərinə məruz qaldığını göstərir.

$$\Delta A_{\text{üm}} = \frac{a_1(e'_1 - e_1) + a_2(e'_2 - e_2) + \dots + a_n(e'_n - e_n)}{2} = \frac{5(6 - 4) + 2(1 - 5)}{2} =$$

$$= \frac{5 \cdot 2 + 2 \cdot (-4)}{2} = \frac{10 - 8}{2} = 1$$

Riyazi hesablamaların nəticələri göstərir ki, reaksiyaya daxil olan maddələrlə müqayisədə, əmələ gələn məhsullarda kimyəvi rabitələrin ümumi sayı bir vahid artıq olur.

Kimyəvi reaksiyalarda siqma rabitələrin say dəyişmələrinin riyazi yolla hesablanması

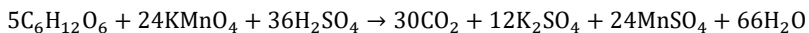
Kimyəvi birləşmələrin struktur xüsusiyyətlərini və onların müxtəlif xassələrini anlamaq üçün siqma rabitələrinin sayını müəyyənləşdirmək mühüm əhəmiyyət daşıyır. Siqma rabitələri molekulların əsas skeletini təşkil edən sabit birləşmələr olduğuna görə, onların dəyişikliyi kimyəvi çevrilmələrin mahiyyətini dərk etmək üçün əsas göstəricilərdən biridir.

Üzvi kimyanın bəzi sahələrində siqma rabitələrinin sayını hesablamaq üçün müəyyənləşdirilmiş xüsusi düsturlar mövcuddur. Lakin bu yanaşma üzvi kimyanın bütün siniflərinə, eləcə də qeyri-üzvi maddələrə şamil oluna bilmir. Belə hallarda tədqiqatçılar adətən molekulların qrafik quruluşlarını çəkərək, bu qrafiklər əsasında rabitə sayını müəyyənləşdirirlər. Lakin bu üsul xüsusilə mürəkkəb birləşmələrdə həm vaxt baxımından sərfəli deyil, həm də əlavə texniki çətinliklər yaradır [1, 16, 17].

Son dövrlərdə aparılan elmi araşdırmalar bu sahədə yeni imkanlar açmışdır. Belə ki, artıq molekulun strukturunu çəkmədən, yalnız riyazi yanaşma ilə siqma rabitələrinin dəyişməsini hesablamaq mümkündür. Bu məqsədlə xüsusi olaraq işlənmiş bir düsturdan (1.2.11) formulundan istifadə olunur [1, 4]. Bu yanaşma, ənənəvi qrafik üsullarla müqayisədə daha sürətli və dəqiq nəticələr əldə etməyə şərait yaradır.

Gəlin bu yeni metodun tətbiqini və praktiki əhəmiyyətini daha dərinləndirən nəzərdən keçirək. Kimyəvi reaksiyalar zamanı baş verən siqma rabitə dəyişikliklərinin riyazi hesablanması yalnız elm üçün deyil, həm də tədris və sənaye məqsədləri üçün böyük

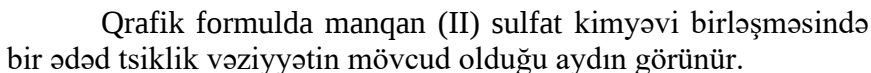
potensiala malikdir. Bu yanaşma sayəsində kimyəvi proseslərə dair daha sistemli və analitik qiymətləndirmələr aparmaq mümkündür.



Verilmiş kimyəvi tənliyi təhlil etdikdə diqqəti cəlb edən ilk məqam sol tərəfdə yer alan maddələrin ümumi əmsallarının cəminin 65, sağ tərəfdəki məhsulların isə 132 olmasıdır. Bu, reaksiyanın baş verməsi zamanı maddə və məhsul tərəfləri arasında ciddi say fərqinin mövcud olduğunu göstərir. Eyni zamanda, reaksiya iştirakçısı olan molekularda heç bir tsiklik quruluşa rast gəlinmir. Halbuki reaksiya nəticəsində əmələ gələn birləşmələrdə bu cür strukturların sayı 24-ə çatır. Bu dəyişiklik prosesin yalnız kvant səviyyəsində deyil, həm də molekulaların fəza quruluşu baxımından köklü şəkildə yenidən təşkil olunduğunu göstərir.

$$\Delta A_\sigma = n + S' - (n' + S) = 65 + 24 - (132 + 0) = 89 - 132 = -43$$

Əldə olunan hesablamaların nəticəsi olan mənfi 43 rəqəmi, reaksiyanın məhsul hissəsində siqma rabitələrin sayının başlanğıc maddələrə nisbətən 43 vahid azalmasını göstərir. Bu cür nəticənin doğruluğuna əmin olmaq üçün reaksiyada iştirak edən maddələrin molekulyar quruluşlarını qrafik (struktur) formada təsvir etmək, yəni onların sxematik formulalarını çəkmək faydalı olar. Belə təsvirlər molekul daxili rabitələrin sayını və növünü aydın şəkildə göstərməklə, aparılan riyazi analizlə praktiki nəticələr arasında uyğunluğu təsdiqləməyə imkan verir. Bu yanaşma təkcə hesablamaların düzgünlüyünü yoxlamağa deyil, həm də molekulaların fəza quruluşlarını daha dərinlən anlamağa şərait yaradır.



Qrafik formulu təhlil edərkən məlum olur ki, manqan(II) sulfat birləşməsində bir tsiklik struktur açıq şəkildə müşahidə olunur. Bu hal, molekulun quruluşunda müəyyən qapanmış rabitələr sisteminin mövcudluğunu göstərir.

Bütün bu məlumatlar birgə təhlil olunmaqla, reaksiyada iştirak edən maddələrin daxili quruluş xüsusiyyətləri əsasında dəqiq kəmiyyət hesablamaları aparmağa zəmin yaradır. Beləliklə, maddələrin molekulyar quruluşları arasındakı fərqlər, onların kimyəvi xüsusiyyətlərinə də birbaşa təsir göstərir.

Reaksiyanın məhsulları tərkibindəki birləşmələrdə siqma rabitələrinin ümumi sayını təyin edərkən, hər bir molekulun daxili quruluşuna və atomlar arasındakı birləşmələrin xarakterinə əsaslanmaq vacibdir. Bu məqsədlə, dörd əsas maddə – karbon dioksid (CO_2), kalium sulfat (K_2SO_4), manqan(II) sulfat (MnSO_4) və su (H_2O) molekulları üzərində araşdırma aparılmışdır.

Karbon dioksid molekulunda karbon və oksigen atomları arasında 2 ədəd ikiqat rabitə mövcuddur. Hər qoşa rabitə bir siqma və bir pi rabitəsindən ibarət olduğuna görə, bu molekul ümumilikdə iki siqma rabitəsi ilə xarakterizə olunur.

Kalium-sulfat duzunda isə kalium ionları ilə sulfat qrupu arasında ion xarakterli, lakin kristal quruluş baxımından müəyyən-ləşdirilə bilən altı əsas siqma rabitəsi mövcuddur.

Manqan(II) sulfat birləşməsində də, sulfat anionu ilə manqan kationunun qarşılıqlı təsiri nəticəsində, strukturda altı siqma rabitəsinin formalaşdığı qəbul edilir.

Nəhayət, su molekulu, iki hidrogen atomunun oksigen atomu ilə iki kovalent siqma rabitə əmələ gətirməsi hesablamaya daxil edilir.

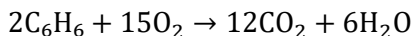
Yuxarıda qeyd olunanları nəzərə alaraq hesablama aparaq:

$$30 \cdot 2 + 12 \cdot 6 + 24 \cdot 6 + 66 \cdot 2 = 60 + 72 + 144 + 132 = 408$$

$$408 - 451 = -43$$

Aromatik struktura malik üzvi birləşmələr arasında xüsusilə benzol və onun kondensləşmiş törəmələri, məsələn, antrasen, diqqət mərkəzində duran mürəkkəb sistemlərdir. Bu molekulların tərkibindəki siqma (σ) rabitələrinin miqdarı və onların müxtəlif reaksiyalar, xüsusilə də yanma prosesi zamanı necə dəyişdiyi, həm nəzəri, həm də tətbiqi kimya üçün xüsusi maraq doğurur.

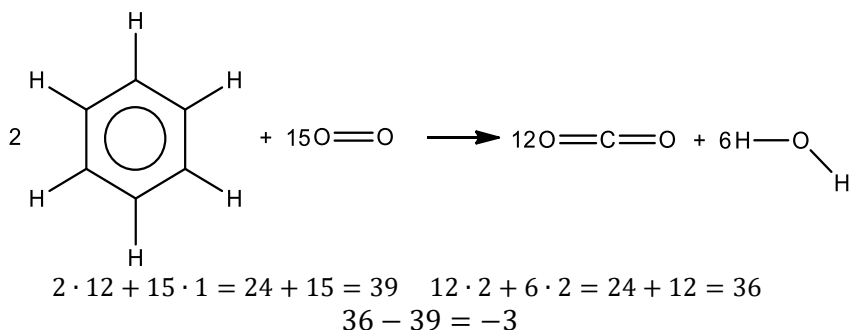
Bu bölmədə aromatik təbiətli C_6H_6 və $C_{14}H_{10}$ molekullarının tam yanma reaksiyaları əsasında onların daxili siqma rabitə strukturlarında baş verən dəyişikliklər riyazi baxımdan təhlil edilir. Hər iki maddənin molekulyar quruluşuna uyğun olaraq, reaksiyadan əvvəlki və sonrakı mərhələlərdə siqma rabitələrinin sayında yaranan fərqlər riyazi üsulla hesablanmışdır.



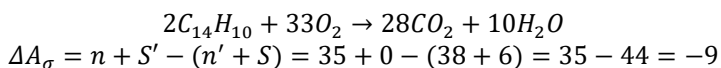
$$\Delta A_{\sigma} = n + S' - (n' + S) = 17 + 0 - (18 + 2) = 17 - 20 = -3$$

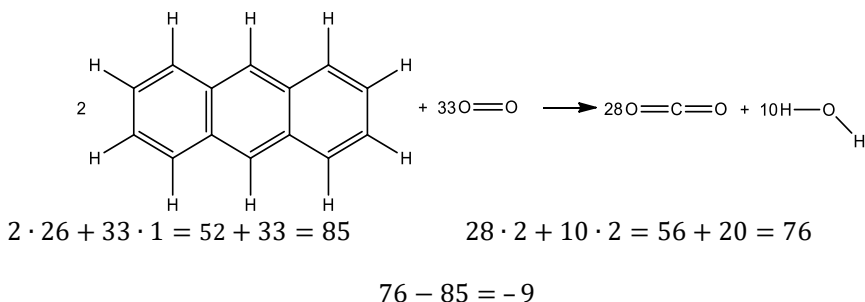
Əgər riyazi hesablamanın nəticəsi mənfi üçə bərabədirsə, bu, reaksiyanın məhsulları olan molekullarda siqma rabitələrinin ümumi sayının başlanğıc maddələrə nisbətən üç vahid azaldığını göstərir.

Molekulların struktur formullarını təsvir etməklə və onların hər birindəki siqma rabitələrinin sayını ayrıca hesablamaqla bu azalma təsdiqlənə bilər. Bu üsul, həm nəzəri, həm də praktik baxımdan nəticənin doğruluğunu dəqiqləşdirmək üçün etibarlı vasitədir.



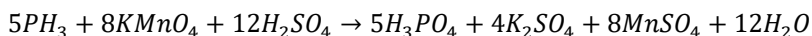
Antrasen ($C_{14}H_{10}$) birləşməsi struktur baxımından üç ədədi aromatik halqanın bir-birinə sıx birləşməsi ilə formalaşan mürəkkəb bir tsiklik quruluşa malikdir. Bu kondensləşmiş halqalar, ardıcıl olaraq birləşmiş üç benzol nüvəsi şəklində yerləşərək antrasenin aromatik xüsusiyyətlərini müəyyənləşdirir. Beləliklə, bu molekulun tsiklik sistemi üç əsas aromatik halqadan ibarətdir.





Göründüyü kimi, riyazi hesablamadan alınan nəticə qrafik formulda öz əksini tapmışdır. Üzvi birləşmə molekullarında olduğu kimi, qeyri-üzvi birləşmələrin reaksiyaları zamanı σ -rabitə sayları dəyişməsinin riyazi hesablanması eyni formulu tətbiq etməklə aparılır.

Əldə edilən riyazi nəticə, təqdim olunan qrafik formulda aydın şəkildə ifadə olunmuşdur. Üzvi birləşmələrin molekulyar quruluşlarında rast gəlinən dəyişikliklərə bənzər şəkildə, qeyri-üzvi maddələrin reaksiyaları zamanı da siqma rabitələrinin sayındakı dəyişikliklər eyni riyazi prinsip əsasında hesablanır. Bu yanaşma, həm üzvi, həm də qeyri-üzvi kimyanın ümumi qanunauyğunluqlarını birləşdirərək, molekulyar səviyyədə baş verən çevrilmələrin daha dəqiq izahına imkan yaradır.

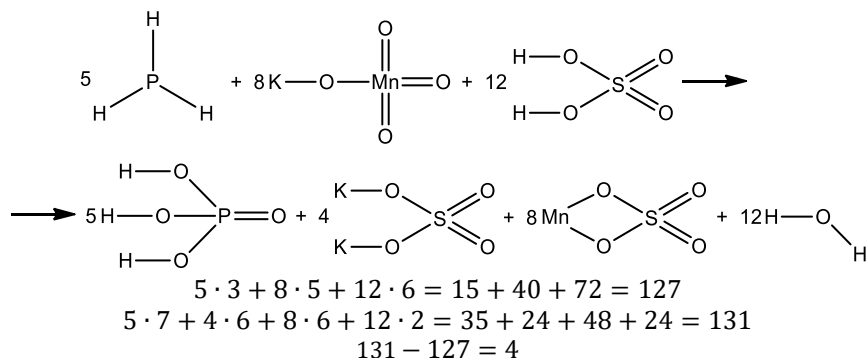


$$\Delta A_{\sigma} = n + S' - (n' + S) = 25 + 8 - (29 + 0) = 33 - 29 = 4$$

Riyazi hesablamalar göstərir ki, alınan nəticənin +4 olması, reaksiya nəticəsində əmələ gələn maddələrdəki siqma rabitələrinin ümumi sayının ilkin maddələrlə müqayisədə dörd ədəd artdığını nümayiş etdirir.

Əgər reaksiyada iştirak edən bütün maddələrin struktur (qrafik) formulaları tərtib edilib, onların siqma rabitələrinin sayı ayrıca hesablanarsa, bu zaman riyazi yolla əldə edilmiş nəticənin qrafik üsulla aparılan analizlə tam uyğunluq təşkil etdiyi aydın görünür.

Bu yanaşma, reaksiyanın əvvəlində və sonunda mövcud olan kimyəvi rabitələrin sayındakı fərqi sadəcə nəzəri deyil, eyni zamanda struktur olaraq təsdiqlənə bilən bir göstərici olduğunu sübut edir.

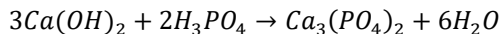


Kimyəvi reaksiyaların mahiyyətini daha dərindən dərk etmək üçün təkcə maddələrin birləşməsi və ya parçalanması ilə kifayətlənmək olmaz. Atomlar arasında yaranan və qırılan rabitələrin xüsusilə də siqma rabitələrinin sayındakı dəyişikliklərin təhlili, reaksiyanın enerjisi və mexanizmi haqqında əhəmiyyətli məlumat verir.

Bu baxımdan, kalsium hidroksid $[\text{Ca}(\text{OH})_2]$ və ortofosfat turşusu $[\text{H}_3\text{PO}_4]$ arasında baş verən neytrallaşma reaksiyası maraqlı bir nümunədir. Burada əsas və turşu bir-biri ilə qarşılıqlı təsirə girərək duz və su əmələ gətirir. Bu reaksiya nəticəsində yalnız maddələr deyil, həm də onların daxili kimyəvi strukturları dəyişir - konkret olaraq, siqma rabitələrinin sayı da bu dəyişikliklərə məruz qalır.

Məqsədimiz, bu reaksiyanın əvvəlki və sonrakı mərhələlərindəki siqma rabitələrinin sayını müqayisə etməklə, ümumi dəyişməni riyazi olaraq hesablamaq və onun mahiyyətini izah etməkdir. Belə bir təhlil, kimyəvi reaksiyaların kəmiyyət göstəriciləri üzərindən keyfiyyət analizini aparmaq imkanı verir və tələbələrə, tədqiqatçılara reaksiyanın struktur aspektlərini daha

aydın görmək imkanı yaradır.

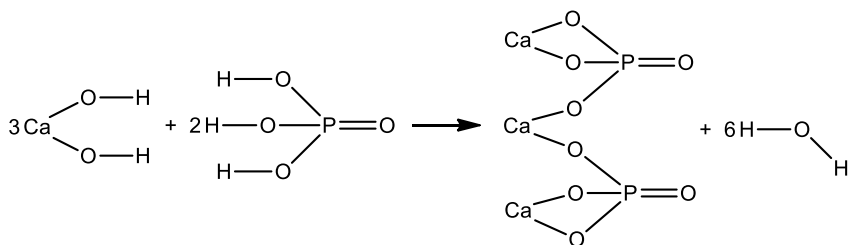


$$\Delta A_{\sigma} = n + S' - (n' + S) = 5 + 2 - (7 + 0) = 7 - 7 = 0$$

Əldə edilən riyazi hesablamaların nəticəsinin sıfırla nəticələnməsi, reaksiyada iştirak edən və nəticədə əmələ gələn kimyəvi birləşmələrdə siqma rabitələrinin ümumi sayının dəyişmədiyini göstərir. Bu hal kimyəvi reaksiyalarda atomlar arasında baş verən əlaqələrin dərin mexanizmini əks etdirir.

Kimyəvi proseslər zamanı ilkin maddələrdəki atomlar arasında mövcud olan rabitələr qırılır, yeni məhsullarda isə fərqli şəkildə yeni rabitələr yaranır. Lakin bu dəyişikliklərə baxmayaraq, reaksiyanın əvvəlində və sonunda siqma rabitələrinin ümumi sayı sabit qalır. Bu sabitlik, reaksiyanın hər iki tərəfindəki molekulyar quruluşların müqayisəsi əsasında aydın şəkildə müşahidə oluna bilər.

Əgər reaksiyaya daxil olan və ondan alınan birləşmələrin qrafik struktur formulları tərtib olunarsa, yaranan və qırılan rabitələrin sayının uyğunluğu daha aydın görünür. Beləliklə, riyazi baxımdan sıfıra bərabər nəticə, reaksiyanın məhsulları ilə daxil olan maddə molekullarında ümumi siqma rabitə saylarının eyni olduğunu göstərir.



Reaksiyaya girən kimyəvi maddələrin struktur quruluşundan siqma rabitələrin sayını tapaq:

$$3 \cdot 4 + 2 \cdot 7 = 12 + 14 = 26$$

Reaksiyadan alınan kimyəvi maddələrdə siqma rabitələrin sayını struktur quruluş üzrə təyin etsək, eyni nəticəyə gəlmiş olarıq:

$$14 + 6 \cdot 2 = 14 + 12 = 26$$
$$26 - 26 = 0$$

Ədədi baxımdan siqma rabitələrinin dəyişməzliyi, qrafik formulalarla aparılan hesablamalarda da özünü doğruldur. Müşahidə olunan nümunələr göstərir ki, istər üzvi, istərsə də qeyri-üzvi maddələrin iştirak etdiyi reaksiyalarda, birləşmələrin qrafik strukturunu çəkmədən həm ümumi rabitə sayını, həm də siqma rabitələrinin miqdarını dəqiqliklə hesablamaq mümkündür.

Bu yanaşmanın ən mühüm üstünlüklərindən biri onun praktikliyidir: qrafik təsvirlərə ehtiyac duymadan həyata keçirilən riyazi hesablamalar vaxt itkisini minimuma endirir və daha etibarlı nəticələr əldə etməyə şərait yaradır. Beləliklə, müasir kimya elminin təhlilində riyazi üsullarla rabitə saylarının təyin olunması həm elmi səmərəliliyi artırır, həm də tətbiqi baxımdan əlverişli metod kimi dəyərləndirilə bilər.

Qeyd etmək lazımdır ki, oksidləşmə-reduksiya reaksiyalarında rabitə və əmsalların hesablanması üçün riyazi yanaşmanın tətbiqi bir çox tədqiqatlarda uğurla sınaqdan keçirilmişdir. Belə yanaşmalardan biri “Аспирант и соискатель” [27] jurnalında dərc olunmuş məqalədə təklif olunur və bu metodun tətbiqi konkret reaksiyalar üzərində ətraflı şəkildə göstərilmişdir [27].

Termokimyəvi reaksiyaların mahiyyətini dərk etmək üçün onların energetik göstəricilərinə – istilik effekti və entalpiya dəyişmələrinə nəzər salmaq vacibdir. Bu kəmiyyətlər heç də təsadüfi deyil və birbaşa olaraq reaksiyada iştirak edən maddələrin molekulyar quruluşu, konkret olaraq, atomları birləşdirən kimyəvi rabitələrin tipi və miqdarı ilə sıx bağlıdır.

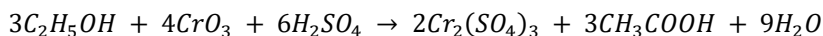
Kimyəvi reaksiyalar zamanı köhnə rabitələr qırılır, yeniləri yaranır. Elə bu dəyişiklik də sistemin daxili enerjisində – yəni entalpiyada fərq yaradır. Əgər bu proseslərdə rabitələrin ümumi sayı, eləcə də onların siqma və pi tipli olması nəzərə alınarsa,

reaksiyanın istilik effekti haqqında daha dəqiq və əsaslandırılmış nəticələrə gəlmək mümkündür. Rabitələrin bu şəkildə riyazi təhlili tədris prosesinə sistematik yanaşmanı təmin edər şagird və tələbələrin kimyəvi reaksiyaların mahiyyətini daha dərindən anlamasına imkan yaradar.

Məsələn, etanolun xrom (VI) oksid və sulfat turşusunun iştirakı ilə oksidləşməsi reaksiyasını götürək. Bu çevrilmədə karbon atomlarının oksidləşmə dərəcələri "-3" və "-1" olaraq qalır. Lakin bu, onların valentlikləri dəyişmir – hər iki karbon atomu dörd valentlidir və etanol molekulunda heç bir tsiklik quruluş mövcud deyil.

Digər tərəfdən, reaksiyanın məhsullarından biri olan xrom(III) sulfat birləşməsində artıq tsiklik strukturlar əmələ gəlir. Konkret desək, burada dörd tsiklik vəziyyət müşahidə olunur. Bu cür struktur dəyişikliklər yalnız tərkibin deyil, eyni zamanda molekul daxilindəki rabitələrin də fərqli paylanmasına səbəb olur. Nəticə etibarilə, rabitə növlərinin (σ və π rabitələrinin) miqdarı dəyişir və bu da istilik effektinin ədədi qiymətinin hesablanmasında mühüm rol oynayır.

Beləliklə, kimyəvi reaksiyaların energetikasını öyrənərkən rabitələrin riyazi analizinə əsaslanmaq, həm nəzəri anlayışların möhkəmlənməsinə, həm də şagird və tələbələrin praktik hesablamalar aparmaq bacarığının inkişafına kömək edə bilər. Bu metodika “Kimyəvi reaksiyaların istilik effekti” mövzusunun tədrisində daha yüksək nəticələr əldə olunmasına zəmin yaradır.



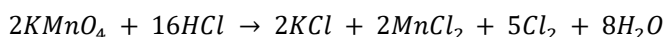
Tənliyin sol tərəfindəki maddələrin əmsallarının cəmi 13-ə, sağ tərəfində isə 14-ə bərabərdir.

$$\Delta A_{\sigma} = n + S' - (n' + S) = 13 + 4 - (14 + 0) = 17 - 14 = 3$$

Əvvəlcə reaksiyada iştirak edən maddələrin struktur formullarını hazırlayıb, onların rabitə saylarının dəyişməsinə

hesabladıqda, məhsullarda siqma rabitə sayının üç vahid artdığını müşahidə edirik. Metal atomunun +7 oksidləşmə dərəcəsinə malik olduğu kalium-permanqanatın (KMnO_4) normal duzunun iştirakı ilə xlorid turşusunun (HCl) oksidləşmə reaksiyasını nümunə götürərək, siqma rabitə saylarındakı dəyişməni müvafiq riyazi formül vasitəsilə təhlil edək.

Bu reaksiyada maddələrin qrafik formulaları əsasında rabitə sayı dəyişiklikləri hesablanır və nəticədə məhsullarda üç vahid siqma rabitə artımı əldə olunur. Oksidləşmə-reduksiya prosesində bu cür rabitə saylarının hesablanması oksidləşmə dərəcələrinin dəyişməsi ilə bağlıdır və reaksiyanın balanslaşdırılması üçün əhəmiyyətlidir. İndi isə bu prosesi düsturla ifadə edərək riyazi əsaslandırmasını təqdim edəcəyik.



Reaksiyada iştirak edən maddələrin molekullarında tsiklik quruluş müşahidə olunmur. Bundan əlavə, reaksiyanın sol tərəfindəki əmsalların cəmi 18-ə, sağ tərəfdə isə bu cəm 17-ə bərabərdir.

$$4A_\sigma = n + S' - (n' + S) = 18 + 0 - (17 + 0) = 18 - 17 = 1$$

Qrafik formullar vasitəsilə siqma-rabitələrin sayını müəyyən etdikdə, reaksiyanın məhsullarında bu rabitələrin sayının bir vahid artdığı müşahidə olunur. Kimyəvi reaksiyaya daxil olan və yaranan maddələrin molekullarında rabitə saylarının dəyişməsi isə fəsildə ətraflı və riyazi metodlarla izah edilmişdir.

İSTİFADƏ EDİLMİŞ ƏDƏBİYYAT SİYAHISI

1. Abbasov Z. S. Ümumtəhsil məktəblərində kimyanın təd-risi zamanı kimyəvi rabitə saylarının riyazi hesablanması tətbiqi yolları. Fəlsəfə doktoru Dissertasiya işi, Bakı: -2022. Azərbaycan Respublikası Ali Attestasiya Komissiyası
2. Abbasov Z. S. Ümumtəhsil məktəblərində kimyanın təd-risi zamanı kimyəvi rabitə saylarının riyazi hesablanması tətbiqi yolları. Fəlsəfə doktoru dissertasiya işin avtoreferatı. Bakı: -2022. Azərbaycan Respublikası Ali Attestasiya Komissiyası.
3. Abbasov M.M., Abbasov, Z.S., Məmmədova D.S. və b.- Kimyəvi birləşmələrdə $\pi(\pi)$ - rabitə saylarının riyazi ifadəsi -Bakı: Kimya məktəbdə, – 2015. № 1, – s. 29-34.
4. Abbasov, M.M. Abbasov, Z.S. Tomayeva, K.Q. -Kimyə-vi reaksiyalar zamanı $\sigma(\text{siqma})$ - rabitə sayları dəyişməsinin riyazi ifadəsi- Bakı: Kimya məktəbdə, – 2015. № 2-3, – s. 65-69.
5. M. Abbasov, V. Abbasov, N. Abışov və b. -Kimya. Ümumtəhsil məktəblərinin 7-ci sinfi üçün dərslik –Bakı: – Aspo-liqraf, – 2014. – 96 s.
6. Abbasov M.M., Abbasov Z.S. Kimyəvi birləşmələrdə siqma rabitə saylarının riyazi hesablanma metodikası -Bakı: Kimya məktəbdə, – 2014. № 4, – s. 74-77
7. Abbasov, M.M. Kimya I hissə. TQDK, Abituriyent – Bakı: – 2007. –420 s.
8. V.M. Abbasov, M.M. Abbasov, R.Y. Əliyev və b.-Kimya: Ümumtəhsil məktəblərinin 8-ci sinfi üçün dərslik -Bakı: – Aspoliqraf, – 2005. – 160 s.
9. V.M. Abbasov, A.M. Məhərrəmov, M.M. Abbasov və b.- Kimya. Ümumtəhsil məktəblərinin 10-cu sinif üçün dərslik Bakı: – Aspoliqraf, – 2009. – 112 s.
10. V.M. Abbasov, A.M. Məhərrəmov, M.B. Babanlı və b. - Ümumi kimyanın əsasları. Bakı: – “Azərbaycan ensiklopedi-yası” nəşriyyat-poliqrafiya birliyi, –2000. – 406 s.
11. Abbasov V.M. Nanokimya və nanotexnologiya – Bakı: Elm, – 2010. – 232 s.
12. Abbasov, Z.S. İstedadın inkişafını şərtləndirən amillər Ümummilli lider Heydər Əliyevin anadan olmasının 87-ci ildönümünə

həsr olunmuş “İstedadlı şagirdlərin potensial imkanlarının inkişaf etdirilməsinin optimal yolları” mövzusunda elmi-metodik konfransın materialları. – Bakı: Elm və təhsil, – 2010. – s. 97-102

13. Abbasov Z.S. Kimyəvi birləşmələrdə siqma rabitə saylarının riyazi ifadəsi - Akademik S.C. Mehdiyevin 100 illik yubileyinə həsr olunmuş respublika elmi-praktiki konfransının məruzələrinin tezisləri. – Bakı: Elm, – 2014. – s. 208-209.

14. Əliyev, A.H. 9-cu sinifdə kimyanın tədrisi (Yeni pedaqoji texnologiyalardan istifadə)– Bakı: Mütərcim, – 2006. – 240 s.

15. R.Ə. Əliyeva, V.M. Abbasov, A.M. Məhərrəmov və b. Kimya. Ümumtəhsil məktəblərinin 8-ci sinfi üçün dərslik – Bakı: Aspoliqraf, – 2015. – 200 s.

16. Salahov, M.S. V.M. Abbasov, B.T. Bağmanov və b. Kimyəvi birləşmələrdə rabitə sayların riyazi ifadəsi-Bakı: Kimya məktəbdə, – 2008. № 2, – s. 70-75.

17. M.S. Salahov, V.M. Abbasov, B.T. Bağmanov və b. Molekulların kimyəvi rabitələrinin sayının hesablanması problemi -Bakı: Kimya məktəbdə, – 2008. № 3, – s. 3-12.

18. M.S. Salahov, V.M. Abbasov, B.T. Bağmanov və b. Reaksiyalar zamanı kimyəvi birləşmələrdə rabitə saylarının dəyişməsinin riyazi ifadəsi -Bakı: Kimya məktəbdə, – 2008. № 4, – s. 34-40.

19. Salahov, M.S., Bağmanov, B.T., Abbasov, Z.S. Kimyəvi birləşmələrdə rabitə saylarının riyazi ifadəsi - Ümummilli lider Heydər Əliyevin 85 illik yubileyinə həsr olunmuş respublika elmi konfransının materialları, – Bakı: – 2008. – s.23-24.

20. Salahov, M.S., Bağmanov, B.T., Abbasov, Z.S. Kimyəvi birləşmələrdə rabitə saylarının tapılmasının yeni üsulu - Материалы VIII Бакинской международной Мамедалиевской конференции по нефтехимии, – Баку: – 2012. – с. 458-459.

21. Salahov, M.S., Bağmanov, B.T., Abbasov, Z.S. Kimyəvi birləşmələrdə rabitə saylarının riyazi ifadəsi -Bakı: Pedaqoji Universitet Xəbərləri, – 2008. № 5, – s. 12-17.

22. Salahov M.S., Bağmanov B.T., Abbasov Z.S. Fulleren molekullarında kimyəvi rabitə sayları problemi -Bakı: Kimya problemləri, – 2012. № 2, – s. 289-291.

23. M.S. Salahov, V.M. Abbasov, B.T. Bağmanov və b. Kimyəvi birləşmələrdə siqma rabitə saylarının riyazi ifadəsi -Bakı: Kimya

məktəbdə, – 2013. № 1, – s. 27-31.

24. Salahov, M.S., Bağmanov, B.T., Abbasov, Z.S. Alkanlarda ərimə və qaynama temperaturunun topoloji indekslərlə korrelyasiyası - Bakı: Kimya problemləri, – 2010. № 4, – s. 545-554.

25. M.S. Salahov, B.T. Bağmanov, Z.S. Abbasov və b. Anilin törəmələrində ərimə temperaturlarının topoloji indekslərlə korrelyasiyası-Kimya problemləri, – 2012. № 3, – s. 352-359.

26. Ümumi təhsilin fənn standartları (I-XI siniflər). – Bakı: Mütərcim, – 2012.– s. 402

27. Аббасов З.С., Шахбазова Г.К. “Расстановка коэффициентов математическим методом в сложных окислительно-восстановительных реакциях.” -Аспирант и соискатель, –Москва –2022 №6 (133), 2022. с. 27-30.

28. Аббасов, З.С. Математический способ определения число связей в молекулах -Химия в школе, – 2015. № 1, – с.33-35.

29. Аббасов, З.С. Математическое выражение количеств пи (π) связей в химических соединениях-Молодой учёный, – 2015. № 16, –с.13-15.

30. Аббасов, З.С. Модифицированные теоретико-информационные индексы в решении задачи “структура-свой-ство”-Современные научные исследования и инновации, – 2014. № 8, – с.42-47.

31. Аббасов, З.С. Новый подход к методике теоретико информационных индексов молекул, с учетом радиусов атомов - Молодой учёный, – 2014. № 18, – с.111-115

32. Аббасов, З.С. Томаева К.Т. Применение топологических индексов в изучении структурно-свойственных связей в химических соединениях - Молодой учёный, – 2015. № 14, – с.25-28

33. М.М. Аббасов, З.С. Аббасов, А.В. Зулфигарова и др. Матиматическое выражение количеств σ (сигма) связей в химических соединениях - Аспирант и соискатель, – 2017. № 4, – с.18-21.

34. Бердетт, Дж. Химическая связь. - Дж. Бердетт – Москва: Бином. Лаборатория знаний, – 2008. – 248 с.

35. Гиричев, Г.В. Структура молекул солей кислород-содержащих кислот - Соросовский образовательный журнал, –1999. № 11, –с.40-44

36. Золотухин, И.В. Фуллерит-новая форма углерода - Соросовский образовательный журнал, —1996. № 2, —с.51-56
37. Краснов, К.С. Молекулы и химическая связь. 2-е изд. —Москва: Высшая школа, —1984. —295 с.
38. Р.А. Лидин, В.А. Молочко, Л.Л. Андреева Химические свойства неорганических веществ: Учеб. Пособие для вузов. —Москва: Химия, —2000. —480 с.
39. Дж. Маррел, С. Кеттл, Дж. Теддер Химическая связь. —Москва: Мир, —1980. —384 с.
40. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев Теория строения молекул. —Москва: Высшая школа, —1979. — 408 с.
41. Паулинг, Л. Природа химической связи - Под ред. Я.К. Сыркина, пер. с англ. М.Е. Дяткиной. —Москва-Ленинград: Госхимиздат, —1947. — 440 с.
42. Г. Пиментел Р. Спратли Как квантовая механика объясняет химическую связь. Пер. с англ. — Москва: Мир, — 1973. — 332 с.
43. Л. Полинг, Под. ред. Р.Х. Фрейдлиной. Кекуле и химическая связь (книга “Тео-ретическая органическая химия”) —Москва-Ленинград: Издательство иностранной литературы, —1963. — 366 с.
44. М.С. Салахов, Б.Т. Багманов, З.С. Аббасов и др. Корреляционный анализ топологи-ческих индексов с температурой плавления в ряду замещенных анилинов- Материали за VIII международна научна - практична конфе-ренция. —София: —2012. —с.75-81.
45. Н.Ф. Степанов, В.И. Пупышев Квантовая механика молекул и квантовая химии. — Москва: Изд-во МГУ, —1991. — 384 с.
46. Сидоров, Л.Н., Макеев, Ю.А. Химия фуллеренов- Соросовский образовательный журнал, —2000. № 5, —с.21-25.
47. Татевский, В.М. Строение молекул. — Москва: Химия, —1977. —512 с.
48. Угай, Я.А. Валентность, химическая связь и степень окисления-важнейшие понятия химии- Соросовский Образовательный журнал, —1997. — с.53-57
49. Уэллс, Ф. Структурная неорганическая химия: в 3-х, Т. II, Уэллс Ф. — Москва: Мир, —1987. —694 с.

50. Л. Физер, М. Физер Органическая химия. Углубленный курс: в 2-х, Т.1, – Москва: Химия, –1966. – 680 с.
51. К.Б. Яцимирский, В.К. Яцимирский Химическая связь. –Киев: Вища школа, – 1975. – 304 с.
52. Abbasov Z. S. “Mathematical Expression Of The Communication Numbers In Chemical Compounds”. International Marmara Scientific Research And Innovation Congress,- Marmara 01–02 February 2025, p. 341-345.
53. A. Laudise, C. Kloc, P. Simpkins [et al.] Physical vapor growth of organic semiconductors –Growth: –1998. –vol. 187, –449 p.
54. S. Pillet, M. Souhassou, C. Lecomte, et al. –2001. 57, –pp. 209-303
55. Richter, M.M. Elektrochemiluminescence (ECL) - Chemical Reviews, –2004, –104 p.
56. L.Smrcek, V. Langer, M. Halvarsson et al. Zeitschrift fuer kristallographie –2001. 216, – pp.409-412
57. Weissmehl, K. Arpe, H. -1, 3-Diolefins. Industrial Organic Chemistry.- 4 th ed. – Wiley, – 2008. – pp.107-126

KİTABIN İÇİNDƏKİLƏR

REDAKTORDAN	3
Ön Söz	4
GİRİŞ	5
I FƏSİL. KİMYƏVİ RABİTƏLƏRİN TƏDRİSİ VƏ RİYAZİ YANAŞMALARIN TƏTBİQİ	7
1.1. Kimyəvi rabitələrin xüsusiyyətləri.....	7
1.2. Kimyanın tədrisində riyazi hesablamaların tədrisə integrasiyası ...	8
II FƏSİL. QEYRİ-ÜZVİ MADDƏLƏRDƏ KİMYƏVİ RABİTƏLƏRİN SAYININ RİYAZİ METODLARLA TƏHLİLİ	14
2.1. Oksidlərdə kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması .	14
2.2. Qeyri-üzvi turşularda kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması	24
2.3. Duzlarda kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması	37
2.4. Kimyəvi birləşmələrdə siqma rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması	53
2.5. Kimyəvi birləşmələrdə $\pi(\text{pi})$ - rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması	57
III FƏSİL. ÜZVİ BİRLƏŞMƏLƏR ÜÇÜN RABİTƏ SAYLARININ HESABLANMASINDA RİYAZİ YANAŞMA	69
3.1. Karbohidrogenlərin kimyəvi rabitələrinin – ümumi, siqma və π (π) – riyazi üsullarla hesablanması	69
3.2. Oksigen tərkibli üzvi birləşmələrdə kimyəvi rabitələrin riyazi hesablanması	90
3.3. Azot tərkibli üzvi maddələrdə kimyəvi rabitələrin sayının riyazi yolla müəyyənəndirilməsi	136
3.4. Polimerlərdə kimyəvi rabitə saylarının riyazi üsulla hesablanması	153
3.5. Kimyəvi reaksiyalar zamanı rabitə saylarının dəyişməsinin riyazi metodla hesablanması	166
İSTİFADƏ EDİLMİŞ ƏDƏBİYYAT SİYAHISI.....	186
KİTABIN İÇİNDƏKİLƏR	191

Ziyafət Sabir oğlu Abbasov.

***KİMYƏVİ RABİTƏ SAYLARININ HESABLAMA
NƏZƏRİYYƏSİ: DÜSTURLAR VƏ ONLARIN
EKSPERİMENTAL TƏSDİQİ***

Nəşriyyatın direktoru: Hüseyn Hacıyev
Redaktor: Mustafa Şəfiyev
Korrektor: Sevinc Mamoyeva
Dizayn: Müşfiq Hacıyev
Cildçi: Elmar Mikayilov

Çapa imzalanmış 06.11.2025-ci il
Kağız formatı 60x84^{1/16}, çap vərəqi 12
Sifariş 120, sayı 100

ADPU-nun nəşriyyatı
Bakı, Ü.Hacıbəyli küçəsi, 68
Tel: (+912) 493-74-10
E-mail: poliqrafiya@mail.ru