

**[(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>Me]<sup>+</sup> VƏ [(H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub>Me]<sup>+</sup> METAL İONU-SU MOLEKULU  
KOMPLEKSLƏRİNİN HESABLAMA MODELƏRİ VƏ KLASSİK  
ELEKTROSTATİK MODELƏ ƏSASƏN FƏZA QURULUŞUNUN  
HESABLANMASI**

**S.M.İsrafilova<sup>1</sup>, N.S.Nəbiyev**  
**Bakı Dövlət Universiteti,**  
**Fizika fakültəsi, II kurs (magistr)**

Kompleks birləşmələrin oriyentasiyası, yəni mərkəzi atomun, liqandın və ionların fərqli düzülüşlər göstərməsi, fərqli kristal quruluşlara malik olması bu birləşmələrin əhəmiyyətini artırmışdır. Bu birləşmələr bir mərkəzi metal kationu və ona bağlı liqand adlanan anion və ya molekulardan meydana gəlir. Bu birləşmələrdə ümumilikdə liqandan metala bir elektron cütü verilir. Liqandlar ən az bir rabitə yaratmamış elektron cütünə malik olurlar. Bu elektron cütü ilə metal kationu bağlanırlar. Bir metal mərkəzinə bağlı qrup sayı onun koordinasiya sayıdır. Mərkəzi atomun koordinasiya ədədi rabitə əmələ gəlməsində iştirak edən orbitalların sayı ilə müəyyən olunur. Kompleks birləşmələrdə koordinasiya ədədi 2 ilə 12 arasında dəyişir. Bu da onların struktur zənginliyi və kimyəvi müxtəlifliyini əmələ gətirir. Ən çox rast gəlinən 6 və 4 –lü koordinasiyalardır. Biz koordinasiya sayı 6 və 8 olan hesablama modellərinə baxmışıq. Cədvəldə koordinasiya sayı 6 və 8 olan halda mərkəzində bir qat ionlaşmış metal ionu olan komplekslərin elektrostatik enerjiləri metal ionu ilə su molekulu arasındakı məsafənin 10 qiyməti üçün hesablanmışdır. Bütün hallarda dipollar koordinat oxu boyunca yönəlmiş şəkildə qəbul edilmişdir və bu simmetriya bütün qiymətlər üçün saxlanmışdır.

i=6 r(m)	E(eV)	i=8 r(m)	E(eV)
10 <sup>-9</sup>	5,86 10 <sup>-2</sup>	10 <sup>-9</sup>	6,601 10 <sup>-2</sup>
1,5 10 <sup>-9</sup>	2,607 10 <sup>-2</sup>	1,5 10 <sup>-9</sup>	2,93 10 <sup>-2</sup>
2 10 <sup>-9</sup>	1,46 10 <sup>-2</sup>	2 10 <sup>-9</sup>	1,65 10 <sup>-2</sup>
2,5 10 <sup>-9</sup>	0,93 10 <sup>-2</sup>	2,5 10 <sup>-9</sup>	1,05 10 <sup>-2</sup>
3 10 <sup>-9</sup>	0,65 10 <sup>-2</sup>	3 10 <sup>-9</sup>	0,73 10 <sup>-2</sup>
3,5 10 <sup>-9</sup>	0,47 10 <sup>-2</sup>	3,5 10 <sup>-9</sup>	0,53 10 <sup>-2</sup>
4 10 <sup>-9</sup>	0,36 10 <sup>-2</sup>	4 10 <sup>-9</sup>	0,41 10 <sup>-2</sup>
4,5 10 <sup>-9</sup>	0,28 10 <sup>-2</sup>	4,5 10 <sup>-9</sup>	0,32 10 <sup>-2</sup>
5 10 <sup>-9</sup>	0,23 10 <sup>-2</sup>	5 10 <sup>-9</sup>	0,26 10 <sup>-2</sup>
5,5 10 <sup>-9</sup>	0,19 10 <sup>-2</sup>	5,5 10 <sup>-9</sup>	0,21 10 <sup>-2</sup>

İstifadə edilmiş enerji düsturu:

$$W = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{de}{r^2}$$

Cədvəllərdən görüldüyü kimi qarşılıqlı təsir enerjiləri koordinasiya sferasının radiusundan kəskin şəkildə asılıdır. Ədədi qiymətlərin müqayisəsindən görüldüyü kimi eV-in 100-də 1 tərtibində fərqlilik müşahidə olunur. Alınan nəticələrin müqayisəli

<sup>1</sup> sayyare.israfilova@yahoo.com

analizi onu söyləməyə əsas verir ki, metal ionu su komplekslərinin elektrostatik modeli ən ümumi halda kompleksin stabilləşmə xüsusiyyətlərini keyfiyyətcə izah etməyə imkan verir.

#### **Ədəbiyyat**

1. Ю.М.Кесслер, В.Е.Петрерко, А.К.Лященко др. Отв.ред. А.М.Кутепов Вода: структура, состояние, сольватация. Достижения послед.лег /-М.: Наука, 2003, 404 с.
2. Радциг А.А, Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике, М.: Атомиздат, 1980.-240с.