

کاربرد ریاضیات در شیمی

پیمان بلقاری سال چهارم ریاضی

تعریف هیبریداسیون: هرگاه چند اُرییتال اتمی متفاوت با هم ادغام و آمیخته شوند و از اختلاط آنان به همان تعداد اُرییتال کاملاً یکسان (از نظر شکل و سطح انرژی) تشکیل شود، این طرح یا مدل را هیبریداسیون می‌نامند و اُرییتالهای حاصل، اُرییتالهای هیبریدی نامیده می‌شوند که این اُرییتالها تنها از نظر جهت‌یابی در سطح یا فضا با یکدیگر تفاوت دارند. انواع هیبریداسیون: Sp و Sp^2 و Sp^3 و Sp^3d و ...

مقیاسهای مناسب به دست می‌آورند. اما از اثبات منطقی و ریاضی آن غافل اند. حال به اثبات ریاضی آن به طور مثال در مورد مولکول متان می‌پردازیم.

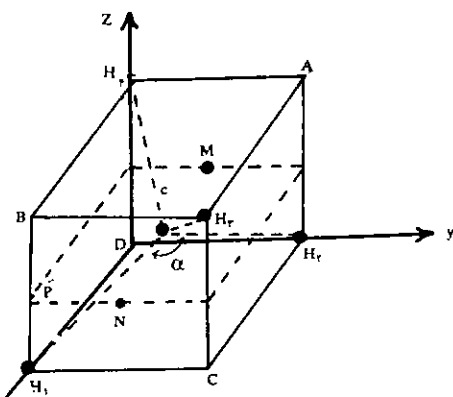
اثبات: ابتدا اوساط دو صفحه (AH_1DH_2) و (BH_1CH_2) را با دو نقطه M و N مشخص می‌کنیم حال ضلع مکعب را برابر مقدار a در نظر می‌گیریم. از هر سه نقطه مانند M و N و C فقط یک صفحه عبور می‌کند. آن صفحه را P می‌نامیم حال داریم:

$$M(0, \frac{a}{\sqrt{2}}, \frac{a}{\sqrt{2}}) \quad H_1(a, 0, 0)$$

$$N(a, \frac{a}{\sqrt{2}}, \frac{a}{\sqrt{2}}) \quad H_2(0, a, 0)$$

M و N و C در یک صفحه واقع اند.

$$\begin{cases} x_c = \frac{0+a}{2} = \frac{a}{2} \\ y_c = \frac{\frac{a}{\sqrt{2}} + \frac{a}{\sqrt{2}}}{2} = \frac{a}{\sqrt{2}} \\ z_c = \frac{\frac{a}{\sqrt{2}} + \frac{a}{\sqrt{2}}}{2} = \frac{a}{\sqrt{2}} \end{cases} \rightarrow C(\frac{a}{2}, \frac{a}{\sqrt{2}}, \frac{a}{\sqrt{2}}) \rightarrow \begin{cases} \vec{CH_1}(\frac{a}{\sqrt{2}}, -\frac{a}{\sqrt{2}}, -\frac{a}{\sqrt{2}}) \\ \vec{CH_2}(-\frac{a}{\sqrt{2}}, \frac{a}{\sqrt{2}}, -\frac{a}{\sqrt{2}}) \end{cases}$$



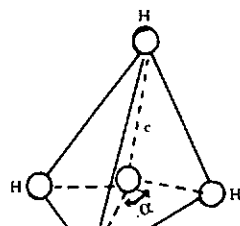
بحث در مورد هیبریداسیون Sp^3

در این نوع هیبریداسیون یک اُرییتال S با سه اُرییتال p هیبرید شده و ۴ اُرییتال هیبرید یکسان Sp^3 به وجود می‌آورند که هر اُرییتال Sp^3 ، $\frac{1}{4}$ خصلت اُرییتال S و $\frac{3}{4}$ خصلت اُرییتال p را دارند و گسترش طولی این نوع اُرییتالها را طبق قرار داد ۲ در نظر گرفته اند.

شکل مولکولهایی که اتم مرکزی آنان از هیبریداسیون Sp^3 استفاده می‌کنند، به صورت چهار وجهی می‌باشد، در حالی که زاویه پیوندی این نوع مولکولها $109^\circ, 28'$ است، مانند مولکول متان

$$\text{زاویه پیوندی} = \alpha = 109^\circ, 28' = 109/5^\circ$$

این زاویه را از طریق تجربی با نقره اندود کردن زاویه و عکسبرداری از مولکول و بزرگ کردن عکس و از طریق



رابطه I را در رابطه II جایگزین می‌کنیم.

$$OA = OB = 2 \text{ طول پیوند}$$

$$4 - x^2 = a^2 - (2+x)^2 = a^2 - 4 - x^2 - 4x$$

رابطه III را در رابطه بدست آمده جایگزین می‌کنیم.

$$BH = HC = y, \quad OH = x$$

$$4 - x^2 = 2y^2 - 2y^2(-\frac{1}{2}) - 4 - x^2 - 4x$$

$$AB = BC = a$$

$$y^2 = 4 - x^2, \quad 4 - x^2 = 3(4 - x^2) - 4 - x^2 - 4x$$

$$\rightarrow 4 - x^2 = 12 - 3x^2 - 4 - x^2 - 4x$$

(زیرا اندازه پاره خط منفی نمی‌شود)

$$\rightarrow -3x^2 - 4x + 4 = 0 \rightarrow \begin{cases} x' = \frac{2+4}{-3} = \frac{-6}{3} = -2 \\ x = \frac{2-4}{-3} = \frac{2}{3} \end{cases}$$

$$\text{رابطه I و II} \Rightarrow 4 - x^2 = a^2 - 4 - x^2 - 4x$$

$$\rightarrow a^2 = 4x + 8 = \frac{8}{3} + 8 = \frac{32}{3} \rightarrow \boxed{a^2 = 10.6666}$$

$$\Delta AOB: a^2 = 4 + 4 - 8 \cos C \rightarrow 10.6666$$

$$= 8 - 8 \cos C \rightarrow \cos C = \frac{2.6666}{-8} = -0.3333$$

$$0.3256 < 0.3333 < 0.3420$$

$$70^\circ < x < 71^\circ$$

چون مقدار کسینوس منفی بود زاویه کم می‌شود به مقدار کسینوس اضافه می‌شود

۰/۰۱۶۴	۱°
۰/۰۰۷۷	$x = 0.4695$

$$\rightarrow 180^\circ - C = 70.5304$$

$$\rightarrow C = 109.469$$

۱°	۶۰°
۴۹۹۶	$x = 18'$

$$\rightarrow \boxed{C = 109^\circ 28'}$$

زاویه بین دو بردار $\vec{CH}_1$ و $\vec{CH}_2$ همان زاویه پیوندی مولکول متان می‌باشد. پس داریم.

$$\sin(19.30^\circ) = 0.3338$$

$$\cos \alpha = \cos(\angle \vec{CH}_1, \vec{CH}_2) = \frac{\vec{CH}_1 \cdot \vec{CH}_2}{|\vec{CH}_1| |\vec{CH}_2|} = \frac{-\frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4}}{\sqrt{\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4}}}$$

$$\times \sqrt{\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4}}$$

$$= \frac{-\frac{a^2}{4}}{\sqrt{3}(\frac{a}{2}) \times \sqrt{3}(\frac{a}{2})} = -\frac{1}{3} = -0.3333$$

$$\rightarrow \cos \alpha = -\sin(19.30^\circ) = -\sin(19.5^\circ)$$

$$= \cos(90^\circ + 19.5^\circ) \rightarrow \alpha = 109.5^\circ \quad \boxed{\alpha = 109.30^\circ}$$

لازم به ذکر است که در بالا از $\sin(19.30^\circ)$ که برابر 0.3338 است استفاده شده در حالی که اگر $2'$ از زاویه کم شود سینوس آن تقریباً 0.3333 خواهد شد.

برای محاسبه زاویه مولکولهای از قبیل مولکول متان، تراکلرید کربن ... روش دیگری که به مراتب از روش اول کاملتر است توسط آقای علیرضا مظفری ارائه شده که شرح آن به صورت زیر می‌باشد.

۱- اگر AO را ادامه دهیم بر صفحه مثلث BCD عمود

می‌شود چون شکل مزبور چهار وجهی منظم می‌باشد.

$$\Delta OHB: y^2 = 4 - x^2 \quad \text{رابطه (I)}$$

$$\text{رابطه (II)}$$

$$\Delta ABH: y^2 = a^2 - (2+x)^2 \rightarrow y^2 = a^2 - 4 - x^2 - 4x$$

$$\Delta CHB: a^2 = y^2 + y^2 - 2y^2 \cos 120^\circ \quad \text{رابطه (III)}$$

