

**Осипчук Яна,**  
студентка V курсу, спеціальність «Математика та фізика».  
Науковий керівник – **Королюк О. М.,**  
кандидат педагогічних наук, доцент

## ГЕОМЕТРИЧНІ ЗАСТОСУВАННЯ В ХІМІЇ

Геометричні ідеї використовуються в хімії при аналізі розташування атомів в молекулах або окремих частинок (молекул, атомів та іонів) у більш великих агрегатах – кристалах, кластерах, міцелах, наночастинках. Як правило, у подібних завданнях потрібне вміння розв'язувати плоскі фігури – трикутники та многокутники, а також знання формул для об'ємів просторових тіл – куль, кубів, циліндрів, які є моделями хімічних частинок [2].

Розглянемо геометрію деяких хімічних структур. Відомо лише п'ять правильних многогранників – тетраедр, куб, октаедр, ікосаедр і додекаедр. Усі вони реалізовані в хімічних структурах.

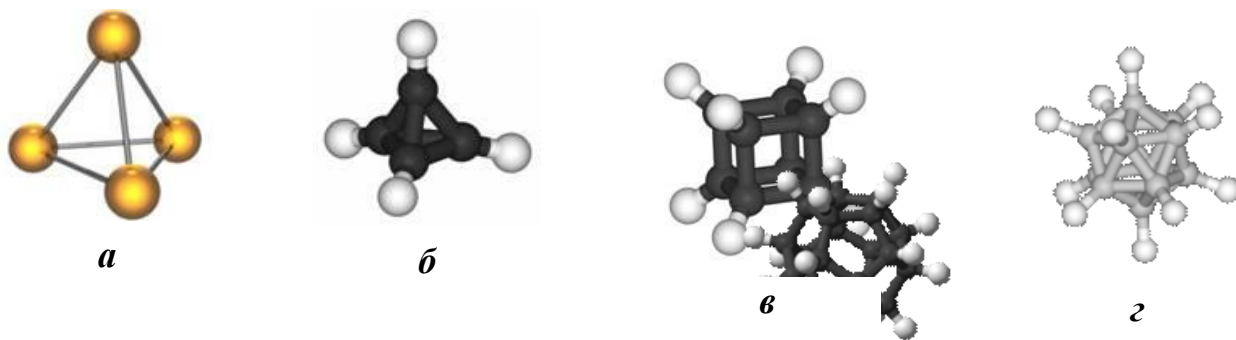


Рис. 1.

д

**Приклад 1.** Тетраедр. Молекула з такою геометрією існує в природі це – молекула білого фосфору ( $P_4$ ) (рис. 1, а). Кожна вершина пов'язана з трьома іншими (атоми фосфору в  $P_4$  є тривалентним).

Валентність III характерна для груп C-N, тому можна уявити собі вуглеводень, вуглецевий скелет якого також має форму тетраедра – тетраедран (рис. 1, б).

**Приклад 2.** Вуглеводень у формі куба (формула  $C_8H_8$ ) називається кубан (рис. 1, в).

**Приклад 3.** Органічних молекул, що мають форму ікосаедра, не існує, оскільки вуглець п'ятивалентним не буває. Однак, відомий негативний іон такої форми – додекаборан  $B_{12}H_{12}^{2-}$  (рис. 1, г).

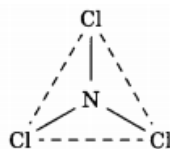
**Приклад 4.** Вуглеводень з геометричною формою додекаедра (найскладніший з правильних многогранників) – додекаедран  $C_{20}H_{20}$  (рис. 1, д). У цій молекулі два додекаедра.

**Задача.** Для визначення структури молекул у газовій фазі використовують метод електронографії, який дозволяє знайти міжядерні відстані в молекулі по інтенсивності пружного розсіювання електронів. За даними одного з експериментів міжядерні відстані в молекулі  $NCl_3$  виявилися рівними:

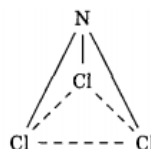
$$r\ N - Cl = 0,176\ \text{нм.} \quad r\ Cl - Cl = 0,289\ \text{нм.}$$

Встановіть, яку геометричну фігуру утворюють ядра атомів у цій молекулі. Який тип гібридизації центрального атома дозволяє описати дана будова молекули [1, с. 20]?

**Розв'язання.** Усі три зв'язки  $N - Cl$  в молекулі  $NCl_3$  однакові. Молекула може мати форму правильного трикутника, якщо атом азоту знаходиться у площині, утвореної трьома атомами хлору:

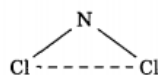


Якщо атом азоту лежить поза цією площиною, то молекула має форму трикутної піраміди:



У першому випадку кут між зв'язками дорівнює  $\angle Cl - N - Cl = 120^\circ$ , у другому:  $\angle Cl - N - Cl \neq 120^\circ$ .

Для знаходження такого кута розглянемо рівнобедрений трикутник  $\Delta Cl - N - Cl$ .



За теоремою косинусів  $r(Cl - Cl)^2 = r(N - Cl)^2 + r(N - Cl)^2 - 2r(N - Cl)^2 \cos \angle Cl - N - Cl$  звідки отримуємо  $\cos \angle Cl - N - Cl = 1 - \frac{0,283^2}{2 \cdot 0,176^2} = -0,293$   $\angle Cl - N - Cl = 107^\circ$

Це означає, що молекула являє собою трикутну піраміду. Центральний атом азоту знаходиться в стані  $sp^3$ -гібридизації.

**Відповідь:** трикутна піраміда;  $sp^3$ -гібридизація.

Ми навели лише декілька прикладів, які показують, як геометрія використовується в хімії. Такі задачі дозволяють одержати певне, хоча, звичайно, неповне уявлення про завдання, що вирішуються хіміками за допомогою геометрії, і тих обмеженнях, які хімія накладає на застосовувану в ній геометрію.

#### *Література*

1. Еремін В. В. Теоретическая и математическая химия для школьников. Подготовка к химическим олимпиадам / В. В. Еремін. – М. : МЦНМО, 2007. – 392 с.
2. Еремін В.В. Химия. 10 класс : учебник для общеобразовательных учреждений / В.В. Еремін, Н.Е. Кузьменко, А.А. Дроздов, В.И. Теренин, В.В. Лунин. – М. : Дрофа, 2008.