

## شیمی مولکولی

همه ی مواد، از ذرات ریزی به نام اتم تشکیل شده اند. عناصر موادی هستند که از تعدادی اتم مشابه ساخته شده اند. در اثر تجزیه مواد مرکب، به نوع عناصر سازنده ی آن و تعداد اتمهای هر عنصر در آن ماده دست خواهیم یافت. بر خلاف تصور دانشمندان گذشته که گمان می کردند تنها نوع عناصر سازنده یک ماده و تعداد اتمهای هر عنصر، تعیین کننده ی خواص آن ماده است، مواد مرکبی یافت شدند که علیرغم خواص متفاوت، از عناصر یکسان تشکیل یافته اند و حتی تعداد اتمهای عناصر هم در آنها یکسان بوده است! اکنون می دانیم که این اختلاف در خواص، ناشی از فاکتور مهم و موثر دیگری به نام "آرایش اتمی" است.

اتمهای هر عنصر ظرفیت مشخصی برای ترکیب شدن با اتمهای دیگر دارند و می توانند آرایشهای اتمی و مولکولی متفاوتی را ایجاد کنند؛ بسیاری از خاصیتهای مواد بر اثر آرایش متفاوت اتمها در ماده می باشد. با استفاده از این ویژگی در اتمها، دانشمندان می توانند آرایشهای خاص از اتمهای گوناگون را برای دست یابی به خواص دلخواه، ایجاد کنند.

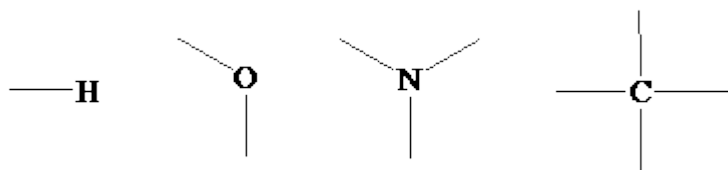
### مقدمه

آیا تا به حال هوا را داخل سرنگی محبوس کرده اید تا آن را تحت فشار قرار دهید؟ چه اتفاقی می افتد وقتی پیستون سرنگ را فشار می دهید؟ هوا چگونه متراکم می شود؟ چگونه در یک فضای کوچکتر جا می گیرد؟ یک تکه اسفنج را می توان در فضای کوچکتری متراکم کرد. علت تراکم اسفنج این است که در آن سوراخهای ریزی وجود دارد؛ وقتی اسفنج را فشار می دهیم، هوای داخل این سوراخها خارج می شود و ذرات جامد اسفنج به هم نزدیکتر می گردند. درست مثل زمانی که یک تکه اسفنج خیس را فشار می دهید؛ آب از سوراخهای اسفنج خارج و اسفنج متراکم می شود. "بویل"، دانشمند انگلیسی، در سال ۱۶۶۲ میلادی مقداری جیوه - که فلزی مایع است - را در یک لوله شیشه ای پنج متری ریخت. این لوله خمیده به شکل حرف انگلیسی U و یک سمت آن مسدود بود. بویل مشاهده کرد که با افزودن جیوه، هوای به دام افتاده در سمتی که بسته است، متراکم می شود و فضای کمتری اشغال می کند. بویل نتیجه گرفت که هوا باید از ذرات بسیار کوچک، یعنی اتمهای ریز، تشکیل شده باشد. در میان اتمها فضایی است، که در آن هیچ چیز نیست. وقتی هوا متراکم می شود، اتمها به هم نزدیکتر می شوند. بویل همان سالها، در کتابی نوشت: "عنصرها را باید با آزمایش کشف کرد. شیمیدانها باید بکشند تا هر چیزی را به مواد ساده تر تجزیه کنند، آن ماده یک عنصر است." دانشمندان بر مبنای این توصیه بویل، تا اواخر قرن هجدهم حدود ۳۰ عنصر گوناگون کشف کردند و مواد مرکب زیادی را که از این عناصر ساخته شده بود را بررسی کردند. بسیاری از مواد مرکب بررسی شده تا آن زمان، از مولکولهای ساده ساخته شده بودند و هر کدام بیش از چند اتم نداشتند. کافی بود فهرستی از انواع گوناگون اتمها تهیه شده و گفته شود که در هر ماده مرکب، چند عدد از هر نوع اتم وجود دارد. در سال ۱۸۲۴ میلادی (۱۲۰۳ شمسی) "یوستون

لیبینگ" و "فردریخ وهلر"، شیمیدان آلمانی، درباره دوماهه مرکب متفاوت تحقیق می کردند. هر یک از آنها برای ماده مرکب خود فرمولی بدست آورد و نشان داد که در آن چه عناصری و از هر عنصر چند اتم وجود دارد. وقتی آنها نتایج کار خود را اعلام کردند، معلوم شد که هر دو ماده دارای فرمول یکسانی هستند. با اینکه این دو ماده با هم متفاوت بودند و از هر جهت خواص گوناگونی داشتند، مولکولهای آنها از عناصر یکسان تشکیل شده و حتی عده اتمهای هر عنصر در هر دو ماده یکسان بود. به این ترتیب مشخص شد که تنها جمع کردن عده اتمهای موجود در یک مولکول کافی نیست. و این اتمها باید آرایش ویژه ای داشته باشند. بنابراین، آرایش متفاوت سبب تفاوت مولکولها می شود و خواص مواد با هم تفاوت خواهند داشت.

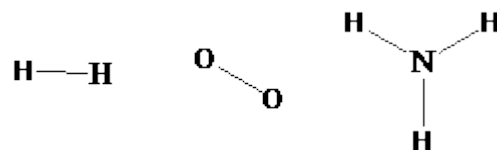
با توجه به اینکه هم مولکولها و هم اتمها به قدری کوچک هستند که دیده نمی شوند، شیمیدانان چگونه می توانند نوع آرایش اتمها را در مولکولها بیابند؟

نخستین گام را در این راه، "ادوارد فرانکلند" انگلیسی برداشت. او مولکولهای آلی را با برخی از فلزات ترکیب کرد و دریافت که اتم یک نوع فلز، همیشه با تعداد مشخصی از مولکولهای آلی ترکیب می شود. او نتیجه گرفت که هر اتم توانایی و ظرفیت خاصی برای ترکیب با عناصر دیگر دارد. او اسم این خصلت را "والانس" گذاشت. "والانس" کلمه ای لاتین به معنای "ظرفیت" یا "توانایی" است. برای مثال وقتی می گوئیم: "ظرفیت هیدروژن «یک» است"، یعنی اتم هیدروژن تنها با یک اتم دیگر می تواند ترکیب شود. ظرفیت اکسیژن «دو»، نیتروژن «سه» و کربن «چهار» است. اسکات کوپر اسکاتلندی نیز در ۱۸۵۸ میلادی، نظریه "پیوندهای شیمیایی" را مطرح کرد. او معتقد بود که اتمها با "قلاب" یا "پیوند" به یکدیگر متصل می شوند و مولکولهای مختلف را تشکیل می دهند. طبق نظریه او، هر اتم به اندازه "ظرفیت" یا "والانس" خود می تواند با اتمهای دیگر پیوند بدهد. کوپر همچنین پیشنهاد کرد، که اتمها را با توجه به ظرفیتشان و تعداد پیوندهایی که می توانند با سایر اتمها داشته باشند، به صورت ذیل نمایش دهند:



شکل ۱. ظرفیت اتمهای کربن، نیتروژن، اکسیژن و هیدروژن

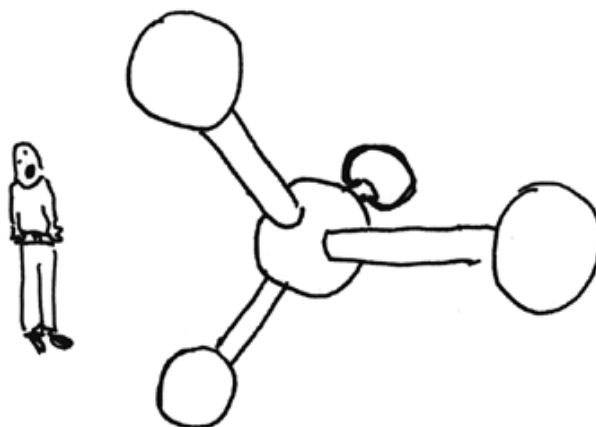
به این ترتیب می توانیم مولکولها را با رسم پیوندهای میان اتمها، به شکل زیر نشان بدهیم:



شکل ۲. آرایش اتمی و پیوندهای بین اتمها

استفاده از روش فوق برای نشان دادن ساختمان مولکول‌های کوچک و غیر آلی، به راحتی مقدور بود، اما در مورد مولکول‌های بزرگتر و مواد مرکب آلی، مشکلاتی وجود داشت که گاه باعث گمراهی می‌شد. از اینرو "ککوله" تلاش کرد تا مشکل ظرفیت را در مورد مواد مرکب آلی برطرف کند. "فردریش آگوست ککوله"، با توجه به این مسأله که هر اتم کربن ظرفیت اتصال به چهار اتم دیگر را دارد، توانست مسایل مربوط به تعداد زیادی از مولکول‌ها - که ساختمان آنها تا آن زمان معماً به نظر می‌رسید- را حل کند.

امروزه نیز از همین مدل برای نشان دادن مولکولها و همچنین توضیح خواص آنها استفاده می‌شود.



شکل ۳. مدل گوی و میله برای نمایش آرایش اتمی

شیمی دانان ها چگونه می‌توانند بین ساختار مولکول و خواص آن ارتباط برقرار کنند؟

مواد مختلف، بسته به این که از چه عناصری تشکیل شده‌اند و دارای چه آرایشی هستند، خواص مختلفی دارند. برای مثال، موادی که خاصیت اسیدی از خود نشان می‌دهند، در ساختار مولکولی خود اتم هیدروژنی دارند که به اکسیژن متصل است و آن اتم اکسیژن هم با یک عنصر نافلز مانند گوگرد، فسفر و... پیوند دارد. حال اگر به جای اتم نافلز، یک اتم فلز مانند سدیم، کلسیم یا ... قرار گیرد، ترکیب به جای "خصلت اسیدی"، "خاصیت قلیایی" خواهد داشت. در داروها و مولکول‌های بزرگ، خواص ترکیب، به عوامل متعددی بستگی دارد. در نانو فناوری، که هدف ساختن مولکولی جدید با رفتاری خاص است، یک دانشمند شیمی مولکولی، با استفاده از تخصص خود، آرایشی از اتم‌ها را پیشنهاد می‌کند که خاصیت مورد نظر ما را داشته باشد. از سوی دیگر باید بدانیم مولکولها، صرفاً آنچه ما روی کاغذ رسم می‌کنیم نیستند. مولکول‌ها دارای بعد هستند و فضا اشغال می‌کنند .

یک مولکول، در فضا آرایشهای مختلفی را می‌تواند اختیار کند. در حال حاضر با استفاده از یک سری فنون خاص و به کمک کامپیوتر، می‌توان آرایش‌های مختلف را پیش‌بینی و چگونگی قرار گرفتن اتمها را در کنار یکدیگر بررسی کرد. همچنین می‌توان حدس زد که هر آرایش مولکولی، چه خواصی را موجب می‌شود. این کار نیز به واسطه اطلاعاتی که

یک دانشمند شیمی مولکولی از مطالعه ساختارهای مختلف مولکولها بدست آورده است، امکان پذیر می باشد .  
شاخه ای از نانوفناوری، که با بهره گیری از شیمی مولکولی و روشهای محاسباتی فیزیکی و مکانیک کوانتومی، آرایشهای  
متنوع مولکولها را بررسی می کند را "نانوفناوری محاسباتی" می نامند.