

1.9. STRUKTŪRŲ ALGEBRA

Struktūrų algebra vadinsime matematinį mokslą, nagrinėjantį sistemų struktūrų matematinius modelius ir operacijas su struktūromis bei jų modeliais.

Šiuo metu struktūrų algebra dar nesusiformavo kaip savarankiška pakankamai formalizuota matematikos ir sistemotyros sritis. Todėl čia susipažinsime tik su kai kuriais tokio mokslo fragmentais bei galimomis jo kūrimo bei vystymosi kryptimis.

Norint sukurti struktūrų algebrą kaip svarbią matematinės sistemotyros dalį ir kaip matematinę discipliną, reikėtų:

a) išskirti **struktūrų klases** ir įvesti **formalizuotus struktūrų klasių (tipų) žymėjimus**,

b) įvesti ir aprašyti **tipines operacijas su elementariomis tipinėmis struktūromis**, įvesti tų **operacijų žymėjimus**,

c) surasti **operacijų su tipinėmis elementariomis struktūromis dėsningumus** (aksiomas ir teoremas), leidžiančius matematiniais metodais rasti operacijų su struktūromis rezultatus, t. y. surasti **taisykles, leidžiančias funkcionaliai ekvivalentiškai pertvarkyti struktūrų algebros formules**, gaunant paprastesnes jų išraiškas ir išvadas, išplaukiančias iš jų.

Žymėjimų, paminėtų punktuose „a“ ir „b“, ir sudėtingų žymėjimų sudarymo taisyklių įvedimas sudarytų **struktūrų algebros matematinės kalbos pagrindą** – jos **žodyną** ir jos **sintaksę**, o pačių operacijų bei jų atlikimo taisyklių įvedimas ir struktūrų algebros formulių pertvarkymo dėsningumų nustatymas, apie ką kalbama punktuose „b“ ir „c“, sudarytų **struktūrų algebros matematinio aparato pagrindą**.

Konstruojant sistemų struktūrų algebrą, galima naudotis tais pačiais metodais, kurie taikomi viso sistemotyros mokslo formavimesi. Apie tuos metodus ir jų sintezę jau buvo rašyta šios mokymo priemonės „Įvado“ 0.4 skyrelyje.

Taikant **empirinį indukcinį metodą**, reikėtų panagrinėti įvairias mus supančio pasaulio sistemas ir išskirti jose tokias jų (bei jų dalių) struktūras, kurias būtų galima laikyti **elementariomis tipinėmis struktūromis**, įsivesti tokių struktūrų **standartinius žymenis** ir išsiaiškinti, kaip, kokiomis **tipinėmis procedūromis** naudojantis, būtų galima iš elementarių tipinių struktūrų sukonstruoti visų kitų ar bent dažniausiai pasitaikančių sudėtingesnių sistemų struktūras.

Elementarios tipinės struktūros turėtų tenkinti du reikalavimus: 1) pačios tos struktūros turėtų būti **pakankamai paprastos**, t. y. tokios, kad būtų nesunku sudaryti pakankamai tikslius matematinius jų modelius, su kuriais būtų nesunku operuoti, įvairiais būdais juos komponuojant į sudėtingesnių struktūrų modelius 2) tos struktūros turėtų būti **pakankamai universalios ir jų aibė pakankamai pilna**, kad, iš jos, naudojantis baigtine paprastų operacijų su struktūromis aibe, būtų galima sukonstruoti pakankamai plačią, praktiškai aprėpiančią kokią nors svarbią sritį, sudėtingesnių struktūrų aibę.

Kaip tai išplaukia iš aukščiau pateikto teksto, kartu su elementarių tipinių struktūrų išskyrimu tektų išskirti ir **elementarias tipines operacijas su jomis**, taip pat tenkinančias panašius reikalavimus: 1) tos operacijos turėtų būti **pakankamai paprastos**, kad jas būtų nesunku vienareikšmiškai apibrėžti ir atlikti, gaunant vienareikšmiškai apibrėžtą rezultatą, 2) jos turi būti **pakankamai universalios**, kad, naudojantis jomis, būtų galima sukonstruoti iš elementarių tipinių struktūrų visas mums reikalingas sudėtingesnes struktūras ir išreikšti visus svarbius struktūrų pokyčius nagrinėjamoje sistemų klasėje. Kitaip tariant, elementarių tipinių operacijų su struktūromis aibė turėtų būti bent jau **praktiškai pakankamai pilna**, nes akivaizdu, kad teorinio pilnumo pasiekti nebus įmanoma.

Iliustruodami empirinio indukcinio metodo taikymą, mes šiame mokymo priemonės skyriuje pasinaudosime: 1) **atominės fizikos pasiekimais**, nagrinėjant **atomų elektroninių apvalkalų struktūras**, kuriant jų modelius ir aprašant tose struktūrose vykstančius pokyčius; 2) **chemijos pasiekimais**, nagrinėjant **cheminių junginių struktūras** ir tas chemines reakcijas, kurių metu iš atskirų atomų konstruojami vis sudėtingesni cheminiai junginiai; 3) **kristalografijos pasiekimais**, nagrinėjant **kristalų struktūras** ir tuos procesus, kurių metu formuojasi kristalų vidinė ir išorinė struktūros, suteikdamos kristalams vidinio bei išorinio simetriškumo ir periodiškumo bruožus; 4) **fraktalų teorijos pasiekimais**, nagrinėjant **mastelio simetriją, struktūras, būdingas gyvajai gamtai**, ir gyvųjų organizmų augimo formas bei dėsningumus.

Taip pat nagrinėsime kai kurias kitas **struktūras, būdingas standiesiems judesiams, audinių raštams ir dekoracijoms**. Empirinio induktyvinio struktūrų analizės metodo iliustravimui skirsime šio skyriaus 1.9.1.2., 1.9.1.3., 1.9.1.4., 1.9.1.6. ir 1.9.2.37. skyrelius. Tokios analizės struktūrų algebros sukūrimui, aišku, nepakaks, tačiau minėtų skyrelių studija žymiai **praturtins sistemos struktūros sąvokos sisteminį suvokimą, leis susipažinti su eile svarbių reiškinių ir dėsningumų ir susidaryti aiškesnį vaizdą, kaip būtų galima ir reikėtų taikyti empirinį induktyvinį metodą**, kuriant sistemų struktūrų algebrą ir, bendrai, vystant sistemotyros mokslą. Pats tas svarbus ir sudėtingas darbas dar priešaky ir reikia, kad atsirastų žmonių, kurie ryžtųsi šį darbą atlikti.

Taikydamas **teorinį dedukcinį metodą** bei dar labiau formalizuotą **matematinę jo modifikaciją**, „Ivado“ 0.4. skyrelyje pavadintą trečiuoju galimu sistemotyros mokslo formavimo(si) metodu, šiame skyriuje stengiausi supažindinti skaitytoją su tokia **virtualia matematine abstrakčių elementarių struktūrų vaizdavimo ir operacijų su jomis atlikimo sistema**, kuri leistų iš elementarių struktūrų, taikant įsivestas ir formaliai aprašytas struktūrų algebros operacijas, konstruoti sudėtingesnes struktūras, turinčias įvairių naujų savybių ir galinčias būti **realių sistemų struktūrų modeliais**.

Šio metodo taikymo iliustracijai mokymo priemonėje, mes skirsime šio skyriaus 1.9.1.1., 1.9.1.5. ir 1.9.2. poskyrio 1.9.2.1.–1.9.2.36. skyrelius. Pirmuose dviejuose susipažinsime su elementariomis sistemų struktūromis, taikomomis **grafų teorijoje** ir su **algebrinėmis struktūromis**, taikomomis šiuolaikinėje algebroje, o 1.9.2. poskyrio skyreliuose nagrinėsime įvairias **galimas abstrakčias operacijas su grafinais ir matriciniais struktūrų modeliais bei tų operacijų taikymus, sprendžiant praktinius ir teorinius uždavinius įvairiose srityse**. Šio poskyrio pradžioje pabandysime operacijas su struktūromis klasifikuoti ir sistematizuoti, kad galimų abstrakčių operacijų su struktūromis aibė taptų lengviau apžvelgiama ir ją būtų galima šiek tiek sutvarkyti, nors ir nesukuriant **algebrinių operacijų su tipinėmis sistemų struktūromis antrojo tipo sistemos**. Tokios sistemos sukūrimas – labai sudėtingas ir, kuriant sistemų struktūros algebrą, – ne pirmaeilis uždavinys, nes jis vargu ar išsprendžiamas, kadangi sistemų struktūrų ir operacijų su jomis įvairovei ribų nėra. Todėl tenka apsiriboti tik tokia dar gana paviršutiniška klasifikacija.

Žinoma, **šiame skyriuje atlikta realių ir virtualių struktūrų analizė yra tik iliustracija to didelio darbo, kurį reikėtų atlikti**, norint sudaryti sistemų bei jų posistemų tipinių struktūrų ir tipinių operacijų su jomis pakankamai dideles aibes, kurios galėtų tenkinti mokslo ir praktikos poreikius. Dar didesnę darbą tektų atlikti, norint nustatyti pakankamai daug dėsningumų, kuriuos galima pastebėti sistemų struktūrų sąveikavime ir tose transformacijose, kurios vyksta su realių sistemų struktūromis ir gali būti interpretuojamos kaip operacijos su struktūromis. Be tų dėsningumų išsiaiškinimo ir formalizavimo, neįmanoma sukurti sistemų struktūrų algebros matematinio aparato. Visas šis nelengvas, tačiau naudingas ir įdomus darbas dar priešaky ir laukia kantrių ir įžvalgių sistemotyrininkų, pasiryžusių jį atlikti.

Tikiuosi, kad tokie pasišventėliai atsiras ir anksčiau ar vėliau bus sukurta:

- 1) įvairių **struktūrų matematinio aprašymo kalba**, tinkanti ir grafų teorijai, ir fizikai, ir chemijai kartu su mikrobiologija ir genetika, ir organizacijų valdymo sistemoms;
- 2) **tipinių struktūrų matematiniai modeliai**, sugebantys atvaizduoti sistemų struktūras įvairiose srityse ir įvairiose formose;
- 3) **struktūrų sąveikavimo, to sąveikavimo metu vykstančių transformacijų ir jų rezultatų aprašymo** ir formalaus jų gavimo, operuojant su struktūrų modeliais, **matematinis aparatas**;
- 4) sudėtingesnių struktūrų konstravimo iš paprastesnių, jų sintezės bei dekompozicijos į paprastesnes struktūras matematinis aparatas, leidžiantis spręsti reikalingų **struktūrų projektavimo** ir tų **struktūrų optimizavimo uždavinius**.

Tačiau, prieš sukuriant bendrąją struktūrų algebrą, kadangi tai labai sudėtingas darbas, kurį atlikti iškart yra labai sunku, **galima čia išvardintų tikslų siekti dalimis, pradžioje kuriant struktūrų algebras atskiroms sritims**. Kai kuriose srityse jau pasiekti gana reikšmingi rezultatai.

Pavyzdžiui, jau dabar efektyviai taikoma **perdavimo funkcijų algebra** sistemoms, sudarytoms iš tiesinių blokų (žiūr. šios mokymo priemonės 1.11 ir 1.12 skyrius), **diakoptikos** [108] **aparatas** elektrinėms schemoms, **grafų teorija**, taikoma sistemoms, kurių struktūros vaizduojamos loginėje stratoje grafais ar matricomis (apie tai bus kalbama šiame skyriuje).

Jau dabar galima bandyti kurti ir taikyti struktūrų algebrą atominėje fizikoje, chemijoje, kristalografijoje, standžiųjų judesių mechanikoje ir pan.

Kuriant tokias algebras, o po to jas apibendrinant ir jungiant į bendrąją struktūrų algebrą, gali būti taikomi abu jau minėti – empirinis indukcinis ir dedukcinis – metodai ir jų sintezė.

1.9.1. Struktūrų klasės ir jų žymėjimas

Norint įvesti struktūrų klasių žymėjimus, pradžioje reikėtų išskirti pačias struktūrų klases ir sudaryti **struktūrų klasifikavimo sistemą**. Tačiau sukurti **pilną**

antrojo tipo sistemą, kurios elementais būtų visos struktūrų klasės, nepaprastai sunku (jei iš viso įmanoma), nes, didėjant struktūros elementų skaičiui, galimų **struktūrų klasių įvairovė auga tiesiog katastrofiškai** (žiūr. [98], 249–268 p.). Todėl šiandien galima kalbėti tik apie bandymus identifikuoti ir klasifikuoti tik kai kurias dažniausiai sutinkamas ir nagrinėjamas struktūras, tik kai kurių tipų grafus (žiūr. [98], kur pavaizduotos kai kurių paprastų grafų, orgrafų bei medžių diagramos) ir tik apie atskirus kai kurių dažniau pasitaikančių nesudėtingų struktūrų žymėjimus (identifikatorius) grafų teorijoje, atominėje fizikoje, chemijoje, kristalografijoje ir t. t., dar nesudarančius net atviros struktūrų bei jų matematinių modelių žymėjimo sistemos (jau nekalbant apie žymėjimų sistemos pilnumą, t. y. uždarumą).

Susipažinsime su kai kuriomis struktūrų klasėmis ir jų žymėjimais kai kuriose srityse: grafų teorijoje, atominėje fizikoje, chemijoje, kristalografijoje, algebrinių struktūrų teorijoje ir eilėje kitų sričių. Tai leis mums gauti kelias svarbias realiai egzistuojančių struktūrų ir tipinių operacijų su jomis aibes, t. y. leis **pradėti kaupiti empirinę bazę**, reikalingą bandant taikyti struktūrų algebros kūrimui pirmąjį – empirinį indukcinį – metodą.

1.9.1.1. Elementarios tipinės struktūros grafų teorijoje

Sistemų struktūrų aprašymui ir nagrinėjimui **loginėje stratoje** galima taikyti grafų teoriją ir jos simboliką bei matematinį aparatą. Trumpai apžvelgsime **tipinius elementarius grafus – elementarias tipines struktūras**.

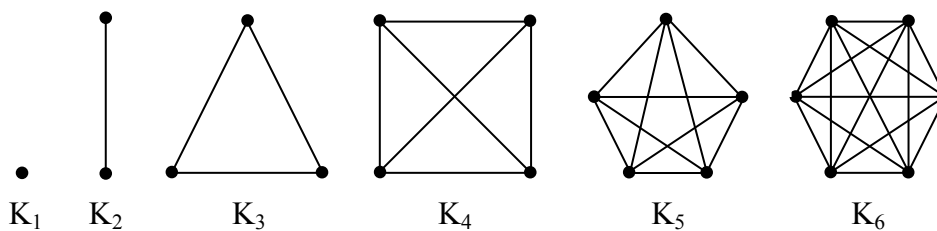
1) K_n – **pilnas grafas**, turintis n viršūnių. Tai struktūra, priklausanti paprastų grafų tipui, kurioje **kiekvienas struktūros elementas susijęs su kiekvienu kitu tos struktūros elementu** vienu abipusiu ryšiu.

Pilno grafo K_n viršūnių skaičius $p=n$, o jo briaunų skaičius $q = \frac{n(n-1)}{2}$. Jeigu suskaičiuotume

K_n lankų (ir jo struktūrą vaizduojančios matricos vienetukų) skaičių ℓ , tai gautume, jog $\ell = 2q = n(n-1)$.

Visi K_n struktūros elementai yra vienodi, nes **kiekvienas pilno grafo sudėties elementas užima vienodą padėtį K_n struktūroje**. Patys sudėties elementai gali būti ir nevienodi.

48 pav. vaizduojamos struktūros K_1, K_2, K_3, K_4, K_5 ir K_6 . Kiekvienas K_n elementas surištas su $n-1$ elementu, todėl kiekvienas pilno grafo viršūnės v_i laipsnis lygus $\deg v_i$ yra $n-1$.



48 pav.

Sistemų, turinčių struktūrą K_n , pavyzdžiai: 1) tiesioginių ryšių tarp didžiųjų valstybių vadovų sistema; 2) tiesioginių transporto ryšių sistema tarp bendras sienas turinčių Belgijos, Liuksemburgo, Prancūzijos ir Vokietijos sostinių, sudaranti tinklą K_4 .

Sudaryti tokį **plokščiąjį pilnąjį grafą K_n** , kurio briaunos, priklausydamos grafo plokštumai, galėtų kirstis tik grafo viršūnėse, galima tik tada, kai $n \leq 4$. Šia pilnojo plokščiojo grafo savybe naudojamosi „keturių spalvų teoremos“* įrodyme.

Kadangi struktūroje K_n **visi struktūros elementai yra visiškai vienodi**, tai net tuo atveju, kai sistemos, turinčios struktūrą K_n , **sudėties elementai nėra vienodi, sudėties elementų sukeitimas**

* „Keturių spalvų teorema“ teigia, jog nuspalvinimui politinio žemėlapiu, kuriame valstybės, turinčios bendrą sienos atkarpą, turės skirtingas spalvas, pakanka tik keturių spalvų. Ši teorema buvo suformuluota kaip hipotezė XIX a. viduryje, tačiau ji buvo įrodyta tik 1976 m., pasitelkus kompiuterinę techniką. Anksčiau – 1890 m. – buvo įrodytas silpnesnis teiginys: plokščio žemėlapiu nudažymui pakanka 5 spalvų.

vietais sistemoje nieko nekeičia. Tokia sistema galėtų pasikeisti tik tada, kada joje kurį nors sudėties elementą pakeistume nauju, paimtu iš sistemos išorės ir nesutampančiu su keičiamuoju sistemos elementu.

Todėl, turėdami $N \geq n \geq 1$ skirtingų elementų, nesutampančių nė su vienu kitu tos aibės elementu, galėtume sudaryti ne daugiau kaip $C_N^n = \frac{N!}{n!(N-n)!}$ skirtingų sistemų, turinčių izomorfiškas struktūras

K_n .

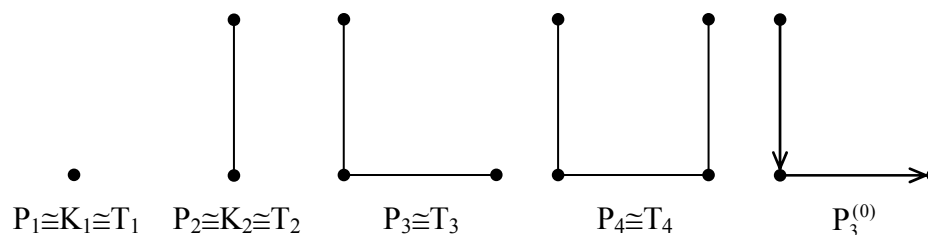
Jei aibėje, sudarytoje iš N elementų, kai kurie elementai būtų vienodi, tai skirtingų sistemų, turinčių struktūrą K_n , skaičius būtų dar mažesnis ir jis taptų lygus 1, kai visi elementai taptų vienodi.

Nesunku įrodyti, jog iš aibės, turinčios $N = \sum_{i=1}^r m_i$ elementų, kurioje m_i yra vienodų elementų,

priklausančių grupei i , skaičius, o r – tokių skirtingų grupių skaičius, kai tenkinama sąlyga $\forall i (r \leq n \leq m_i)$, galima sudaryti $C_{n+r-1}^{r-1} = C_{n+r-1}^n$ skirtingų pilnųjų grafų K_n . Pabandykite įrodyti šį teiginį, remdamiesi skirtingų derinių su pasikartojimais skaičiaus nustatymo bei sveikų neneigiamų n dėmenų sumos, lygios n , sudarymo galimų skirtingų būdų skaičiaus apskaičiavimo metodais. Jei šio teiginio įrodymo jums rasti nepavyktų, tai dar kartą perskaitykite šios mokymo priemonės 1.5.11. skyrelį ir ten nurodytas šių eilučių autoriaus knygeles.

2) P_n – **paprasta grandinė**, turinti n viršūnių. Tai struktūra, kurioje kiekvienas vidinis elementas surištas abipusiai ryšiais su dviem kaimyniniais elementais, o du kraštiniai – kiekvienas tik su vienu elementu. Kai $n \leq 2$, tai grandinė P_n neturi vidinių elementų, o kai $n=1$, tai abu kraštiniai grandinės P_n elementai susilieja į vieną.

Paprastų grandinių pavyzdžiai – 49 pav. vaizduojamos struktūros P_1, P_2, P_3 ir P_4 .



49 pav.

Sistemų, turinčių paprastų grandinių P_n struktūrą, pavyzdžiai: stuburo slankstelių grandinė stubure, traukinio vagonų grandinė, anglies atomų grandinės aciklinių sočiųjų organinių junginių (angliavandenilių ir pan.) molekulėse ir pan.

Kai $n > 2$, tai grandinės P_n sudėties elementų padėtis struktūroje P_n jau nėra vienoda. Todėl grandinėje P_n , sudarytoje net iš visiškai vienodų sudėties elementų, kai kurie jos elementai tampa nebevienodi kaip struktūros elementai: būdami vienodi savo individualiomis savybėmis, jie jau skirsis savo struktūrinėmis savybėmis, nes užims grandinėje nevienodą padėtį kitų elementų atžvilgiu, kitaip tariant, **būdami vienodi kaip sistemos sudėties elementai, jie bus skirtingi kaip jos struktūros elementai. Todėl tie elementai bus skirtingi grandinės sandaros elementai, būdami vienodais jos sudėties elementais.**

Kita vertus, iš skirtingų elementų galima sudarinėti grandines P_n , turinčias **izomorfiškas struktūras, nors ir skirtingą sudėtį.** Pavyzdžiui, iš $N \geq n \geq 2$ skirtingų elementų galima sudaryti

$C_N^n \cdot \frac{1}{2} \cdot P_n = \frac{N!}{2(N-n)!}$ skirtingų sistemų, turinčių tą pačią (izomorfišką) struktūrą P_n , bet

nesutampančias sudėtis. Kai aibėje, sudarytoje iš N elementų, kai kurie sudėties elementai tampa vienodi, šis skaičius mažėja ir tampa lygus 1, kai visi elementai tampa vienodi.

Paprastoje grandinėje P_n viršūnių skaičius $p=n$, briaunų skaičius $q=n-1$, lankų skaičius $\ell = 2(n-1)$. Dvi P_n viršūnės turi laipsnį deg $_v$, lygų 1, visos kitos – lygų 2.

Iš aibės, turinčios $N = \sum_{i=1}^r m_i$ elementų, kurią sudaro r poaibių po m_i elementų, kai kiekviename poaibyje elementai vienodi, bet skirtinguose poaibiuose – skirtingi, o skaičiai r, n ir m_i

tenkina sąlygą $\forall i (r \leq n \leq m_i)$, galima sudaryti $\frac{r^n + r^{\left\lceil \frac{n+1}{2} \right\rceil}}{2}$ skirtingų grandinių P_n . Šioje formulėje $\left\lceil \frac{n+1}{2} \right\rceil$

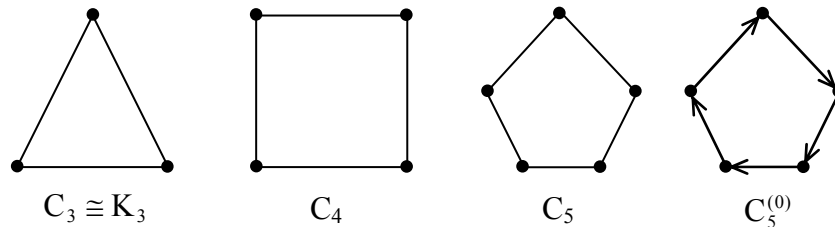
vaizduoja sveikąjį skaičių $\frac{n+1}{2}$ dalį. Pabandykite įrodyti šį teiginį. Tokių įrodymų paieškos lavina „sisteminių mastymų“, labai naudingą ieškant sisteminių dėsningumų.

3) $P_n^{(0)}$ – **orientuota grandinė**, turinti n viršūnių, – tai grandinė, kurios viršūnės surištos **vienpusiais vienos krypties ryšiais**. 49 pav. vaizduojama $P_3^{(0)}$. Orientuota grandinė $P_n^{(0)}$ turi $p=n$ viršūnių ir $\ell=n-1$ lankų. Orientuotų grandinių pavyzdžiai: eilė prie kasos, mėnesio dienos ir t. t.

Orientuotos grandinės $P_n^{(0)}$ struktūriniai elementai nėra vienodi, nors sistemos, turinčios struktūrą $P_n^{(0)}$, sudėties elementai gali būti vienodi (o taip pat – ir nevienodi). Iš $N \geq n \geq 2$ skirtingų objektų ar procesų galima sudaryti $C_N^n \cdot P_n = \frac{N!}{(N-n)!}$ skirtingų izomorfiškų sistemų, turinčių struktūrą $P_n^{(0)}$.

Dviejų skirtingai orientuotų iš tų pačių vienodai išdėstytų elementų sudarytų grandinių $P_n^{(0)}$ ir $P_n^{(0)}$ struktūros sąsajos operacijos $P_n^{(0)} \cup P_n^{(0)}$ (žiūr. 1.9.2.21.1 skyrelį) rezultatas yra paprastoji grandinė P_n .

4) C_n – **paprastas ciklas**, turintis n viršūnių. Paprastas ciklas C_n gaunamas iš paprastos grandinės P_{n+1} , sujungus ir sutapatinus jos galus. 50 pav. vaizduojamos struktūros C_3, C_4, C_5 .



50 pav.

C_n turi $p=n$ viršūnių ir $q=n$ briaunų. Lankų skaičius $\ell=2q=2n$. Visos C_n viršūnės turi vienodus laipsnius, lygius 2. Todėl **cikle C_n visų struktūros elementų padėtis yra panaši, nors sistemoje, turinčioje struktūrą C_n , sudėties elementai gali būti ne būtinai vienodi ir tuomet kai kurių struktūros elementų padėtis cikle C_n gali tapti jau nebevienoda**. Todėl iš $N \geq n \geq 3$ skirtingų esybių galima sudaryti $C_N^n \cdot \frac{1}{2} \cdot P_{n-1} = \frac{N!}{2n(N-n)!}$ skirtingų sistemų, turinčių izomorfišką struktūrą C_n .

Iš aibės, turinčios $N = \sum_{i=1}^r m_i$ elementų, kurią sudaro r poaibių po m_i elementų i -tajame poaibyje, kai kiekviename poaibyje visi elementai vienodi, o skirtinguose poaibiuose – skirtingi, skaičiams r, n ir m_i tenkinant sąlygas $\forall i (r \leq n \leq m_i)$, galimų sudaryti izomorfiškų, bet besiskiriančių savo sudėtimi ciklų C_n skaičiai yra tokie:

$$a) \frac{r^n - r}{n} + r = \frac{r^n + (n-1)r}{n} = \frac{r(r^{n-1} + n-1)}{n}, \text{ kai } n - \text{pirminis skaičius};$$

$$b) \frac{r^n - r - \sum_{j=1}^k (r^{n_j} - r)}{n} + r + \sum_{j=1}^k \frac{r^{n_j} - r}{n_j}, \text{ kai } n = \prod_{j=1}^k n_j^{\alpha_j} \text{ ir } \min_j n_j \geq r, \text{ kur } n_j - \text{pirminiai}$$

skaičiai, i kurių laipsnių $n_j^{\alpha_j}$ sandaugą skaidosi skaičiaus n , o α_j – sveiki skaičiai, esantys pirminių skaičių n_j laipsnių rodikliais skaičiaus n skaidinyje $\prod_{j=1}^k n_j^{\alpha_j}$;

c) bendruoju atveju, kai dalis pirminių skaičių n_j gali būti mažesni už r , pirminių skaičių n_j aibė $\{n_j\}$ suskaidoma į du poaibius $\{n_v\}$ ir $\{n_w\}$, priskiriant poaibiui $\{n_v\}$ visus tuos n_j , kurie tenkina sąlygą $n_j \geq r$, o poaibiui $\{n_w\}$ – likusius n_j , t. y. tuos n_j , kurie tenkina nelygybę $n_j < r$; tuomet gauname, jog

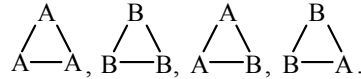
$$n = \prod_{j=1}^k n_j^{\alpha_j} = \prod_{v=1}^{k_1} n_v^{\alpha_v} \cdot \prod_{w=1}^{k_2} n_w^{\alpha_w} \text{ ir } k_1 + k_2 = k, \text{ o po to galime įrodyti, kad skirtingų ciklų } C_n \text{ skaičius gali}$$

būti apskaičiuotas naudojantis formule

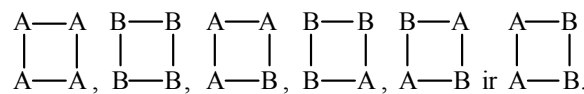
$$\frac{r^n - r - \sum_{v=1}^{k_1} (r^{n_v} - r) - \sum_{w=1}^{k_2} C_r^{n_w} (n_w^{n_w} - n_w)}{n} + r + \sum_{v=1}^{k_1} \frac{r^{n_v} - r}{n_v} + \sum_{w=1}^{k_2} C_r^{n_w} \frac{n_w^{n_w} - n_w}{n_w}.$$

Formulę „c“ galima laikyti bendrąja formule, tinkančia bet kuriam atvejui, tenkinančiam sąlygą $\forall i (r \leq n \leq m_i)$, nes kai $\min_j n_j \geq r$, tai poaibis $\{n_w\}$ tampa tuščias ir iš formulės „c“ gauname formulę „b“, o kai n – pirminis skaičius – formulę „a“.

Pavyzdžiai, kai $r=2$ ir $n=3$, tai, taikydami formulę „a“, gauname, jog šiuo atveju galima sudaryti $\frac{r^n + r(n-1)}{n} = \frac{2^3 + 2 \cdot 2}{3} = 4$ skirtingus ciklus C_3 . Tai ciklai:



Kai $r=2$ ir $n=4=2^2$, tai tenka naudotis formule „b“. Gauname, jog šiuo atveju egzistuoja $\frac{2^4 - 2 - (2^2 - 2)}{4} + 2 + \frac{2^2 - 2}{2} = 3 + 2 + 1 = 6$ skirtingi ciklai C_4 . Tai ciklai:



Kai $r=3$ ir $n=12=2^2 \cdot 3$, tenka naudotis jau formule „c“. Gauname, kad egzistuoja $\frac{3^{12} - 3 - (3^3 - 3) + C_3^2(2^2 - 2)}{12} + 3 + \frac{3^3 - 3}{3} + C_3^2 \frac{2^2 - 2}{2} = \frac{3^{12} - 33}{12} + 3 + 8 + 3 \cdot 1 = \frac{3^{11} - 11}{4} + 14 = 44284 + 14 = 44298$ skirtingi ciklai C_{12} .

Kaip jau buvo ką tik minėta, būtų naudinga, jei skaitytojas pabandytų išsiaiškinti, kaip išvedamos formulės „a“, „b“ ir „c“, o dar geriau – pats pabandytų jas savarankiškai išvesti. Būsimiems sudėtingų sistemų analitikams būtina lavinti sistematizavimo įgūdžius.

Sistemos, turinčios struktūrą C_n , pavyzdys – šokančių n vaikų ratelis. Liaudies šokiuose įvairūs ciklai C_n – viena iš tipinių šokio figūrų.

Kitas ciklo pavyzdys – benzolo žiedas, sudarytas iš šešių anglies atomų. Benzolo žiedą galima rasti įvairių ciklinių aromatinių angliavandenilių (benzolo, toluolo, ksilolo, naftalino, antraceno, difenilo, difenilmetano ir t. t.) molekulėse. Tiesa, pačią benzolo C_6H_6 molekulę sudaro ne tik iš anglies atomų sudarytas benzolo žiedas C_6 , bet ir prie kiekvieno anglies atomo prijungtas vandenilio H atomas.

5) $C_n^{(0)}$ – **orientuotas ciklas**, turintis n viršūnių. Orientuotas ciklas $C_n^{(0)}$ gaunamas iš orientuotos grandinės $P_{n+1}^{(0)}$, sujungus ir sutapatinus jos galus. 50 pav. vaizduojamas $C_5^{(0)}$. Orientuotas ciklas $C_n^{(0)}$ turi $p=n$ viršūnių ir $\ell=n$ lankų.

Sistemų bei procesų, turinčių orientuoto ciklo struktūrą, pavyzdžiai: medžiagų apykaitos ciklas ekosistemoje, metų laikų ciklas mūsų planetoje, nuolatinės elektros srovės grandinė, turinti savo sudėtyje kokią nors puslaidininkį.

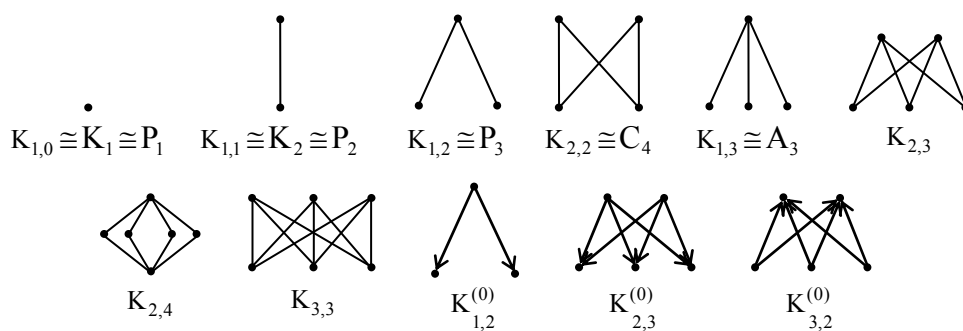
Orientuoto ciklo $C_n^{(0)}$ visų struktūros elementų padėtis yra panaši nors, sistemos turinčios struktūrą $C_n^{(0)}$, sudėties elementai gali būti ne būtinai vienodi ir tuomet kai kurių ar net visų struktūros $C_n^{(0)}$ elementų padėtis sistemoje gali tapti jau nebevienoda.

Iš $N \geq n \geq 2$ skirtingų objektų bei procesų galima sudaryti $C_N^n \cdot P_{n-1} = \frac{N!}{n \cdot (N-n)!}$ skirtingų sistemų, turinčių izomorfiškas struktūras $C_n^{(0)}$. Pusės šios aibės sistemų elementai bus surišti ryšiais, orientuotais į vieną pusę (pavyzdžiui, laikrodžio rodyklės kryptimi), pusė – į kitą (t. y. prieš laikrodžio rodyklę).

Dviejų skirtingai orientuotų iš vienodų elementų sudarytų ciklų $C_n^{(0)}$ ir $C_n^{(0)}$ sąsajos $C_n^{(0)} \cup C_n^{(0)}$, o taip pat paprastos disjunkcijos $C_n^{(0)} \vee C_n^{(0)}$ (žiūr. 1.9.2.25 skyrelį) rezultatas yra paprastas ciklas C_n .

6) $K_{m,n}$ – pilnas bigrafas yra struktūra, kurioje kiekvienas iš m pirmosios grupės elementų (viršūnių) yra sujungtas su kiekvienu iš n antrosios grupės elementų (viršūnių) abipusiais ryšiais, o pačiose grupėse elementai nėra sujungti. Todėl šioje struktūroje $p=m+n$, $q=m \cdot n$, $\ell = 2m \cdot n$. Grafo $K_{m,n}$ m viršūnių turi laipsnius, lygus n , o n viršūnių – laipsnius, lygus m .

51 pav. vaizduojamos struktūros $K_{1,0}$, $K_{1,1}$, $K_{1,2}$, $K_{2,2}$, $K_{1,3}$, $K_{2,3}$, $K_{2,4}$, $K_{3,3}$. Bigrafai $K_{1,n}$ kartais vadinami žvaigždėmis (žvaigždinėmis struktūromis) ir žymimi A_n .



51 pav.

Sistemos, turinčios bigrafinę struktūrą $K_{2,4}$, pavyzdys – iš šiaudelių sukonstruota „erdvinė žvaigždutė“, kuri gaunama, sujungus dviejų statmenų rombų bukąsias (kampai – po 120°) viršūnes. Ta pati struktūra $K_{2,4}$ vaizduoja seniai išsiskyrusių ir tarpusavyje nebendraujančių buvusių vyro ir žmonos santykius su keturiais atskirai gyvenančiais ir tarpusavyje nebendraujančiais suaugusiais jų vaikais. Bigrafinės struktūros gali susiklostyti ir įvairių įstaigų darbuotojams bendraujant su piliečiais, turinčiais reikalų keliose įstaigose. Bigrafines struktūras turi kai kurios molekulės, kurių atomai surišti kovalentiniais ryšiais.

Žvaigždės A_4 struktūrą turi metano CH_4 molekulė: jos centre esantis anglies atomas viengubais ryšiais sujungtas su kiekvienu iš keturių vandenilio atomų. Tokią pačią struktūrą turi ir anglies tetrachlorido CCl_4 molekulė.

Iš $N \geq n+m$ skirtingų objektų, kai $n \geq 1$, $m \geq 1$ ir $n \neq m$, galima sudaryti $C_N^n \cdot C_{N-n}^m = C_N^m \cdot C_{N-m}^n = \frac{N!}{n!m!(N-n-m)!}$ skirtingų sistemų, turinčių izomorfiškas struktūras $K_{m,n}$. Kai $n=m \geq 1$, tokių sistemų skaičius dėl bigrafo simetriškumo dvigubai sumažėja ir iš $N \geq 2m$ skirtingų objektų galima sudaryti tik $\frac{N!}{2(m!)^2(N-2m)!}$ skirtingų sistemų, turinčių izomorfiškas ir simetriškas struktūras $K_{m,m}$.

Pilname bigrafe $K_{m,n}$ jo elementų, priklausančių tai pačiai bigrafo grupei, padėtis bigrafo struktūroje yra vienoda (nepriklausomai nuo to, iš kokių elementų – vienodų ar nevienodų – tas bigrafas yra sudarytas). Bigrafo elementų, priklausančių skirtingoms grupėms, padėtis bigrafo struktūroje gali skirtis ir bus vienoda tik tada, kai $m=n$ ir abi bigrafo elementų grupės turi vienodą sudėtį.

7) $K_{m,n}^{(0)}$ – **orientuotas bigrafas**. Jis gaunamas iš paprasto bigrafo $K_{m,n}$, pakeitus abipusius ryšius vienpusiais vienodai orientuotais ryšiais. 51 pav. vaizduojami orientuoti bigrafai $K_{1,2}^{(0)}$, $K_{2,3}^{(0)}$, $K_{3,2}^{(0)}$. Orientuotas bigrafas $K_{m,n}^{(0)}$ turi $p=m+n$ viršūnių ir $\ell=m \cdot n$ lankų.

Sistemos, turinčios orientuoto bigrafo $K_{m,n}^{(0)}$ struktūrą, pavyzdžiu gali būti kovinių strateginių raketų su branduolinėmis galvutėmis paleidimo sistema, kurioje raketos paleidžiamos skrydžiui iš anksto apskaičiuotomis trajektorijomis tik atėjus specialioms signalams iš visų iš anksto nustatyto skaičiaus ir lygio atsakingų asmenų.

Iš $N \geq n+m$ skirtingų objektų, kai $n \geq 1$ ir $m \geq 1$, galima sudaryti $C_N^m \cdot C_{N-m}^n = C_N^n \cdot C_{N-n}^m = \frac{N!}{n!m!(N-n-m)!}$ skirtingų sistemų, turinčių izomorfiškas struktūras $K_{m,n}^{(0)}$, ir tiek pat skirtingų sistemų, turinčių izomorfiškas struktūras $K_{n,m}^{(0)}$. Kai $n=m$, tai sudarytųjų skirtingų sistemų, turinčių struktūras $K_{n,m}^{(0)} = K_{m,m}^{(0)}$, aibė sutaps su sudarytųjų skirtingų sistemų, turinčių struktūras $K_{m,n}^{(0)} = K_{m,m}^{(0)}$, aibe. Todėl iš $N \geq 2m$ skirtingų elementų galima sudaryti tik $\frac{N!}{(m!)^2(N-2m)!}$ skirtingų sistemų, turinčių struktūrą $K_{m,m}^{(0)}$.

Dviejų iš vienodų elementų sudarytų, bet skirtingai orientuotų bigrafų, sąsajos $K_{m,n}^{(0)} \cup K_{m,n}^{(0)}$ rezultatas yra bigrafas $K_{m,n}$.

8) Q_m – **m-matis kubas**. Tai grafas, kurio sudarymo algoritmas yra toks:

a) priimama, kad $Q_0 \cong K_1$,

b) Q_m gaunamas, sujungus dviejų Q_{m-1} atitinkamas viršūnes.

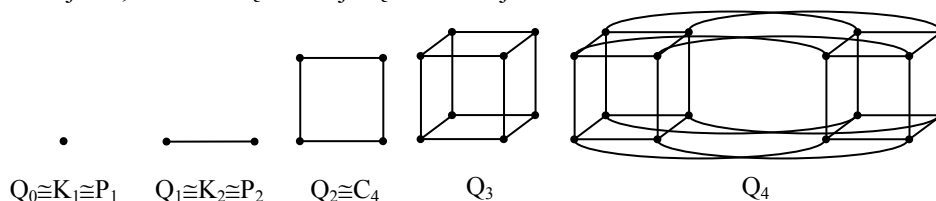
Struktūra Q_m turi $p_m = 2^m$ elementų (viršūnių) ir $q_m = 2q_{m-1} + 2^{m-1}$ abipusių ryšių (briaunų). Briaunų skaičiaus q_m apskaičiavimui galima gauti paprastesnę (ne rekurentinę) formulę: $q_m = 2^{m-1} + 2q_{m-1} = 2^{m-1} + 2(2^{m-2} + 2q_{m-2}) = 2^{m-1} + 2^{m-1} + 2 \cdot 2(2^{m-3} + 2q_{m-3}) = 3 \cdot 2^{m-1} + 2^3 \cdot q_{m-3} = 4 \cdot 2^{m-1} + 2^4 \cdot q_{m-4} = \dots = m \cdot 2^{m-1} + 2^m \cdot q_{m-m}$. Kadangi $q_0 = 0$, tai $q_m = m \cdot 2^{m-1}$. Pavyzdžiui, $q_1 = 1$, $q_2 = 4$, $q_3 = 12$, $q_4 = 32$. Kadangi $\ell = 2q$, tai $\ell = m \cdot 2^m$.

Formulę $\ell = m \cdot 2^m$ galima gauti ir kitu (paprastesniu) būdu: kadangi kubas Q_m turi $p_m = 2^m$ viršūnių ir kadangi iš kiekvienos viršūnės išeina po m lankų, tai bendras lankų skaičius $\ell = m \cdot 2^m$.

Struktūroje Q_m visi struktūros elementai yra vienodi, t. y. visi sudėties elementai struktūroje Q_m užima vienodą padėtį ir turi vienodus laipsnius, lygus m . Patys sudėties elementai gali būti ir nevienodi.

52 pav. vaizduojami Q_0 , Q_1 , Q_2 , Q_3 ir Q_4 .

Trimatę kubinę struktūrą turi kristalų, priklausančių kubinei sistemai (singonijai), kristalinės gardelės. Paprastą kubinę gardelę turi, pavyzdžiui, pirit (geležies sulfido FeS_2) kristalai. Centruotą kubinę gardelę turi valgomosios druskos ($NaCl$) kristalai, kuriuose kiekvieną natrio joną simetriškai supa 6 chloro jonai, o kiekvieną chloro joną – 6 natrio jonai.



52 pav.

Kubo Q_m , kur $m=1,2,3,4, \dots$ „paviršiumi“ vadinsime kubų Q_{m-1} aibę, ribojančią kubo Q_m „vidų“ nuo jo išorės. Kadangi kiekviena kubo Q_m viršūnė priklauso m kubams Q_{m-1} , tai bendrą kubų Q_{m-1} , ribojančių kubą Q_m ir sudarančių jo „paviršių“, skaičių F_m , vadinamą kubo Q_m „sienų“ skaičiumi,

galima rasti iš formulės $F_m = \frac{m \cdot p_m}{p_{m-1}} = \frac{m \cdot 2^m}{2^{m-1}} = 2m$.

Pavyzdžiui, kai $m=1$, tai $F_1 = 2 \cdot 1 = 2$, iš kur išplaukia, kad kubo Q_1 , (t. y. vienmatės atkarpos) „paviršių“ sudaro 2 kubai Q_0 , t. y. du taškai, esantys tos atkarpos galuose.

Kai $m=2$, tai gauname, jog $F_2 = 2 \cdot 2 = 4$, iš kur išplaukia, jog kubo Q_2 „paviršių“ sudaro 4 kubai Q_1 , t. y. kvadratą riboja 4 atkarpos.

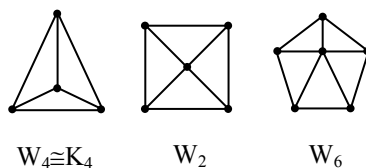
Kai $m=3$, tai $F_3 = 2 \cdot 3 = 6$: trimatnio kubo Q_3 paviršių sudaro 6 kubai Q_2 , t. y. 6 kvadratinės jo sienos. Pažymėję kubo Q_3 sienų skaičių žymeniu F , viršūnių skaičių V ir briaunų skaičių E , nesunkiai įsitikinsime, kad trimatniam kubui Q_3 , kaip ir bet kuriam uždaram trimatniam daugiasieniui, galioja **Oilerio formulė** $V + F = E + 2$, kur $V = p_3 = 2^3 = 8$, $F = F_3 = 2 \cdot 3 = 6$, $E = q_3 = 3 \cdot 2^2 = 12$. Ši formulė galioja ir plokštumoje bet kuriam uždaram daugiakampiui, nes toks daugiakampis dalina plokštumą į dvi dalis, todėl $F=2$, o viršūnių ir kraštinių skaičiai uždaram daugiakampyje yra lygūs ir todėl $V=E$.

Analogiškai gauname, kad Q_4 „paviršių“ sudaro $F_4 = 8$ trimatniai kubai Q_3 ir t. t.

Šiek tiek sunkiau apskaičiuoti, kiek skirtingų sistemų, turinčių izomorfišką struktūrą Q_m , galima sudaryti iš $N \geq 2^m$ skirtingų elementų, nes tokių sistemų skaičius k_m , didėjant m , labai greitai auga.

Pavyzdžiui, kai $m=0$, tai $k_0 = N$; kai $m=1$, tai $k_1 = \frac{N(N-1)}{2}$; kai $m=2$, tai $k_2 = \frac{N(N-1)(N-2)(N-3)}{8}$; kai $m=3$, tai $k_3 = \frac{N(N-1)(N-2)(N-3)(N-4)(N-5)(N-6)(N-7)}{48}$ ir t. t.

9) W_n – „**ratas**“, sudarytas iš „ratlankio“ C_{n-1} ir „rato centro“ K_1 , sujungto su visomis „ratlankio“ viršūnėmis. Struktūrų W_n pavyzdžiai – 53 pav. vaizduojamos struktūros W_4 , W_5 ir W_6 .



53 pav.

Struktūra W_n turi $p=n$ viršūnių ir $q=n-1+n-1=2n-2=2(n-1)$ briaunų. Lankų skaičius $\ell=2q=4(n-1)$. Viena W_n viršūnė turi laipsnį $n-1$, kitos – laipsnius, lygius 3.

„Rato“ W_n struktūra gali būti gauta, jungiant paprastą ciklą C_{n-1} su žvaigžde A_{n-1} . Turint $N \geq n \geq 4$ skirtingų elementų, galima sudaryti $N \cdot C_{N-1}^{n-1} \cdot \frac{P_{n-2}}{2} = \frac{N!}{2(n-1)(N-n)!}$ skirtingų sistemų, turinčių izomorfiškas struktūras W_n .

„Rato“ W_n struktūros konstrukcijos dėl jų standumo dažnai naudojamos statyboje ir, bendrai, technikoje. Vargu ar įmanoma pervertinti tą didžiulį vaidmenį, kurį suvaidino ir dar dabar tebevaidina mūsų civilizacijos evoliucijoje nežinomo genialaus išradėjo gilioje senovėje išrastas ratas. Juk gamtoje rato konstrukcija nėra paplitusi. Įdomu, kokias savybes turėtų molekulė, jei jos struktūra būtų, pavyzdžiui, W_5 (ką teoriškai, atrodytų, būtų galima padaryti, jungiant keturvalentės anglies atomą su keturiais trivalenčio azoto atomais)? „Rato“ struktūra būdinga organizacijoms, turinčioms centralizuotą vertikalų valdymą ir horizontalius ryšius tarp gretimų valdomų elementų.

10) T_n – **medis**, turintis n viršūnių. Medis T_n – tai grafas, kuriame bet kuri jo viršūnė surišta su bet kuria kita viršūne vienintele paprasta grandine. Kitaip tariant, T_n – tai grafas, turintis n viršūnių ir minimalų briaunų skaičių, lygų $n-1$.

Teiginys, jog grandinė P_n turi $n-1$ briauną, yra akivaizdus. Teiginys, kad kiekvienas medis T_n nepriklausomai nuo jo struktūros (o medžių T_n struktūros gali būti gana įvairios, medžiai gali turėti daug šakų, o pastarosios – daug šakelių ir t. t.) visada turi lygiai $n-1$ briauną, nėra toks akivaizdus. Todėl įrodysiu šį teiginį.

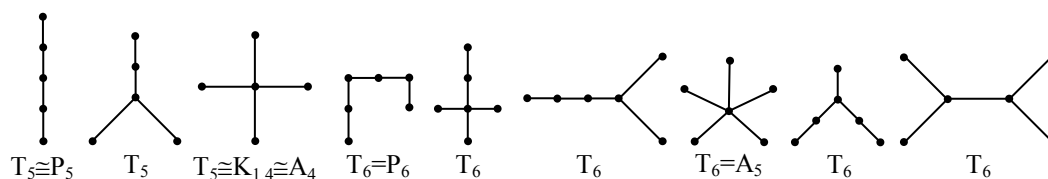
Iš sudėtingo medžio galima gauti paprastesnį, atjungiant nuo jo kokią nors paprastą šaką (šakelę) i , neturinčią savo šakų ir todėl sudarančią „atvirą“ grandinę P_{n_i} („grandinė–spindulį“), kur $n_i \geq 1$ – šakos i viršūnių (šios medžio dalies elementų) skaičius. Kadangi „grandinė–spindulys“ skiriasi nuo „normalios“ grandinės P_{n_i} tuo, kad turi tokią vieną briauną, kurios vienas galas priklauso „grandinei–spinduliui“, o kitas, anksčiau priklausęs likusio medžio vienam iš elementų, dabar yra laisvas, tai atplėšta šaka i , turinti n_i viršūnių, turi $n_i-1+1=n_i$ briaunų. Iš šio fakto išplaukia, jog, atplėsdami nuo medžio kokią nors šaką i , mes sumažiname medžio viršūnių ir medžio briaunų skaičių lygiai tuo pačiu n_i vienetų skaičiumi, t. y. nekeičiame prieš tai medyje egzistavusio skirtumo tarp jo viršūnių ir briaunų skaičių. Tas pats atitinka ir prijungiant prie medžio kokią nors naują šaką.

Atplėsdami nuo sudėtingo medžio šakelę po šakelės, mes anksčiau ar vėliau gausime tokią medžio dalį, kuri bus paprasta grandinė. Joje briaunų skaičius bus vienetu mažesnis už viršūnių skaičių. Prijungdami atplėštąsias šakeles, mes, kaip jau buvo įrodyta, didinsime medžio viršūnių ir briaunų skaičius, nekeisdami skirtumo tarp tų skaičių. Prijungę visas atplėštąsias šakeles ta pačia tvarka, kaip jos buvo atplėšiamos, gausime pradinį medį, tuo pačiu įrodydami, kad bet kuriame medyje T_n viršūnių skaičius n yra vienetu didesnis už jo briaunų skaičių q , lygų $n-1$.

Kai $n \leq 3$, tai viršūnių skaičius n visiškai vienareikšmiškai apibrėžia T_n struktūrą. Gauname struktūras $T_1 \cong K_1 \cong P_1$, $T_2 \cong K_2 \cong P_2$ ir $T_3 \cong P_3 \cong A_2$.

Kai $n=4$, tai jau galimos dvi neizomorfiškos struktūros T_4 : struktūra P_4 ir struktūra $K_{1,3} \cong A_3$.

Kai $n=5$, tai gaunamos trys neizomorfiškos struktūros T_5 . Jos pavaizduotos 54 pav. Jei $n=6$, tai gaunamos 6 neizomorfiškos struktūros T_6 . Jos taip pat pavaizduotos 54 pav.



54 pav.

Struktūroje T_n turime $p=n$ viršūnių (elementų) ir $q=n-1$ briaunų (abipusių ryšių) bei $\ell=2q=2(n-1)$ lankų. Medžio T_n viršūnių laipsniai d_i arba $\deg v_i$ gali būti įvairūs sveiki skaičiai, tenkinantys sąlygą $1 \leq d_i \leq n-1$. Kadangi kiekvieno paprasto grafo viršūnių laipsnių suma turi būti lygi dvigubam briaunų skaičiui $2q$, tai medžio T_n viršūnių laipsniai turi tenkinti dar ir antrąją sąlygą: $\sum_{i=1}^n d_i = 2(n-1)$.

Kadangi kiekvienas medis T_n , kai $n \geq 2$, turi nemažiau kaip du „galus“, tai bent dvi tokio medžio viršūnės turi laipsnius, lygius 1. Pažymėję tas viršūnes numeriais 1 ir n , gausime, jog likusių viršūnių laipsniai

turi tenkinti dar ir trečiąją sąlygą $\sum_{i=2}^{n-1} d_i = 2(n-2)$. Įvedę sveikaskaitinius kintamuosius $y_i = d_i - 1$, gauname,

jog pastarieji turi tenkinti sąlygas: 1) y_i – sveiki skaičiai; 2) $0 \leq y_i \leq n-2$; 3) $\sum_{i=2}^{n-1} y_i = n-2$; 4) $y_1=0, y_n=0$.

Kai $n=3$, tai gauname vienintelį sprendinį $y_2=1, d_2=2$, atitinkantį vienintelį medį $T_3=P_3$.

Kai $n=4$, tai gauname dvi neizomorfiškas struktūras: 1) $y_2=1, y_3=1; d_2=2, d_3=2$; 2) $y_2=2, y_3=0; d_2=3, d_3=1$. Pirmoji jų yra grandinė P_4 , antroji – grafas $K_{1,3} \cong A_3$.

Kai $n=5$, tai gauname 3 atvejus: 1) $y_2=1, y_3=1, y_4=1; d_2=2, d_3=2, d_4=2$; 2) $y_2=2, y_3=1, y_4=0; d_2=3, d_3=2, d_4=1$; 3) $y_2=3, y_3=0, y_4=0; d_2=4, d_3=1, d_4=1$. Tai grafai, pavaizduoti 54 pav.

Kai $n=6$, tai gauname 6 neizomorfiškas struktūras: 1) $y_2=1, y_3=1, y_4=1, y_5=1; d_2=2, d_3=2, d_4=2, d_5=2$; 2) $y_2=2, y_3=1, y_4=1, y_5=0; d_2=3, d_3=2, d_4=2, d_5=1$; 3) $y_2=2, y_3=2, y_4=0, y_5=0; d_2=3, d_3=3, d_4=1, d_5=1$; 4) $y_2=1, y_3=2, y_4=1, y_5=0; d_2=2, d_3=3, d_4=2, d_5=1$; 5) $y_2=3, y_3=1, y_4=0, y_5=0; d_2=4, d_3=2, d_4=1, d_5=1$; 6) $y_2=4, y_3=0, y_4=0, y_5=0; d_2=5, d_3=1, d_4=1, d_5=1$. Šie medžiai taip pat pavaizduoti 54 pav.

Analogiškai gauname, kad medžiai T_7 sudaro 11 neizomorfiškų struktūrų ir t. t.

Struktūrų T_n konstravimas, jungiant objektus į medžius, ir gaunamų medžių skaičiaus apskaičiavimas bus nagrinėjami specialiai šiems klausimams skirtame 1.9.2.4.5. skyrelyje, todėl čia apsiribosiu tik pastaba, jog buvo įrodyta (A. Cayley, 1889), kad iš $n \geq 2$ skirtingų elementų galima sudaryti n^{n-2} skirtingų medžių. Kai $n \leq 3$, tai visi tie medžiai yra izomorfiški ir priklauso grandinių P_2 ir P_3 klasei. Kai $n=4$, tai, kaip buvo ką tik rašyta, gauti 16 skirtingų medžių priklauso jau dviem skirtingoms izomorfiškų struktūrų klasėms: 4 medžiai turi struktūrą A_3 , kiti 12 – struktūrą P_4 . Kai $n=5$, tai gauname 125 skirtingus medžius, iš kurių 5 priklauso žvaigždžių A_4 klasei, 60 – yra grandinės P_5 ir likusieji 60 – struktūros, kurios gaunamos iš žvaigždžių A_3 , pridėdant prie bet kurios nors jos „spindulio“ dar po vieną grandį (o kartu ir po vieną viršūnę, turinčią laipsnį $\deg v=1$).

Kai turime $N \geq n \geq 2$ skirtingų elementų, tai iš jų galima sukonstruoti $C_N^n \cdot n^{n-2}$ skirtingų medžių T_n . Skirtingų medžių skaičius žymiai sumažėja, kai visi elementai vienodi. Tuomet galima sukonstruoti tik du skirtingus medžius, turinčius struktūrą T_4 , tris skirtingus medžius, turinčius struktūrą T_5 , šešis skirtingus medžius, turinčius struktūrą T_6 , vienuolika skirtingų medžių, turinčių struktūrą T_7 , 23 skirtingus medžius, turinčius struktūrą T_8 ir t. t.

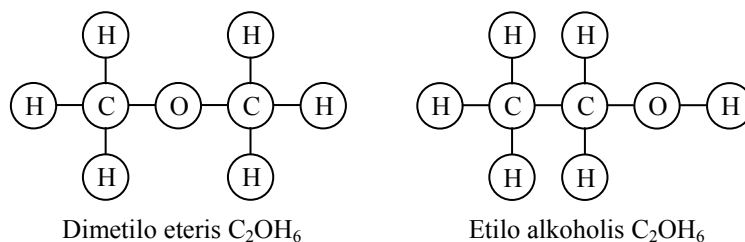
Sistemos, turinčios medžio T_n struktūrą, gana plačiai paplitusios gamtoje. Tai ne tik medžiai su savo šakomis ir šaknimis, bet ir didelė grupė molekulių, priklausančių organinėms medžiagoms, kaip, pavyzdžiui, aciklinių angliavandenilių (metano CH_4 , etano C_2H_6 , propano C_3H_8 , butano C_4H_{10} , izobutano C_4H_{10} , izobuteno C_4H_8 , transbuteno C_4H_8 , cisbutadieno C_4H_6 , etileno C_2H_4 , acetileno C_2H_2 ir t. t.) molekulės.

Pastabus skaitytojas galėjo atkreipti dėmesį į tai, kad kai kurie čia ką tik paminėti angliavandeniliai, turintys vienodas chemines formules, vadinami skirtingai: butanas C_4H_{10} ir izobutanas C_4H_{10} , izobutenas C_4H_8 ir transbutenas C_4H_8 . **Tai skirtingų medžiagų poros, nes jų molekulės, nors ir turi vienodą sudėtį, skiriasi savo struktūra, o todėl ir kai kuriomis savo savybėmis.**

Tokių medžiagų sutinkama gana daug ir jos vadinamos **struktūriniais izomerais** viena kitos atžvilgiu. Izomerų egzistavimas dar kartą patvirtina jau anksčiau suformuluotą teiginį, jog **sistemos savybės priklauso ne tik nuo sistemos sudėties, bet ir nuo jos struktūros**. Vadovaujantis dualumo principu, nesunku įžvelgti tam tikrą sąryšį tarp izomerijos ir izomorfizmo reiškinių.

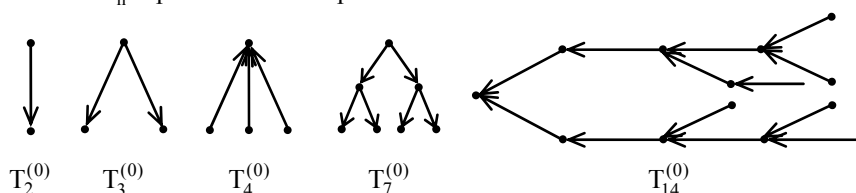
Iš izomerų egzistavimo taip pat išplaukia, jog mums įprastos cheminės formulės C_4H_{10} , C_4H_8 , C_2OH_6 ir pan. ne visada gali būti laikomos pakankamai pilnu medžiagos molekulės cheminiu modeliu. Todėl neretai šios formulės (jos kartais vadinamos dar ir **empirinėmis cheminėmis formulėmis**) pakeičiamos **struktūrinėmis cheminėmis formulėmis**, vaizduojančiomis ne tik molekulės sudėtį, bet ir jos struktūrą: 55 pav. pateiktos izomerų dimetilo eterio C_2OH_6 ir etilo alkoholio C_2OH_6 supaprastintos struktūrinės formulės, simboliškai vaizduojančios ir molekulių sudėtį, ir tarpatominius ryšius.

Dar pilnesnį molekulės modelį gauname naudodamiesi **erdvinėmis struktūrinėmis cheminėmis formulėmis**, kuriose **nurodomi ne tik tiesioginiai ryšiai tarp molekulę sudarančių atomų, bet ir santykinė atomų padėtis erdvėje**: kampai tarp tiesių, kertančių porų atomų centrus, o taip pat ir atstumai tarp atomų centrų. Tokios formulės vartojamos toje **struktūrinės chemijos** dalyje, kuri vadinama **stereochemija**. Stereochemija gana artima fizikai ir ją galima laikyti taip pat ir **fizinės chemijos** dalimi. Šie mokslai žymiai pagilina ir praplečia sąvokos „sistemos struktūra“ suvokimą. Apie tai detaliau pakalbėsime 1.9.1.3. skyrelyje.



55 pav.

11) Medžiai gali būti ir **orientuoti**. Tokie medžiai sudaromi ne iš briaunų, o iš lankų, turinčių vienodą kryptį. **Orientuotas šakninis medis** $T_n^{(0)}$ – tai medžio tipo orgrafas, turintis n viršūnių, kuriame viena viršūnė, vadinama „šaknimi“, turi tokią savybę, jog iš šaknies galima pasiekti kiekvieną kitą orientuoto medžio viršūnę. Orientuoto medžio šaknį kartais vadina **ištaka (arba šaltiniu)**. Kiekvienas $T_n^{(0)}$ su ištaka turi jam dualų (atvirkštinį) $T_n^{(0)}$, kuriame viršūnė, buvusi šaltiniu, tampa tokia orientuoto medžio viršūne, į kurią galima patekti iš bet kurios kitos to grafo viršūnės, t. y. tampa **santaka**. Struktūros $T_n^{(0)}$ pavaizduotos 56 pav.



56 pav.

Sistemos, turinčios orientuoto medžio $T_n^{(0)}$ struktūrą, pavyzdys – didelė upė su savo intakais ir intakų intakais – mažesnėmis upėmis ir upeliais.

Kitas orientuoto medžio pavyzdys – tai taip vadinamas „**tikslų medis**“, kuris gaunamas dekomponuojant pagrindinį tikslą į potikslus, šiuos – į jų potikslus ir t. t. Su „tikslų medžių“ taikymais skaitytojas bus supažindintas antroje šios mokymo priemonės dalyje, kai bus nagrinėjami sudėtingų organizacijų **sisteminės analizės** ir **sisteminio projektavimo** metodai.

Orientuoto medžio $T_n^{(0)}$ struktūrą turi ir sudėtingo gaminio, sudaryto iš mazgų, kurie savo eile sudaryti iš detalių, **sudėties schema**. Tokios schemos ir jų struktūros bei jų taikymai bus nagrinėjami 1.9.2.11. skyrelyje.

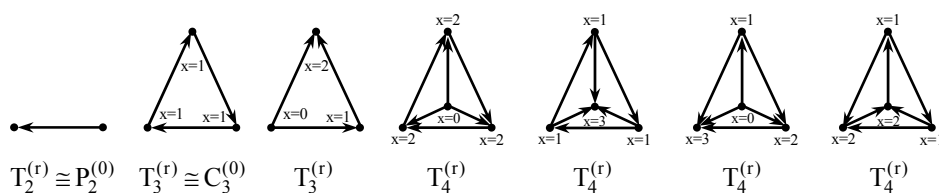
Struktūroje $T_n^{(0)}$ viršūnių skaičius $p=n$, o lankų (vienpusių orientuotų ryšių) skaičius $\ell = n-1$.

Iš $N \geq n \geq 2$ skirtingų elementų galima sukonstruoti lygiai tiek pat skirtingų orientuotų medžių $T_n^{(0)}$ su ištaka (šaknimi), kiek ir skirtingų paprastų medžių T_n , o taip pat lygiai tiek pat skirtingų orientuotų medžių $T_n^{(0)}$ su santaka. Orientuoti medžiai lygiai taip pat skirstomi į izomorfiškų orientuotų medžių klases kaip ir paprastieji medžiai: gaunamos analogiškos dualios (orientuotų medžių su ištaka ir orientuotų medžių su santaka) izomorfiškų medžių klasės (orientuotos grandinės, orientuotos žvaigždės ir t. t.) su tokiais pat skaičiais skirtingų orientuotų medžių $T_n^{(0)}$, sudarytų iš skirtingų elementų, kiekvienoje klasėje.

Iš medžių T_n ir orientuotų medžių $T_n^{(0)}$ galima sudarinėti struktūras, vadinamas **miškais** ir **orientuotais miškais**. Miškas – tai struktūra, neturinti ciklų, kurioje kiekviena jos komponentė (kiekvieno sistemos posisteminio struktūra) yra medis.

Pavyzdžiui, visi orientuoti medžiai iš 56 pav., paimti kartu, sudaro orientuotą mišką. Net ir vieną orientuotą medį $T_{14}^{(0)}$ galima laikyti orientuotu mišku, sudarytu iš dviejų orientuotų medžių $T_8^{(0)}$ ir $T_7^{(0)}$, sujungtų savo santakomis į vieną sudėtingesnę orientuotą medį.

12) $T_n^{(r)}$ – **turnyras**, turintis n viršūnių, yra orientuotas pilnas grafas (pilnas orgrafas). 57 pav. vaizduojami keli skirtingi turnyrai. Turnyrų $T_n^{(r)}$ pavyzdžių galima rasti vykdomosios valdžios struktūrose bei informaciniuose tinkluose.



57 pav.

Struktūra $T_n^{(r)}$ turi $p=n$ viršūnių ir $\ell = \frac{n(n-1)}{2}$ lankų.

Kadangi kiekviena turnyro $T_n^{(r)}$ viršūnių v_i ir v_j pora sujungta vienu ir tik vienu orientuotu lanku ($v_i v_j$ ar $v_j v_i$), tai iš $n \geq 2$ skirtingų elementų galima sudaryti $2^{\frac{n(n-1)}{2}}$ skirtingų sistemų, turinčių struktūrą $T_n^{(r)}$.

Kai $n=2$, tai visos tos sistemos bus izomorfiškos ir turės struktūrą $T_2^{(r)} = P_2^{(0)}$. Kai $n \geq 3$, tai sistemų, turinčių struktūrą $T_n^{(r)}$, aibė jau nebebus izomorfiška. Tai reiškia, kad kai $n \geq 3$, tai net iš visiškai vienodų elementų galima sukonstruoti jau ne vieną, o keletą skirtingų sistemų, turinčių struktūrą $T_n^{(r)}$. Tokių sistemų skaičius gana greitai auga, didėjant n .

Šio skaičiaus radimui galima pasinaudoti algoritmu, panašiu į tą, kuriuo naudojoms, apskaičiuodami skirtingų medžių T_n , sudarytų iš vienodų elementų, skaičių.

Pažymėsime x_i orientuotų lankų, įeinančių į i -ją turnyro $T_n^{(r)}$ viršūnę, skaičių, o y_i – orientuotų lankų, išeinančių iš tos viršūnės, skaičių. Kadangi $x_i + y_i = \text{const} = n-1$, $\sum_{i=1}^n (x_i + y_i) = n(n-1)$ ir

$$\sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i, \text{ tai } \sum_{i=1}^n x_i = \frac{n(n-1)}{2}. \text{ Dydziai } x_i \text{ gali būti tik sveiki skaičiai, pradedant nuliu ir baigiant } n-1,$$

t. y. $0 \leq x_i \leq n-1$. Be to, kiekviename turnyre $T_n^{(r)}$ gali būti ne daugiau kaip vienas x lygus 0 ir ne daugiau kaip vienas x lygus $n-1$. Todėl, turėdami $n \geq 3$ vienodų elementų, galime sudaryti tiek skirtingų turnyrų

$$T_n^{(r)}, \text{ kiek lygtis } \sum_{i=1}^n x_i = \frac{n(n-1)}{2} \text{ turi skirtingų sveikaskaitinių sprendinių } (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*), \text{ tenkinančių}$$

sąlygas: 1) $0 \leq x_i^* \leq n-1$, 2) sprendinyje negali egzistuoti daugiau kaip po vieną x_i^* reikšmę, lygią 0 ar $n-1$, be to, tokių reikšmių sprendinyje gali ir iš viso nebūti.

Kadangi turnyre $T_n^{(r)}$, sudarytame iš vienodų elementų, elementų sukeitimas vietomis grafo viršūnėse nekeičia nei turnyro sudėties, nei struktūros, tai laikysime, jog sprendinyje $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ nežinomųjų x_i ir x_j reikšmių x_i^* ir x_j^* sukeitimas vietomis sprendinio nekeičia, t. y. abu perstatiniai vaizduoja vieną ir tą patį sprendinį.

Kai $n=3$, tai maksimali galima x_i reikšmė $\hat{x} = 2$ ir $x_1 + x_2 + x_3 = 3$. Šiuo atveju galimi tik du skirtingi sprendiniai: $(0; 1; 2)$ ir $(1; 1; 1)$, kuriuos atitinka du skirtingi turnyrai $T_3^{(r)}$, pavaizduoti 57 pav.

Kai $n=4$, tai $\hat{x} = 3$ ir $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 6$. Šiuo atveju galimi jau 4 skirtingi sprendiniai, kuriuos vaizduoja 29 lentelė.

29 lentelė

Nr.	x_1^*	x_2^*	x_3^*	x_4^*
1	0	1	2	3
2	1	1	1	3
3	0	2	2	2
4	1	1	2	2

Tuos sprendinius atitinkantys keturi neizomorfiški turnyrai $T_4^{(r)}$ pavaizduoti taip pat 57 pav.

Kai $n=5$, tai $\hat{x} = 4$ ir $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 = 10$. Gauname 9 skirtingus sveikaskaitinius šios lygties sprendinius, kuriuos atitinka 9 neizomorfiški turnyrai $T_5^{(r)}$. Šie sprendiniai ir jų gavimo būdas pavaizduoti 30-ojoje lentelėje, kuri buvo sukonstruota papildant ir pratęsiant 29-ją lentelę.

Kai $n=6$, tai $\hat{x} = 5$ ir $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 = 15$. Gauname 22 skirtingus sveikaskaitinius sprendinius, pavaizduotus 31-ojoje lentelėje, kuri sudaroma pratęsiant ir papildant 30-ją lentelę, t. y. prirašant dėmenį $x_6=5$ ir po to perkėlinėjant vieną ar du jo vienetus ankstesniems dėmenims.

30. lentelė

Nr.	x_1^*	x_2^*	x_3^*	x_4^*	x_5^*
1	0	1	2	3	4
2	1	1	1	3	4
3	0	2	2	2	4
4	1	1	2	2	4

Nr.	x_1^*	x_2^*	x_3^*	x_4^*	x_5^*
5	0	1	3	3	3
6	0	2	2	3	3
7	1	1	2	3	3
8	1	2	2	2	3
9	2	2	2	2	2

31. lentelė

Nr.	x_1^*	x_2^*	x_3^*	x_4^*	x_5^*	x_6^*
1	0	1	2	3	4	5
2	1	1	1	3	4	5
3	0	2	2	2	4	5
4	1	1	2	2	4	5
5	0	1	3	3	3	5
6	0	2	2	3	3	5
7	1	1	2	3	3	5
8	1	2	2	2	3	5
9	2	2	2	2	2	5

Nr.	x_1^*	x_2^*	x_3^*	x_4^*	x_5^*	x_6^*
10	0	1	2	4	4	4
11	1	1	1	4	4	4
12	0	1	3	3	4	4
13	0	2	2	3	4	4
14	1	1	2	3	4	4
15	1	2	2	2	4	4
16	0	2	3	3	3	4
17	1	1	3	3	3	4
18	1	2	2	3	3	4
19	2	2	2	2	3	4
20	0	3	3	3	3	3
21	1	2	3	3	3	3
22	2	2	2	3	3	3

Analogiškai tęsdami lygčių $\sum_{i=1}^n x_i = \frac{n(n-1)}{2}$ sveikaskaitinių sprendinių, tenkinančių anksčiau

išvardintas sąlygas, konstravimą, gautume, kad, pavyzdžiui, egzistuoja 64 neizomorfiški turnyrai $T_7^{(r)}$ ir t. t., t. y. gautume, jog, didėjant n , neizomorfiškų turnyrų $T_n^{(r)}$ skaičius auga net greičiau negu geometrinės progresijos nariai.

Dar greičiau auga skirtingų sistemų, turinčių struktūrą, priklausančią turnyrų $T_n^{(r)}$ klasei, ir sudarytų iš $N \geq n \geq 2$ skirtingų elementų, skaičius $C_N^n \cdot 2^{\frac{n(n-1)}{2}}$.

Sudarius struktūrų K_n , P_n , C_n , $K_{m,n}$, Q_n , W_n ir T_n matricas, nesunku pastebėti, kad jos visos – kvadratinės loginės matricos, simetrinės teigiamų įstrižainių atžvilgiu. Pačios tos įstrižainės sudarytos iš nulių. Vienetukų skaičius tose matricose lygus $2q$, o nulių skaičius lygus $p^2 - 2q$.

Struktūrų $P_n^{(0)}$, $C_n^{(0)}$, $K_{m,n}^{(0)}$, $T_n^{(0)}$ ir $T_n^{(r)}$ matricos – kvadratinės nesimetrinės matricos. Jose vienetukų skaičius lygus lankų skaičiui ℓ , o nulių skaičius lygus $p^2 - \ell$. Pavyzdžiui, turnyro $T_4^{(r)}$ matricoje yra $\ell = \frac{4 \cdot 3}{2} = 6$ vienetukai ir $p^2 - \ell = 16 - 6 = 10$ nulių.

Žymenys K_n , P_n , $P_n^{(0)}$, C_n , $C_n^{(0)}$, $K_{m,n}$, $K_{m,n}^{(0)}$, Q_n , W_n aprašo sistemų struktūras vienareikšmiškai, nes yra izomorfiškų sistemų klasių žymenys. Tuo tarpu žymenys T_n , $T_n^{(0)}$ ir $T_n^{(r)}$ žymi struktūras, kurios gali priklausyti skirtingoms izomorfiškų sistemų klasėms. Kitaip tariant, **žymenys T_n , $T_n^{(0)}$, $T_n^{(r)}$ jau ne pilnai apibrėžia sistemos struktūrą**, nes, kai $n \geq 4$ struktūros T_n , ir $T_n^{(0)}$ jau gali būti neizomorfiškos, o struktūros $T_n^{(r)}$ jau gali būti neizomorfiškos net tada, kai $n \geq 3$.

Čia aprašytos struktūros K_n , P_n , $P_n^{(0)}$, C_n , $C_n^{(0)}$, $K_{m,n}$, $K_{m,n}^{(0)}$, Q_n , W_n , T_n , $T_n^{(0)}$, $T_n^{(r)}$ priklauso tipinių struktūrų, nagrinėjamų grafų teorijoje, aibei, bet neišsemia jos.

Egzistuoja dar labai daug kitų tipinių struktūrų, kurios nagrinėjamos struktūrinėje chemijoje, kristalografijoje, kvantinėje fizikoje, genetikoje, choreografijoje, dekoratyviniame mene, fraktalų teorijoje ir t. t.

Kituose šio poskyrio skyreliuose trumpai apžvelgsiu kai kurias čia paminėtas elementarių struktūrų grupes, jų charakteristikas ir žymėjimų sistemas. Pradėsiu nuo atominės fizikos ir šiek tiek

detalesniam panagrinėjimui atomo sandarą, siekdamas ne tik supažindinti skaitytoją su atomų branduolius supančių elektroninių apvalkalų tipinėmis struktūromis, bet ir papildomų tikslų.

Pirmasis papildomas tikslas – parodyti, kaip kvantinė fizika leidžia moksliskai pagrįsti D.Mendelejevo pastebėtą periodiškumą cheminių elementų savybėse ir žymiai giliau suvokti cheminius procesus, tuo pačiu pademonstruojant **mokslų integracijos naudą**, apie ką jau buvo rašyta „Įvade“, išvardinant pagrindinius sistemos tykos tikslus.

Antrasis papildomas tikslas – pagilinti skaitytojo žinias apie materijos sandarą ir mokslo evoliuciją, kas **labai svarbu ugdant sisteminį mąstymą, kuris atsiranda kaip įvairių mokslų pasiekimų sintezės ir apibendrinimo rezultatas**.

Apie kitus papildomus tikslus bus kalbama 1.9.1.2. skyrelio pabaigoje.

1.9.1.2. Elementarios tipinės struktūros atominėje fizikoje

Mintį, kad **visa medžiaga susideda iš atskirų dalelių**, pirmą kartą iškėlė Antikos laikų mąstytojas Leukipas Miletietis (apie 500–440 m. pr. m. e.). Šią idėją toliau plėtojo jo mokinys Demokritas, pradėjęs vartoti žodį „atomas“, reiškiantį graikų kalboje sąvoką „nedalomas“. Tačiau Leukipo ir Demokrito idėjos vėliau buvo primirštos.

Žodžio „atomas“ vartoseną atgaivino Dž. Daltonas (1766–1844), kuris 1808 m. cheminiais bandymais įrodė tokių dalelių egzistavimą ir apibrėžė atomą kaip mažiausią cheminio elemento dalelę, dalyvaujančią cheminėse reakcijose.

Atominę medžiagos sandarą galutinai įrodė D. Mendelejevas, 1869 m. sukurdamas periodinę cheminių elementų sistemą, leidusią tos sistemos kūrėjui **ne tik išvelgti tam tikrą tvarką cheminių elementų savybių aibėje, bet ir nuspėti egzistavimą ir savybes net tokių cheminių elementų, kurie tuo metu dar nebuvo atrasti**. Pavyzdžiui, 1871 m. D. Mendelejevas pareiškė, jog turėtų egzistuoti elementas, kuris privalėtų užimti periodinėje lentelėje vietą, esančią tiesiogiai žemiau silicio (Si), pavadino tą hipotetinį elementą ekasiliciu ir aprašė jo savybes. Praėjo 15 m. ir toks elementas iš tikrųjų buvo atrastas. Jis buvo pavadintas germaniu (Ge). Pasirodė, kad germanio savybės tikrai yra panašios į tas, kurias buvo numatęs periodinės cheminių elementų sistemos kūrėjas. Dabar germanio kristalai plačiai naudojami puslaidininkių gamyboje. O patį pirmąjį savo triumfą periodinės elementų sistemos idėja šventė 1875 m., kai P. Lekokas spektrų analizės metodu atrado ir išskyrė naują cheminį elementą, pavadintą galiu (Ga), kurio savybės sutapo su D. Mendelejevo 1870 m. aprašyto hipotetinio elemento – ekaaliuminio savybėmis.

Atradus katodinius spindulius (1858 m., J. Pliukeris), radioaktyvumą (1896 m., A. Bekerelis, P. ir M. Kiuri) ir elektroną (1897 m., Dž. Tomsonas), paaiškėjo, jog atomas vis dėlto yra dalomas ir nėra pati mažiausioji materijos dalelė, kaip manė Demokritas ir Daltonas.

1903 m. Dž. Tomsonas iškėlė atomo lašelinės struktūros hipotezę, kurią 1911 m. pakeitė E. Rezerfordo pasiūlytas artimesnis tikrovei planetinis atomo modelis. Pagal E. Rezerfordą atomą sudaro teigiamas branduolys ir aplink jį besisuką (kaip planetos aplink Saulę) neigiami elektronai.

Tačiau ir šis modelis negalėjo paaiškinti, kodėl atomai spinduliuoja energiją ne tolydžiai o kvantais, ką dar 1900 m., nagrinėdamas spektrus, buvo įrodęs M. Plankas.

Teko atsisakyti įprasto klasikinės mechanikos požiūrio į atome vykstančius procesus ir ieškoti naujo modelio, neprieštaraujančio eksperimentų rezultatams.

1913 m. N. Boras sukūrė jau **neklasikinį atomo** modelį, kurio esmę sudarė to modelio autoriaus suformuluoti postulatai, dabar vadinami **Boro postulatais**. Tie postulatai teigė, kad elektronai gali judėti aplink atomą ne bet kokiomis, o tik tam tikromis orbitomis, ir, judėdami jomis, nei savo, nei viso atomo energijos nekeičia: nei spinduliuoja ją į išorę, nei sugeria iš jos. Tas orbitas N. Boras pavadino **stacionariomis**, išskirdamas jų tarpe taip vadinamas **pagrindines**, esančias arčiausiai atomo branduolio ir todėl atitinkančias mažiausius elektronų (ir atomo) energijos lygius. Atomo energijos pokyčiai, teigė kitas N. Boro postulatą, gali įvykti tik elektronui persokant iš vienos stacionarios orbitos į kitą: kai elektronas persoka iš tolimesnės orbitos į artimesnę, tai atomas išspinduliuoja energijos kvantą, lygų tas orbitas atitinkančių energijų skirtumui, o kai atomas absorbuoja kvantą energijos iš išorės, tai atitinkamas elektronas persoka iš atitinkamos artimesnės orbitos į tolimesnę.

N. Boro modelis, kurį vėliau dar patobulino A. Zomerfeldas ir V. Paulis, paaiškino, kaip ir kodėl atsiranda linijiniai atomų energijos spinduliavimo į išorę ir absorbcijos (energijos sugėrimo) spektrai, tačiau neatskleidė priežasčių, kodėl elektronai atome gali judėti tik tam tikro dydžio orbitomis, o negali judėti kokiomis nors kitomis.

1924 m. L. V. de Broilis iškėlė hipotezę, jog atome dėl elektronų judėjimo ir sąveikavimo su teigiamu branduoliu atsiranda elektromagnetiniai virpesiai, panašiai, kaip jie atsiranda elektros srovei tekant kontūru, sudarytu iš kondensatoriaus ir ritelės (žiūr. 1.4.6. ir 1.11.10. šios mokyimo priemonės skyrelius), o kartu su tais virpesiais – ir stovinčios bangos, panašiai, kaip jos, pavyzdžiui, susidaro,

virpinant stygą ar ilgą virvę, kurios vienas galas yra pritvirtintas (plačiau apie stovinčias bangas žiūr. 1.9.1.4. skyrelį). Tų virpesių dažniai ir stovinčių bangų ilgiai gali būti ne bet kokie, o priklauso nuo atomo matmenų ir jo energijos dydžio (kaip stygos virpesių dažniai ir stovinčių bangų ilgiai priklauso nuo stygos ilgio, storio ir jos įtempimo).

Pagal de Broilio hipotezę kiekvienai mikrodalelei, turinčiai energiją E ir impulsą (judesio kiekį) p , būdinga banga, kurios dažnis $\nu = \frac{E}{h}$ ir ilgis $\lambda = \frac{h}{p}$ (kur $h=6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ – Planko

konstanta, įvesta jau minėto M. Planko, dar 1900 m. nustačiusio, jog atomai spinduliuoja energiją kvantais $\Delta E=h\nu$). De Broilio bangos ilgis elektronui yra apie 10^{-8} cm , t. y. tos pačios eilės, kaip ir atomo matmenys (žiūr. 32-ą lentelę, kurioje duoti apytikriai vandenilio atomo ir jo branduolio matmenys).

32. lentelė

Objektas	Linijiniai matmenys	Paviršiaus plotas	Tūris
Vandenilio atomas	$\sim 10^{-8} \text{ cm}$	$\sim 10^{-16} \text{ cm}^2$	$\sim 10^{-24} \text{ cm}^3$
Vandenilio atomo branduolys	$\sim 10^{-12} \text{ cm}$	$\sim 10^{-24} \text{ cm}^2$	$\sim 10^{-36} \text{ cm}^3$
Santykis tarp vandenilio atomo ir jo branduolio matmenų	10^4	10^8	10^{12}

Panašaus dydžio yra ir atstumai tarp atomų branduolių joniniuose kristaluose, sąlyginai vadinami jonų radiusais. 33-oje lentelėje pateikiamos kai kurių jonų radiusų vertės, apskaičiuotos pagal Belovo ir Bokijaus sistemą.

33. lentelė

Jono pavadinimas	Simbolis	Jono radiuso vertė (cm)
Fluoro anijonas	F^-	$1,33 \cdot 10^{-8}$
Chloro anijonas	Cl^-	$1,81 \cdot 10^{-8}$
Bromo anijonas	Br^-	$1,96 \cdot 10^{-8}$
Jodo anijonas	I^-	$2,2 \cdot 10^{-8}$
Degunies anijonas	O^{2-}	$1,36 \cdot 10^{-8}$
Ličio katijonas	Li^+	$0,68 \cdot 10^{-8}$
Kalio katijonas	K^+	$1,33 \cdot 10^{-8}$
Rubidžio katijonas	Rb^+	$1,49 \cdot 10^{-8}$
Cezio katijonas	Cs^+	$1,65 \cdot 10^{-8}$

Tai, kad stovinčių bangų, pagal de Broilio hipotezę egzistuojančių atomuose, ilgiai yra tos pačios eilės kaip atomų linijiniai matmenys bei atstumai tarp jonų branduolių kristaluose, nėra atsitiktinis sutapimas, o išplaukia iš tų bangų susidarymo „mechanizmo“ (žiūr. 1.9.1.4. skyrelį).

De Broilio hipotezę, kad elektronai turi ne tik materialių dalelių korpuskulines, bet ir bangines savybes, 1927 m. eksperimentais patvirtino K. Deivisonas ir L. Džermeris, užfiksavę elektronų difrakcijos (kliūtis aplenkimo) reiškinių, kuris nėra įmanomas mechaniniams makrokūnams ir yra būdingas bet kokioms bangoms (šviesos, garso bei mechaninėms bangoms, sklindančioms, pavyzdžiui, vandens paviršiumi).

Toks elektrono savybių dualumas daugeliui to laiko fizikų atrodė nenatūralus, dėl ko buvo gana ilgai ginčijamasi, kas vis dėlto yra tas elektronas: materiali dalelė ar banga.

Dabar tie ginčai atrodo šiek tiek panašūs į situaciją, aprašytą viename anekdote, kai vienos salos, kurioje nebuvo jokių kitų stuburinių, o tik karvės ir šunys, aborigenai, pasidarę luotelį, nuplaukė į kitą salą ir ten pirmą kartą savo gyvenime išvydo arklį. Pastebėję, kad arkllys, kaip ir karvė, turi kanopas, vieni aborigenai nusprendė, jog tas jų sutiktas gyvūnas yra karvė. Kiti gi, atkreipę dėmesį į tai, kad arkllys, kaip ir šuo, neturi ragų, padarė išvadą, jog arkllys yra šuo. Aborigenams tekę ilgokai pasiginčyti, kol jie nusprendė, jog jų sutikta būtybė nėra nei karvė, nei šuo, o naujas gyvūnas – arkllys.

Nieko nuostabaus, kad kvantinė mechanika, tirdama, palyginti, didelių masių judėjimą, nebuvo pastebėjusi, jog makrokūnai turėtų banginių savybių: iš de Broilio formulės $\lambda = \frac{h}{p}$, kur $p=mv$, nesunku

išvesti, kad, esant didelei stebimo (judančio greičiu v) kūno masei m , de Broilio bangos ilgis λ būtų toks mažas, lyginant su makrokūno matmenimis, jog banginės to kūno savybės negalėtų būti pastebėtos. Mūsų turimomis priemonėmis jos gali būti pastebėtos tik tada, kai kūnas yra labai mažas, t. y., kai jis – mikrodalelė.

1925 m. jau mūsų minėtasis V. Paulis, apibendrinamas atomų elektronų būsenų stebėjimo rezultatus, suformulavo dar vieną (klasikinės mechanikos požiūriu irgi gana keistą) principą: atome negali būti dviejų elektronų (kaip vėliau paaiškėjo – ir bet kokių kitų mikrodalelių, turinčių pusinį sukinio momentą), kurių kvantinės būsenos, aprašomos kvantinių skaičių n , ℓ , m_ℓ ir m_s , rinkiniais, būtų visiškai vienodos. Iš šio principo (dabar vadinamo Paulio principu) ir iš energijos minimumo principo (kuris buvo žinomas ir klasikiniame mechanikoje) išplaukia atomo elektronų stacionarių pagrindinių orbitų užpildymo elektronais dėsningumai, paaiškinantys cheminių

elementų savybių periodiškumą. Tuo mes netrukus įsitikinsime nagrinėdami kvantinių skaičių reikšmių galimus rinkinius ir galimas elektronų sluoksnių ir posluoksnių užpildymo elektronais struktūras.

1925–1927 m. V. Heizenbergas, E. Šredingeris, M. Bornas ir P. Dirakas, apibendrinami ir matematizuodami tuolaikinės atomų fizikos tyrimų rezultatus, sukūrė kvantinės mechanikos pagrindus ir jos matematinį aparatą: **Heizenbergo matricas ir Šredingerio bei Dirako lygtis.**

Naudojantis tuo aparatu, pavyko apskaičiuoti atomuose vykstančių procesų ir mikrodalelių charakteristikas, gana tiksliai sutampančias su fizikinių eksperimentų rezultatais, nuspėti dar neatrastų mikrodalelių bei jų būsenų egzistavimą (pavyzdžiui, pozitrono, miuonio), išsiaiškinti atomų struktūros dėsningumus bei cheminio ryšio, jungiančio atomus į molekules, prigimtį, suvokti cheminių elementų sistemos periodinės sandaros priežastis.

Taip pat paaiškėjo ir eilė naujų reiškinių bei mikrodalelių savybių. Pavyzdžiui, paaiškėjo, kad mikrodalelės būsena negali būti vienu ir tuo pačiu metu tiksliai išmatuota ir charakterizuojama jos koordinatėmis x, y, z ir impulsais p_x, p_y, p_z , kaip tai daroma klasikinėje mechanikoje, aprašant makrodaleles. Nustatant mikrodalelių koordinates ir impulsus, dėl tų dalelių banginių savybių atsiranda paklaidos $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$, kurių atitinkamos sandaugos $\Delta x \cdot \Delta p_x, \Delta y \cdot \Delta p_y, \Delta z \cdot \Delta p_z$, kaip tai išplaukia iš **Heizenbergo neapibrėžtumo sąryšio**, negali būti mažesnės negu $\frac{h}{2\pi}$, kur h – jau minėtoji

Planko konstanta. Todėl, didinant elektrono koordinatų nustatymo tikslumą, neišvengiamai išauga impulso nustatymo paklaida (ir atvirkščiai).

Iš neapibrėžtumo sąryšio išplaukia, jog, kalbant apie elektrono judėjimą atome, jau nebegalima operuoti tiksliai apibrėžtų orbitų sąvokomis, o galima kalbėti tik apie elektrono buvimą tam tikrose srityse, supančiose atomo branduolį lyg savo rūšies „debesėliais“ (žiūr. 58 pav.), tikimybę. Tos sritys vadinamos **orbitalėmis** ir matematiškai apibrėžiamos kaip sritys, kuriose elektrono buvimą tikimybė nėra lygi nuliui.

Orbitalių (o taip pat ir kitų elektrono judėjimo charakteristikų) nustatymui kvantinėje fizikoje naudojamosi **banginėmis funkcijomis** $\psi(x, y, z, t)$ (arba – sferinėse koordinatėse – $\psi(r, \vartheta, \varphi, t)$), leidžiančiomis įvertinti elektrono buvimą toje ar kitoje būsenoje tikimybės: **banginės funkcijos modulio kvadratas kaip tik ir yra lygus elektrono buvimą duotuoju momentu duotajame erdvės taške tikimybės tankiui.**

Tuo atveju, kai mikrodalelių greičiai, lyginant juos su šviesos greičiu c , yra maži ir todėl galima nekreipti dėmesio į reliatyvistinius efektus (masės, geometrinių matmenų ir laiko intervalų ilgio pasikeitimus), tų dalelių banginės funkcijos randamos, sprendžiant jau minėtąją **Šredingerio lygtį**

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$
, kur $i = \sqrt{-1}$, h – **Planko konstanta**, ψ – **banginė funkcija**, $\hat{H}$ – **Hamiltono operatorius**

(hamiltonianas), charakterizuojantis mikrodalelės ar jų sistemos energiją.

Kai mikrodalelių greičiai pakankamai dideli, tenka naudotis **reliatyvistinės kvantinės fizikos** aparatu ir spręsti **Dirako lygtį**.

Naudojantis banginėmis funkcijomis (ar Heizenbergo matricomis) ir sprendžiant **tikrinių verčių lygtis bei jų sistemas**, galima apskaičiuoti mikrodalelių fizikines charakteristikas. **Tais atvejais, kai elektronai, sąveikaudami su atomų branduoliais, dėl susidarančių ryšių nėra laisvi, tikrinių verčių lygčių bei jų sistemų sprendiniais gali būti tik diskrečios funkcijos, charakterizuojamos tam tikrų diskrečių parametrų rinkiniais – kvantiniais skaičiais. Iš čia ir išplaukia atomo elektronų energijos ir kitų charakteristikų galimo kitimo spektrų diskretumas.** Ir tik tais atvejais, kai elektronai atitrūksta nuo atomų branduolių ir tampa laisvi, kaip tai, pavyzdžiui, atsitinka metaluose, **tikrinių verčių lygčių sprendiniais tampa klasikinei fizikai įprastos tolydžios funkcijos.**

Tai, kad tikrinių verčių lygtys bei jų sistemos tam tikromis sąlygomis gali turėti serijas diskrečių sprendinių, o tam tikromis – tolydžius sprendinių spektrus, nėra koks tai išskirtinis, tik kvantinei mechanikai būdingas, reiškinys. Su panašiais atvejais galima susidurti ir sprendžiant diferencialines lygtis su dalinėmis išvestinėmis ir kraštinėmis sąlygomis, o taip pat ir kitose srityse. Pavyzdžiui, taisyklingų daugiakampių kraštinių skaičius n gali būti bet koku sveiku skaičiumi, ne mažesniu už 3, o tuo tarpu taisyklingų iškilių daugiasienių, kurių sienos – taisyklingi daugiakampiai, egzistuoja, kaip yra įrodęs dar Euklidas, tik penkios rūšys: 1) taisyklingi tetraedrai, turintys po 4 trikampes sienas, 2) kubai, turintys po 6 kvadratinės sienas, 3) oktaedrai, turintys po 8 trikampes sienas, 4) dodekaedrai, turintys po 12 sienų, esančių taisyklingais penkiakampiais, ir 5) ikosaedrai, turintys po 20 trikampių sienų. Tai išplaukia iš jau minėtos formulės $V+F=E+2$ ir iš tos aplinkybės, kad daugiasienio viršūnės erdvinį kampą gali sudaryti ne mažiau kaip 3 sienos, o jį sudarančių plokščiųjų kampų suma turi būti mažesnė už 360°.

Taigi, nieko nuostabaus, kad **atomų elektronai, sąveikaudami su atomų branduoliais ir tarpusavyje, sąveikos jėgų veikiami ir surišami, gali užimti erdvėje ne bet kokias, o tik tam tikras padėtis, gali turėti ne bet kokius, o tik tam tikrus diskrečius energijos dydžius. Ir tik laisvi (nesurišti) elektronai gali keisti savo energiją kokiais nori dydžiais, taigi – ir tolydžiai.**

Elektronų padėčių atome (ir elektronų galimų būsenų) apibūdinimui kvantinėje fizikoje vartojami jau minėtieji **kvantiniai skaičiai** – tikrinių verčių lygčių bei jų sistemų sprendinių parametrai. Čia aprašysiu tik pačių **svarbiausiųjų kvantinių skaičių n , ℓ , m_ℓ ir m_s , rinkinį**, pakankamai pilnai ir pakankamai tiksliai apibūdinantį vandenilio atomo H (o taip pat ir vienaelektroninių jonų, pavyzdžiui, He^+ , Li^{2+} ir t. t.) būseną ir jo elektroninio apvalkalo struktūrą. Naudojantis tais skaičiais, galima susidaryti ir daugiaelektroninio atomo elektroninio apvalkalo struktūros modelį, tačiau šis modelis dėl elektronų, esančių atome, tarpusavio sąveikavimo, kurio įvertinimui reikalinga papildoma informacija, bus tik gana artutinis, reikalaujantis papildomų patikslinimų, atsižvelgiant į minėtąją sąveikavimą.

Skaičius $n=1, 2, 3, 4, 5, \dots$ reiškia atomo elektrono energijos galimo stacionaraus lygmens (atomo elektroninio apvalkalo energetinio sluoksnio) numerį. Jis charakterizuoja tokią svarbią atomo elektrono charakteristiką kaip elektrono energija ir todėl vadinamas **pagrindiniu kvantiniu skaičiumi**.

Elektrono energija E_n apskaičiuojama naudojantis **Boro formule**: $E_n = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}$ (elektrono voltų), kur Z – protonų skaičius atomo branduolyje, t. y. elektrono energija didėja, didėjant sluoksnio numeriui n , artėdamai prie 0, tačiau absoliutus tos energijos dydis, didėjant n , mažėja. Todėl **kuo didesnis n , tuo elektronai yra toliau nuo branduolio, tuo silpniau su juo susiję, tuo lengviau juos nuo branduolio atplėšti.**

Naudojantis Boro formule, galima apskaičiuoti vienaelektronio atomo (ir jono) jonizacijos energiją, t. y. energiją, reikalingą tam, kad elektronas būtų „išmuštas“ iš pagrindinio energetinio sluoksnio $n=1$, kuriam būdinga mažiausia elektrono energija, ir „atplėštas“ nuo atomo (tai reikštų, jog $n \rightarrow \infty$).

Pavyzdžiui, vandenilio atomo H jonizavimui reikia $\Delta E = E_\infty - E_1 = 13,6 \cdot \left[0 - \left(\frac{1^2}{1^2} \right) \right] \text{ eV} = -13,6 \text{ eV}$ energijos kvanto $h\nu$. Helio jono He^+ jonizavimui, „išplėšiant“ iš jo paskutinį elektroną ir gaunant joną He^{2+} , reikia $\Delta E = 13,6 \cdot \left[0 - \left(\frac{2^2}{1^2} \right) \right] \text{ eV} = -54,4 \text{ eV}$, o ličio jono Li^{2+} jonizavimui, gaunant joną Li^{3+} , reikia jau $-13,6 \cdot \frac{3^2}{1^2} \text{ eV} = -122,4 \text{ eV}$ energijos. Šie skaičiai sutampa su eksperimentų rezultatais.

Žinant atomo, turinčio atominį numerį Z , elektroninio apvalkalo sluoksnio numerį n , galima apskaičiuoti elektrono, priklausančio tam sluoksniui, **orbitalės vidutinį spindulio ilgį $r_{n,Z} = r_0 \frac{n^2}{Z}$** , kur $r_0 \approx 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 0,529 \text{ Å}$ – vandenilio atomo elektrono pirmosios (pagrindinės) orbitalės spindulio vidutinis ilgis.

Skaičius ℓ charakterizuoja elektrono **orbitinio judesio kiekio momento M_ℓ dydį** $M_\ell = \pm \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)}$ ir todėl yra vadinamas **orbitiniu (azimutiniu, šalutiniu) kvantiniu skaičiumi**. Jo galimos reikšmės: $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ yra posluoksnių energetiniame sluoksnyje n numeriai. Patys posluoksniai sluoksnyje eilės tvarka žymimi raidėmis: s (kai $\ell = 0$), p (kai $\ell = 1$), d (kai $\ell = 2$), f (kai $\ell = 3$) ir toliau (abėcėlės tvarka: g, h ir t. t.).

Pirmasis sluoksnis ($n=1$) turi tik vieną posluoksnį s, žymimą 1s ir sutampantį su pačiu sluoksniu $n=1$. Antrasis sluoksnis ($n=2$) turi jau du posluoksnius s ir p, žymimus 2s ir 2p. Trečiasis sluoksnis ($n=3$) turi jau tris posluoksnius s, p ir d, žymimus 3s, 3p ir 3d. Analogiškai (raidėmis s, p, d, f, g, h ir t. t.) žymimi ketvirtojo, penktojo ir t. t. sluoksnio posluoksniai.

Skaičius m_ℓ charakterizuoja elektrono **orbitinio judesio kiekio momento M_ℓ orientaciją – jo projekciją $M_{\ell z}$ į laisvai pasirinktą koordinačių ašį Oz, einančią per atomo branduolio centrą – koordinačių sistemos centrą.** Tos projekcijos $M_{\ell z}$ dydis apskaičiuojamas naudojantis formule

$M_{\ell z} = \frac{\hbar}{2\pi} m_\ell$. Skaičius m_ℓ vadinamas **magnetiniu kvantiniu skaičiumi**. Jo galimos reikšmės: $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$, t. y. iš viso $2\ell + 1$ reikšmių kiekvienai ℓ reikšmei. Iš to išplaukia, jog

posluoksnyje ℓ esančių elektronų orbitinio judesio kiekio momentai M_ℓ gali būti orientuoti erdvėje $2\ell+1$ skirtingais būdais.

Kvantinis skaičius m_s charakterizuoja **elektrono sukinio (sukimosi apie savo ašį) judesio kiekio momento M_s orientaciją – jo projekciją M_{sz} į koordinačių ašį Oz**. Tos projekcijos M_{sz} dydis apskaičiuojamas naudojantis formule $M_{sz} = \frac{h}{2\pi} m_s$. Skaičius m_s vadinamas **sukinio (spino) kvantiniu**

skaičiumi. Jis kiekvienam atomo elektronui gali turėti tik dvi reikšmes: $m_s = \pm \frac{1}{2}$, iš kur išplaukia, jog **elektrono sukinio momentas gali būti orientuotas erdvėje tik dviem būdais**.

Sukinio skaičiaus m_s žinojimas leidžia įvertinti **elektrono nuosavo magnetinio lauko sąveikavimą su jo orbitinio judesio magnetiniu lauku**. Iš to, kad m_s gali turėti kiekvienai m_ℓ reikšmei po dvi reikšmes, o taip pat iš Paulio principo, kad elektronai atome būtinai turi skirtis savo būsenomis (kvantinių skaičių verčių rinkiniais), išplaukia, jog **posluoksnyje ℓ gali būti tik iki $2(2\ell+1)$ elektronų**.

Kadangi $\ell = 0, 1, \dots, n-1$, tai **sluoksnyje, turinčiame numerį n , gali būti iki $\sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell+1) = 4 \sum_{\ell=0}^{n-1} \ell + 2n = 4 \cdot \frac{n-1}{2} \cdot n + 2n = 2n^2 - 2n + 2n = 2n^2$ elektronų**: pirmame sluoksnyje $2 \cdot 1^2 = 2$, antrame $2 \cdot 2^2 = 8$, trečiame $2 \cdot 3^2 = 18$, ketvirtame $2 \cdot 4^2 = 32$ ir t. t.

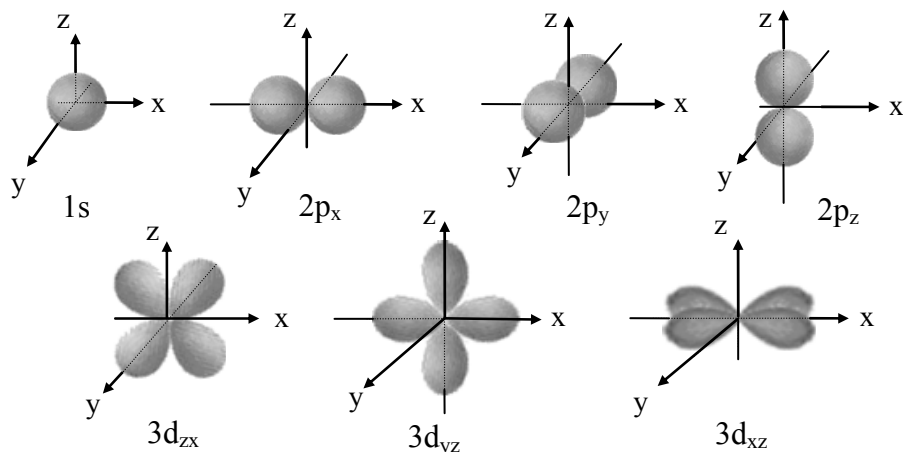
Orbitalių užpildymas elektronais vyksta (kaip to reikalauja energijos minimumo ir Paulio principai), pradedant nuo sluoksnio su mažiausiu n (t. y. nuo $n=1$), o sluoksnyje – nuo posluoksnio su mažiausiu ℓ (t. y. nuo posluoksnio s). Elektronų, jau esančių posluoksnyje, skaičius, žymimas kaip posluoksnio žymens ($s, p, d, f, \dots$) „laipsnio rodiklis“. Kai posluoksnyje yra tik vienas elektronas, tai „laipsnio rodiklis“, kuris turėtų būti lygus 1, tuomet gali būti ir nerašomas, tačiau dažniausiai yra rašomas.

Pavyzdžiui, nesusžadinto vandenilio atomo elektroninio apvalkalo struktūrą vaizduoja formulė $1s^1$, nesusžadinto helio atomo – $1s^2$, nesusžadinto ličio atomo – $1s^2 2s^1$, nesusžadinto berilio (Be) atomo – $1s^2 2s^2$, boro (B) – $1s^2 2s^2 2p^1$, anglies (C) – $1s^2 2s^2 2p^2$, azoto (N) – $1s^2 2s^2 2p^3$, deguonies (O) – $1s^2 2s^2 2p^4$, fluoro (F) – $1s^2 2s^2 2p^5$, neono (Ne) – $1s^2 2s^2 2p^6$, natrio (Na) – $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, magnio (Mg) – $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ ir t. t.

Kartais, kai norima pažymėti buvusio kokio nors posluoksnyje elektrono praradimą, gali būti vartojamas ir to posluoksnio raidės nulinis „laipsnio rodiklis“ (pavyzdžiui, $5d^0, 6d^0$), reiškiantis tai, jog tas posluoksnis dabar tapo tuščias, nors „anksčiau“ (t. y. elemento, turinčio mažesnę numerį Z , atomo elektroniniame apvalkale) jis galėjo būti netuščias.

Patys atomo elektroninio apvalkalo sluoksniai gali būti žymimi ne tik numeriais $n: 1, 2, 3, 4, \dots$, bet ir didžiosiomis raidėmis tokia tvarka: K, L, M, N, $\dots$.

Čia pateiktos **atomų elektroninio apvalkalo struktūros formulės** vadinamos **elektronų konfigūracijos formulėmis**, nes jos atspindi kvantinių skaičių n ir ℓ reikšmių rinkinius vadinamus **atomo elektronų konfigūracijomis**. Konfigūraciją sudaro rinkinys būsenų, charakterizuojamų beveik vienodomis elektronų energijomis. **Pagrindinei konfigūracijai būdinga mažiausia energija**.



58 pav.

Pačios konfigūracijos, vaizduojant orbitales trimačiais „debesėliais“, atrodytų taip, kaip parodyta 58 pav.

Daugiaelektroniniuose atomuose dėl elektronų sąveikavimo tarpusavyje jų energija pasiskirsto taip, kad, pradedant nuo $n=4$, naujo sluoksnio **pirmųjų posluoksnių užpildymas elektronais prasideda, dar neužpildžius buvusio sluoksnio paskutinių posluoksnių**. Pavyzdžiui, posluoksnio 4s pildymas prasideda anksčiau negu posluoksnio 3d, o posluoksnio 5s – anksčiau negu posluoksnio 4d. Posluoksnis 4f pradedamas pildyti ne tik vėliau posluoksnių 5s ir 5p, bet net po posluoksnio 6s. Elektroninio apvalkalo sluoksnių ir posluoksnių **užpildymo tvarką*** vaizduoja 34-oji lentelė.

34. lentelė

Sluoksnio Nr. n	Posluoksnio Nr. ℓ	Posluoksnio pavadinimas	Maksimalus elektronų skaičius posluoksnyje	Periodas	Maksimalus elektronų skaičius periode	Atominiai skaičiai Z (elementų numeriai)
1	0	1s	2	I	2	nuo 1 iki 2
2	0	2s	2	II	8	nuo 3 iki 10
2	1	2p	6			
3	0	3s	2	III	8	nuo 11 iki 18
3	1	3p	6			
4	0	4s	2	IV	18	nuo 19 iki 36
3	2	3d	10			
4	1	4p	6			
5	0	5s	2	V	18	nuo 37 iki 54
4	2	4d	10			
5	1	5p	6			
6	0	6s	2	VI	32	nuo 55 iki 86
4	3	4f	14			
5	2	5d	10			
6	1	6p	6			
7	0	7s	2	VII		nuo 87
5	3	5f	14			
6	2	6d	10			
.....						

34-ojoje lentelėje pavaizduota atomų elektroninio apvalkalo sluoksnių ir posluoksnių užpildymo tvarka bei periodų susidarymo dėsningumai paaiškina D.Mendelejevo periodinės cheminių elementų lentelės dėsningumus, o taip pat cheminių elementų savybių priklausomybę nuo jų atominio numerio Z, sutampančio su atomo branduolyje esančių protonų skaičiumi.

Natūralu, kad atomų cheminės savybės pirmoje eilėje priklauso nuo jo **elektroninio apvalkalo išorinio sluoksnio elektronų**, vadinamų **valentiniais**. Juk atomui chemiškai sąveikaujant su kitais atomais, tas sąveikavimas pirmoje eilėje pasireiškia kaip atomo išorinių elektronų sąveikavimas.

To sąveikavimo ypatumai priklauso nuo to, kiek elektronų tame išoriniame sluoksnyje yra, o taip pat nuo to, kokiam to sluoksnio posluoksniui tie elektronai priklauso.

Pavyzdžiui, išorinio sluoksnio posluoksnio s elektronai yra gana silpnai surišti su atomu ir dėl išorinių poveikių gana dažnai gali būti prarandami. Tuomet atomas, praradęs vieną ar net abu to posluoksnio elektronus, tampa teigiamu vienvalenčiu ar divalenčiu jonu: Li^+ , Na^+ , K^+ , Ca^+ , Ca^{2+} ir pan. Cheminiai elementai, kurių elektroninio apvalkalo išorinis sluoksnis susideda iš s–jo posluoksnio elektronų, vadinami **s elementais** ir turi jau minėtą savybę gana lengvai tapti teigiamais **jonais** – **katijonais**. Iš metalų atsiradę katijonai, pakeisdami rūgščių molekulėse **s elemento vandenilio jonus** H^+ , sudaro joninius junginius – **druskas**.

Elektroninio apvalkalo išorinio sluoksnio posluoksnis p turi, galima sakyti, atvirkštinę savybę: kai tame posluoksnyje trūksta vieno ar kelių elektronų, kad jis būtų pilnai užpildytas iki šešių elektronų ir su dviem s posluoksnio elektronais sudarytų stabilią struktūrą – **oktetą** (8 elektronus), atomas gana dažnai tokį elektroną prisijungia iš aplinkos. Tokie cheminiai elementai vadinami **p elementais**.

* Elektroninio apvalkalo sluoksnių ir posluoksnių **užpildymo tvarka**, kaip matyti iš 34. lentelės, ne visai sutampa su jų **išsidėstymo tvarka** apvalkale, kurią vaizduoja 36. lentelė.

Ypatingai aktyvūs tie p elementai, kuriems iki okteto trūksta tik vieno elektrono. Tokių elementų, vadinamų **halogenais**, atomai tiesiog atima tą elektroną iš kokio nors kito atomo (pavyzdžiui, iš atomo, priklausančio s elementų grupei), patys tapdami neigiamais jonais – **anijonais** (pavyzdžiui, F^- , Cl^- , Br^- , I^- ir pan.). Ši halogenų savybė chemikams buvo žinoma jau seniai, tačiau tik kvantinė fizika ir jos sandūroje su chemija atsiradusi kvantinė chemija leido suprasti tokios savybės egzistavimo priežastį.

Neigiami jonai, elektrostatinės jėgos veikiami, linkę jungtis su teigiamais jonais į sistemas – **molekules**. Taip atsiranda tokios molekulės kaip NaCl (natrio chloridas – valgomoji druska), KBr (kalio bromidas) ir pan.

Cheminis ryšys, jungiantis halogenų atomus su s elemento atomu į molekulę, vadinamas **joniniu ryšiu**. Tokio ryšio energija – apie kelis šimtus kilodžaulių vienam moliui. Pavyzdžiui, valgomosios druskos joninio ryšio energija apie 413,7 kJ/mol. Kiti p elementai, kuriems iki okteto trūksta dviejų ar daugiau elektronų, linkę tuos elektronus ne atimti iš kitų atomų, o padaryti juos bendrais, t. y. priklausančiais ir ankstesniam tų elektronų „savininkui“ ir p elemento atomui. Toks elektronų „kolektyvizavimas“ taip pat gali sujungti atomus į molekules. Cheminis ryšys, jungiantis atomus, paverčiant dviejų (ar daugiau) atomų kai kuriuos (ar visus) išorinius elektronus bendrais, t. y. priklausančiais jau ne atskiriems, o iškart dviems (ar daugiau) atomams, vadinamas **kovalentiniu ryšiu**.

Kai kovalentinis ryšys jungia skirtingų elementų atomus, jų bendros elektronų poros orbitalė dėl atomų branduolių nevienodų elektrinių krūvių tampa nesimetriška ir neutrali molekulė savaime poliarizuojasi, tapdama savo rūšies elektriniu dipoliu. Todėl kovalentinis ryšys, jungiantis skirtingus atomus, vadinamas **poliniu** (arba **heteropoliniu**, kur priešdėlis „hetero–“ reiškia skirtingumą).

Pavyzdžiui, vandens molekulėje dėl elektronų ir jų orbitalių pasislinkimo vandenilio atomai išsidėsto taip, kad tiesės, jungiančios jų centrus su deguonies atomo centru, sudaro apie 150° kampą. Dėl tokio teigiamų vandenilio jonų H^+ ir neigiamo deguonies jono O^{2-} išsidėstymo vandens molekulė tampa **dipoliu**. Tai ir paaiškina, kodėl vanduo gali būti tirpikliu, ištirpdančiu tokias chemines medžiagas kaip cukrų, valgomąją druską ir t.t., o taip pat tai, kodėl tarp vandens molekulių atsiranda ryšiai, jungiantys jas į struktūras – **asociatus** $(H_2O)_x$.

Kai kovalentinis ryšys jungia vienos rūšies elemento atomus, jų elektronų bendros poros išsidėsto elektroniniame apvalkale simetriškose orbitalėse tų atomų branduolių atžvilgiu ir neutrali molekulė savaime nesipoliarizuoja. Toks kovalentinis ryšys todėl vadinamas **nepoliniu** (arba **homopoliniu**, kur priešdėlis „homo–“ reiškia vienodumą).

Kovalentinis ryšys, jungiantis atomus į molekules kartais gali būti silpnesnis negu joninis, atsirandantis elektrostatinės traukos tarp priešingų ženklų jonų dėka. Pavyzdžiui, vandens molekulėje egzistuojančio kovalentinio ryšio energija yra 14,24 kJ/mol., t. y. apie 29 kartus mažesnė už joninio ryšio energiją valgomosios druskos molekulėje.

Taigi, jei fluoro grupės p elementams (halogenams), turintiems išorinio elektroninio sluoksnio struktūrą s^2p^5 ir priklausantiems periodinės cheminio elementų lentelės (žiūr. 34 lentelę) VII A stulpeliui, būdingas tik elektronų prijungimas iš išorės ir joninis ryšys, sudarant molekules, tai deguonies, azoto, anglies ir boro grupių p elementams (turintiems išorinio elektronų sluoksnio struktūras, atitinkamai, s^2p^4 , s^2p^3 , s^2p^2 bei s^2p^1 ir dėl to priklausantiems periodinės lentelės stulpeliams VI A, V A, IV A bei III A), kai šie elementai jungiasi su nemetalais, labiau būdingas kovalentinis ryšys.

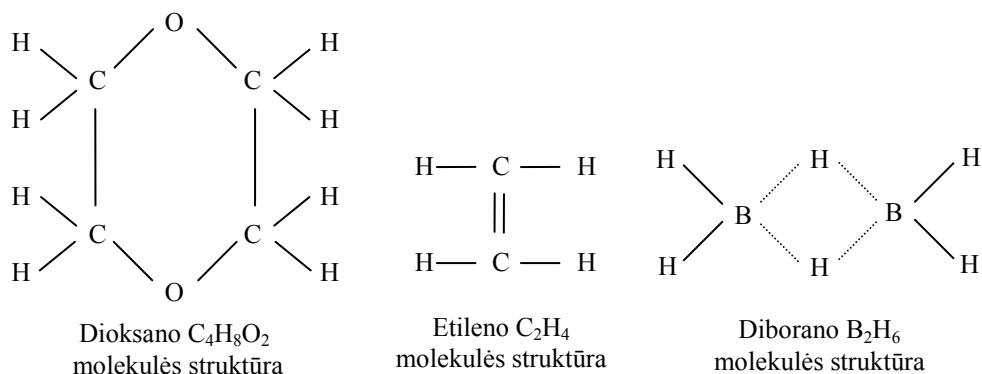
Tačiau ir šių grupių elementai, panašiai kaip ir halogenai, kartais sugeba atimti elektronus iš metalų ir tapti neigiamais jonais. Tai labiau būdinga deguonies grupės elementams, turintiems išorinio elektronų sluoksnio struktūrą, artimesnę halogenams.

Boro grupės elementai, kurių išoriniame sluoksnyje yra du s elektronai ir vienas p elektronas kartais sugeba netekti visų trijų savo išorinių elektronų ir tapti teigiamais trivalenčiais jonais, kaip pavyzdžiui Al^{3+} .

Kovalentiniai ryšiai dažniausiai būna viengubi, kai du atomus jungia pora bendrų elektronų – po vieną iš kiekvieno atomo. Molekulių, kuriose atomai sujungti viengubais kovalentiniais ryšiais, pavyzdžiai: H_2O , H_2S , NH_3 , $C_4H_8O_2$. Dietileno dioksido (dioksano) $C_4H_8O_2$ molekulės struktūra pavaizduota 59 pav.

Gana dažnai sutinkami ir **dvigubi kovalentiniai ryšiai**. Pavyzdžiui, etileno C_2H_4 molekulėje anglies atomai sujungti dviguba kovalentine jungtimi, susidedančia iš taip vadinamos σ jungties ir π jungties. Vandenilio atomai etileno molekulėje sujungti su anglies atomais paprastomis (viengubomis) kovalentinėmis σ jungtimis. Etileno molekulės struktūra taip pat pavaizduota 59 pav.

Pasitaiko, nors ir žymiai rečiau, sudėtingesnių kovalentinių ryšių. 59 pav. pavaizduota diborano B_2H_6 molekulės struktūra, kurioje egzistuoja ne tik keturi paprasti kovalentiniai ryšiai, bet ir du **tricentriniai kovalentiniai ryšiai**, kiekviename iš kurių pora valentinių elektronų jungia tris atomus: 2 boro ir 1 vandenilio atomą. Tie ryšiai pavaizduoti punktyrais.



59 pav.

Nagrinėdami dioksino, etileno ir diborano molekulių struktūras, negalime nepastebėti jų simetriškumo. **Simetrija – būdingas daugeliui sistemų bruožas, atsirandantis tų sistemų elementams išsidėstant taip, kad būtų pasiekta pusiausvyros būseną, charakterizuojama sistemos energijos minimumu.** Simetrija būdinga ir atomų elektroninio apvalkalo struktūroms. Galima pastebėti ir dėsningumą, kad kuo struktūra simetriškesnė, tuo ji stabilesnė.

Pavyzdžiui, kai p elementų elektroninio apvalkalo išorinio sluoksnio struktūra tampa simetrišku „oktetu“ (du s elektronai ir 6 p elektronai), toje struktūroje susidaro gana patvari pusiausvyra: joje, iš vienos pusės, nebėra vietos naujiems elektronams, o iš kitos pusės, nelengva atimti turimus elektronus, pririštus prie atomo simetriškais ryšiais. Taip atsiranda p elementų inertinių dujų grupė (periodinės lentelės stulpelis 0), kuriai priklauso neonas (Ne), argonas (Ar), kriptonas (Kr), ksenonas (Xe), radonas (Rn). Inertinių dujų grupei priklauso ir helis (He), kuris nors ir neturi okteto s^2p^6 ir nėra p elementas, tačiau turi elektroninį apvalkalą, susidedantį iš vienintelio sluoksnio, kurio konfigūracija – simetriškas „duetas“ $1s^2$. Cheminių ryšių tarp nulinės grupės elementų atomų ir kitų elementų atomų nesusidarymas, esant normalioms išorinėms sąlygoms, kaip tik ir paaiškina tai, kodėl nulinės grupės elementų normali fazinė būseną yra dujinė būseną. Ir tik pakeitus išorines sąlygas galima pasiekti, kad inertinių dujų atomai pradėtų jungtis su kitais atomais. 1962m. N.Bartletas atrado, kad ksenonas gali reaguoti su fluoru, sudarydamas spalvotus kristalinius junginius. Dabar jau pagaminta daug ksenono ir kriptono junginių.

Nagrinėjant sistemų pusiausvyros būsenas iš bendrasisteminių pozicijų, labai svarbu suvokti tas būsenas palaikančių mechanizmų veikimo dėsningumus. Viena tokių dėsningumų aprašo **Le Šatelje ir Brauno principas** (vadinamas dar ir **atoveikio principu**): **pusiausvyrioji sistema į išorės sąlygų (pavyzdžiui, temperatūros, slėgio ir t. t.) pasikeitimus reaguoja taip, kad sumažėtų tas išorės poveikis sistemai.**

Pavyzdžiui, jei padidėtų pusiausvyrios sistemos, sudarytos iš vandens ir ledo mišinio, išorinis slėgis, tai tam, kad sistema išliktų pusiausvyroje, turėtų sumažėti jos tūris ir padidėti vidinis slėgis, atsveriantis padidėjusį išorinį slėgį. Kad taip atsitiktų, turėtų dalis ledo mišinyje ištirpti, pavirsdama vandeniu, kurio tankis yra didesnis už ledo tankį ir todėl užima mažesnę tūrį. O kad ledas esamoje pusiausvyrinėje būsenoje pradėtų tirpti, turėtų sumažėti jo tirpimo temperatūra, t. y. pagal atoveikio principą ledo tirpimo temperatūra, didėjant slėgiui, turėtų mažėti. Taip tikrovėje ir yra ir tuo, pavyzdžiui, naudojamosi čiūžinėjant pačiūžomis: čiūžinėtojo svoris per siauras pačiūžų geležėles stipriai sleigia ledo paviršių, ledas, sumažėjęs jo tirpimo temperatūrai, po pačiūžomis tirpsta, ir atsirandantis vanduo tampa savo rūšies tepalu, padidinančiu ledo slidumą.

Panašių pavyzdžių, iliustruojančių atoveikio principą, galima rasti daug ir ne tik procesuose, kada medžiaga **pereina iš vienos fazinės būsenos** (kieto kūno, skysčio, dujų) **į kitą**. Todėl galima teigti, jog **atoveikio principas priklauso bendrasisteminių principų aibei** (panašiai, kaip ir jau ne kartą minėtas izomorfizmo principas) **ir yra viena bendrasisteminių pusiausvyrinės būsenos simetrijos principo išraiškų.**

Ketvirtame, penktame ir t. t. periodinės cheminių elementų lentelės perioduose (žiūr. 34. lentelę) tarp s ir p elementų grupių, t. y. tarp stulpelių IIA ir IIIA, atsiranda **pereinamųjų elementų** grupės. Toms grupėms būdinga, jog, nesikeičiant išoriniam sluoksniui, atsiranda d posluoksnio elektronai, kurie pagrindinai ir nulemia tų elementų cheminių savybių skirtumus. Tie skirtumai nėra labai ryškūs, nes pereinamųjų elementų atomų branduolių elektroninių apvalkalų išoriniai sluoksniai yra vienodi. Pereinamųjų elementų elektroninio apvalkalo formavimosi procesas dėl elektronų ir jų sluoksnių tarpusavio sąveikavimo turi specifinių ypatumų, į kuriuos atidesnis skaitytojas galėjo atkreipti dėmesį jau anksčiau, nagrinėdamas 31. lentelę. Pavyzdžiui, ketvirtojo ir penktojo periodo elementų pasipildantys nauji elektronai gali priklausyti ne tik ketvirtajam, bet ir trečiajam sluoksniui, būtent – jo

posluoksniui 3d, į kurį gali tilpti iki 10 elektronų. Analogiškai, penktojo periodo elementų pasipildantys elektronai gali priklausyti ne tik penktajam, bet ir ketvirtajam sluoksniui, būtent – jo posluoksniui 4d, į kurį gali tilpti iki 10 elektronų. Taip periodinėje cheminių elementų lentelėje atsiranda 10 stulpelių, į kuriuos patenka pereinamieji elementai, sugrupuoti į **grupes**: IIIB, IVB, VB, VIIB, VIII, IB, IIB (žiūr. 35. lentelę).

35. lentelė

Grupės Periodai	Grupės																0	
	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	VIII			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA		VIIA
1.	¹ H																² He	
2.	³ Li	⁴ Be										⁵ B	⁶ C	⁷ N	⁸ O	⁹ F	¹⁰ Ne	
3.	¹¹ Na	¹² Mg										¹³ Al	¹⁴ Si	¹⁵ P	¹⁶ S	¹⁷ Cl	¹⁸ Ar	
4.	¹⁹ K	²⁰ Ca	²¹ Sc	²² Ti	²³ V	²⁴ Cr	²⁵ Mn	²⁶ Fe	²⁷ Co	²⁸ Ni	²⁹ Cu	³⁰ Zn	³¹ Ga	³² Ge	³³ As	³⁴ Se	³⁵ Br	³⁶ Kr
5.	³⁷ Rb	³⁸ Sr	³⁹ Y	⁴⁰ Zr	⁴¹ Nb	⁴² Mo	⁴³ Tc	⁴⁴ Ru	⁴⁵ Rh	⁴⁶ Pd	⁴⁷ Ag	⁴⁸ Cd	⁴⁹ In	⁵⁰ Sn	⁵¹ Sb	⁵² Te	⁵³ I	⁵⁴ Xe
6.	⁵⁵ Cs	⁵⁶ Ba	⁵⁷ La	⁷² Hf	⁷³ Ta	⁷⁴ W	⁷⁵ Re	⁷⁶ Os	⁷⁷ Ir	⁷⁸ Pt	⁷⁹ Au	⁸⁰ Hg	⁸¹ Tl	⁸² Pb	⁸³ Bi	⁸⁴ Po	⁸⁵ At	⁸⁶ Rn
7.	⁸⁷ Fr	⁸⁸ Ra	⁸⁹ Ac	¹⁰⁴ Ku														
</																		

Periodinės cheminių elementų lentelės, pateiktos 35-oje lentelėje, langeliai, vaizduojantys cheminius elementus, esančius **nemetalais**, yra šviesiai pilko fono, **pusmetaliais** – tamsiai pilko fono, metalų langeliai palikti balto fono. Metalai skiriasi nuo nemetalų visų pirma tuo, kad metalų atomų elektroninio apvalkalo išorinio sluoksnio elektronai, būdami gana silpnai surišti su branduoliais, tampa beveik laisvi ir sudaro taip vadinamas „**elektronines dujas**“, kurioms priklausančios elektronai yra jau ne atskirų branduolių „nuosavybė“, o „kolektyvinė“ visų metalo atomų „nuosavybė“: elektronai gana laisvai gali keliauti nuo vieno atomo prie kito, taip suteikdami metalams labai didelį elektrinį laidumą ($\sim 10^7$ s/m), o taip pat ir šiluminį laidumą. Todėl metalai – geri **laidininkai**. „**Metalinės**“ **savybės perioduose silpnėja iš kairės į dešinę, o grupėse stiprėja iš viršaus žemyn**. Nemetalų elektronai pririšti prie savo branduolių žymiai stipriau ir todėl nemetalai yra **dielektrikai**. Nemetalai dažniau ne praranda savo elektronus, tapdami teigiamais jonais, o akceptuoja juos iš išorės, papildydami savo atomų elektroninio apvalkalo išorinį sluoksnį iki pilno „okteto“ ir tokiu būdu tapdami neigiamais jonais. Pusmetalių laidumas yra mažas (0,01–1 s/m). Vieni jų (Ge, Sb, Po) yra artimesni metalams, kiti (B, Si, As, Se, Te, At) – nemetalams. Pusmetaliai gali būti naudojami **puslaidininkų** gamybai. Vieniems jų būdingas **elektroninis, kitiems – skylinis laidumas**.

Formuojantis ketvirtojo ir penktojo periodų elementų atomų elektroniniams apvalkalams, atsiranda ir daugiau specifinių ypatumų. Jie parodyti 36-oje lentelėje, vaizduojančioje atomų elektroninių apvalkalų struktūras.

Dar daugiau specifinių ypatumų atsiranda, formuojantis šeštojo ir septintojo periodų elementų elektroniniams apvalkalams. Pavyzdžiui, susiformavus 57-jo elemento – lantano (La) – elektroniniam apvalkalui $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 5d^1$, tolesnis posluoksnio 5d formavimasis sustoja ir prasideda vidinio posluoksnio 4f, esančio ketvirtajame, skaičiuojant iš vidaus, ir tuo pačiu metu trečiajame nuo išorės sluoksnyje, formavimasis. Kadangi į posluoksnį 4f gali tilpti $2(2 \cdot 3 + 1) = 14$ elektronų, tai gauname 14 ypatingų cheminių elementų, pavadintų **lantanoidais** (lantanidais). Šių elementų (⁵⁸Ce, ⁵⁹Pr, ⁶⁰Nd, ⁶¹Pm, ⁶²Sm, ⁶³Eu, ⁶⁴Gd, ⁶⁵Tb, ⁶⁶Dy, ⁶⁷Ho, ⁶⁸Er, ⁶⁹Tm, ⁷⁰Yb ir ⁷¹Lu) atomų elektroninio apvalkalo **dvių išorinių sluoksnių struktūros yra labai panašios** (o daugumos jų visiškai vienodos), todėl **lantanoidų cheminės savybės mažai kuo skiriasi**, ir todėl periodinėje cheminių elementų lentelėje **lantanoidai išskiriami į atskirą eilutę, atitinkančią periodinės cheminių elementų lentelės IIIB stulpelio langelį**. Lantanoidų eilutė iškeliamą iš pagrindinės periodinės cheminių elementų lentelės ir patalpinama atskirai (žiūr., 34. lentelę). Pirmasis tos eilutės elementas – ceris (Ce) – turintis atominį numerį 58, skiriasi nuo 57-jų numerį turinčio lantano tuo, kad cerio atomo elektroniniame apvalkale atsiranda ketvirtojo sluoksnio posluoksnis f, kuriame iškart atsiranda 2 elektronai: vienas – „eilės tvarka“, o kitas – posluoksnio 5d sąskaita, t. y. posluoksnis 5d tampa tuščias. Toks jis ir išlieka visų lantanoidų atomuose, išskyrus paskutinįjį – lutecį (Lu) – turintį atominį numerį 71, kurio elektroninio apvalkalo struktūra skiriasi nuo priešpaskutiniojo lantanoido – iterbio (⁷⁰Yb) struktūros tik tuo, kad lutecio atomo elektroninio apvalkalo 5d posluoksnyje vėl atsiranda vienas elektronas (kaip buvo prieš tai lantano atomo elektroniniame apvalkale). Visų kitų lantanoidų atomų, pradedant prazeodimiu (⁵⁹Pr) ir baigiant jau minėtu iterbiu (⁷⁰Yb), elektroniniai apvalkalai skiriasi tik tuo, kad, didėjant atominiam numeriui, tokiu pat tempu didėja elektronų skaičius 4f posluoksnyje: ⁵⁸Ce

turi du 4f posluoksnio elektronus, ^{59}Pr – tris, ^{60}Nd – keturis, ^{61}Pm – penkis ir t. t. iki iterbio ^{70}Yb imtinai, kurio 4f posluoksnyje yra jau 14 elektronų. Pereinant prie paskutiniojo lantanoido ^{71}Lu , 4f posluoksnio elektronų skaičius išlieka toks pat (posluoksnis 4f jau pilnai užpildytas ir toks jis išliks visiems atomams, kurių atominis numeris $Z \geq 70$), o naujas elektronas atsiranda 5d posluoksnyje. Gauname tokią lutecio atomo elektroninio apvalkalo struktūrą: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$. Toliau didėjant atominiam numeriui, didės posluoksnio 5d elektronų skaičius (hafnis ^{72}Hf turės jau du 5d elektronus, tantalas ^{73}Ta – tris ir t. t.), t. y. tęsis pereinamųjų elementų 6–jame cheminių elementų lentelės periode formavimasis, kuris užsibaigs gyvsidabriu ^{80}Hg , kurio atomo elektroninio apvalkalo ne tik posluoksnis 4f, bet ir posluoksniai 5d ir 6s taps pilnai užpildyti: pirmasis turės 10, o antrasis – 2 elektronus. Po to prasidės posluoksnio 6p formavimasis ir atsiras 6–jo periodo p elementų eilutė: ^{81}Te , ^{82}Pb , ^{83}Bi ir t. t., kuri užsibaigs inertinėmis dujomis ^{86}Rn .

Panašiai (nors ir truputį kitoniškai) nutinka ir septintajame periode. Susiformavus septintojo sluoksnio posluoksniui 7s, t. y. atsiradus periodinėje lentelėje jos septintojo periodo s elementams ^{87}Fr ir ^{88}Ra , pereinamojo elemento aktinio ^{89}Ac atomo elektroninio apvalkalo šeštojo (antrojo nuo išorės) sluoksnio posluoksnyje 5d atsiranda pirmasis elektronas ir po to prasideda ypatingųjų cheminių elementų, pavadintų **aktinoidais**, eilutė. Padidėjus atominiam numeriui Z vienetu, torio ^{90}Th atomo apvalkale šeštojo sluoksnio posluoksnį 6d papildo dar vienas elektronas ir gauname tokią to atomo elektroninio apvalkalo struktūrą: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2 6p^6 6d^2 7s^2$. Protaktinio ^{91}Pa atome vienas 6d posluoksnio elektronas persoka į 5f posluoksnį, ir todėl, pasipildžius 5f posluoksniui vienu elektronu „eilės tvarka“, jame atsiranda jau du elektronai, o posluoksnyje 6d – vienas elektronas. Padidėjus atominiam numeriui Z vienetu, urano ^{92}U atomo 5f posluoksnis pasipildo dar vienu elektronu, o neptūnio ^{93}Np – dar vienu. Plutonio ^{94}Pu atome posluoksnis 5f pasipildo iškart dviem elektronais: vienas elektronas atsiranda „eilės tvarka“, o kitas persoka iš posluoksnio 6d, ir tas posluoksnis plutonio atome tampa tuščias. Jis išlieka tuščias ir americio ^{95}Am atome, kurio 5f posluoksnyje elektronų skaičius išauga iki 7. Jų skaičius išlieka toks pat ir kiurio ^{96}Cm atome, nes naujasis elektronas patenka ne į 5f, o į 6d posluoksnį. Berklio ^{97}Bk atomo elektroniniame apvalkale tas elektronas posluoksnyje 6d išlieka, todėl ir toliau vyksta elektronų skaičiaus 5f posluoksnyje didėjimas vienetu. Kalifornio ^{98}Cf atome 5f posluoksnis iškart vėl pasipildo dviem elektronais ir jų skaičius tame posluoksnyje tampa lygus 11: vienas elektronas gaunamas „eilės tvarka“, o antrasis iš posluoksnio 6d, kuris tampa tuščias ir po to išlieka tuščias iki priešpaskutinio aktinoido – nobelio ^{102}No imtinai. Todėl einšteinio ^{99}Es , fermio ^{100}Fm , mendelevio ^{101}Md ir nobelio ^{102}No atomuose 5f posluoksnio elektronų skaičius nuosekliai didėja nuo 12 iki 14, t. y. iki pilno užsipildymo. Pereinant prie paskutinio aktinoido – laurencio ^{103}Lr , 5f posluoksnio elektronų skaičius jau nebesikeičia, o naujasis elektronas patenka į 6d posluoksnį. Todėl laurencio atomo elektroninio apvalkalo struktūra tampa tokia: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 6s^2 6p^6 6d^1 7s^2$. Taigi visų aktinoidų paskutiniųjų dviejų sluoksnių struktūra mažai kuo skiriasi: 6d posluoksnyje tik toris turi du elektronus, o visi kiti aktinoidai – tik po vieną arba nė vieno. **Kadangi skirtumas elektronų skaičiumi 5f posluoksnyje, priklausančiame vidiniam (trečiam nuo išorės) sluoksniui, beveik nepasireiškia chemiškai, tai aktinoidų cheminės savybės gana panašios ir 14 aktinoidų išskiriami į atskirą eilutę, kuri, kaip ir lantanoidų eilutė, iškeliamą iš periodinės lentelės kaip tos lentelės IIIB stulpelį papildantis „tęsinys“.** Visiems aktinoidams (o ypačiai – uranui ir transuraniniams elementams), kurių branduoliuose yra daug protonų ir neutronų, **būdingas tų branduolių nestabilumas.** Tačiau tai – jau ne atomų elektroninių apvalkalų, o atomų branduolių savybė, priklausanti nuo jų sudėties ir struktūros. Reikėtų pažymėti, kad **radioaktyviųjų izotopų** turi ne tik aktinoidai bei kiti septintojo periodo elementai, pasižymintys dideliu atominiu svoriu. Tokių izotopų pasitaiko ir perioduose, turinčiuose mažesnį numerį (pavyzdžiui, radioaktyvioji anglis $^{14}_6\text{C}$, radioaktyvusis kobaltas $^{60}_{27}\text{Co}$ ir t. t.).

Cheminių elementų **nesužadintų atomų elektroninių apvalkalų struktūros**, nulemiančios tų elementų chemines savybes bei jų **emisijos ir absorbcijos spektrų sandarą**, pavaizduotos 36-oje lentelėje. Stengiantis išvengti gremėzdiškumo ir pasikartojimų, eilinio sluoksnio (ir periodo) struktūra vaizduojama tik iki tol, kol vyksta į tą sluoksnį (ir periodą) įeinančių posluoksnių užpildymas elektronais, t. y. iki tol, kol susiformuoja visas periodas. Pilnai susiformavusių periodų (jų sluoksnių ir posluoksnių) struktūra, kaip visiškai identiškai besikartojanti, po to jau nebevaizduojama, o vaizduojama tik naujų susidarancių sluoksnių ir posluoksnių struktūra.

Pavyzdžiui, ličio ^3Li , priklausančio antrajam periodui, nesužadinto atomo elektroninio apvalkalo struktūrą aprašo formulė $1s^2 2s^1$, tačiau 36-oje lentelėje ji bus vaizduojama ne pilnai, o tik kaip... $2s^1$, kur daugtaškis... vaizduoja pilnai užpildytą pirmąjį sluoksnį $1s^2$. Analogiškai, trečiajam periodui priklausančio natrio ^{11}Na nesužadinto atomo elektroninio apvalkalo struktūros formulė $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ bus rašoma ne pilnai, o tik... $3s^1$, kur taškai... reiškia jau nebevaizduojamą pilnai užpildytą pirmojo ir antrojo sluoksnių struktūras. Kalcio ^{20}Ca struktūra bus vaizduojama ne pilna formule $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$, o tik... $4s^2$, nes posluoksnio 3p užpildymu argono ^{18}Ar atomo elektroniniame

apvalkale šešiais elektronais baigėsi trečiasis periodas ir natrio atomo elektroninio apvalkalo išorinio sluoksnio posluoksnio 4s pildymu prasidėjo ketvirtasis.

Trečiojo periodo (panašiai, kaip ir ketvirtojo, penktojo ir t. t.) pabaiga nesutampa su trečiojo sluoksnio pildymo elektronais pabaiga, nes, kaip rodo 34-oji lentelė, posluoksnis 3d pradamas pildyti tik po posluoksnio 4s užpildymo. Visi periodai prasideda atitinkamo išorinio sluoksnio posluoksnio s pildymu ir visi periodai, išskyrus pirmąjį, baigiami posluoksnio p tame išoriniame sluoksnyje užpildymu šešiais p elektronais, kai tuo tarpu kiti to sluoksnio posluoksniai (d, f, g ir t. t.) bus pildomi jau tolimesniuose (t. y. turinčiuose didesnę numerį) perioduose.

Todėl, pavyzdžiui, skandžio ^{21}Sc atomo elektroninio apvalkalo struktūros formulė yra $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$. Lygindami šią struktūrą su periodinės lentelės trečiojo periodo pabaigoje esančio argono ^{18}Ar atomo elektroninio apvalkalo struktūra $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$, matome, jog skandžio atomo elektroniniame apvalkale ketvirtame periode papildomai jau atsirado du ketvirtojo sluoksnio posluoksnio 4s elektronai ir, pereinant nuo kalcio ^{20}Ca prie skandžio ^{21}Sc , prisidėjo dar vienas elektronas – trečiojo sluoksnio posluoksnio 3d pirmasis elektronas. Todėl 36-joje lentelėje skandžio atomo elektroninio apvalkalo struktūra vaizduojama užrašu...3d¹4s².

Analogiškai 36-oje lentelėje vaizduojama ir lantano ^{57}La atomo elektroninio apvalkalo struktūra. Užrašas...5d¹6s² rodo, kad lantanas priklauso šeštajam periodui, nes jo atomo elektroninio apvalkalo išoriniame sluoksnyje jau yra du posluoksnio 6s elektronai, o taip pat, kad jau pradėtas priešpaskutiniojo (penktojo) sluoksnio posluoksnio 5d pildymas, nes jame atsirado vienas elektronas.

Dar padidėjus atominiam numeriui Z vienetu, cerio ^{58}Ce atomo elektroniniame apvalkale prasideda dar neužpildyto vidinio (ketvirtojo nuo branduolio ir trečiojo nuo išorės) sluoksnio posluoksnio 4f pildymas, į kurį peršoka ir elektronas iš posluoksnio 5d, dėl ko pastarasis tampa tuščias. Todėl 36-joje lentelėje cerio atomo elektroninio apvalkalo struktūra vaizduojama užrašu...4f²5d⁰6s².

Cheminiai elementai 36-oje lentelėje išdėstyti jų atominių numerių Z, rodančių protonų skaičių jų branduoliuose ir elektronų skaičių nesusžadintų atomų elektroniniuose apvalkaluose, didėjimo tvarka.

36. lentelė

z	Elemento simbolis S ir pavadinimas		Elemento nesusžadinto atomo elektroninio apvalkalo struktūra (išorinių sluoksnių elektronų pagrindinės konfigūracijos)	Pastabos
	S	Pavadinimas		
1	H	Vandenilis	1s ¹	s elementas
2	He	Helis	1s ²	inertinės dujos
3	Li	Litis	...2s ¹	s elementas
4	Be	Berilis	...2s ²	s elementas
5	B	Boras	...2s ² 2p ¹	p elementas
6	C	Anglis	...2s ² 2p ²	p elementas
7	N	Azotas	...2s ² 2p ³	p elementas
8	O	Degūnis	...2s ² 2p ⁴	p elementas
9	F	Fluoras	...2s ² 2p ⁵	p elementas, halogenas
10	Ne	Neonas	...2s ² 2p ⁶	inertinės dujos
11	Na	Natris	...3s ¹	s elementas
12	Mg	Magnis	...3s ²	s elementas
13	Al	Aliuminis	...3s ² 3p ¹	p elementas
14	Si	Silicis	...3s ² 3p ²	p elementas
15	P	Fosforas	...3s ² 3p ³	p elementas
16	S	Siera	...3s ² 3p ⁴	p elementas
17	Cl	Chloras	...3s ² 3p ⁵	p elementas, halogenas
18	Ar	Argonas	...3s ² 3p ⁶	inertinės dujos
19	K	Kalis	...4s ¹	s elementas
20	Ca	Kalcis	...4s ²	s elementas
21	Sc	Skandis	...3d ¹ 4s ²	pereinamasis elementas
22	Ti	Titanas	...3d ² 4s ²	pereinamasis elementas
23	V	Vanadis	...3d ³ 4s ²	pereinamasis elementas
24	Cr	Chromas	...3d ⁵ 4s ¹	vienas elementas iš 4s posluoksnio peršoka į 3d posluoksnį
25	Mn	Manganas	...3d ⁵ 4s ²	vėl užsipildo 4s posluoksnis

26	Fe	Geležis	$\dots 3d^6 4s^2$	pereinamasis elementas
27	Co	Kobaltas	$\dots 3d^7 4s^2$	pereinamasis elementas
28	Ni	Nikelis	$\dots 3d^8 4s^2$	pereinamasis elementas
29	Cu	Varis	$\dots 3d^{10} 4s^1$	vienas elektronas iš 4s posluoksnio papildo 3d posluoksnį iki pilno užpildymo, s elementas
30	Zn	Cinkas	$\dots 3d^{10} 4s^2$	vėl užsipildo 4s posluoksnis
31	Ga	Galis	$\dots 3d^{10} 4s^2 4p^1$	p elementas
32	Ge	Germanis	$\dots 3d^{10} 4s^2 4p^2$	p elementas
33	As	Arsenas	$\dots 3d^{10} 4s^2 4p^3$	p elementas
34	Se	Selenas	$\dots 3d^{10} 4s^2 4p^4$	p elementas
35	Br	Bromas	$\dots 3d^{10} 4s^2 4p^5$	p elementas, halogenas
36	Kr	Kriptonas	$\dots 3d^{10} 4s^2 4p^6$	inertinės dujos
37	Rb	Rubidis	$\dots 5s^1$	s elementas
38	Sr	Stroncis	$\dots 5s^2$	s elementas
39	Y	Itris	$\dots 4d^1 5s^2$	pereinamasis elementas
40	Zr	Cirkonis	$\dots 4d^2 5s^2$	pereinamasis elementas
41	Nb	Niobis	$\dots 4d^4 5s^1$	vienas elektronas iš 5s posluoksnio papildo 4d posluoksnį
42	Mo	Molibdenas	$\dots 4d^5 5s^1$	posluoksnis 5s išlieka neužpildytas
43	Te	Technecis	$\dots 4d^5 5s^2$	užpildomas 5s posluoksnis
44	Ru	Rutenis	$\dots 4d^7 5s^1$	vienas elektronas iš 5s posluoksnio papildo 4d posluoksnį
45	Rh	Rodis	$\dots 4d^8 5s^1$	posluoksnis 5s išlieka neužpildytas
46	Pd	Paladis	$\dots 4p^6 4d^{10} 5s^0$	paskutinis elektronas iš posluoksnio 5s peršoka į posluoksnį 4d ir jis pilnai užpildomas
47	Ag	Sidabras	$\dots 4p^6 4d^{10} 5s^1$	vėl prasideda posluoksnio 5s pildymas, nes 4d posluoksnis pilnai užpildytas, s elementas
48	Cd	Kadmis	$\dots 4d^{10} 5s^2$	posluoksnis 5s pilnai užpildomas
49	In	Indis	$\dots 4d^{10} 5s^2 5p^1$	p elementas
50	Sn	Alavas	$\dots 4d^{10} 5s^2 5p^2$	p elementas
51	Sb	Stibis	$\dots 4d^{10} 5s^2 5p^3$	p elementas
52	Te	Telūras	$\dots 4d^{10} 5s^2 5p^4$	p elementas
53	J	Jodas	$\dots 4d^{10} 5s^2 5p^5$	p elementas, halogenas
54	Xe	Ksenonas	$\dots 4d^{10} 5s^2 5p^6$	inertinės dujos
55	Cs	Cezis	$\dots 6s$	s elementas
56	Ba	Baris	$\dots 6s^2$	s elementas
57	La	Lantanai	$\dots 5d^1 6s^2$	pereinamasis elementas
58	Ce	Ceris	$\dots 4f^2 5d^0 6s^2$	lantanoidas, elektronas iš 5d posluoksnio papildo pradėtą pildyti 4f posluoksnį
59	Pr	Prazeodimis	$\dots 4f^3 5d^0 6s^2$	lantanoidas, pildomas 4f posluoksnis
60	Nd	Neodimis	$\dots 4f^4 5d^0 6s^2$	lantanoidas, pildomas 4f posluoksnis
61	Pm	Prometis	$\dots 4f^5 5d^0 6s^2$	lantanoidas, pildomas 4f posluoksnis
62	Sm	Samaris	$\dots 4f^6 5d^0 6s^2$	lantanoidas, pildomas 4f posluoksnis
63	Eu	Europis	$\dots 4f^7 5d^0 6s^2$	lantanoidas, pildomas 4f posluoksnis
64	Gd	Gadolinis	$\dots 4f^7 5d^1 6s^2$	lantanoidas, vėl pradamas pildyti 5d posluoksnis
65	Tb	Terbis	$\dots 4f^9 5d^0 6s^2$	lantanoidas, elektronas iš 5d posluoksnio papildo 4f posluoksnį
66	Dy	Disprozis	$\dots 4f^{10} 5d^0 6s^2$	lantanoidas, tęsiamas posluoksnio 4f pildymas
67	Ho	Holmis	$\dots 4f^{11} 5d^0 6s^2$	lantanoidas, tęsiamas posluoksnio 4f pildymas
68	Er	Erbis	$\dots 4f^{12} 5d^0 6s^2$	lantanoidas, tęsiamas posluoksnio 4f pildymas
69	Tm	Tulis	$\dots 4f^{13} 5d^0 6s^2$	lantanoidas, tęsiamas posluoksnio 4f pildymas
70	Yb	Iterbis	$\dots 4f^{14} 5d^0 6s^2$	lantanoidas, tęsiamas posluoksnio 4f pildymas, 4f posluoksnis pilnai užpildytas
71	Lu	Lutecis	$\dots 4f^{14} 5d^1 6s^2$	vėl pradamas pildyti 5d posluoksnis, paskutinis lantanoidas
72	Hf	Hafnis	$\dots 4f^{14} 5d^2 6s^2$	pereinamasis elementas, tęsiamas 5d posluoksnio pildymas

73	Ta	Tantalas	$\dots 4f^{14}5d^36s^2$	pereinamasis elementas, tęsiasi 5d posluoksnio pildymas
74	W	Volframas	$\dots 4f^{14}5d^46s^2$	pereinamasis elementas, tęsiasi 5d posluoksnio pildymas
75	Re	Renis	$\dots 4f^{14}5d^56s^2$	pereinamasis elementas, tęsiasi 5d posluoksnio pildymas
76	Os	Osmis	$\dots 4f^{14}5d^66s^2$	pereinamasis elementas, tęsiasi 5d posluoksnio pildymas
77	Ir	Iridis	$\dots 4f^{14}5d^76s^2$	pereinamasis elementas, tęsiasi 5d posluoksnio pildymas
78	Pt	Platina	$\dots 4f^{14}5d^96s^1$	pereinamasis elementas, tęsiasi 5d posluoksnio pildymas, dar vienas papildomas elektronas patenka į 5d posluoksnį iš 6s posluoksnio
79	Au	Auksas	$\dots 4f^{14}5d^{10}6s^1$	baigiamas 5d posluoksnio pildymas, o 6s posluoksnis išlieka nepilnai užpildytas, s elementas
80	Hg	Gyvsidabris	$\dots 4f^{14}5d^{10}6s^2$	užbaigiamas 6s posluoksnio pildymas, s elementas
81	Tl	Talis	$\dots 4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$	p elementas
82	Pb	Švinas	$\dots 4f^{14}5d^{10}6s^26p^2$	p elementas
83	Bi	Bismutas	$\dots 4f^{14}5d^{10}6s^26p^3$	p elementas
84	Po	Polonis	$\dots 4f^{14}5d^{10}6s^26p^4$	p elementas
85	At	Astatas	$\dots 4f^{14}5d^{10}6s^26p^5$	p elementas
86	Rn	Radonas	$\dots 4f^{14}5d^{10}6s^26p^6$	inertinės dujos
87	Fr	Francis	$\dots 7s^1$	s elementas
88	Ra	Radis	$\dots 7s^2$	s elementas
89	Ac	Aktinis	$\dots 6d^17s^2$	pereinamasis elementas, ypatingas tuo, kad nuo jo prasideda aktinoidų grupės formavimasis
90	Th	Toris	$\dots 6d^27s^2$	pereinamasis aktinoidų grupės elementas, dar neturintis 5f elektronų
91	Pa	Protaktinis	$\dots 5f^26d^17s^2$	aktinoidas, prasideda posluoksnio 5f pildymas, dar vienas elektronas papildo 5f posluoksnį, peršokdamas iš 6d posluoksnio
92	U	Uranas	$\dots 5f^36d^17s^2$	aktinoidas, tęsiasi posluoksnio 5f pildymas
93	Np	Neptūnis	$\dots 5f^46d^17s^2$	aktinoidas, tęsiasi posluoksnio 5f pildymas
94	Pu	Plutonis	$\dots 5f^66d^07s^2$	aktinoidas, tęsiasi posluoksnio 5f pildymas, iš 6d posluoksnio paskutinis elementas peršoka į 5f posluoksnį
95	Am	Americis	$\dots 5f^76d^07s^2$	aktinoidas, tęsiasi 5f posluoksnio pildymas
96	Cm	Kiuris	$\dots 5f^76d^17s^2$	aktinoidas, vėl atsiranda elektronas 6d posluoksnyje
97	Bk	Berklis	$\dots 5f^86d^17s^2$	aktinoidas, tęsiasi 5f posluoksnio pildymas
98	Cf	Kalifornis	$\dots 5f^{10}6d^07s^2$	aktinoidas, tęsiasi 5f posluoksnio pildymas
99	Es	Einšteinis	$\dots 5f^{11}6d^07s^2$	aktinoidas, tęsiasi 5f posluoksnio pildymas, paskutinis 6d posluoksnio elektronas papildomai papildo 5f posluoksnį
100	Fm	Fermis	$\dots 5f^{12}6d^07s^2$	aktinoidas, tęsiasi 5f posluoksnio papildymas elektronais
101	Md	Mendelevis	$\dots 5f^{13}6d^07s^2$	aktinoidas, tęsiasi 5f posluoksnio papildymas elektronais
102	No	Nobelis	$\dots 5f^{14}6d^07s^2$	aktinoidas, tęsiasi 5f posluoksnio papildymas elektronais, 5f posluoksnio pildymas užbaigiamas
103	Lr	Laurencis	$\dots 5f^{14}6d^17s^2$	paskutinis aktinoidas, 5f posluoksnis pilnai užpildytas ir vėl pradedamas pildyti 6d posluoksniu
104	Ku	Kurčiatovis	$\dots 5f^{14}6d^27s^2$	pereinamasis elementas, tęsiasi 6d posluoksnio papildymas elektronais
105	Ns	Nilsboris	$\dots 5f^{14}6d^37s^2$	pereinamasis elementas, tęsiasi 6d posluoksnio papildymas elektronais
106			$\dots 5f^{14}6d^47s^2$	pereinamasis elementas, tęsiasi 6d posluoksnio papildymas elektronais

107			...5f ¹⁴ 6d ⁵ 7s ²	pereinamasis elementas, tęsiamas 6d posluoksnio papildymas elektronais
*	*			

36-oji lentelė, kuri buvo sudaryta, naudojantis kvantinės atomų fizikos dėsniais, paaiškina, iš kur ir kaip atsiranda cheminių elementų savybių kitimo, didinant jų atominis numerius, dėsningumai, leidusieji iš tų elementų sudaryti antrojo tipo sistemą – periodinę cheminių elementų lentelę.

Nagrinėdami 36-ją lentelę pastebime, kad atomų elektroninių apvalkalų išorinio sluoksnio struktūra, išdėdčius elementus jų atominis numeris Z didėjimo tvarka, kartojasi, ir to kartojimosi periodai taip pat kinta dėsningai: pirmas periodas lygus 2, t. y. $2 \cdot 1^2$; antras ir trečias periodai lygūs po 8, t. y. $2 \cdot 2^2$; ketvirtas ir penktas – po 18, t. y. $2 \cdot 3^2$; šeštas ir septintas – po 32, t. y. $2 \cdot 4^2$.

Pavyzdžiui, ličio, natrio, kalio, rubidžio, cezio ir francio, priklausančių periodinės cheminių elementų lentelės IA stulpeliui ir turinčių atominis numerius Z , lygius 3, 11, 19, 37, 55 ir 87, atomų elektroninių apvalkalų išorinį sluoksnį sudaro vienas s posluoksnio elektronas, kurį, kaip jau buvo minėta apibūdinant s elementų savybes, atomai gana lengva praranda, tapdami vienvalenčiais teigiamais jonais.

Padidinę šių čia išvardintų elementų atominis numerius Z vienu vienetu, pereitume į periodinės cheminių elementų lentelės (žiūr. 35-ją lentelę) IIA stulpelį, kurio elementų (berilio, magnio, kalcio, stroncio, bario ir radžio) atomų elektroninių apvalkalų išorinį sluoksnį sudaro du s elektronai. Šios grupės s elementai dėl savo atomų išorinio elektroninio sluoksnio tapatumo taip pat turi panašias savybes ir jų atomai gali tapti divalenčiais teigiamais jonais. Kadangi prarasti du elektronus yra šiek tiek sunkiau negu vieną, tai IIA stulpelio s elementai yra chemiškai mažiau aktyvūs negu IA stulpelio elementai.

Nagrinėdami p elementų atomų elektroninių apvalkalų išorinio sluoksnio sandarą, analogiškai rasime, jog, pavyzdžiui, visų VIIA stulpelio p elementų (fluoro, chloro, bromo, jodo, ir astato, turinčių atominis numerius 9, 17, 35, 53, 85) atomų elektroninių apvalkalų išorinio sluoksnio struktūra yra vienoda. Ją sudaro du s elektronai ir penki p elektronai, t. y. šių elementų atomų elektroninių apvalkalų išoriniam sluoksniui iki pilno „okteto“ trūksta tik po vieną elektroną. Pasiimdami tą elektroną iš aplinkinių atomų, linkusių atiduoti elektronus (pavyzdžiui, iš IA stulpelio metalų), VIIA stulpelio halogenų atomai tampa neigiamais vienvalenčiais jonais, linkusiais jungtis su teigiamais metalų jonais ir sudaryti įvairių druskų molekules.

Padidinę čia ką tik išvardintų elementų atominis numerius vienu vienetu, pereitume į periodinės cheminių elementų lentelės stulpelį, pažymėtą numeriu „0“, kur rastume elementus, turinčius savo atomų elektroninių apvalkalų išoriniame sluoksnyje pilną „oktetą“ elektronų. Visi tie elementai (neonas, argonas, kriptonas, ksenonas ir radonas) yra inertinės dujos, turinčios analogiškas savybes, panašias į tam pačiam stulpeliui priklausančių inertinių dujų – helio ^2He – savybes. Dėl savo elektroninio apvalkalo simetriškumo inertinių dujų atomai silpnai sąveikauja tarpusavyje, o taip pat ir su kitais atomais. Todėl nenuostabu, kad, būdami silpnai surišti tarpusavyje, inertinių dujų atomai, esant įprastai temperatūrai ir slėgiui, sudaro ne kietus kūnus ar skysčius, o dujas.

Taigi, elementų, priklausančių tam pačiam periodinės lentelės stulpeliui, atomų elektroninių apvalkalų išoriniai sluoksniai beveik visada visiškai sutampa. Todėl tų elementų cheminės savybės, pirmoje eilėje priklausančios nuo išorinių elektronų, yra labai panašios, kas ir atkreipė periodinės cheminių elementų lentelės kūrėjo D.Mendelejevo dėmesį. Tik gana retais atvejais kai kurių pereinamųjų metalų (pavyzdžiui, platinos ^{78}Pt , paladžio ^{46}Pd) atomų elektroninių apvalkalų išoriniai sluoksniai dėl išorinių s elektronų galimų peršokimų į vidinių sluoksnių nepilnai užpildytus posluoksnius gali šiek tiek skirtis.

Panašiomis gali tapti ir skirtingų periodinės lentelės stulpelių elementų atomų elektroninių apvalkalų paskutinių (išorinių) bei priešpaskutinių sluoksnių struktūros, o dėl to irgi gali atsirasti kai kurių cheminių savybių panašumas. Todėl periodinėje sistemoje ir atsiranda cheminių elementų grupių

* Čia žvaigždutėmis * pažymėtas 36 lentelės tęsinys. G. Siborgas numatė (t.y. teoriškai nustatė) ir aprašė naujų **transuraninių elementų** – periodinės cheminių elementų lentelės tęsinio – savybes net iki 168-ojo elemento. Elementai, kurių atominiai numeriai Z tenkina nelygybę $103 \leq Z \leq 112$, turėtų būti d elementai, t. y. pereinamieji metalai, o nuo $Z=113$ iki $Z=118$ – p elementai. Elementu $Z=118$ užsibaigtų septintasis periodinės cheminių elementų lentelės periodas. Taigi, septintajame periode iš viso (įskaitant ir aktinoidus) būtų, kaip ir šeštajame (įskaitant ir lantanoidus), 32 elementai. Aštuntajame periode turėtų būti jau 50 elementų. Tačiau visi tokie elementai dėl jų branduolių nestabilumo gali egzistuoti tik labai trumpai ir natūraliomis sąlygomis gamtoje nesutinkami. Juos galima sukurti tik dirbtinai – fizinėse laboratorijose.

pogrupiai – periodinės lentelės stulpeliai, turintys vienodus romėniškus numerius, tačiau besiskiriantys prie tų numerių pridėtomis raidėmis A ir B – pogrupių žymenimis. **Pogrupiai A** vadinasi **pagrindiniais**, nes juose vyksta išorinio sluoksnio posluoksnių s ir p užpildymas elektronais ir todėl tiems pogrupiams priklauso s ir p elementai. **Pogrupiai B** vadinami **šalutiniais**, nes juose vyksta ne išorinio sluoksnio, o vidinių sluoksnių posluoksnių d ir f užpildymas ir todėl tuos pogrupius sudaro pereinamieji metalai.

Pirmosios ir antrosios grupės pogrupių A elementų atomų elektroninių apvalkalų išoriniai sluoksniai, sudaryti iš vieno ir dviejų s elektronų, pilnai sutampa su atitinkamų grupių pogrupio B elementų atomų elektroninių apvalkalų išoriniais sluoksniais ir skiriasi tik priešpaskutinio sluoksnio paskutinio posluoksnio (artimiausio išoriniam sluoksniui) sandara: A pogrupio elementų atomuose artimiausiu išoriniam sluoksniui yra pilnai užpildytas p posluoksnis, B pogrupyje – pildomas d posluoksnis.

Trečiosios, ketvirtosios, penktosios, šeštosios ir septintosios grupių pogrupių A ir B elementų panašumas šiek tiek sudėtingesnis: A pogrupio elementų atomo elektroninio apvalkalo išorinį sluoksnį sudaro du s elektronai ir toks p elektronų skaičius, kuris lygus grupės numeriui, sumažintam dviem vienetais; B pogrupio elementų atomų elektroninio apvalkalo išorinis sluoksnis turi tuos pačius du s elektronus ir priešpaskutinio sluoksnio d posluoksnyje tiek d elektronų, kiek atitinkamos grupės A pogrupio atomai turi savo išorinio sluoksnio p posluoksnyje p elektronų.

Periodinėje sistemoje išsiskiria **dvi ypatingos grupės – nulinė ir aštuntoji**, kurios neskaidomos į A ir B pogrupius.

Nulinei grupei būdinga tai, kad jos išorinį sluoksnį sudaro „oktetas“: pilnai užpildyto s posluoksnio du elektronai ir pilnai užpildyto p posluoksnio šeši elektronai. Todėl tos grupės elementai, kaip jau buvo minėta, beveik (seniau buvo manoma, kad visai ir visada) nereaguoja tarpusavyje, o taip pat ir su kitais elementais.

Aštuntoji grupė susideda iš trijų stulpelių, kuriuose jau nebegali būti būdingo I – VII grupių pogrupiams A ir B atitikimo tarp p ir d elektronų, nes aštuntos grupės stulpelių elementų atomų priešpaskutinio sluoksnio posluoksnyje d elektronų skaičius jau yra 6 arba didesnis už jį, kai, kaip žinome, posluoksnyje p gali būti tik iki 6 elektronų. Aštuntosios grupės stulpeliuose baigiamas priešpaskutinio sluoksnio d posluoksnio formavimas, ir sekančiuose po aštuntosios grupės stulpeliuose IB ir IIB tas posluoksnis tampa jau pilnai užpildytas – turi visus 10 elektronų. Taigi, VIII grupės (kaip ir nulinės) elementai negali turėti sau analogų kituose lentelės stulpeliuose.

Apibendrinant tai, kas būdinga A ir B pogrupių elementų atomų elektroninių apvalkalų struktūroms, galima suformuluoti tokius teiginius:

1) A pogrupių elementų atomų elektroniniuose apvalkaluose, didėjant tų elementų atominiams numeriams Z, palaipsniui vyksta jų išorinio sluoksnio, turinčio numerį n, sutampanti su periodo numeriu, posluoksnių s ir p formavimasis;

2) B pogrupių elementų atomų elektroniniuose apvalkaluose tik IB ir IIB pogrupiuose vyksta išorinio sluoksnio posluoksnio s formavimasis, o visuose kituose (IIIB – VIIB) pogrupiuose elementų atomų išorinio sluoksnio s posluoksnis beveik visada yra pilnai užpildytas ir, didėjant Z, vyksta vidinių sluoksnių posluoksnio d (ir posluoksnio f lantanoiduose ir aktinoiduose) formavimasis;

3) VIII ir nulinės grupės negali turėti sau analogų – kitų tokių periodinės cheminių elementų lentelės stulpelių, kurių elementų atomų elektroninių apvalkalų paskutiniojo (išorinio) ir priešpaskutiniojo sluoksnių struktūros sutaptų arba būtų labai panašios į VIII ir nulinei grupei priklausančių elementų atomų elektroninio apvalkalo paskutiniojo ir priešpaskutiniojo sluoksnio struktūras. Todėl VIII ir nulinės grupių elementai negali priklausyti A ir B tipo pogrupiams.

Tęsdami 36-osios lentelės lyginamąją analizę ir naudodamiesi kvantinės fizikos mokslu, galėtume ne tik surasti atomų elektroninio apvalkalo susidarymo algoritmą ir paaiškinti visus periodinės cheminių elementų sistemos sandaros dėsningumus, bet ir chemines elementų savybes (pavyzdžiui, jų tą ar kitą valentingumą, bei oksidacijos laipsnį, polinkį jungtis ar nesijungti į druskų, rūgščių, bazių, angliavandenilių, angliavandenių, riebalų, baltymų ir t. t. molekules, sugebėjimą polimerizuotis ir pan.), **o taip pat ir jų fizines savybes** (pavyzdžiui, didesnę ar mažesnę elektrinį bei šiluminį laidumą, tas ar kitas optines savybes bei iš jų susidariusių molekulių sugebėjimą burtis į tokias stambesnes struktūras kaip kristalai, anizotropijos, izotropijos bei alotropijos, diamagnetizmo, paramagnetizmo, feromagnetizmo ir kitus reiškinius, atomų bei molekulių spektrų sandaros dėsningumus ir t. t.).

Visa tai užimtų daug vietos ir nuvestų į specialias chemijos bei fizikos sritis, jau mažai ką beduodančias sistemotyros mokslui. Todėl visų šių klausimų toliau čia nebenagrinėsiu ir trumpai apsisistosiu tik ties spektrais. Tokiam išskirtiniam dėmesiui spektrams yra pora priežasčių.

Pirmoji priežastis – **atomų ir molekulių spektrų susidarymo procesai yra atomų ir molekulių elektroninių apvalkalų struktūros persitvarkymo procesai**, kuriais šios mokymo

priemonės 1.9.2. skyrelyje bus pasinaudota kaip **struktūrų algebros kai kurių operacijų fizinio interpretavimo pavyzdžiais.**

Antroji priežastis – **spektrų analizė** yra kaip tik ta mokslo sritis, kuri:

a) **iššaukė ir stimuliavo kvantinės fizikos atsiradimą;**

b) leidžia vienu iš paprasčiausių būdų **eksperimentiškai patvirtinti kvantinės teorijos teisingumą;**

c) turi labai platų **pritaikymą įvairiose mokslo ir praktikos srityse** (fizikoje, chemijoje, astronomijoje, geologijoje, archeologijoje, biologijoje, medicinoje, technikoje), nustatant medžiagos sudėtį, o taip pat ir kai kurias kitas jos charakteristikas.

Todėl **spektrų analizė gali būti laikoma gana universaliu ir efektyviu medžiagos sandaros (ir ne tik jos) sisteminės analizės instrumentu**, supratimą apie kurį privalo turėti kiekvienas sistemos tyrininkas.

Atomų ir molekulių spektrai skirstomi į emisijos ir absorbcijos spektrus.

Emisijos spektrai atsiranda, kai sužadintų atomų elektronai, atomui artėjant prie pagrindinės stacionarios būsenos, grįžta iš tolimesnių elektroninio apvalkalo sluoksnių bei jų posluoksnių į artimesnius ir išspinduliuoja į aplinką energijos kvantus, lygius elektrono energijos tuose sluoksniuose bei posluoksniuose skirtumams. Emisijos spektrus sudaro tam tikrais atstumais išsidėsčiusios spalvotos (matomos) ir ultravioletinės (nematomos) linijos, atstumai tarp kurių, mažėjant tas linijas atitinkančių bangų ilgiams, dėsningai mažėja.

Absorbcijos spektrai gaunami, kai atomų bei molekulių elektronai, aplinkos paveikti, peršoka iš artimesnių elektroninio apvalkalo sluoksnių bei posluoksnių į tolimesnius, „sugerdami“ tam tikrą kvantą energijos, lygų naujos ir senos energetinių būsenų skirtumui. Absorbcijos spektrus sudaro tamsių (juodų) linijų, išsidėsčiusių ištisinio spalvoto spektro fone tose pačiose vietose, kur buvo emisijos spektro spalvotos (ir ultravioletinės) linijos, serijos.

Emisijos spektro pavyzdžiu gali būti **vandenilio atomo spektro linijų serija**, kurią pirmą kartą (1885 m.) stebėjo ir ištyrė J. Balmeris. Tą spektrą sudaro keturios matomos linijos (raudonoji H_α , kurią atitinka bangos ilgis $\lambda_\alpha \approx 656,28 \cdot 10^{-7}$ cm; mėlynoji H_β , kurios $\lambda_\beta \approx 486,13 \cdot 10^{-7}$ cm; violetinė H_γ , kurios $\lambda_\gamma \approx 434,05 \cdot 10^{-7}$ cm ir antroji violetinė H_δ , kurios $\lambda_\delta \approx 410,17 \cdot 10^{-7}$ cm) bei visa eilė vis tankėjančių ir vis mažesnio intensyvumo ultravioletinių linijų. 1920 m. R. V. Vudass nufotografavo 22 ir išmatavo 20 šios serijos, dabar vadinamos **Balmerio serija**, linijų. Dauguma šios serijos linijų (net 37) buvo rasta Saulės chromosferos ir protuberancų spektruose.

J. Balmeris, nagrinėdamas vandenilio atomų emisijos spektrų linijų išsidėstymą, pastebėjo to išsidėstymo dėsningumą ir surado, kad tą dėsningumą gana tiksliai išreiškia formulė $\sigma \approx R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right)$,

kurioje $\sigma = \frac{1}{\lambda_0}$ yra taip vadinamas **bangos skaičius**, reiškiantis atvirkštinį bangos ilgiui λ_0 vakuume

dydį, R – konstanta, o m – sveikas kintamasis, kuriam priimant reikšmes 3, 4, 5, 6, ..., gaunami jau anksčiau minėtieji dydžiai $\lambda_\alpha, \lambda_\beta, \lambda_\gamma, \lambda_\delta, \dots$, atitinkantys spektro linijas $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, H_\delta, \dots$.

Formulė $\sigma \approx R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ dabar vadinama **Balmerio formule**, o dydžiai $\frac{R}{n^2}$ ir $\frac{R}{m^2}$, kurių

skirtumai reiškia spektro linijas atitinkančius bangos skaičius σ , – **Balmerio termiais**.

Vėliau buvo atrastos ir ištirtos dar ir kitos vandenilio spektro linijų serijos (Laimeno, Pašeno, Braketo, Hamfrio, Pfaundo). Jų linijų bangų skaičius taip pat pavyko išreikšti Balmerio termų skirtumais, tiesa, tik su kitomis n reikšmėmis (pavyzdžiui, **Pašeno serija** skiriasi nuo Balmerio serijos tik tuo, kad joje n lygus ne 2, o 3 ir todėl m reikšmės prasideda ne nuo 3, o nuo 4; analogiškai – **Laimeno serijoje** $n=1$, **Braketo serijoje** $n=4$, **Pfaundo** – $n=5$, **Hamfrio** – $n=6$).

1885 m., kai J. Balmeris pastebėjo vandenilio spektro linijų išsidėstymo dėsningumą ir jį aprašė savo formule, nei pats J. Balmeris, nei kiti to meto fizikai dar negalėjo paaiškinti atrasto dėsningumo priežasčių. Tuo metu juk dar nebuvo atrastas elektronas, o iki pirmųjų kvantinės fizikos idėjų paskelbimo dar buvo likę 15 metų. Tačiau pats minėtojo dėsningumo atradimas ir jo išreiškimas Balmerio formule jau ruošė dirvą, kurioje neužilgo ir gimė kvantinės fizikos mokslas.

Kvantinėje fizikoje **apibendrintoji Balmerio formulė** $\sigma \approx RZ^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$, aprašanti ne tik

Balmerio seriją, bet ir visas kitas vandenilio ^1_1H , deuterio ^2_1H , tričio ^3_1H bei vienaelektroninių jonų ($\text{He}^+, \text{Li}^{2+}, \text{Be}^{3+}$) spektrų linijų serijas, **yra jau ne tik empirinė formulė, bet ir formulė, išplaukianti iš**

kvantinės fizikos dėsnių, būtent, iš jau minėtų Boro ir Planko formulių: $E_n \approx -13,6 \frac{Z^2}{n^2}$ ir $\Delta E_{m,n} = h\nu_{m,n} = \frac{h}{T_{m,n}} = \frac{hc}{cT_{m,n}} = \frac{hc}{\lambda_{m,n}}$.

Boro formulė $E_n \approx -13,6 \frac{Z^2}{n^2}$ išreiškia vienaelektroninio atomo (ar jono) elektrono, esančio to atomo (ar jono) elektroninio apvalkalo n -jame sluoksnyje, energiją elektronvoltais ir rodo tos energijos priklausomybę nuo branduolio protonų skaičiaus Z ir nuo elektroninio apvalkalo (energetinio lygmens) numerio n .

Planko formulė $\Delta E_{m,n} = \frac{hc}{\lambda_{m,n}}$ išreiškia priklausomybę tarp elektrono energijos pokyčio $\Delta E_{m,n}$, atsirandančio elektronui peršokant iš sluoksnio su numeriu m , kuriame elektrono energija buvo lygi E_m , į sluoksnį su numeriu n , charakterizuojamu energija E_n , ir tarp išspinduliuojamos energetinės bangos ilgio $\lambda_{m,n}$. Iš Planko formulės gauname, jog $\sigma_{m,n} = \frac{\Delta E_{m,n}}{hc} = \frac{1}{hc}(E_m - E_n)$, iš kur, įstačius peršokančio elektrono energijos reikšmes, išreikštas Boro formule, išplaukia, jog $\sigma_{m,n} \approx \frac{13,6\text{eV}}{hc} Z^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$, t. y. gauname apibendrintą Balmerio formulę $\sigma \approx RZ^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$.

Kvantinė fizika leidžia teoriškai apskaičiuoti ir konstantos R reikšmę. Ši konstanta dabar vadinama ją pirmą kartą apskaičiavusio **J. Riudbergo (Rydbergo)** vardu ir yra lygi $R = \frac{2\pi^2 e^4 m M}{ch^3 (M + m)}$

$= \frac{2\pi^2 e^4 m}{ch^3 \left(1 - \frac{m}{M} \right)}$, kur c – šviesos greitis vakuume ($c \approx 2,997924562 \cdot 10^{10} \frac{\text{cm}}{\text{s}}$), h – Planko konstanta

($h \approx 6,626176 \cdot 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s} = 6,626176 \cdot 10^{-27} \text{erg}\cdot\text{s}$), e – elektrono elektrinis krūvis ($e \approx 1,6021917 \cdot 10^{-19}$ kulono, arba, išreikšus CGSE vienetais, $e \approx 4,803242 \cdot 10^{-10}$ CGSE vienetų), m – elektrono rimties masė ($m \approx 0,9109534 \cdot 10^{-27} \text{g}$), M – atomo branduolio rimties masė. Pastaroji priklauso ne tik nuo branduolyje esančių nukleonų (t. y. neutronų ir protonų) skaičiaus bei jų rimties masių (neutrono rimties masė yra apie 1839 kartus didesnė už elektrono rimties masę ir yra lygi $\approx 1,6749543 \cdot 10^{-24} \text{g}$, o protono masė – truputį mažesnė už neutrono masę ir yra lygi $\approx 1,6726486 \cdot 10^{-24} \text{g}$), bet ir nuo taip vadinamo masės defekto ΔM . **Masės defektas** atsiranda protonams ir neutronams jungiantis į branduolį, kai jungimosi metu sumažėja bendra į branduolį besijungiančių nukleonų energija, o todėl, kaip tai išplaukia iš **Eišteino formulės** $\Delta E = \Delta M \cdot c^2$, sumažėja ir bendra visų susijungusių į branduolį mikrodalelių masė. Pavyzdžiui, neutronams ir protonui jungiantis į deuterio ${}^2_1\text{H}$ ar tričio ${}^3_1\text{H}$ branduolius, išsiskiria apytikriai po 3,5 MeV energijos kiekvienam nukleonui ir bendroji jų masė sumažėja apie 0,4%.

Vandenilio ${}^1_1\text{H}$, kurio atominis numeris $Z=1$, branduolį sudaro tik vienas protonas. Todėl masės defektas vandenilio ${}^1_1\text{H}$ branduoliui yra lygus 0 ir vandenilio branduolio rimties masė yra lygi protono rimties masei, t. y. $\approx 1,6726486 \cdot 10^{-24} \text{g}$.

Įstatę dydžių π , e , m , c , h ir M reikšmes, išreikštas CGSE sistemoje, į formulę $R = \frac{2\pi^2 e^4 m}{ch^3 \left(1 - \frac{m}{M} \right)}$, gauname jog vandenilio ${}^1_1\text{H}$ atomui Riudbergo konstanta $R_H \approx 109677,575 \text{cm}^{-1} = 109677,575 (0,01 \text{m})^{-1} = 1,09677575 \cdot 10^7 \text{m}^{-1}$, o helio jonui He^+ – $R_{\text{He}^+} \approx 1,097222265 \cdot 10^7 \text{m}^{-1}$.

Branduolio masei M didėjant, Riudbergo konstanta taip pat didėja, nes mažėja dydis $\left(1 + \frac{m}{M} \right)$, tačiau tas didėjimas gana nežymus: $\lim_{M \rightarrow \infty} R = R_\infty \approx 1,097373143 \cdot 10^7 \text{m}^{-1}$.

Naudodamiesi teorine Balmerio formule, apskaičiuosime Balmerio serijos matomas spalvotas linijas H_α , H_β , H_γ ir H_δ atitinkančius „teorinius“ bangų ilgius λ_α , λ_β , λ_γ , λ_δ .

$$\text{Kai } n=2, m=3, \text{ tai gauname } \lambda_{\alpha} = \frac{1}{R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)} = \frac{36}{5R_H} \approx 656,47 \cdot 10^{-7} \text{ cm.}$$

$$\text{Kai } n=2, m=4, \text{ tai gauname } \lambda_{\beta} = \frac{1}{R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right)} = \frac{16}{3R_H} \approx 486,27 \cdot 10^{-7} \text{ cm.}$$

$$\text{Kai } n=2, m=5, \text{ tai gauname } \lambda_{\gamma} = \frac{1}{R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2} \right)} = \frac{100}{21R_H} \approx 434,17 \cdot 10^{-7} \text{ cm.}$$

$$\text{Kai } n=2, m=6, \text{ tai gauname } \lambda_{\delta} = \frac{1}{R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{6^2} \right)} = \frac{9}{2R_H} \approx 410,29 \cdot 10^{-7} \text{ cm.}$$

Lygindami teoriškai apskaičiuotus bangų ilgius su tais, kurie buvo išmatuoti eksperimentų metu (žiūr. Balmerio serijos aprašymą), matome, kad pirmieji trys skaitmenys visiškai sutampa, t. y. kad **skirtumas tarp teorinių ir eksperimentinių rezultatų neviršija 0,1%**. Tas skirtumas dar labiau sumažėja, kai teoriniuose apskaičiavimuose atsižvelgiama į elektrono sukinio ir jo orbitinio magnetinių momentų sąveiką ir energetinio sluoksnio skaidą į posluoksnius.

Atsižvelgiant į tai, kad, keičiantis sluoksnio posluoksnio ℓ numeriui, šiek tiek keičiasi elektrono energija, didėdama didėjant ℓ , galima paaiškinti ir **atomų spektrų „smulkiąją struktūrą“**, pasireiškiančią tuo, kad **pagrindinės spektro linijos, atitinkančios sluoksnius, skaidosi į smulkesnes linijas, atitinkančias posluoksnius**.

Nagrinėjant daugiaelektroninius atomus ir jų spektrus, tenka naudotis jau sudėtingesniais skaičiavimais, nes tuomet tenka atsižvelgti ne tik į elektronų sąveikavimą su branduoliu, bet ir į elektronų sąveikavimą tarpusavyje. Tokiais atvejais Šredingerio lygtį ir tikrinių verčių lygčių sistemas tiksliai išspręsti jau nebepavyksta ir tenka tenkintis artutiniais sprendiniais. Tačiau ir artutiniai sprendiniai neprieštaruoja praktikai ir dažnai būna gana artimi eksperimentų rezultatams.

Pavyzdžiui, paskaičiavimai rodo, kad, pradedant nuo $n=4$, elektronai su mažesnėmis ℓ ir didesnėmis n reikšmėmis gali stipriau sąveikauti su branduoliu negu elektronai su didesniu ℓ , bet mažesniu n . Todėl ir gauname, jog, pavyzdžiui, 4s elektronai stipriau sąveikauja su branduoliu negu 3d elektronai, ką ir atspindi 34-osios lentelės struktūra: po posluoksnio 3p susiformavimo pradeda formotis ne 3-jo sluoksnio posluoksnis 3d, o ketvirtąjo sluoksnio posluoksnis 4s ir tik po to – posluoksnis 3d. Panašiai atsitinka ir su posluoksniais 4d ir 5s ir t. t.

Artutiniai paskaičiavimai rodo, kad nemažai daliai paprastesnių atomų spektrų linijas atitinkančių bangų ilgių artutiniam apskaičiavimui dar galima naudotis Balmerio formule, šiek tiek ją papildžius: vietoj termų $\frac{R}{n^2}$ ir $\frac{R}{m^2}$ vartojant termus $\frac{R}{(n+\alpha)^2}$ ir $\frac{R}{(m+\alpha)^2}$, kur $\alpha < 1$ reikšmės

priklauso nuo elektronų tarpusavio sąveikavimo.

Apskaičiuojant atomų spektrų linijas atitinkančius bangų ilgius tiksliais ir artutiniais metodais, visų pirma remiamasi tuo, kad **atomų energijos, impulso, judesio kiekio momento, būsenos lyginumo tvermės dėsniai yra tikslūs**, ir todėl atitinkamos **atrankos taisyklės** griežtai reglamentuoja atomų elektromagnetinį spinduliavimą. Pažymėtina, kad iš **kvantinės teorijos išplaukiančių matematinių modelių atitikimą tikrovei patvirtina visos eilės eksperimentų rezultatai**.

Žymiai sudėtingesnių skaičiavimų prireikia, kai elektronų (ar kitų mikrodalelių) greičiai priartėja prie šviesos greičio c . Tuomet tenka atsižvelgti į **reliatyvistinius efektus** (masės padidėjimą, laiko trukmės sutrumpėjimą, kūno matmenų sumažėjimą judėjimo kryptimi, gravitacijos lauke sklindančios šviesos dažnio kitimą ir t. t.).

Reliatyvistinėje kvantinėje fizikoje, norint apskaičiuoti elektrono (ar kitos mikrodalės, turinčios pusinį sukinį) būseną ir jos charakteristikas, kaip jau buvo minėta, tenka spręsti jau ne Šredingerio, o **Dirako lygtį**, kuri skiriasi nuo Šredingerio lygties tuo, kad yra **reliatyvistiškai invariantinė banginė lygtis**.

Dirako lygtį sudaro keturių lygčių sistema, kuri matricų pavidalu operatorinėje formoje užrašoma taip:
$$\left\{ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \alpha_x \frac{\partial}{\partial x} - \alpha_y \frac{\partial}{\partial y} - \alpha_z \frac{\partial}{\partial z} - i\beta \frac{2\pi mc}{h} \right\} \psi = 0.$$

Čia t yra laikas, x, y, z – dalelės koordinatės, m – jos masė, c – šviesos greitis, h – Planko konstanta, $i = \sqrt{-1}$, $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, \beta$ – ketvirtosios eilės kvadratinės matricos, ψ – dalelės banginė funkcija.

Spręsdami Dirako lygtį, pavyzdžiui, elektronui, gauname, jog jis turi savąjį magnetinį momentą, lygų $\frac{eh}{4\pi mc}$, ir mechaninį momentą, lygų $\frac{h}{4\pi}$, kur e – elektrono elektrinis krūvis, m – jo masė, c – šviesos greitis, h – Planko konstanta. Dirako lygtis leidžia paaiškinti **ne tik normalųjį, bet ir anomalųjį Zemano efektą** – spektro linijų susiskaidymą silpname išoriniame magnetiniame lauke į daug sudedamųjų, simetriškai pasislinkusių į abi puses nuo pagrindinių (t. y., skaidomų) spektro linijų.

Reliatyvistinės kvantinės fizikos taikymas spektrų nagrinėjimui leidžia nustatyti ne tik medžiagos sudėtį bei temperatūrą (pavyzdžiui, Saulės, žvaigždžių), bet ir mikrodalelių bei makrokūnų judėjimo greitį ir to judėjimo kryptį. Tolstančio nuo mūsų kūno bei dalelės spinduliuojamų bangų ilgis (dėl **Doplerio efekto**) mūsų atžvilgiu pailgėja ir to spinduliavimo spektro linijos pasislenka į ilgujų bangų pusę. Panašus reiškinys pastebimas ir stipriame gravitaciniame lauke, kuriame sulėtėja laiko tėkmė. Kosmologijoje gerai žinomas **metagalaktinis raudonasis poslinkis**, kurį dar 1912–1914 m. atrado V. Slajferis, tyrinėdamas labai nuo mūsų nutolusių žvaigždžių ir galaktikų spektrus: tų spektrų **linijos pasirodė esančios pastumtos ilgujų bangų link**. 1929 m. E. Hablis nustatė, kad tas poslinkis yra tuo didesnis, kuo galaktikos, iš kurių ateina tas spinduliavimas, yra labiau nutolusios nuo mūsų Galaktikos, t. y., kad galaktikos, esančios toliau nuo mūsų, tolsta didesniu greičiu, palyginus su tomis, kurios yra arčiau. Iš **Metagalaktikos plėtimosi** išplaukia hipotezė apie **Didįjį sproginą**, galėjusį įvykti prieš $13,7 \pm 0,1$ milijardų metų, kurio rezultata – medžiagos judėjimą iš sproginio centro – stebime iki šiol. Ta medžiaga, kuri sproginio metu išlėkė su didesniu greičiu, per tuos milijardus metų suspėjo nukeliauti toliau ir tebetolsta su didesniu greičiu negu ta, kuri, išlėkdama iš centro, turėjo mažesnį greitį.

Reliatyvistinė kvantinė teorija, bandant ją taikyti ne tik mikrodalelių judėjimo bei jų elektromagnetinio sąveikavimo nagrinėjimui, bet ir kitoms jų sąveikavimo rūšims (silpnajam, stipriajam, gravitaciniam) bei mikrodalelių vartimo kitomis mikrodalelėmis bei jų anihiliacijos procesams, išsivystė į **kvantinę lauko teoriją**, kurioje dabar priimta išskirti tokias pagrindines dalis:

- 1) **kvantinę elektrodinamiką**, nagrinėjančią mikrodalelių elektromagnetinio sąveikavimo procesus (nereliatyvistinė kvantinė mechanika, kurios pagrindus čia trumpai apžvelgėme, yra kvantinės elektrodinamikos dalinis atvejis, gaunamas, kai mikrodalelių greičiai yra maži, palyginus juos su šviesos greičiu, ir reliatyvistiniai efektai tampa nereikšmingi),

- 2) **silpnosios sąveikos teoriją**, tiriančią elementariųjų dalelių irimo ir branduolio β skilimo procesus;

- 3) **stipriosios sąveikos teoriją**, tiriančią **barionų** (sunkiųjų mikrodalelių) sąveikavimo procesus (tame tarpe – ir **atomų branduoliuose veikiančias jėgas**),

- 4) **gravitacijos teoriją**, nagrinėjančią gravitacines jėgas, atsirandančias dėl masių traukos (tame tarpe **gravitacinės ir inercinės masių proporcingumo** reiškinį).

Kvantinė lauko teorija aprašo procesus, vykstančius ne tik atomų elektroniniuose apvalkaluose, bet ir atomų branduoliuose, tame tarpe ir naudojamus atominėje ir termobranduolinėje energetikoje **branduolių skilimo ir sintezės procesus**, kurių metu vienų cheminių elementų izotopų branduoliai virsta kitų cheminių elementų izotopų branduoliais ir dėl jau anksčiau minėto masės defekto išsiskiria didžiuliai energijos kiekiai.

Sistemotyros atžvilgiu labai svarbu pažymėti, jog **kvantinė lauko teorija nepaneigia klasikinės (Niutono) mechanikos, o tik pagilina ir papildo ją, paversdama klasikinę mechaniką reliatyvistinės kvantinės mechanikos daliniu atveju, kuris gali būti taikomas makrokūnams, kai jų masės ir matmenys yra labai dideli, lyginant su mikrodalelėmis, o greičiai – labai maži, lyginant su šviesos greičiu.**

Tokių senų teorijų ir jų formulų „išliejimą“ į naujas teorijas, tampant daliniu jų atveju, galima laikyti bendrasisteminiu geru (t. y. kokybišku, atitinkančiu tikrovę) teorijų požymiu. Ši požymį tikslinga vartoti kaip **bendrasisteminių teorijos teisingumo antrąjį kriterijų**, papildantį **pirmąjį teorijos teisingumo kriterijų – teorijos atitikimo praktikai kriterijų**.

Šiais kriterijais bus naudojamos ir tolesniuose šios mokymo priemonės skyreliuose (pavyzdžiui, 1.13. skyriuje, nagrinėjant idealaus skysčio išteklėjimo greičio „patikslintą formulę“; 1.16. skyriuje, įrodinėjant L. Zadeh formulę tikimybinės interpretacijos pranašumą, lyginant su paties L. Zadeh pasiūlyta „kietąja“ jų interpretacija).

Reikėtų taip pat pabrėžti, jog ir pats **pereinamumo tarp senųjų ir naujųjų teorijų faktas yra labai svarbus sistemotyros mokslui, teisingos sisteminės pasaulėžiūros formavimuisi, nes jis liudija, jog pasaulio pažinimas, nežiūrint į gausybę įvairių revoliucijų ir naujų atradimų moksle, vis dėlto yra progresuojantis evoliucinis procesas – begalinis artėjimas prie absoliučios tiesos** (nors, žinoma, ne be laikinų nuokrypių nuo „tiesiausio kelio“, kaip, pavyzdžiui, „kaloriko bei flogistono teorijos“, „šiluminės mirties teorija“ ir pan.). Todėl atotykio tarp teisingų senų ir teisingų naujų teorijų principą, teigiantį, kad **teisingos senos teorijos turėtų pereiti į naujas (bendresnes) teisingas teorijas, kaip pastarųjų dalinis atvejis, galima laikyti vienu iš bendrasisteminių principų.**

Baigdamas šį skyrelį, norėčiau sugrąžinti skaitytojo dėmesį į 1.9 skyriaus pradžią, kur buvo kalbama apie sistemų struktūrų algebros konstravimo metodus, ir detaliau paaiškinti, kodėl ryžausi į sistemo tyros kurso mokymo priemonę įtraukti ekskursą į atominės fizikos pagrindus ir kodėl norėčiau, kad šios mokymo priemonės skaitytojas pasistengtų į juos įsigilinti. Tam yra kelios priežastys.

Pirma. Aš manau, kad, nagrinėjant tipines sistemų struktūras, **sistemo tyrininkui, privalančiam sugebėti visur pastebėti sistemas, būtų nedovanotina nepastebėti tipinių struktūrų, kurios objektyviai egzistuoja visus mus ir visą mūsų aplinką sudarančiuose atomuose, neatsižvelgti į jas, kuriant tipinių struktūrų matematinius modelius bei jų sistemą**, ir neišsivelti, kaip nuo tų struktūrų priklauso cheminės ir fizinės elementų savybės, kaip jos logiškai išplaukia iš atomų sandaros ypatumų ir gali būti ne tik paaiškintos, bet ir deduktyviai išvestos.

Sistemo tyrai labai aktualu ir tai, kad atomų elektroniniuose apvalkaluose vykstantys procesai yra **algebrinių operacijų, vykstančių bei galinčių vykti sistemų struktūrose fizikinės interpretacijos**.

Antra. Nors moksliniams darbuotojams, dirbantiems sistemo tyros mokslo plėtotės bei jo taikymo srityse, ir, tuo labiau, dženeralistams praktikams nebūtina mokėti spręsti Šredingerio bei Dirako lygtis ir naudotis Heizenbergo matricomis, tačiau nagrinėjantiems (ir tuo labiau – kuriantiems) sistemo tyros mokslą yra būtinas pasaulį sudarančios materijos sandaros mokslinis supratimas, nes **sisteminis mąstymas (sisteminė filosofija ir sisteminė metodologija) negali atsirasti tuščioje vietoje tik kaip lakios fantazijos vaisius, o formuojasi tik įsigilinant į įvairių mokslų pasiekimus ir apibendrinant juos**.

Šių eilučių autoriaus darbo su matematikos ir informatikos specialybių studentais praktika parodė, jog dauguma studentų nepakankamai žino atominės fizikos pagrindus ir tai trukdo jiems, nagrinėjant tokias sudėtingų sistemų savybes kaip jų diskretumas ir tolydumas, jų determinuotumas ir stochastiškumas, suvokti tų savybių prigimtį, išsivelti sąryšį tarp diskrečių ir tolygių, determinuotų ir stochastinių procesų, išsiaiškinti sąlygas, apsprendžiančias, kada ir kaip čia paminėtos savybės atsiranda ir pasireiškia.

Šiame skyrelyje pateikta populiari ir glausta atominės fizikos pagrindų apžvalga padės šiek tiek praplėsti studentų akiratį ir priartins juos prie **sisteminio Visatos sandaros suvokimo**, neatimdama iš jų tiek daug brangaus laiko, kiek pareikalautų specialios literatūros papildomas studijavimas. Šių eilučių autorius savo laiku turėjo sugaišti nemažai laiko, kol pasiekė tą aiškumą, kuris leidžia jam dabar viską išdėstyti žymiai glausčiau ir sistematiškiau. Norėtusi, kad tai padėtų sutaupyti laiką kitiems.

Trečia. Šiame skyrelyje išnagrinėtoji cheminių elementų periodinė sistema ir 34-oji, 35-oji bei 36-oji lentelės labai pravers 1.10-jame šios mokymo priemonės skyriuje, sudarant **antrojo tipo sistemų ir jų modelių pavyzdžius**, aiškinant atributinės ir reliacinės struktūrų sąvokas.

Ketvirta. Sistemo tyros mokslui labai aktualūs empiriniuose tyrimuose pastebėtų dėsningumų vartimo darniomis teorijomis, paaiškinančiomis tų dėsningumų priežastis, pavyzdžiai (tokie, kaip šiame skyrelyje aprašyti D. Mendelejevo ir J. Balmerio atrastų dėsningumų priežasčių nustatymo pavyzdžiai). Tokiais pavyzdžiais bus naudojamos ir vėlesniuose šios mokymo priemonės skyreliuose (pavyzdžiui, 1.14.12. skyrelyje, nagrinėjant ekonometrinių modelių galimybes pavirsti kauzaliniais bei sąryšius tarp ekonometrinių ir kauzalininių modelių).

Penka. Nuosekliai mąstantis sistemo tyrininkas, analizuodamas šiame skyrelyje paminėtus dėsnius ir dėsningumus, kuriuos nustatė kvantinė fizika, negali neiškelti sau klausimo, **kodėl tokie dėsningumai egzistuoja, iš kur ir kaip jie atsiranda**, ir, bandydamas įsivaizduoti tokių dėsningumų susidarymo „mechanizmą“, negali neatkreipti dėmesio į analogijas su 1.9.2.4 skyrelyje aprašytu stovinčių bangų susidarymo, sąveikaujant priešingomis kryptimis sklindančioms ir pernešančioms energiją bėgančioms bangoms, „mechanizmu“. Jis negali neiškelti sau dar vieno klausimo: **„Kodėl egzistuoja panašios analogijos? Ar analogiški reiškiniai neturi kokio nors bendro pagrindo, ar jie nėra kokio nors bendresnio reiškinių ir dėsnių, charakterizuojančio energijos ir energijos – medžiagos virsmus, daliniai atvejai? Ar kartais taip vadinamasis fizinis vakumas, kuriame egzistuoja energetiniai laukai, nėra tam tikrą stangrumą turinti fizinė terpė, kurioje gali egzistuoti bėgančios ir stovinčios bangos bei virpantys energetinio lauko „sutankėjimai“ bei „sūkuriai“, pasireiškiantys įvairių atsirandančių, judančių, sąveikaujančių ir išnykstančių elementarių dalelių pavidalų?“**

Juk ir **branų teorijos** (vienmatės branos laikomos stygomis, dvimatės – paviršiais ir t. t.) autoriai, kurdami matematinės fizikos ir „visko“ teorijas, kurios leistų matematiškai modeliuoti stebimus fizikinius reiškinius (nors dėl savo pozityvistinių pažiūrų jie laiko bandymus objektyviai pažinti realų pasaulį beprasmiu dalyku), savo matematiniuose modeliuose prieina prie panašių išvadų ir laiko elementarias daleles virpančiomis stygomis. Ar pats faktas, kad, net **žiūrėdami į stebimus reiškinius iš skirtingų pozicijų, neišvengiamai prieiname prie panašių išvadų**, nieko nesako sistemų analitikui?

Sudėtingų fizikinių teorijų **systeminis nagrinėjimas** net ir tada, kada jis nesugeba duoti atsakymų į iškylančius klausimus, naudingas jau bent tuo, kad jis padeda pastebėti ir iškelti klausimus, kurių atsakymų verta ieškoti.

Šešta. Šiame skyrelyje norėjosi atkreipti skaitytojo dėmesį ne tik į **dėsningumus atomų elektroninių apvalkalų struktūrose, išoriškai pasireiškusius dėsningumais cheminių elementų savybėse**, kurių pagrindu ir buvo sudaryta antrojo tipo sistema – **periodinė cheminių elementų sistema**, bet ir į eilę **bendrųjų fizikos dėsnių bei principų**, kurie yra tokie bendri, jog juos galima laikyti **bendrasisteminiiais**. Tokių dėsnių bei principų pavyzdžiai: ankstesniuose šios mokymo priemonės skyriuose minėtieji **termodinamikos principai bei tvermės dėsniai**, šiame skyrelyje paminėtieji **Le Šatelje ir Brauno atoveikio principas, sistemos energijos minimumo jos pusiausvyros būsenoje principas, simetrijos ir periodiškumo principas, pasaulio pažinimo ir atotytkio tarp teisingų naujų ir senų teorijų principas**.

Septinta. Čia aprašytos atomų branduolių elektronų apvalkalų struktūros ir elektronų peršokimų iš vienu orbitalių į kitas operacijos, lydimos emisijos ir absorbcijos spektrų susidarymu, – tai **realių tipinių struktūrų ir realių tipinių operacijų jose pavyzdžiai** – jau minėtosios kaupiamos **empirinės bazės, reikalingos struktūrų algebros kūrimui, svarbi dalis**.

Bus ir kitų šio skyrelio mokymo medžiagos panaudojimo atvejų. Apie kai kuriuos jau buvo kalbėta pačiame šio skyrelio tekste, todėl jų nebevardinsiu, nes manau, jog ir to, kas jau pasakyta, pakanka šio trumpo ekskurso į atominę fiziką sistemotyros kurse pateisinimui, o vienu iš jų pasinaudosiu jau sekančiame, t. y. 1.9.1.3, skyrelyje.

Atomų elektroninių apvalkalų struktūrų žinojimas leidžia pakilti materijos sandaros sudėtingumo hierarchinėje sistemoje viena struktūrų sudėtingumo pakopa aukščiau ir pereiti prie struktūrų, kurios susidaro atomams jungiantis į molekules bei kitus cheminius junginius analizės. Dabar kaip tik ir pereisiu prie **tipinių struktūrų chemijoje** nagrinėjimo. Cheminių junginių tipinių struktūrų nagrinėjimas bus naudingas **gilinant sistemos struktūros sąvokos suvokimą ir išsiaiškinant sistemų struktūrų susidarymo dėsningumus**, o tipinių cheminių reakcijų nagrinėjimas – **operacijų su struktūromis dėsningumus**. Pagrindiniai tokio nagrinėjimo tikslai bus suformuluoti 1.9.1.3. skyrelio pabaigoje, kai skaitytojas jau bus susidaręs apytikrį cheminių junginių įvairovės koncepcinį modelį. Ten bus pateiktos ir iš to nagrinėjimo išplaukiančios **išvados, svarbios konstruojamai struktūrų algebrai ir visam sistemotyros mokslui**.

1.9.1.3. Tipinės struktūros chemijoje

Atomams sąveikaujant, tarp jų gali atsirasti ryšiai, priskiriami **cheminių ryšių** tipui, ir tokiu būdu iš atomų gali susidaryti **cheminis junginys**: molekulė, makromolekulė, įvairaus tipo kompleksai, elementariosios kristalų gardelės ir kiti atomų agregatai.

Atomams jungiantis į cheminį junginį, įvyksta jų elektroninių apvalkalų sąveikavimas ir persidengimas, dėl ko atomų elektronai molekulėje gali persiskirstyti. Norint apskaičiuoti elektronų pasiskirstymą ir to pasiskirstymo tankį molekulės elektroniniame apvalkale, nuo kurių priklauso molekulės fizinės ir cheminės savybės, reikėtų sudaryti molekulės banginę funkciją ir išspręsti tikrinių verčių lygčių sistemą, aprašančią molekulės energiją ir kitas fizines jos charakteristikas. Šis uždavinys yra dar sudėtingesnis negu 1.9.1.2. skyrelyje minėtas analogiškas uždavinys daugielektroniniams atomams. Todėl jis gali būti sprendžiamas tik naudojantis artutiniais metodais. Dažniausiai naudojamasi dviem vienas kitą papildančiais artutiniais metodais, išplaukiančiais iš dviejų vienas kitą papildančių teorijų: 1) molekulinio orbitalių teorijos (MOT) ir 2) valentinių ryšių teorijos (VRT).

Molekulinio orbitalių teorija teigia, jog, atomams jungiantis į molekulę, atskirų atomų elektroniniuose apvalkaluose esančių **išorinių elektronų orbitalės gali „sumuotis“ į molekulinės orbitales, kurios ir suriša atomus į molekulę**. Atomų orbitalės sumuojasi į molekulinės orbitales su atitinkamais svoriniais koeficientais, kurie tampa vienodi, kai į molekulę jungiasi to paties cheminio elemento atomai. Tuomet gauname **homobranduolinę molekulę**, pavyzdžiui, N_2 . Kai į molekulę jungiasi skirtingi atomai, tai gauname **heterobranduolinę molekulę**, pavyzdžiui, CO . Homobranduolinių molekulių orbitalės yra simetriškos, o heterobranduolinių – nesimetriškos. Lengviausiai gali būti apskaičiuotos dviatomų homobranduolinių molekulių orbitalės, turinčios du simetriškus centrus – vienodų atomų branduolių centrus. Žymiai sudėtingiau apskaičiuoti triatomų, keturatomų, penkiaatomų ir t. t. heterobranduolinių molekulių orbitales. Apskaičiavimai reikšmingai palengvėja, kai atomai molekulėje išsidėsto simetriškai, kaip, pavyzdžiui, triatomėje BeH_2 molekulėje (kurioje visi trys atomai išsidėsto vienoje tiesėje su Be atomu centre) ar penkiaatomėje CH_4 molekulėje (kurioje vandenilio atomai išsidėsto taisyklingo tetraedro viršūnėse, o anglies atomas – tetraedro centre). Atomų, besijungiančių į molekulę, elektronų orbitalės, sąveikaudamos viena su kita, gali sudaryti ne tik **jungiančiąsias, bet ir skiriančiąsias molekulinės orbitales**, kurioms būdingas elektronų išsklaidymas.

Valentinių ryšių teorija remiasi atomų valentingumo sąvoka, **priskirdama atomams savybę sudaryti tam tikrą skaičių cheminių ryšių su kitais atomais, kurią ir vadina atomo valentingumu**. Valentinių ryšių teorija teigia, kad **kiekvienas cheminis ryšys yra lokalizuotas tarp dviejų atomų ir yra dvicentris ir dvielektroninis**. Molekulių sandaros formulėse tie ryšiai vaizduojami brūkšneliais, jungiančiais į molekulės sudėtį įeinančias atomų poras. Cheminiai ryšiai tarp atomų, kai tų atomų elektroninių apvalkalų išoriniai sluoksniai turi pakankamai daug elektronų, gali būti ne tik viengubieji, bet ir dvigubieji bei trigubieji. Jie vaizduojami dvigubais bei trigubais brūkšneliais. Bet ir tokių papildinių, vaizduojant molekulių struktūras neretai nebepakanka ir tenka pereiti nuo plokščių struktūrinių formulių prie erdvinių, naudojamų **stereochemijoje**.

Svarbi **cheminio ryšio charakteristika yra jo energija**, matuojama energijos, reikalingos tam ryšiui nutraukti, kiekiu. Ryšiui susidarant, tas energijos kiekis išsiskiria. Priimta laikyti, kad tuo atveju, kai tarpatominio ryšio energija yra mažesnė negu 8–12 kJ vienam moliui, atomai sudaro ne cheminius junginius, o **mišinius**, kurie skiriasi nuo junginių tuo, kad **neturi apibrėžtos struktūros**: mišinių struktūra yra atsitiktinė. Ir tik tuo atveju, kai tarpatominių ryšių energija yra $\geq 8-12$ kJ/mol., gauname „konstrukcijas“, turinčias jau **ne atsitiktines, o apibrėžtas (iš anksto nuspėjamas) struktūras**. Tokias konstrukcijas iš atomų ir vadina **cheminiais junginiais**.

Cheminius junginius pagal jų „sugebėjimo“ išlaikyti pastovią tiems junginiams būdingą sudėtį bei struktūrą lygi priimta skirstyti į daltonidus ir bertolidus.

Daltonidais (stechiometriniais junginiais) vadinami molekulinio tipo cheminiai junginiai, kurių atomai yra tarpusavyje susijungę pakankamai stipriais ir pilnaverčiais cheminiais ryšiais ir turi jiems būdingą pastovią cheminę sudėtį ir molekulės struktūrą. Daltonidų pavyzdžiai: deguonies molekulės O_2 , vandens molekulės H_2O dujinėje fazėje, butano molekulės C_4H_{10} natūraliose sąlygose ir t. t.

Šiame skyrelyje bus nagrinėjamos **tipinės (dažniausiai pasitaikančios) daltonidų struktūros bei tipinės tų struktūrų dalys** (pavyzdžiui, aldehido, ketono, karboksilo ir pan. grupės, kai kurie angliavandenilių radikalai ir pan.).

Bertolidais vadinami nestechiometriniai cheminiai junginiai. Jų sudėtis ir struktūra, būdamos neatsitiktinėmis, nėra pastovios, o tam tikrose ribose gali keistis priklausomai nuo išorinių sąlygų. Bertolidų pavyzdžiai: vanduo skystoje fazėje, įvairūs polimerai, kai kurių metalų junginiai su deguonimi ar siera ir kiti.

Bertolidų sudėties ir struktūros kitimo priežastis – palyginti silpni ryšiai tarp atomų. Todėl bertolidai visada egzistuoja kartu su savo disociacijos produktais, kurių kiekio santykis su nedisocijuotų bertolidinių junginių kiekiu bertolidinės cheminės medžiagos struktūroje nebūtinai būna pastovus.

Klasikinės chemijos požiūriu cheminiais junginiais buvo laikomi tik daltonidų tipo junginiai. Bertolidai buvo laikomi mišiniais. Dabar jie priskiriami prie nepastovių junginių.

Šiame skyrelyje pagrindinis dėmesys skiriamas tipinėms molekulių struktūroms, todėl bertolidiniai junginiai nebus sistemiškai nagrinėjami. Apie juos bus tik epizodiškai užsimenama.

Kadangi net vien tik daltonidinių junginių struktūrų įvairovė yra milžiniškai didelė, tai norint ją aprėpti ir išskirti pagrindines tipines struktūras bei jų dalis, tenka cheminius junginius klasifikuoti ir sistematizuoti, t. y. pabandyti įžvelgti jų aibėje kokią nors sistemą. O tam reikia rasti bei tinkamai pasirinkti cheminių junginių bei jų struktūrų klasifikavimo požymius.

Vienu iš natūralių klasifikavimo požymių galėtų būti cheminių ryšių, jungiančių elementų atomus į cheminius junginius, tipai.

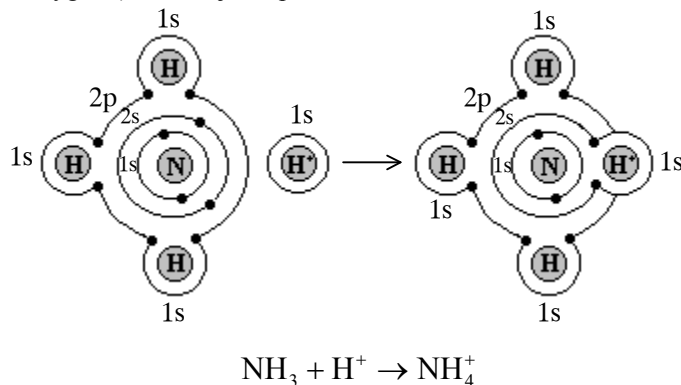
1.9.1.2. skyrelyje jau buvo aprašyti du cheminių ryšių tipai: **joniniai** ir **kovalentiniai ryšiai**. Ten pat buvo pateikti ir pavyzdžiai, kaip, sujungus s elementą ir p elementą joniniu ryšiu, gaunama neutrali kokios nors druskos molekulė, o 59 pav. buvo schematiškai pavaizduotos dioksano, etileno ir diborano molekulių erdvinių struktūrų projekcijos, parodančios, kaip tose molekulėse atomai sujungti kovalentiniais ryšiais.

Dabar šį cheminių ryšių sąrašą papildysime **dar vienos kovalentinio ryšio rūšies – koordinacinio ryšio**, o taip pat **metališkojo ir vandenilinio ryšių** aprašymais.

Koordinacinis (donorinis akceptorinis) ryšys yra būdingas kompleksiniams junginiams. Jis atsiranda tarp atomo, vadinamo **donoru**, turinčio kitais kovalentiniais ryšiais dar nepadalytą išorinio sluoksnio elektronų porą, ir atomo, vadinamo **akceptoriumi**, turinčio išoriniame elektroninio apvalkalo sluoksnyje laisvą orbitalę, galinčią priimti tuos elektronus.

Pavyzdžiui, amoniako NH_3 molekulėje azoto atomas N gali tapti donoru, nes jo elektroninio apvalkalo išorinio sluoksnio $2s^2 2p^3$ struktūroje tik trys posluoksnio 2p elektronai surišti su vandenilio atomų 1s elektronais paprastaisiais kovalentiniais ryšiais, sudarančiais bendras azoto ir vandenilio atomams amoniako molekulės orbitales, o du išorinio sluoksnio posluoksnio 2s elektronai yra dar nepadalyti. Todėl amoniako NH_3 molekulei suartėjus su vandenilio jonu H^+ , kuris galėtų tapti akceptoriumi, nes turi laisvą 1s orbitalę, tarp azoto atomo amoniako molekulėje ir laisvo jono H^+ gali

atsirasti koordinacinis ryšys. Jis ir atsiranda, kai vandenilio jonas H^+ pritraukia nepadalytą azoto atomo posluoksnio 2s elektronų porą ir ji tampa bendra azoto atomui ir vandenilio jonui. Taip susidaro naujas junginys – amonio jonas NH_4^+ , kuriame trys vandenilio atomai išlieka sujungti su azoto atomu paprastaisiais viengubais kovalentiniais ryšiais, o vandenilio jonas susijungia koordinaciniu ryšiu. Koordinacinio ryšio susidarymą, amoniako NH_3 molekulei susijungiant su vandenilio jonu H^+ , labai schematiškai (ir todėl sąlyginai) vaizduoja 60 pav.



60 pav.

Kairėje 60 pav. pusėje schematiškai vaizduojama amoniako NH_3 molekulės elektroninio apvalkalo struktūros projekcija ir dar nesusijęs su ta molekule vandenilio jonas H^+ . Amoniako molekulėje azoto atomas, turintis elektroninio apvalkalo struktūrą $1s^2 2s^2 2p^3$, savo išoriniais 2p elektronais yra viengubais kovalentiniais ryšiais susijungęs su trim vandenilio atomais. Tuos ryšius sudaro 3 poros bendrų elektronų: po vieną iš azoto atomo elektroninio apvalkalo 2p posluoksnio ir po vieną iš vandenilio atomų 1s posluoksnio (ir sluoksnio). Šių kovalentinių ryšių dėka „sukolektyvizavus“ elektronus, minėtieji **posluoksniai tampa pilni**: azoto atomo 2p posluoksnyje atsiranda 6 elektronai, o vandenilio atomų 1s posluoksniuose – po 2 elektronus.

Teigiamas vandenilio jonas H^+ , neturintis 1s posluoksnyje nė vieno elektrono, elektrostatinės traukos jėga traukia prie savęs du nepadalytus azoto atomo elektroninio apvalkalo išorinio sluoksnio 2s posluoksnio elektronus ir šie pasislenka vandenilio jono H^+ link. Susidaro sąlygos koordinacinio ryšio atsiradimui. Tai plokštumoje schematiškai vaizduoja 60 pav. kairioji pusė.

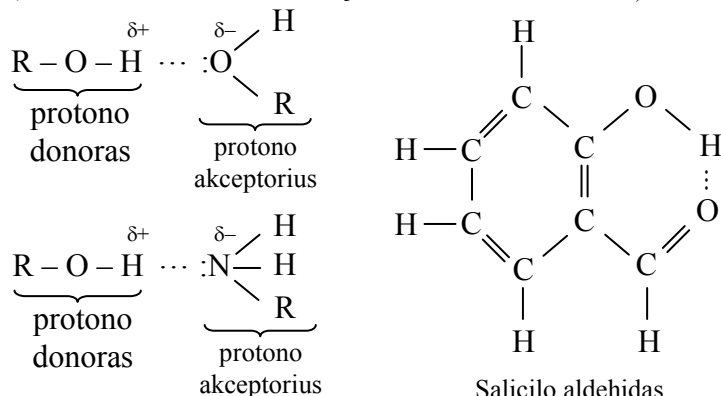
Dešinėje 60 pav. pusėje schematiškai vaizduojama to ryšio dėka susidariusio amonio jono NH_4^+ elektroninio apvalkalo struktūra. Ten parodyta, kad azoto atomo 2s orbitalės abu elektronai yra tapę tuo pat metu ir vandenilio jono 1s orbitalės elektronais, tokiu būdu sudarydami koordinacinį ryšį tarp azoto atomo ir vandenilio jono ir bendrą amonio jono orbitalę.

Koordinacinis ryšys, būdamas kovalentiniu (nes jis atsiranda „kolektyvizuojant“ elektronų poras), skiriasi nuo paprasto kovalentinio ryšio tuo, kad pastarajame „kolektyvizuotų“ elektronų pora sudaroma, imant po vieną elektroną iš kiekvieno besijungiančio tuo ryšiu atomo, o koordinaciniame ryšyje abu tos poros elektronus „pristato“ atomas donoras, o atomas akceptorius dalyvauja to ryšio sudaryme tik pateikdamas laisvą orbitalę, kuri, susijungdama su donoro elektronų orbitale, tampa bendra abiem jungiamiesiems atomams.

Metališkasis ryšys yra šiek tiek panašus į kovalentinį, nes ir jis remiasi elektronų „kolektyvizavimo“ principu, tačiau skiriasi nuo pastarojo tuo, kad kovalentiškojo ryšio atveju kiekviena pora tą ryšį sudarančių elektronų tampa bendra dviejų gretimų atomų „nuosavybe“, o metališkojo ryšio atveju elektronai delokalizuoja daugelio atomų sistemoje, **tapdami bendrais daugeliui atomų, ir tokiu būdu sudaro taip vadinamas „elektronines dujas“**, jungiančias atomus į kristalinę struktūrą ir beveik laisvai judančias tos kristalinės struktūros gardelėse. Metališkasis ryšys būdingas metalų atomams kietoje ir skystoje jų fazėse, o taip pat kai kuriems pereinamųjų metalų (d metalų) junginiams su azotu, anglimi, siliciu, seleno, fosforu, siera, vandeniliu. Apie tuos junginius bus kalbama šiek tiek vėliau, o apie kristalų struktūras – 1.9.1.4. skyrelyje. Dėl „elektroninių dujų“ susidarymo, „kolektyvizuojant“ elektronus, visiems metališkojo ryšio junginiams būdingas tipiškos metalų savybės – geras šiluminis ir elektrinis laidumas, metalinis blizgesys, kristalinė struktūra.

Vandeniliniu ryšiu vadinamas ryšys, atsirandantis tarp vandenilio atomo H, kovalentiniu ryšiu susijungusio su koku nors elektroneigiamu atomu A (tai gali būti deguonis, azotas ir t. t.), ir tarp elektroneigiamesnio atomo B arba jų grupės, turinčių nepadalintų elektronų porą. Junginys A–H šiuo atveju tampa **protono donoru** (elektrono akceptoriumi), o atomas B (ar atomų grupė, simbolizuojanti atomą B) – **protono akceptoriumi** (elektrono donoru). Pats vandenilio atomas tampa tartum tilteliu tarp

atomų A ir B, susirišdamas su atomu A kovalentiniu, o su atomu B – vandeniliniu ryšiu, atsirandančiu dėl elektrostatinės sąveikos. Cheminių junginių formulėse vandenilinis ryšys žymimas trim taškeliais (žiūr. 61 pav. kairiąją pusę, kur žymenys R reiškia kokius nors radikalus – angliavandenilio molekulės liekanas, gaunamas, atėmus iš tos molekulės vieną ar kelis vandenilio atomus).



Ypač palankios sąlygos atsirasti vandeniliniam ryšiui susidaro tada, kai tas ryšys uždaro penkianarius, šešianarius ar septynianarius ciklus (žiūr. 61 pav. dešiniąją pusę, kur plokštumoje schematiškai vaizduojama erdvinė salicilo aldehido molekulės struktūra, turinti ciklą uždarančią vandenilinį ryšį). Vandenilinis ryšys yra gana silpnas donorinis akceptorinis ryšys. Jam susidarant išsiskiria nuo 10 iki 25 kJ energijos vienam moliui. Kai vandenilinis ryšys jungia atomus, priklausančius tai pačiai molekulei, jis vadinamas **vidiniu**. Tačiau dažniausiai tas ryšys būna **tarpmolekulinis**, asocijuojantis molekules į agregatus bei kompleksus. Apie juos pakalbėsime šio skyrelio pabaigoje.

Ne tik vandenilinis, bet ir kiti cheminiai ryšiai gali jungti atomus, molekules bei jonus į stambesnes struktūras, pavyzdžiui, į **kristalines gardeles** (žiūr. 1.9.1.4. skyrelį). Tokioms gardelėms susidarius, jų išskaidymui į atomus, molekules ar jonus reikalinga tam tikra energija, charakterizuojanti cheminių ryšių tarp elementų, sudarančių kristalinę gardelę, stiprumą, priklausančią nuo cheminio ryšio tipo. Šią priklausomybę iliustruoja 37-oji lentelė, kurioje pateikti kai kurių medžiagų kristalinių gardelių energijos dydžiai kilodžauliais (kJ), reikalingi vieno molio (mol) kristalinės medžiagos suskaidymui į atomus, molekules ar jonus.

37. lentelė

Ryšio tipas	Kristalinės medžiagos pavadinimas	Cheminė formulė	Kristalinės gardelės energija (kJ/mol)
Kovalentinis	silicio karbidas	SiC	1185
Joninis	natrio chloridas	NaCl	755
Metališkasis	Geležis	Fe	354
	Natris	Na	109
Vandenilinis	Ledas	H ₂ O	50
Molekulinis	Metanas	CH ₄	10

Kaip matome iš 37-osios lentelės, kovalentiniai ryšiai kristalinėse gardelėse gali būti stipresni ir už joninius, nors molekulėse joniniai ryšiai, kaip jau buvo minėta, neretai būna stipresni už kovalentinius. Taip atsitinka todėl, kad joninių ryšių energija proporcingai mažėja, augant atstumui tarp jonų branduolių (žiūr. 33-ją lentelę, kurioje duotos kai kurios jonų radiusų eilės) ir proporcingai didėja, augant jonų valentingumui, t. y. jų elektriniam krūviui. Tarpmolekulinius ryšius, jungiančius molekules į kristalus ir atsirandančius tarp neutralių molekulių dėl gravitacijos ir van der Valso jėgų, reikėtų laikyti greičiau mechaniniais negu cheminiais ryšiais.

Taigi, pagal ryšių tipą cheminius junginius galima skirstyti į **joninius**, **kovalentinius**, **metališkuosius** ir **mišrius**, kuriuose gali pasireikšti taip pat ir vandenilinis bei koordinacinis ryšiai.

Kitas cheminių junginių klasifikavimo būdas susiklostė istoriškai, kada cheminės medžiagos pagal jų kilmę buvo skirstomos į **organines** ir **neorganines**. Šiandien šis cheminių junginių kilmės požymis jų klasifikavimui, žiūrint į tai teoriškai, jau nebėra pakankamai tinkamas, nes dabar daug cheminių junginių, būdingų gyvymui gamtai, gali būti dirbtinai sintezuoti iš neorganinių komponentų. Tačiau **anglies atomų grandinės, medžiai ir ciklai, jų junginiai su vandeniliu, sudarantys organinių junginių pagrindą, turi tiek daug specifinių savybių (kurios ir leido susidaryti gyvymui materijai būdingoms struktūroms), kad ir šiandien išlieka organinių junginių išskyrimo iš visų kitų**

cheminių junginių praktinė prasmė. Tiesa, frazė „organinių junginių išskyrimas iš visų kitų cheminių junginių“ skamba šiek tiek savotiškai, nes tiksliau būtų kalbėti apie neorganinių junginių atskyrimą nuo organinių, kadangi chemikai organinių junginių surado ir sukonstravo žymiai daugiau negu neorganinių. 1970 m., bandant įvertinti cheminių junginių skaičių, buvo rasta, jog žinomų neorganinių junginių skaičius tik šiek tiek viršija 100 tūkstančių, o organinių junginių yra daugiau nei 3 milijonai. Šie skaičiai vis didėja, bet kartu didėja ir skirtumas tarp jų. Žinomų skirtingų organinių junginių skaičius dabar jau viršija 17 mln.

Tokia organinių junginių gausybė sąlygojama **anglies atomų „sugebėjimu“ ir „polinkiu“ jungtis į ilgas grandines, įvairiai išsiskojusius medžius bei ciklus, o taip pat struktūrinės izomerijos reiškiniu**, apie kurį jau buvo rašyta 1.9.1.1. skyrelyje (žiūr. 45 pav., vaizduojantį du struktūrinius izomerus – dimetilo eterį ir etilo alkoholį, turinčius tą pačią sudėtį ir todėl tą pačią empirinę cheminę formulę C_2H_6O , tačiau skirtingas struktūras, o todėl – ir skirtingas savybes). Iš tame skyrelyje pateiktų formulių, išreiškiančių įvairių struktūrų skaičiaus priklausomybę nuo tas struktūras sudarančių elementų skaičiaus, išplaukia, jog, didėjant atomų skaičiui molekulėse, galimų izomerų skaičius turėtų labai sparčiai augti. Ir jis iš tikrųjų auga tokiais tempais, kurie primena sprogimą.

Dabartinės kvantinės chemijos požiūriu tarp organinių ir neorganinių junginių nėra griežto principinio skirtumo, nes, pavyzdžiui, nemažai silicio junginių yra struktūriškai panašūs į anglies atomų grandines, medžius ir ciklus, sudarančius organinių junginių struktūrą pagrindą. Ilgos grandinės bei ciklai gali būti sudaryti ne tik iš anglies bei silicio (priklausančių periodinės sistemos IVA pogrupiui) atomų, bet ir iš kitų elementų (pavyzdžiui, fosforo) atomų. Taip pat ir **polimerizacijos** (t. y. **makromolekulių** susidarymo iš besikartojančių mažesnių atominių struktūrų – **monomerų**) reiškinyje yra būdingas ne tik angliai, bet ir eilei kitų cheminių elementų. Juk net vienas iš seniausiai žmonijos vartojamų polimerų – stiklas – nėra organinė medžiaga. Taigi, **sistemiškai mąstant, ir organines ir neorganines medžiagas būtų galima ir reikėtų nagrinėti ne atskirai, o vadovaujantis vieninga bendrasisteminė metodologija ir kvantine chemija bei kvantine fizika.**

Tačiau istoriškai susiklosčiusi cheminių junginių klasifikavimo ir pavadinimų jiems suteikimo sistema (taip vadinamoji **chemijos nomenklatura**) sąlygoja tai, kad cheminių junginių skirstymas į organinius ir neorganinius išlieka iki šiol ir išliks ateityje, kaip išliko bei išliks ir daugelis kitų kadaise prigijusių ir dabar jau išsėkusių tradicijų.

Todėl ir mes sistemotyroje naudosis chemijos moksle pripažinta cheminių junginių klasifikacija ir pavadinimų jiems suteikimo sistema, žinoma, nevengdami kritinių pastabų tais atvejais, kai ta „sistema“ akivaizdžiai pažeidžia sistematizavimo principus. O tokių atvejų yra nemažai.

Klasifikuojant neorganinius junginius pagal jų **molekulių cheminę sudėtį**, istoriškai priimta išskirti į atskirą ypatingą grupę cheminių elementų junginius su deguonimi, pavadinant juos **oksidais**. Norint nurodyti, kokio cheminio junginio elemento atomai yra susijungę su deguonimi į oksido molekulę, žodis „oksidas“ vartojamas kartu su to elemento pavadinimu kilmininko linksnyje, o norint nurodyti deguonies atomų skaičių oksido molekulėje, prie žodžio „oksidas“ pridedamas atitinkamas priešdėlis („mono–“, „di–“, „tri–“, „tetra–“, „penta–“ ir t. t.), išreiškiantis tą skaičių. Taip gaunami konkrečių oksidų pavadinimai: anglies monoksidas CO, anglies dioksidas CO_2 , azoto dioksidas NO_2 , silicio dioksidas SiO_2 , sieros trioksidas SO_3 , chromo trioksidas CrO_3 , fosforo pentoksidas P_2O_5 ir pan.

Kokios nors medžiagos jungimosi su deguonimi cheminė reakcija, atsižvelgiant į deguonies lotynišką pavadinimą, buvo pavadinta oksidacija (oksidavimusi). **Žodis „oksidacija“ chemijoje vartojamas ir platesne prasme, reiškiančia cheminę reakciją, kurios metu atomas, molekulė ar jonas netenka vieno ar kelių elektronų**, atiduodamas juos kitiems atomams (nebūtinai deguonies). Atvirkštinė reakcija, kada atomas, molekulė ar jonas gauna (ar susigražina anksčiau prarastus) vieną ar kelis elektronus, vadinama **redukcija**. Molekulė, jonas ar atomas, atiduodantys elektronus, vadinami **reduktoriais** tuos elektronus gaunančio atomo, jono ar molekulės atžvilgiu, o molekulė, atomas ar jonas, gaunantys elektronus iš besioksiduojančio atomo, molekulės ar jono, vadinami to besioksiduojančio atomo, molekulės ar jono **oksidatoriais**. Taigi, **oksidatoriumi plačiąja prasme gali būti ne tik deguonis**, bet ir kuris nors kitas elementas, kurio atomai gali priimti į savo nepilnai užpildytą elektroninio apvalkalo išorinį sluoksnį elektronus iš kitų atomų.

Pavyzdžiui, cheminėje reakcijoje $Zn + Cl_2 \rightarrow ZnCl_2$ cinkas oksiduojasi ($Zn - 2e \rightarrow Zn^{2+}$), o chloras redukuojasi ($Cl_2 + 2e \rightarrow 2Cl^-$), ir teigiamas cinko jonas Zn^{2+} , susijungdamas su neigiamais chloro jonais Cl^- , sudaro neutralią $ZnCl_2$ molekulę. Šiame pavyzdėlyje besioksiduojantis cinkas yra reduktorius besiredukuojančio chloro atžvilgiu, o besiredukuojantis chloras yra oksidatorius besioksiduojančio cinko atžvilgiu.

Oksidatoriais dažniausiai būna nemetalai (deguonis, ozonas, halogenai), kai kurios rūgštys ir druskos, o reduktoriais – daugelis metalų (ypatingai – s elementai), anglis, anglies monoksidas, nitritai ir t. t.

Oksidacijos proceso bei jo rezultato kiekybiniam įvertinimui, elektros krūvių balanso apskaičiavimui, rašant chemines formules ir lygtis, o taip pat cheminių bei elektrocheminių ekvivalentų apskaičiavimui chemijoje įvedama speciali sąvoka, vadinama **atomo (ar jų grupės) oksidacijos laipsniu cheminiame junginyje**, rodanti **atomo (ar jų grupės) elektrinį krūvį tame junginyje**, išreikštą elementariais elektros krūvio vienetais (pozitrono krūviais) su atitinkamu ženklu („+“ ar „-“).

Pavyzdžiui, apskaičiuodami chromo atomo oksidacijos laipsnį chromo trioksido CrO_3 (atsižvelgdami į tai, kad deguonies atomas gali priimti du jam iki pilno „okteto“ trūkstančius elektronus, dėl ko minimalus jo oksidacijos laipsnis yra -2), gauname, kad chromo trioksido chromo oksidacijos laipsnis yra lygus $+6$, kadangi pati chromo trioksido molekulė yra neutrali.

Cheminėse formulėse, reikalui esant, atomų oksidacijos laipsniai nurodomi arabiškais skaičiais su atitinkamais ženklais („+“ ar „-“) virš atomų simbolių. Pavyzdžiui: $\overset{+6}{\text{Cr}}\overset{-2}{\text{O}}_3$, $\overset{0}{\text{Zn}} + \text{Cl}_2 \rightarrow \overset{+2}{\text{Zn}}\overset{-1}{\text{Cl}}_2$,

$\overset{+1}{\text{K}}\overset{+5}{\text{Cl}}\overset{-2}{\text{O}}_3 \rightarrow \overset{+1}{\text{K}}\overset{-1}{\text{Cl}} + \overset{0}{3\text{O}_2}$ ir pan. Kartais teigiamai poliarizuotų atomų oksidacijos laipsniai nurodomi ir romėniškais skaitmenimis, paimtais iš skliaustelių ir užrašytais šalia atomo simbolio. Pavyzdžiui, tai, kad chromo trioksido CrO_3 chromo oksidacijos laipsnis yra $+6$, galima užrašyti ir Cr(VI) .

Kai kurių cheminių elementų oksidacijos laipsniai yra pastovūs, t. y. vienodi visuose cheminiuose junginiuose. Pavyzdžiui, IA pogrupio s metalų oksidacijos laipsnis visada yra $+1$, nes šių metalų atomai, turėdami vieną išorinį s elektroną, gali jį tik prarasti ir tapti teigiamais jonais. Pastovų oksidacijos laipsnį, lygų $+2$, dėl panašios priežasties turi ir IIA pogrupio s elementai. IIIA pogrupio p metalų oksidacijos laipsnis taip pat dažniausiai yra pastovus ir lygus $+3$, nes jų atomai dažniausiai praranda savo išorinį p elektroną ir dar du išorinius s elektronus. IVA pogrupio p metalų oksidacijos laipsnis būna jau arba $+2$ arba $+4$, t. y. jų atomai arba praranda abu išorinius p elektronus arba kartu su jais dar ir du išorinius s elektronus. Dar daugiau galimų kombinacijų atsiranda VA pogrupio p metalams, turintiems du išorinius s elektronus ir tris išorinius p elektronus. Todėl šių metalų oksidacijos laipsnis skirtinguose cheminiuose junginiuose gali būti ir $+2$, ir $+3$, ir net visi $+5$. Dar magesnį oksidacijos laipsnių reikšmių spektrą turi pereinamieji metalai: IB pogrupyje – $+1$, $+2$, $+3$, IVB pogrupyje – $+2$, $+3$, $+4$, VB pogrupyje – nuo $+2$ iki $+5$, VIB pogrupyje – nuo $+2$ iki $+6$, VIIB pogrupyje – nuo $+2$ iki $+7$, VIIIB pogrupyje – nuo $+2$ iki $+8$. Lantanoidų oksidacijos laipsnis gali būti $+2$, $+3$, $+4$, aktinoidų – nuo $+3$ iki $+7$. Dar platesnį oksidacijos laipsnio reikšmių spektrą gali turėti nemetalai, nes jų oksidacijos laipsniai gali būti ir teigiami ir neigiami. Taigi, didžiausia cheminio elemento oksidacijos laipsnio reikšmė gali būti $+8$, mažiausia – iki -4 .

Oksidacijos laipsnio sąvoka yra gimininga **valentingumo** sąvokai, reiškiančiai atomo ar jono **galimų cheminių ryšių skaičių**, tačiau ne visada sutampa su ja. Pailiustruosiu oksidacijos laipsnio ir valentingumo sąvokų ryšį ir jų nesutapimą konkrečiais pavyzdžiais.

Vandenilio atomas turi tik vieną elektroną, kurį, jungdamasis su kitu atomu, arba gali prarasti, ir tuomet atomo oksidacijos laipsnis tampa $+1$, arba priimti į savo s orbitalę dar vieną (ir tik vieną) elektroną ir tuomet vandenilio atomo oksidacijos laipsnis tampa lygus -1 .

Paprastuose junginiuose, jungdamasis joniniais ar kovalentiniais ryšiais, vandenilio atomas, kaip tai išplaukia iš joninio ir kovalentinio ryšio mechanizmų, gali susijungti tik su vienu atomu. Todėl vandenilio atomo valentingumas yra lygus 1.

Kaip jau buvo minėta, IA pogrupio metalų atomai gali tik prarasti savo išorinio sluoksnio s elektroną, tapdami teigiamais jonais, todėl jų oksidacijos laipsnis gali būti tik $+1$. Šių elementų valentingumas taip pat lygus 1, nes jų atomai joniniu ryšiu gali susijungti tik su vienu atomu ar jonu.

IIA pogrupio elementai yra metalai, kurių atomai savo elektroninių apvalkalų išoriniame sluoksnyje turi po 2 elektronus, kuriuos taip pat gana lengvai praranda, tapdami teigiamais jonais. Todėl cheminiuose junginiuose šių elementų oksidacijos laipsnis yra $+2$, o valentingumas 2.

Oksidacijos laipsnio ir valentingumo lygybė galioja ir IIIA pogrupio metalams – aliuminiui, galiui, iridžiui ir taliui: jų oksidacijos laipsnis yra $+3$, o valentingumas taip pat lygus 3.

Tačiau tokia lygybė galioja ne visada. Pavyzdžiui, anglis organiniuose junginiuose yra keturvalentė: keturiais viengubais ryšiais ji gali susijungti su keturiais atomais (arba dviem dvigubais ryšiais – su dviem atomais, turinčiais ne mažesnę negu 2 valentingumą, ir pan.). Toks anglies valentingumas išplaukia iš jos atomo elektroninio apvalkalo struktūros $1s^2 2s^2 2p^2$: turėdamas savo išoriniame sluoksnyje 4 elektronus ir 4 laisvas vietas to sluoksnio p orbitalėje, anglies atomas gali priimti į tą orbitalę 4 kitų atomų elektronus bei su savo keturiais išoriniais elektronais gali sudaryti keturis kovalentinius ryšius su kitų atomų elektronais (arba du dvigubus, arba vieną dvigubą ir du viengubus ryšius ir t. t.). Iš anglies atomo elektroninio apvalkalo struktūros išplaukia ir anglies galimybė turėti skirtingus oksidacijos laipsnius cheminiuose junginiuose. Kai anglies atomas, jungdamasis su kitais atomais, į savo p orbitalę priima 4 kitų atomų elektronus, kaip tai įvyksta susidarant metano CH_4

molekulei, tai jo oksidacijos laipsnis tampa lygus -4 , nes pati metano molekulė $\overset{-4}{\text{C}}\overset{+1}{\text{H}}_4$ yra neutrali. Kai

anglies atomas perduoda savo išorinius elektronus kitiems atomams, kaip tai įvyksta anglies tetrachlorido $\overset{+4}{\text{C}}\overset{-1}{\text{Cl}}_4$ molekulėje, kurioje anglis išlieka keturvalentė, anglies atomo oksidacijos laipsnis tampa lygus +4, nes chloro atomai, papildydami savo 2p posluoksnius iki pilnų „oktetų“, prisijungia po vieną anglies išorinį elektroną: du iš 2p posluoksnio ir dar du – iš 2s posluoksnio. Kartais anglies atomas gali prarasti ne visus išorinius elektronus, o tik du posluoksnio 2p elektronus, kaip, pavyzdžiui,

skrudžių rūgštyje $\text{H}-\overset{+1}{\text{C}}\overset{+2}{\underset{\text{O}-\text{H}}{\overset{-2}{\text{O}}}}\overset{-1}{\text{O}}$. Tuomet jo oksidacijos laipsnis tampa lygus +2. O tais atvejais kai

anglies atomas į savo 2p orbitalę priima ne visus keturis, o tik 2 elektronus, kaip, pavyzdžiui, metilo alkoholyje $\text{H}_3\overset{+1}{\text{C}}\overset{-2}{\text{O}}\overset{-2}{\text{H}}$, tai jo oksidacijos laipsnis tampa –2.

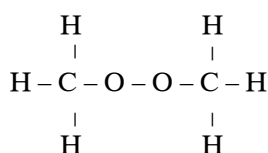
Kaip matome iš pateiktų pavyzdžių, **nors tarp oksidacijos laipsnio ir valentingumo egzistuoja ryšys, nes abu tie dydžiai priklauso nuo atomo elektroninio apvalkalo struktūros, šie dydžiai ne visada sutampa.**

Oksidai, kuriuose deguonies atomai yra susiję su kitų elementų atomais, bet nesusiję tarpusavyje, vadinami tiesiog **oksidais**. Tokių oksidų pavyzdžiai: vanduo H_2O , kalcio oksidas CaO , azoto dioksidas NO_2 , fosforo pentoksidas P_2O_5 ir pan.

Kai oksido molekulėje vienam oksiduojamo elemento atomui tenka mažiau negu vienas deguonies atomas, t. y., kada oksiduojamo elemento oksidacijos laipsnis tampa mažesnis negu to elemento monoksido, tokį oksidą vadina **suboksidu**. Suboksidų pavyzdžiai: azoto suboksidas N_2O ir labai napatvarus anglies suboksidas C_3O_2 .

Oksidai, kuriuose deguonies atomai yra susiję ne tik su kitų elementų atomais, bet ir tarpusavyje, vadinami **superoksidais**. Pavyzdžiui, kalio superoksido KO_2 molekulėje su kalio atomu yra susijungęs ne anijonas O^{2-} (kaip kalio okside K_2O , kuriame deguonies atomas priima į savo 2p orbitalę dar po vieną 4s elektroną iš kiekvieno kalio atomo, tampančio jonu K^+), o anijonas O_2^- , kuriame du deguonies atomai yra susiję tarpusavyje kovalentiniu ryšiu ir priėmę vieną 4s elektroną iš kalio atomo.

Superoksidai, kurių molekulių sudėtyje yra **peroksido grupė** – $\text{O}-\text{O}$ – (t. y. anijonas O_2^{2-}), vadinami **peroksidais**. Peroksidų pavyzdžiai: vandenilio peroksidas H_2O_2 , turintis struktūros grafinį modelį $\text{H}-\text{O}-\text{O}-\text{H}$, natrio peroksidas Na_2O_2 , turintis struktūros modelį $\text{Na}-\text{O}-\text{O}-\text{Na}$, ir metilo peroksidas $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2$, kurio molekulės struktūros modelis yra medis T_{10} , turintis „Vyties kryžiaus“ formą (žiūr. 62 pav.).



Metilo peroksidas $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2$

62 pav.

Oksidai, kurių sudėtyje yra deguonies anijonas O_3^- , vadinami **ozonidais**. Šis pavadinimas kilęs iš deguonies elemento alotropinės atmainos – ozono O_3 – pavadinimo. Ozonido pavyzdys – kalio ozonidas KO_3 .

Deguonies atomą įvairiuose cheminiuose junginiuose dažnai galima pakeisti jau minėtąja grupe – $\text{O}-\text{O}$ – ir gauti taip vadinamą peroksijunginį. Terminas **peroksijunginiai (peroksojunginiai)** neretai vartojamas ir platesne prasme: peroksojunginiais dažnai vadinami cheminiai junginiai, kurių molekulėje yra tarpusavyje susijusių deguonies atomų. Taip apibrėžus peroksojunginių klasę, į ją patenka ir peroksidai, turintys molekulių sudėtyje peroksidinę grupę – $\text{O}-\text{O}$ –, ir peroksorūgštys bei jų druskos, ir ozonidai, turintys molekulių sudėtyje anijoną O_3^- , ir superoksidai, turintys anijoną O_2^- , ir eilę kitų junginių.

Priešdėlis „per–“ cheminėje terminologijoje (chemijos nomenklatūroje) gali būti vartojamas ir be tęsinio „–oksi–“. Pavyzdžiui, šis priešdėlis vartojamas taip vadinamųjų perjunginių pavadinimuose.

Perjunginiais priimta vadinti septynvalenčių periodinės lentelės septintosios grupės (jos VIIA ir VIIB pogrupių) elementų oksidų junginius su metalais bei vandeniliu (druskas ir rūgštis), kai tuose junginiuose minėtųjų elementų oksidacijos laipsnis yra tiems elementams pats aukščiausias ir lygus +7. Tai reiškia, jog perjunginiuose VIIA pogrupio elementų atomai perleidžia deguonies atomams ne tik visus penkis savo išorinio sluoksnio posluoksnio p elektronus, bet dar ir to sluoksnio posluoksnio s du elektronus, t. y. visus išorinio sluoksnio elektronus, o VIIB pogrupio elementų atomai perleidžia deguonies atomams, sudarydami cheminius ryšius su jais, ne tik visus du išorinio sluoksnio posluoksnio s elektronus, bet ir visus penkis pildomo, bet dar neužpildyto posluoksnio d, priklausančio antram nuo išorės sluoksniui, elektronus.

Perjunginių ir jų pavadinimų, turinčių priešdėlį „per–“, pavyzdžiai: VIIA pogrupio elemento chloro (VII) junginys $\text{H}\overset{+1}{\text{Cl}}\overset{+7}{\text{O}}\overset{-2}{\text{O}}_4$ – perchloro rūgštis; tos rūgšties kalio druska $\text{K}\overset{+1}{\text{Cl}}\overset{+7}{\text{O}}\overset{-2}{\text{O}}_4$ – kalio perchloratas;

VII pogrupio elemento mangano (VII) junginys $\overset{+1}{\text{H}}\overset{+7}{\text{Mn}}\overset{-2}{\text{O}_4}$ – permangano rūgštis; tos rūgšties kalio druska KMnO_4 – kalio permanganatas ir t. t.

Tačiau pasitaiko ir tokių atvejų, kada priešdėlis „per-“ vartojamas ir tokių junginių pavadinimuose, kurių formulėse nėra VII grupės elementų. Tokio junginio pavyzdys – amonio druska $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$, vadinama amonio persulfatu, nors siera priklauso ne septintajai, o šeštajai cheminių elementų periodinės lentelės grupei – VIA pogrupiui. Tiesa, sieros oksidacijos laipsnis amonio persulfate yra +7 ir yra aukštesnis už sieros oksidacijos laipsnį amonio sulfate $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$, kuriame tas laipsnis lygus +6.

Taigi, perjunginių apibrėžimą reikėtų šiek tiek išplėsti, kad į perjunginių klasę tilptų ir tokie junginiai kaip persulfatai, peroksikarbonatai ir t. t. Tai bus padaryta šiek tiek vėliau.

Skaitytojui, įpratusiam prie matematikos terminų ir taisyklių apibrėžtumo (vienareikšmiškumo), matyt, nelengva susitaikyti su chemijos mokslo terminologijos nepakankamu vienareikšmiškumu. Neseniai jau buvome susidūrę su termino „oksidacija“ dvejopa interpretacija, panašiai, kaip dabar – su dvejopa termino „peroksidunginys“ reikšme. Panašių pavyzdžių galima pririnkti gana daug, jų tarpe – ir įvairių taisyklių negriežto laikymosi bei įvairių išimčių pavyzdžių. Štai, kad ir žodžio „oksidas“ priešdėlių „mono-“, „di-“, „tri-“ ir t. t. vartojimo taisyklė, kuri, kaip jau buvo minėta, teigia, jog tie priešdėliai reiškia deguonies atomų molekulėje skaičių. Šios taisyklės chemijoje ne visada griežtai laikomasi. Visų pirma, gana dažnai nevartojamas priešdėlis „mono-“. Jis dažniausiai vartojamas tik tada, kada norima kokio nors elemento monoksidą išskirti (ar atskirti) nuo kitų to elemento oksidų, o visais kitais atvejais šis priešdėlis retai vartojamas. Tai nepažeistų terminų vienareikšmiškumo reikalavimo, jei būtų griežtai laikomasi kitų priešdėlių („di-“, „tri-“, „tetra-“ ir t. t.) vartojimo taisyklės. Tačiau taip nėra, nes gana dažnai (ypatingai, kai kalbama apie metalų oksidus) nevartojami ir priešdėliai „di-“, „tri-“, „tetra-“ ir t. t. Tuomet oksido pavadinimas jau nebesuteikia pakankamai informacijos apie molekulės sudėtį ir struktūrą, ir spręsti apie jas galima jau tik iš molekulės formulės (empirinės ar, dar geriau, struktūrinės). Minėtų priešdėlių epizodinį vartojimą bei nevartojimą dar galima būtų leisti, nes nebūtina, kad trumpas pavadinimas būtų toks pat informatyvus kaip cheminė formulė. Tačiau kartais susiduriame ne tik su terminų nepakankamo apibrėžtumo, bet ir su tiesioginio prieštaravimo taisyklėms atvejais, t. y. su kai kurių priešdėlių bei priesagų vartojimu kita prasme. Su tokiais atvejais šiame skyrelyje susidursime ne vieną kartą. Būna ir taip, kad atsiranda sunkumų, taikant tą ar kitą taisyklę. Pavyzdžiui, vadovaudamiesi ką tik minėtąja oksidų pavadinimų sudarymo taisykle, junginiui MnO mes galime suteikti mangano monoksido pavadinimą, o MnO_2 pavadinti mangano dioksidu. Tačiau susiduriame su tam tikru neapibrėžtumu, taikydami šią taisyklę junginiams Mn_2O_3 , Mn_3O_4 bei Mn_2O_7 . Atrodytų, jog išeitį iš tokios situacijos būtų galima rasti perėjus

prie romėniškų skaičių, rodančių mangano oksidacijos laipsnį junginyje: $\overset{+2}{\text{Mn}}\overset{-2}{\text{O}}$ – mangano (II) oksidas, $\overset{+3}{\text{Mn}_2}\overset{-2}{\text{O}_3}$ – mangano (III) oksidas, $\overset{+4}{\text{Mn}}\overset{-2}{\text{O}_2}$ – mangano (IV) oksidas, $\overset{+7}{\text{Mn}_2}\overset{-2}{\text{O}_7}$ – mangano (VII) oksidas. Bet ir tada dar išliktų klausimas, kaip pavadinti Mn_3O_4 , kokią oksidacijos laipsnį priskirti manganui šiuo atveju, kai tas manganas sutinkamas, pavyzdžiui, mangano rūdoje, vadinamoje hausmanitu. Taigi, net atsisakymas nuo priešdėlių, pakeičiant juos teigiamai poliarizuoto elemento oksidacijos laipsnio nurodymu, ne visada išsprendžia oksidų pavadinimų vienareikšmiško atitikimo jų sudėčiai ir struktūrai problemą. Su panašiais sunkumais susiduriama ir suteikiant pavadinimus azoto oksidams N_2O , NO , NO_2 , N_2O_4 , N_2O_3 , N_2O_5 . Tenka įsivesti **dimero** sąvoka, kad atskirtume N_2O_4 nuo NO_2 .

Apibendrinant tai, kas čia buvo pasakyta (o dar daugiau – nepasakyta, nors galima pateikti daugybę panašių pavyzdžių) apie cheminę terminologiją (chemijos nomenklatūrą) ir, bendrai, apie chemijos mokslo kalbą, reikėtų pažymėti, jog ta kalba, nors ir turi nemažai formalios kalbos požymių (simbolių įvedimas, cheminių formulų ir lygčių vartojimas, chemijos nomenklatūros taisyklių formulavimas), vis dėlto dar nėra pilnai formali kalba, kaip, pavyzdžiui, matematinės logikos kalba ar algoritminės kalbos. Cheminė terminologija formavosi palaipsniui („istoriškai“) ir tos terminologijos formavimo(si) taisyklės taip pat klostėsi (ir tebesiklosto iki šiol) palaipsniui, o nebuvo suformuluotos ir suderintos, sujungiant jas į pilną ir neprieštaringą sistemą, pačios chemijos mokslo kalbos formavimosi pradžioje. Taigi, **chemijos mokslo kalbos formavimosi procesas yra gana panašus į natūralių kalbų vystymosi procesus**. Todėl nenuostabu, kad chemijos mokslo kalbai ir jos „gramatikos taisyklėms“ taip pat būdingos įvairios išimtys iš taisyklių, kurios taip apsunkina natūraliųjų kalbų ir jų gramatikų mokymąsi. Ir vargu ar galima tikėtis, kad artimiausiu laiku būtų įvykdyta kardinali chemijos nomenklatūros reforma, kurios metu būtų susisteminta ir pilnai suderinta visa cheminė terminologija bei jos sudarymo „gramatinės taisyklės“. Juk, pavyzdžiui, kiekvienam, susipažinusiam su anglų kalba, aišku, kad tos kalbos žodžių rašybos ir jų tarimo skirtumai žymiai apsunkina anglų kalbos

mokymąsi ne tik kitataučiams, bet ir pačių anglų vaikams. Tačiau vargu ar galima tikėtis, kad greitai laiku atsirastų tokia ryžtingų ir įtakingų reformatorių grupė, kuri išdrįs ir sugebės įvykdyti anglų kalbos rašybos reformą. Juk tokios reformos pasekoje tektų perrašyti didelę dalį milžiniško iki šiol sukaupto literatūros anglų kalba palikimo, idant juo būtų patogiau naudotis ir ateinančioms kartoms, jau nebegalėsiančioms laisvai skaityti knygų, parašytų „ikireformine“ rašytine kalba.

Bet grįžkime prie oksidų klasifikacijos. Pagal tai, kaip jie reaguoja su vandeniu, bazėmis ir rūgštimis, oksidai skirstomi į rūgštinius, bazinius, amfoterinius ir indiferentinius.

Rūgštiniai oksidai, arba anhidridai, gaunami, kai deguonis jungiasi su nemetalais arba su pusmetaliais bei metalais, kurių valentingumas yra 5, 6, 7. Rūgštinių oksidų pavyzdžiai: azoto dioksidas NO_2 , sieros trioksidas SO_3 , anglies dioksidas CO_2 , fosforo pentoksidas P_2O_5 ir t. t.

Rūgštiniam oksidui jungiantis su vandeniu, susidaro **rūgštys**, t. y. tokie cheminiai junginiai, kurie, disocijuodami tirpaluose, atskiria ir atiduoda teigiamą vandenilio joną H^+ (protoną) arba oksonį H_3O^+ . Rūgščių gavimo pavyzdžiai: $\text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{NO}_3$ – azoto rūgštis; $\text{SO}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{SO}_4$ – sieros rūgštis; $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{CO}_3$ – anglies rūgštis; $\text{P}_2\text{O}_5 + 3\text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{H}_3\text{PO}_4$ – fosforo rūgštis.

Rūgštiniam oksidui reaguojant su bazėmis bei baziniais oksidais, susidaro junginiai, vadinami **druskomis**. Pavyzdžiui, reaguojant azoto dioksidui NO_2 su s elemento kalio baze – kalio šarmu KOH , susidaro azoto rūgšties druska – kalio nitratas K_2NO_3 , vadinama kalio salietra, ir vanduo: $\text{NO}_2 + 2\text{KOH} \rightarrow \text{K}_2\text{NO}_3 + \text{H}_2\text{O}$. Kitas pavyzdys: $\text{NO}_2 + \text{K}_2\text{O} \rightarrow \text{K}_2\text{NO}_3$.

Baziniai oksidai susidaro, kai deguonis jungiasi su mažo oksidacijos laipsnio metalais, visų pirma – su s metalais. Bazinių oksidų pavyzdžiai: K_2O , CaO , MgO ir pan.

Reaguodami su vandeniu, baziniai oksidai sudaro **bazes**, t. y. cheminius junginius, kurie savo sudėtyje turi hidroksilo grupę OH ir disocijuodami išskiria anijoną HO^- , galintį prisijungti vandenilio joną H^+ (protoną), t. y. elgiasi atvirkščiai, lyginant su rūgštimis. Bazių gavimo pavyzdžiai: $\text{K}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{KOH}$; $\text{CaO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Ca(OH)}_2$; $\text{MgO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Mg(OH)}_2$.

Baziniams oksidams reaguojant su rūgštimis ir rūgštiniais oksidais, susidaro druskos. Pavyzdžiui, $\text{CaO} + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{CaSO}_4 + \text{H}_2\text{O}$; $\text{Na}_2\text{O} + 2\text{HCl} \rightarrow 2\text{NaCl} + \text{H}_2\text{O}$; $\text{CaO} + \text{SO}_3 \rightarrow \text{CaSO}_4$.

Amfoteriniams oksidams, kurie susidaro vidutinio oksidacijos laipsnio metalams reaguojant su deguonimi, gali būti būdingos ir rūgštinės ir bazinės savybės. Tokių oksidų pavyzdžiai: Al_2O_3 , TiO_2 , PbO_2 . Egzistuoja tokius oksidus atitinkančios rūgštys ir bazės (pavyzdžiui, H_3AlO_3 , Al(OH)_3) bei tas rūgštis ir bazės atitinkančios druskos.

Indiferentiniai oksidai nereaguoja nei su rūgštimis, nei su bazėmis. Tokių oksidų pavyzdžiai: CO , NO , N_2O .

Kita cheminių junginių grupė, kuri, kaip ir oksidai, užima ypatingą vietą cheminių junginių aibėje, yra cheminių elementų junginiai su vandeniliu, vadinami **hidridais**. Hidridų pavyzdžiai: ličio hidridas LiH , kalcio hidridas CaH_2 , silicio hidridas SiH_4 , boro hidridas B_2H_6 , anglies hidridas CH_4 vadinamas metanu, fosforo hidridas PH_3 vadinamas fosfinu, azoto hidridas NH_3 , vadinamas amoniaku, silanai $\text{Si}_n\text{H}_{2n+2}$ ir pan.

Pagal elemento ir vandenilio cheminio ryšio tipą hidridai skirstomi į joninius, metališkuosius ir kovalentinius.

Joninius hidridus sudaro IA ir IIA pogrupiams priklausančių s metalų (šarminių ir šarminių žemės metalų) junginiai su vandeniliu. Tokių hidridų pavyzdžiai: LiH , NaH , CaH_2 . Kai joninio hidrido molekulėje yra dar ir boro bei aliuminio atomų, tai tokie hidridai vadinami **joniniais kompleksiniais**.

Pereinamųjų metalų (pavyzdžiui, vanadžio, titano) hidridų molekulėse metalų ir vandenilio atomai sujungti metališkaisiais ryšiais, todėl tokie hidridai vadinami **metališkaisiais**. Jie yra laidūs elektrai ir šilumai, jiems būdingas metalinis blizgesys.

Kovalentiniai hidridai gaunami nemetalams jungiantis su vandeniliu kovalentiniais ryšiais. Tokių hidridų pavyzdžiai: SiH_4 , CH_4 , AsH_3 , B_2H_6 .

Panašiai kaip hidridai, išskiriamos ir klasės kitų junginių, kurių **molekulės sudarytos iš teigiamai poliarizuoto atomo (ar teigiamai poliarizuotos atomų grupės) ir iš neigiamai poliarizuoto nemetalo arba pusmetalio** (išskyrus inertines dujas ir deguonį, kurio panašūs junginiai jau iš pat pradžių buvo išskirti į ypatingą oksidų klasę). Teigiamai poliarizuota tokių junginių dalimi gali būti: a) metalų ir vandenilio atomai, b) tų pusmetalių ir metalų atomai, kurie lengviau netenka savo išorinių elektronų negu tie pusmetalių ir nemetalų atomai, kurie poliarizuosis neigiamai, c) atomų grupės (pavyzdžiui, alkilai). Jungiantis į tokį junginį dviem skirtingiems nemetalams ar dviem pusmetaliams, išorinių elektronų lengviau netenka tas atomas, kuris tų elektronų turi mažiau ir kuriam jų iki pilno „okteto“ reikėtų daugiau, o tas atomas, kuriam iki pilno „okteto“ elektronų trūksta mažiau, lengviau juos persiveda iš savo kaimyno į savo orbitalę ir tampa neigiamai poliarizuotu junginio atomu. Kai du besijungiantys nemetalai ar pusmetaliai priklauso vienam pogrupiui (vienam periodinės lentelės stulpeliui), tai neigiamai poliarizuotu atomu tampa tas atomas, kurio atominis numeris Z yra mažesnis, nes to atomo išorinis p posluoksnis yra arčiau branduolio ir elektrostatinės jėgos, traukiančios elektronus

į tą posluoksnį, yra didesnės negu tame atome, kurio išorinis p posluoksnis yra labiau nutolęs nuo branduolio.

Junginių, sudarytų iš skirtingai poliarizuotų atomų bei jų grupių, pavyzdžiai: NaCl, AgBr, Cu₂J₂, Hg₂J₂, HF, FeCl₂, FeCl₃, CuCl₂, AsCl₃, SnCl₄, SbCl₅, CCl₄, PCl₃, NCl₃, ClF, ClF₃, BrCl, JCl, JCl₃, S₂Cl₂, FeS, H₂S, FeS₂, Fe₃C, CS₂, Ca₃P₂, CaS, ZnS, K₂S, CS₂, BP, ZrP, HfP, Na₃B, B₄C, Si₃N₄, TiN, Zn₃N₂, AlN, B₃N, AlF₃, KF, KJ, K₂Te, CaTe, AuTe₂, H₂Te, Ag₂Te, H₂Se, PbSe, HgSe, SeF₆, SeBr₄, SeCl₄, MoSi₂, SiCl₄, TiC, ZnC₂, W₂C, SiC, Al₄C₃, Na₄Si, Zn₃As₂, C₂H₅Br ir t. t. Iš šių pavyzdžių matyti, kokių elementų atomai tokiuose junginiuose gali tapti neigiamai, kokių – teigiamai poliarizuotais.

Visų tokių junginių pavadinimai sudaromi iš dviejų žodžių. Pirmasis žodis – **teigiamai poliarizuoto atomo ar jų grupės pavadinimas kilmininko linksnyje**. Antrasis žodis gaunamas iš **neigiamai poliarizuoto atomo lotyniško pavadinimo šaknies, pridodant prie jos priesagą „-id-“** ir galūnę „-as“. Taip gaunami pavadinimai: AgBr – sidabro bromidas, NaCl – natrio chloridas, HF – vandenilio fluoridas, FeS – geležies sulfidas, JCl – jodo chloridas, KJ – kalio jodidas, HgSe – gyvsidabrio selenidas, BP – boro fosfidas, Na₄Si – natrio silicidas, SiC – silicio karbidas, Na₃B – natrio boridas, CaTe – kalcio telūridas, Au₃N – aukso nitridas, PbSe – švino selenidas, Zn₃As₂ – cinko arsenidas, AsCl₃ – arseno chloridas, C₂H₅Br – etilo bromidas ir t. t.

Kai teigiamai poliarizuotų atomų bei jų grupių oksidacijos laipsnis yra didesnis už +1, tai to laipsnio dydį galima išreikšti priešdėliais „di-“, „tri-“, „tetra-“ ir t. t., kurie pridunami prie neigiamai poliarizuoto atomo pavadinimo, pateikto su priesaga „-id-“. Taip gaunami pavadinimai: geležies dichloridas FeCl₂, geležies trichloridas FeCl₃, geležies disulfidas FeS₂, anglies tetrachloridas CCl₄, fosforo trichloridas PCl₃, alavo tetrachloridas SnCl₄, arseno trichloridas AsCl₃, magnio dichloridas MnCl₂, stibio pentachloridas SbCl₅, seleno heksafluoridas SeF₆ ir pan.

Ši priešdėlių taisyklė, panašiai kaip ir priešdėlių taisyklė oksidams, kartais pažeidžiama. Pavyzdžiui, priešdėliai nemetalų ir pusmetalių atomų junginiuose su teigiamai poliarizuotais atomais kartais gali reikšti ne oksidacijos laipsnį, t. y. ne teigiamai poliarizuoto atomo elektrinį krūvį, o neigiamai poliarizuotų atomų skaičių molekulėje. Kitaip tariant, nesant griežtai nustatytų reikalavimų, kartais sukeičiamas vietomis priešdėlių taisyklių oksidams ir nemetalų bei pusmetalių junginiams vartojimas. Taip atsitinka todėl, kad pavadinimai junginiams buvo suteikiami dar tada, kai tų pavadinimų suteikimo tradicijos dar tik klostėsi ir nebuvo susiformavusios į griežtas taisykles. Vis dėlto atrodo, kad Tarptautinė teorinės ir taikomosios chemijos sąjunga (IUPAC) galėtų šiek tiek griežčiau tvarkytis cheminėje terminologijoje, pilniau ir vienareikšmiškiau formuluodama chemijos nomenklatūros taisykles ir griežčiau prižiūredama, kad tų taisyklių visur būtų laikomasi.

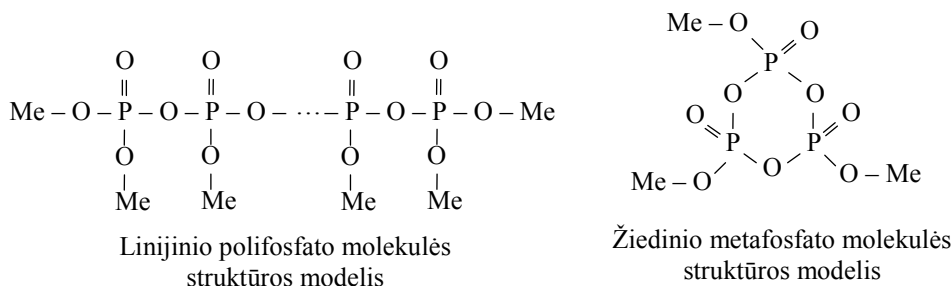
Nemetalų ir pusmetalių neigiamai poliarizuotų atomų junginiai su teigiamai poliarizuotais kitų elementų atomais bei jų grupėmis, kaip ir jau anksčiau aprašytieji hidridai, gali susidaryti, **atomams jungiantis joniniais, kovalentiniais ir metališkaisiais ryšiais**. Todėl egzistuoja joniniai halogenidai (fluoridai, chloridai, bromidai, jodidai), karbidai, fosfidai, selenidai, silicidai, o taip pat kovalentiniai karbidai, nitridai, sulfidai ir t. t. bei metališkieji karbidai, silicidai, fosfidai, nitridai ir t. t. Joninių šio tipo junginių pavyzdžiai: NaCl, KBr, CaC₂, Na₂C₂, HgC₂, Cu₂C₂, Al₄C₃, Be₂C, Na₃P, Ca₃P₂, AlP, Na₃N, Be₃N, Cu₃N, Zn₃N₂, Ag₃N, Au₃N ir t. t. Kovalentinių junginių pavyzdžiai: SiC, B₄C, B₃N, AlN, Si₃N₄, NbP, CrP, MnP ir t. t. Metaliskajam tipui priskiriami TiC, ZrC, W₂C, NbN, TiN, TiP, HfP ir t. t. Prie metaliskųjų galima priskirti ir cementito tipo karbidus Fe₃C, Ni₃C ir t. t.

Kai nemetalų ir pusmetalių, o taip pat kai kurių metalų (Al, Ti) oksidai jungiasi su kitų elementų teigiamai poliarizuotais atomais ar jų grupėmis taip, kad gaunamos druskos, kuriose tų **teigiamai poliarizuotų nemetalų, pusmetalių ar metalų oksidacijos laipsnis tampa didžiausias** tarp oksidacijos laipsnių, būdingų tų metalų bei pusmetalių oksidams (bet ne peroksidams), tai tokių junginių pavadinimai formuojami panašiai kaip prieš tai nagrinėtų junginių (fluoridų, chloridų, karbidų, sulfidų, nitridų ir t. t.), tik **vietoj priesagos „-id-“ vartojama priesaga „-at-“**. Taip sudaromi pavadinimai: chloratai, bromatai, sulfatai, fosfatai, nitratai, karbonatai, silikatai, boratai, chromatai, aluminatai, titanatai ir pan. Tokių junginių pavyzdžiai: kalio chloratas KClO₃ ir natrio chloratas NaClO₃ – abu junginiai yra chloro rūgšties HClO₃ druskos; bario bromatas Ba(BrO₃)₂ – bromo rūgšties HBrO₃ druska; natrio sulfatas NaSO₄, divalentės geležies sulfatas FeSO₄, trivalentės geležies sulfatas Fe₂(SO₄)₃ – visi trys junginiai yra sieros rūgšties druskos; Na₂B₄O₇ – natrio tetraboratas – tetraboro rūgšties H₂B₄O₇ druska; Ag₂CrO₄ – sidabro monochromatas – chromo rūgšties H₂CrO₄ druska; Ag₂Cr₂O₇ – sidabro dichromatas – dichromo rūgšties H₂Cr₂O₇ druska; Ag₂Cr₃O₁₀ – sidabro trichromatas – trichromo rūgšties H₂Cr₃O₁₀ druska; K₃AlO₃ – kalio aluminatas – aliuminio rūgšties H₃AlO₃ druska; kalcio karbonatas CaCO₃ – anglies rūgšties H₂CO₃ druska; kalio nitratas KNO₃; švino nitratas Pb(NO₃)₂, sidabro nitratas AgNO₃, Al(NO₃)₃ – aliuminio nitratas – visi keturi junginiai yra azoto rūgšties HNO₃ druskos; kalio ir kalcio ortofosfatai K₃PO₄ ir Ca₃(PO₄)₂ – ortofosforo rūgšties H₃PO₄ druskos; kalio metafosfatas K₃(PO₃)₃ – metafosforo rūgšties H_n(PO₃)_n druska; stroncio metatitanatas SrTiO₃ – metatitano H₂TiO₃

rūgšties druska; kalcio silikatas Ca_2SiO_4 , natrio silikatas Na_2SiO_3 – silicio dioksido SiO_2 junginiai su metalų oksidais.

Silikatai – labiausiai paplitę mūsų planetoje mineralai. Jie sudaro virš 75% Žemės plutos masės. Tai kristalinės struktūros, apie kurias bus kalbama 1.9.1.4. skyrelyje, todėl čia apsiribosiu tik pastaba, kad pagal radikalo $(\text{SiO}_4)^{4-}$ tipą silikatai skirstomi į 5 poklasius: 1) ortosilikatai ir diortosilikatai; 2) ciklosilikatai (metasilikatai ir dimetasilikatai), 3) grandininės juostinės struktūros metasilikatai, 4) sluoksniuotos struktūros dimetasilikatai, 5) karkasinės struktūros silikatai. Taigi, kaip jau buvo minėta šiame skyrelyje, lyginant organinius junginius su silicio junginiais, pastariesiems irgi būdinga asocijuotis į ilgas grandines, žiedus, medžius, karkasines struktūras. **Dar neaišku, ar silicio pagrindu galima sukonstruoti „gyvą medžiagą“, panašią į tą, kuri egzistuoja anglies pagrindu, tačiau jau dabar aišku, kad silicio pagrindu galima sukurti sudėtingas struktūras, naudojamas šiuolaikinėje mikroelektronikoje.**

Kai kurių panašių savybių galima rasti ir fosforo, priklausančio jau kitam periodinės cheminių elementų sistemos pogrupiui nei anglis ir silicis, junginiuose – metafosfatuose, polifosfatuose. Tai iliustruoja 63 pav. kairėje pusėje atvaizduotos linijinio polifosfato, o dešinėje – židinio metafosfato struktūrų, kuriose Me vaizduoja vienvalentį metalą, supaprastinti modeliai – tų struktūrų projekcijos.



63 pav.

Priesaga „at–“ vartojama ir pavadinime „hidratas“, tačiau jau visai kita prasme kaip bromatas, sulfatas, nitratas, aluminatas ar titanatas.

Hidratai – tai kietos ir skystos medžiagos, sudarytos iš oksidų, rūgščių, bazių, druskų, organinių junginių bei vieningų medžiagų molekulių, kurias elektrostatinės ir van der Valso jėgos sieja su nesuskaidytomis vandens molekulėmis. Hidratai gali būti apibrėžtos ir neapibrėžtos sudėties. Apibrėžtos sudėties hidratų pavyzdžiai: $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $\text{Ba}(\text{OH})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, $\text{Cl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Neapibrėžtos sudėties hidratų pavyzdžiai: $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot x(\text{H}_2\text{O})$, $\text{SiO}_2 \cdot x(\text{H}_2\text{O})$. Čia x – vandens molekulių skaičius, kuris gali būti įvairus ir gali keistis.

Hidratų pavyzdys rodo, kad chemijos terminologijoje ne tik priešdėliai, bet ir priesaga „at–“ gali būti vartojama nevienareikšmiškai. Galima rasti ir priesagos „id–“ vartojimo platesnė (negu buvo ką tik nurodyta) prasme pavyzdžių.

Kai nemetalų ir pusmetalų atomų oksidų junginiuose su teigiamai poliarizuotais kitų elementų atomais ar jų grupėmis **nemetalų ir pusmetalų oksidacijos laipsnis yra šiek tiek mažesnis** už tą, kurį jie turi junginiuose su priesaga „at–“, tai tokių junginių, priklausančių druskų ir esterių klasėms, pavadinimuose **vietoj priesagos „at–“ vartojama priesaga „it–“**. Taip buvo sudaryti žinomi junginių pavadinimai: chloritai, sulfitai, nitritai ir pan. Tokių junginių pavyzdžiai: kalio chloritas KClO_2 – chloritinės rūgšties HClO_2 druska; natrio sulfitas Na_2SO_3 – sulfitinės rūgšties H_2SO_3 druska; kalio nitritas KNO_2 ir kalcio nitritas $\text{Ca}(\text{NO}_2)_2$ – abu junginiai yra nitritinės rūgšties druskos; etilo nitritas $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONO}$ ir pentilo nitritas $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{ONO}$ – abu junginiai yra **esteriai**, t. y. nitritinės rūgšties ir alkoholio junginiai. Apie alkoholius ir esterius dar bus kalbama vėliau, nagrinėjant organinius junginius.

Priesaga „it–“ cheminėje ir mineraloginėje terminologijoje vartojama gana plačiai ir ne tik čia aprašyta prasme, kas dar kartą patvirtina jau nekartą išsakytą teiginį apie cheminės terminologijos daugiareikšmiškumą.

Kai nemetalų ir pusmetalų atomų oksidų druskose, rūgštyse bei esteriuose tų nemetalų ir pusmetalų oksidacijos laipsnis yra didesnis už tą, kurį tie elementai turi analogiškuose junginiuose, turinčiuose pavadinimą su priesaga „at–“ (t. y., tampa pats didžiausias), tai **tų junginių pavadinimai gaunami iš pavadinimų su priesaga „at–“, pridedant priešdėlį „per–“**.

Pavyzdžiui, chloro rūgšties HClO_3 druska KClO_3 vadinama kalio chloratu. Jame chloro oksidacijos laipsnis yra +5. Tą patį oksidacijos laipsnį chloras turi ir chloro rūgštyje. Junginyje KClO_4 , kuris yra rūgšties HClO_4 kalio druska, chloro oksidacijos laipsnis yra +7, t. y. didesnis negu kalio chlorate. Todėl druską KClO_4 vadina kalio **perchloratu**, o rūgštį HClO_4 – **perchloro** rūgštimi. Analogiškai, amonio druska $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$, kurioje sieros oksidacijos laipsnis yra lygus +6, vadinama

amonio sulfatu, o to paties amonio druska $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$, kurioje sieros oksidacijos laipsnis yra +7, vadinama amonio **persulfatu**.

Kai nemetalų ir pusmetalų bei kai kurių metalų oksidų junginiuose su teigiamai poliarizuotais atomais bei jų grupėmis tų atomų bei jų grupių **oksidacijos laipsnis gaunamas dar mažesnis negu junginiuose, kurių pavadinimuose vartojama priesaga „-it-“**, tai prie žodžio su priesaga „-it-“ pridedamas **priešdėlis „hipo-“**, reiškiantis buvimą po ko nors, ko nors sumažėjimą. Taip atsiranda tokie pavadinimai kaip „hipochloritai“, „hipofosulfitai“ ir t. t. Tokių junginių pavyzdžiai: kalio hipochloritas KClO – hipochloritinės rūgšties HClO druska, natrio hiposulfitas $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4$ – hiposulfitinės rūgšties $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_4$ druska ir t. t.

Ryšį tarp elementų oksidacijos laipsnio jų druskose ir tarp priesagų „-id-“, „-at-“, „-it-“ bei priešdėlių „per-“ ir „hipo-“ vartojimo tų druskų pavadinimuose pailiustruosiu tokiu pavyzdžiu.

VIIA pogrupio elemento chloro atomo elektroninio apvalkalo išorinį sluoksnį sudaro 7 elektronai, iš kurių 2 priklauso posluoksniui 3s ir 5 – posluoksniui 3p. Chloro atomas, sąveikaudamas su IA ir IIA pogrupių s elementais, gali atimti iš jų bei prisijungti „okteto“ sudarymui išoriniame sluoksnyje reikalingą elektroną ir tapti neigiamu jonu Cl^- , tačiau, sąveikaudamas su deguonimi, esančiu rūgštyse ir druskose, chloro atomas gali prarasti dalį ar net visus penkis išorinio sluoksnio posluoksnio 3p elektronus, o kartais – dar ir paskutinius du išorinio sluoksnio elektronus, priklausančius posluoksniui 3s, tokiu būdu išgydamas teigiamą oksidacijos laipsnį, lygų +7.

Taip gaunamos druskos: 1) chloro (VII) junginys $\overset{+1}{\text{K}}\overset{+7}{\text{Cl}}\overset{-2}{\text{O}_4}$ – kalio **perchloratas**; 2) chloro (V) junginys $\overset{+1}{\text{K}}\overset{+5}{\text{Cl}}\overset{-2}{\text{O}_3}$ – kalio **chloratas**; 3) chloro (III) junginys $\overset{+1}{\text{K}}\overset{+3}{\text{Cl}}\overset{-2}{\text{O}_2}$ – kalio **chloritas**; 4) chloro (I) junginys $\overset{+1}{\text{K}}\overset{+1}{\text{Cl}}\overset{-2}{\text{O}}$ – kalio **hipochloritas** ir, galų gale, 5) junginys $\overset{+1}{\text{K}}\overset{-1}{\text{Cl}}$, vadinamas kalio **chloridu**, kuriame chloro oksidacijos laipsnis yra –1.

Kai druskų molekulėse **kai kurie (bet ne visi) metalo atomai pakeičiami vandenilio atomais**, tai gaunamos taip vadinamų **rūgščiųjų druskų** molekulės, ir tokių junginių pavadinimuose atsiranda **priešdėlis „hidro-“**. Tokių junginių ir tokių pavadinimų pavyzdžiai: NaHSO_3 – natrio hidrosulfitas; NaHSO_4 – natrio hidrosulfatas; $\text{Ca}(\text{HSO}_3)_2$ – kalcio hidrosulfitas; K_2HPO_4 – kalio monohidrofosfatas (gaunamas pakeitus fosforo rūgštyje H_3PO_4 du vandenilio atomus kalio atomais); KH_2PO_4 – kalio dihidrofosfatas (gaunamas pakeitus kalio ortofosfate K_3PO_4 du kalio atomus dviem vandenilio atomais); CaHPO_4 – kalcio monohidrofosfatas; $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ – kalcio dihidrofosfatas ir t. t.

Priešdėlis „hidro-“ vartojamas ir su žodžiu „oksidas“, ir tokiu būdu gaunamas pavadinimas **„hidroksidas“, reiškiantis metalo junginį su hidroksilo grupe OH** (t. y. su grupe „-O-H“). Hidroksidai susidaro reaguojant metalų oksidams su vandeniu. Bendroji hidroksidų formulė $\text{Me}(\text{OH})_n$, kur Me – metalo atomas, n – metalo valentingumas. Hidroksidų pavyzdžiai: $\text{Mg}(\text{OH})_2$ – magnio hidroksidas (brusitas), NaOH – natrio hidroksidas (natrio šarmas), $\text{Al}(\text{OH})_3$ – aliuminio hidroksidas (hidrargilitas). Hidroksidai, kurie gaunami, jungiant bazinius oksidus su vandeniu, yra mūsų jau minėtos bazės (tame tarpe ir IA ir IIA pogrupių metalų hidroksidai – **šarmai**), tačiau kai kurių metalų (berilio, cinko, aliuminio, galio) hidroksidai yra amfoteriniai junginiai, kuriems disocijuojant atskyra ir HO^- ir H^+ jonai. Amfoteriniai hidroksidai gaunami, jungiantis su vandeniu jau minėtiems amfoteriniams oksidams Al_2O_3 , TiO_2 , PbO_2 ir pan.

Taigi, ir priešdėlis „hidro-“ chemijoje vartojamas gana įvairiai (t. y. jo vartojimas nėra griežtai apibrėžtas), nors intuityviai jo prasmę kiekvienu atveju galima nustatyti iš konteksto, žinant, kad žodelytis „hidro-“ savo prasme surištas su vandeniu arba su išvestiniu žodžiu „Hydrogenium“, reiškiančiu vandenilį.

Kai molekulės formulėje šalia teigiamai poliarizuoto atomo simbolio (pavyzdžiui, šalia metalo simbolio druskos molekulės formulėje ir pan.) atsiranda deguonies simbolis, tai tokio junginio pavadinime prie jo antrojo žodžio pridedamas **priešdėlis „oksi-“**. Tokių formulių ir tokių pavadinimų pavyzdžiai: BiONO_3 – bismuto oksinitratas – azoto rūgšties HNO_3 druska, COS – anglies oksisulfidas, kurio formulė, gaunama iš anglies disulfido formulės CS_2 , pakeitus joje vieno sieros atomo simbolį S tame pačiame periodinės lentelės stulpelyje esančio deguonies simboliu O.

Kai druskų molekulių neigiamojoje grupėje deguonies atomą pakeičia sieros atomas, tai prie cheminio junginio antrojo žodžio prijungiamas **priešdėlis „tio-“**. Pavyzdžiui, natrio sulfato molekulės formulėje Na_2SO_4 pakeitę vieną deguonies atomą tam pačiam periodinės lentelės stulpeliui priklausančios sieros atomu, gauname natrio tiosulfato $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ formulę.

Chemijoje priesaga „-id-“ vartojama ir su žodžiu „metalas“. Gaunamas žodis **„metalidai“**.

Siaurąja prasme šis žodis reiškia cheminius junginius, susidarancius jungiant metalų atomus metališkuoju ryšiu. Tokie cheminiai junginiai sudaro atskirą grupę, kuri nepatenka nė į vieną iš mūsų

jau paminėtų ir trumpai apibūdintų grupių. Apie tokius **metalidus ir jų kristalines struktūras** bus kalbama 1.9.1.4. skyrelyje.

Tačiau dažniausiai šis žodis vartojamas platesne prasme, ir metalidai apibrėžiami kaip cheminiai junginiai, susidarantys jungiant bet kurių elementų atomus metališkaisiais cheminiais ryšiais. Tuomet į metalidų klasę patenka ne tik mūsų jau minėtieji **metalidai siaurąja prasme**, bet ir metališkieji hidridai (pavyzdžiui, titano, vanadžio ir kitų pereinamųjų metalų metališkieji junginiai su vandeniliu) bei tokie junginiai, kaip titano karbidas TiC, niobio nitridas NbN, hafnio fosfidas HfP, cirkonio karbidas ZrC, titano nitridas TiN, volframo karbidas W₂C, titano fosfidas TiP ir eilė kitų junginių, priklausančių jau anksčiau išskirtoms cheminių junginių klasėms.

Toks neorganinių **cheminių junginių klasių persidengimas – būdingas dabar egzistuojančioms neorganinių cheminių junginių klasifikavimo sistemoms** reiškinys, todėl cheminių junginių klasių persidengimo reiškinių galima rasti ir daugiau. Juk tą patį sieros vandenilį galima vadinti ir vandenilio sulfidu H₂S ir sieros hidridu SH₂, priskiriant jį ir vienai ir kitai cheminių junginių klasei. Tokie reiškiniai rodo, jog **neorganinių cheminių junginių klasifikavimo požymiai pasirinkti nepakankamai tobulai, o taip pat tai, kad ir pati jų klasifikavimo sistema nėra tobula, nes joje ne kiekvienas cheminis junginys turi vieną ir tik vieną griežtą apibrėžtą vietą.**

Ši tokios klasifikavimo sistemos trūkumą galima pastebėti ne tik cheminių junginių klasifikavimo pagal juose esantį elektroneigiamesnį elementą sistemoje, kurioje išskiriami jau minėtieji chloridai, karbidai, arsenidai, nitridai ir t. t., karbonatai, silikatai, titanatai, aliuminatai ir t. t., nitritai, sulfidai, chloritai ir t. t., bet ir klasifikavimo sistemoje pagal neorganinių cheminių junginių savybes, išskiriančioje tokias cheminių junginių klases kaip mūsų jau minėtos **rūgštys, bazės, druskos, oksidatoriai, reduktoriai**. Reikėtų pažymėti, jog **ne visų chemikų nuomonės sutampa, apibrėžiant pačias šių klasių sąvokas**, o patys tie apibrėžimai laikas nuo laiko tobulinami ir vis dar nėra universalūs. Pavyzdžiui, iki šiol egzistuoja šiek tiek **skirtingos rūgščių ir bazių teorijos** (Arenijaus, Brionstedo, Lujo, Laurio, Pirsono).

Kartais sutinkami ir **nepadengimo** reiškiniai: kai kuriems cheminiams junginiams esamose junginių klasėse neatsiranda vietos. Tenka įsivedinėti naujas klases.

Sistemiškai panagrinėjus cheminių junginių įvairovę ir neorganinių junginių sąveikavimą su organiniais, nesunku įsitikinti, jog, kaip jau buvo minėta, pats cheminių junginių skirstymas į organinius ir neorganinius nėra tobulas ir todėl gali būti pateisinamas tik istoriškai bei didele organinių junginių gausa, jų įvairove ir svarba. Žinoma, galima (ir tikslinga) nagrinėti, organinius junginius kaip atskirą cheminių junginių klasę (tuo labiau, kad organiniai junginiai turi ryškiai išreikštą specifiką), tačiau vargu ar tikslinga cheminių junginių skirstymo į organinius ir neorganinius požymį priimti kaip patį pagrindinį sisteminį požymį, **bandant sukurti visus cheminius junginius apimančią antrojo tipo sistemą, kurioje kiekvienas cheminis junginys atsidurtų tik jam skirtoje vietoje**, kaip, pavyzdžiui, kiekvienas cheminis elementas atsiduria tik jam skirtoje vietoje periodinėje cheminių elementų sistemoje, kurią jau galima pavadinti antrojo tipo sistema. **Cheminių junginių aibe antrojo tipo sistema dar nesukurta, ir tokios sistemos sukūrimo uždavinys yra žymiai sunkesnis negu periodinės cheminių elementų sistemos sukūrimas.** Ir žymiai sudėtingesnis ne tik todėl, kad cheminių junginių aibė yra nepalyginamai gausesnė už cheminių elementų gana nedidelę aibę, bet ir todėl, kad cheminius junginius nebus įmanoma išrikiuoti taip, kaip buvo išrikiuoti cheminiai elementai į vieną eilutę pagal vieną požymį (tegul ir matricos pavidalo: su periodais – eilutėmis bei grupėmis ir pogrupiais – stulpeliais, kad būtų lengviau stebėti dėsningumus toje sistemoje ir jais bei ja naudotis). **Cheminių junginių ir jų struktūrų aibę sistematizuoti tebus įmanoma tik „daugiamatėje erdvėje“, t. y. tik daugelio požymių – klasifikavimo sistemos „koordinacių“ – sistemoje, kurioje patys klasifikavimo požymiai ir jų ryšiai sudarys gana sudėtingą struktūrą, pajėgiančią aprėpti cheminių junginių struktūrų įvairovę ir tos įvairovės augimą, didėjant cheminio junginio komponentų skaičiui ir sudėtingėjant jų struktūrai.** Tokios antrojo tipo sistemos cheminiams junginiams sukūrimo uždavinys tikrai labai sunkus, nes cheminių junginių struktūrų įvairovė yra labai didelė ir labai marga ir, kas svarbiausia, nėra baigtinė ir gali augti tiesiog „kombinatoriškai“. Tačiau **šis uždavinys (bent jau žinomų cheminių junginių aibei) nėra neišsprendžiamas:*** šiuolaikinė kvantinė fizika ir iš jos išplaukianti kvantinė chemija, pasitelkusi šiuolaikinę matematiką ir kompiuterinę techniką bei sudėtingų klasifikavimo sistemų konstravimo patirtį, gali sukurti teorinį tokios antrojo tipo sistemos pagrindą, kuris leistų mokslškai pagrįstai sistematizuoti tą gausybę empirinių faktų, kurią sukaupė iš alchemijos išaugęs chemijos mokslas. Šio uždavinio sprendimas, žinoma, jau ne pavienio genijaus, o didelio

* Vienas galimų sprendimo būdų, leidžiančių sukurti tokią konstruojamos ir vis papildomą naujais elementais antrojo tipo sistemos elementų kodavimo ir rikiavimo sistemą, kurią, pildant vis naujais elementais, nereikia keisti jau sukurtos sistemos ir joje esančios elementų išdėstymo tvarkos, aprašytos šios mokymo priemonės 1.5.11. skyrelyje.

kompleksinio mokslinio kolektyvo darbas, kuriame pavieniai genijai galėtų pasireikšti, generuodami naujas principines idėjas, sintezuojančias chemijos mokslo pastebėtus dėsningumus ir matematinį kvantinės fizikos aparatą, tobulindami pastarąjį. Tokio kolektyvo darbe galėtų naudingai dalyvauti ir sistemo tyros specialistai, plėtodami ir taikydami sisteminę metodologiją, besiformuojančios struktūrų algebros matematinį aparatą.

Na, o dabar, kol dar nesukurta cheminių junginių antrojo tipo sistema, apžvelgiant tipines tų junginių struktūras tenka naudotis egzistuojančiomis jų klasifikavimo sistemomis, nors jos ir nepakankamai tobulos.

Pereisiu prie **organinių cheminių junginių struktūrų bei tų junginių tipų** nagrinėjimo ir jų pavadinimų formulavimo taisyklių apžvalgos.

Apžvelgti visą tikrai milžinišką organinių cheminių junginių ir jų struktūrų įvairovę šioje mokymo priemonėje neįmanoma ir to nesiekama, nes tam prireiktų specialios gana didelės ir rimtos studijos, kurią galėtų parengti jau ne sistemo tyros, o chemijos specialistai (galbūt dalyvaujant ir sistemo tyros specialistams).

Čia apsiribosiu tik kai kurių svarbiausių organinių cheminių junginių klasių ir joms būdingų tipinių struktūrų bei jų santykių, žinotinų studijuojantiems sistemo tyra, apžvalga.

Pradėsiu nuo pačios paprasčiausios sudėties atžvilgiu ir vienos įdomiausių ir darniausių struktūros atžvilgiu organinių junginių klasės – **angliavandenilių klasės**. Kadangi iš **angliavandenilių molekulių, keičiant anglies atomus deguonies, azoto, sieros, fosforo bei kitų elementų atomais, o vandenilio atomus metalais, halogenais bei pačių angliavandenilių radikalais ir įvairiomis funkcinėmis grupėmis, galima gauti gana daug įvairių cheminių, junginių priklausančių kitoms klasėms bei tai pačiai angliavandenilių klasei, tai angliavandenilių klasės analizės rezultatai vėliau padės ir analizuojant kitų junginių klases bei jų tipines struktūras.**

Angliavandeniliai vadinami anglies ir vandenilio cheminiai junginiai, kurių struktūrų pagrindą sudaro grandinės, medžiai, ciklai bei tinklai (karkasai) iš anglies atomų, susijungusių vienas su kitu viengubaisiais, dvigubaisiais, o kartais – net trigubaisiais ryšiais ir prisijungusių prie savęs po tris, du ar vieną vandenilio atomą. Jau minėtasis metanas CH_4 – taip pat angliavandenilis.

Kai angliavandenilio molekulės struktūroje nėra ciklų, tai tokie angliavandeniliai vadinami **acikliniais**, o angliavandeniliai, kurių molekulės turi žiedų (ciklų), sudarytų iš anglies atomų, vadinami **cikliniais**.

Angliavandeniliai, kurių molekulėse ryšiai tarp anglies atomų yra tik viengubieji, vadinami **sočiaisiais**, o tuos angliavandenilius, kurių molekulės turi nors vieną dvigubąjį ar trigubąjį ryšį tarp anglies atomų, – **nesočiaisiais**.

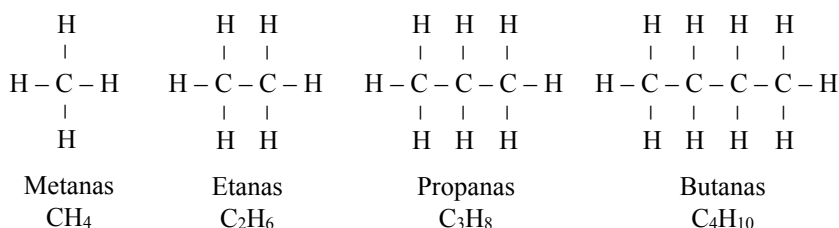
Įrodysime, jog sočiųjų aciklinių angliavandenilių (**alkanų, parafinų**) molekulės formulė turi būti $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$, kur n – anglies atomų molekulėje skaičius ($n=1, 2, 3, 4, \dots$).

Kadangi sočiųjų aciklinių angliavandenilių molekulių struktūros pagrindą sudaro medžiai T_n (bei jų dalinis atvejis – grandinės P_n) iš anglies atomų, kurių struktūrose, kaip jau buvo įrodyta 1.9.1.1. skyrelyje, yra $n-1$ briaunų, tai reiškia, jog sočiųjų angliavandenilių molekulėse tarp n anglies atomų egzistuoja $n-1$ viengubųjų ryšių, jungiančių kaimyninius anglies atomus, t. y. sujungiančių kovalentinių ryšių po vieną tų atomų išorinį elektroną į kovalentinių elektronų porą. Tai reiškia, jog, sudarant tokį ryšį, kiekvienas anglies atomas išieškoja po vieną valentingumo vienetą, o iš viso visiems kovalentiniais ryšiams tarp kaimyninių anglies atomų visi anglies atomai išieškoja $2(n-1)$ valentingumo vienetų. Kadangi anglis organiniuose junginiuose yra keturvalentė, tai n anglies atomų turi $4n$ valentingumo vienetų, iš kurių, išieškojus tarpusavio ryšiams $2(n-1)$ valentingumo vienetus, ryšiams su vandeniliu lieka $4n-2(n-1)=2n+2$ valentingumo vienetai. Kadangi vandenilio valentingumas lygus 1, tai išplaukia, jog **sočiojo aciklinio angliavandenilio molekulėje, turinčioje n anglies atomų, turi būti $2n+2$ vandenilio atomai, t. y. tos molekulės bendroji formulė turi būti $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$.**

Išvesdami alkanų molekulės bendrąją formulę, naudojome grafų, vadinamų medžiais T_n , savybę. Istoriskai gi medžio T_n sąvoka atsirado vėliau negu sočiųjų angliavandenilių ir jų izomerų sąvoka ir kilo kaip tik iš pastarųjų nagrinėjimo: 1857 m. A. Kelis (A. Cayley), nagrinėdamas sočiųjų angliavandenilių izomerų bei kitas panašias, tačiau jau heterogenines struktūras, ir norėdamas nustatyti jų galimą skaičių, įvedė medžio T_n sąvoką bei suformulavo visų galimų medžių T_n su duotuoju jų viršūnių skaičiumi radimo uždavinį. 1889 m. jis įrodė 1.9.1.1. skyrelyje minėtą teorema, kad iš $n \geq 2$ skirtingų elementų galima sudaryti n^{n-2} skirtingų medžių T_n , tarp kurių, kai $n \geq 4$, atsiranda ir neizomorfiškų struktūrų, kurių skaičius, didėjant n , sparčiai didėja. Šis istorijos faktas dar kartą iliustruoja bendrasisteminę tiesą, jog **ryšiai tarp mokslų visada buvo, yra ir bus abipusiai naudingi.**

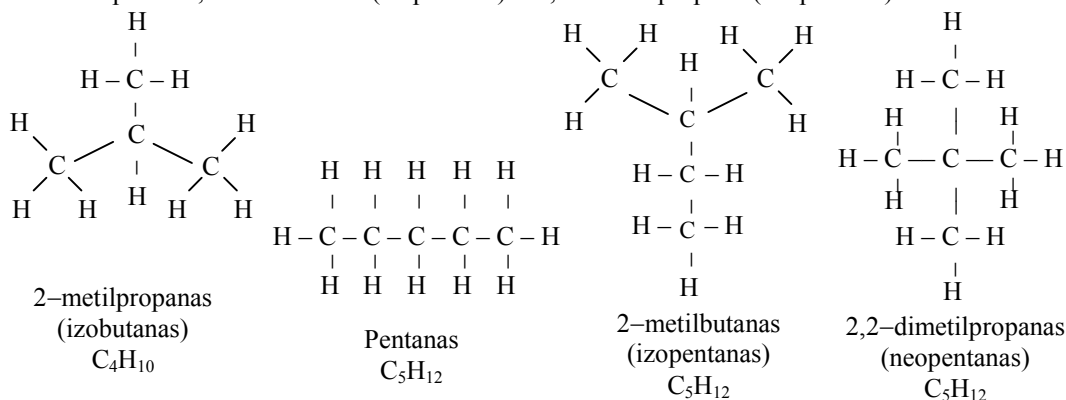
Sočiųjų angliavandenilių pavadinimai sudaromi su **priesaga „-an-“**: CH_4 – metanas, C_2H_6 – etanas, C_3H_8 – propanas, C_4H_{10} – butanas. Šių alkanų molekulių sandaros formulės vaizduojamos 64 pav. Analogiškai sudaromos pentano ir kitų alkanų formulės.

Kadangi, kaip buvo parodyta 1.9.1.1. skyrelyje, pradedant nuo $n \geq 4$, medžiai T_n gali turėti po kelias neizomorfiškas struktūras, tai, **pradedant nuo $n \geq 4$, alkanai gali turėti sandaros izomerų**, apie kuriuos jau buvo rašyta tame pačiame 1.9.1.1. skyrelyje (žiūr. 55 pav.).



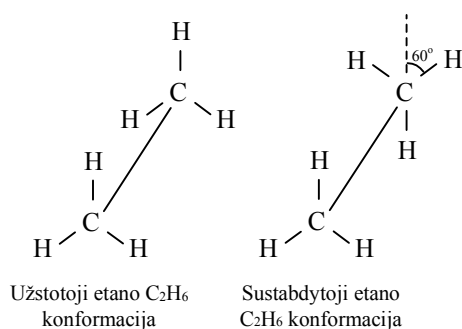
64 pav.

Pavyzdžiui, kai $n=4$, tai egzistuoja dvi neizomorfiškos medžio T_4 struktūros: P_4 ir $K_{1,3}$. Todėl butano C_4H_{10} molekulė turi dvi neizomorfiškas struktūras – du **sandaros izomerus**. Vienas izomeras, kurio anglies atomai sudaro grandinę P_4 , vadinamas tiesiog butanu. Kitas izomeras, kurio anglies atomai sudaro žvaigždę $A_3 \equiv K_{1,3}$, vadinamas izobutanu (2-metilpropanu). Butano molekulės formulės pavaizduotos 64 pav., o izobutano – 65 pav. kartu su trijų pentano C_5H_{12} izomerų molekulių formulėmis: pentano, 2-metilbutano (izopentano) ir 2,2-dimetilpropano (neopentano).



65 pav.

Alkanų izomerija gali atsirasti ne tik **dėl medžių T_n , sudarytų iš anglies atomų, galimo neizomorfiškumo**, bet ir dėl **stereochemijoje** nagrinėjamos **molekulių atomų bei jų grupių skirtingos padėties erdvėje vieni kitų atžvilgiu**. Taip, pavyzdžiui, gaunami **posūkio izomerai**, kartais vadinami **konformerais**. Pavyzdžiui, etano C_2H_6 molekulė, kurios **sandaros formulė** atvaizduota 64 pav., gali turėti du posūkio izomerus – **konformacijas**: užstotąją ir sustabdytąją.



66 pav.

Užstotoje konformacijoje (žiūr. 66 pav.) vandenilio atomai, sujungti su pirmuoju anglies atomu, yra išsidėstę kaip tik priešais antrojo anglies atomo atitinkamus vandenilio atomus, t. y. užstoja vieni kitus. Todėl stūmos jėga tarp jų elektronų (o kartu ir potencinė jų sąveikos energija) yra didžiausia.

Sustabdytoje konformacijoje minėtieji vandenilio atomai yra ne priešais vienas kitą, o pasukti 60° kampu vienas kito atžvilgiu (žiūr. 66 pav.) ir todėl yra išsidėstę toliausiai vienas nuo kito. Tuomet jų sąveikos jėga (o kartu ir potencinė energija) yra mažiausia, ir todėl etano molekulė tokioje būsenoje gali išbūti ilgiausiai.

Skirtingų konformacijų izomerai turi tas pačias chemines savybes, tačiau jų **molekulės skiriasi savo stabilumo lygiu** ir todėl negali būti laikomos tapačiomis.

Konformerų egzistavimo faktas rodo, jog molekulių (ir, bendrai, sistemų) būseną ir savybės gali keisti net tada, kada sistemos struktūra išlieka izomorfiška tiesioginių tarpatominių ryšių atžvilgiu, bet keičiasi atomų (bei jų grupių) padėtis molekulėje vienas kito atžvilgiu.

Angliavandenilių molekulėse susidursime ir su kitais **izomerijos erdvėje** atvejais. Iš **erdvinės izomerijos** egzistavimo fakto išplaukia, kad cheminių junginių struktūrų vaizdavimui plokščių struktūrinių formulių, vaizduojančių atomus ir ryšius tarp jų, ne visada pakanka, kad reikalingi tų junginių stereocheminiai modeliai.

Nesotieji acikliniai angliavandeniliai pagal turimų neviengubų jungčių tipą skirstomi į alkenus (etileninius) ir alkinus (acetileninius).

Alkenais (etileniniais angliavandeniliais) vadinami nesotieji acikliniai angliavandeniliai, kurių molekulėse yra nors vienas dvigubasis ryšys ir nėra nė vieno trigubosio ryšio.*

Pagal dvigubųjų ryšių skaičių alkenai skirstomi į paprastuosius alkenus (olefinus), dienus, trienus ir t. t.

Paprastųjų alkenų pavadinimai sudaromi iš alkanų pavadinimų, **pakeitus priesagą „-an-“ į priesagą „-en-“**. Taip alkenai turėtų vadintis, vadovaujantis jau minėtosios JUPAC nutarimu apie chemijos nomenklatūrą. Tačiau gana dažnai tebevartojama ir **senoji priesaga „-ilen-“**. Todėl alkeną C_2H_4 dažnai vadina ne tik etenu bet ir etilenu, alkeną C_3H_6 – propenu ir propilenu, alkeną C_4H_8 – butenu ir butilenu ir t. t.

Paprastųjų etileninių angliavandenilių bendrąją formulę sudarome sumažindami bendrojoje alkanų formulėje vandenilio atomų skaičių dviem vienetais, nes vieno dvigubosio ryšio tarp anglies atomų atsiradimas sumažina vandenilio atomų prijungimui skirtą bendrąjį anglies atomų valentingumo vienetų skaičių lygiai dviem vienetais. Todėl **olefinų molekulių bendroji formulė yra C_nH_{2n}** .

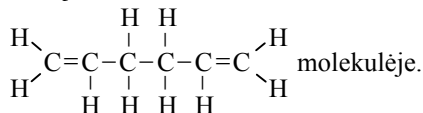
Dienais vadinami alkenai, turintys du dvigubuosius ryšius. Dienų pavadinimai sudaromi panašiai kaip ir paprastųjų alkenų, tik vietoj priesagos „-en-“ („-ilen-“) vartojama **priesaga „-dien-“**. Taip gaunami pavadinimai: „butadienas“, „pentadienas“, „heksadienas“, „heptadienas“, ir pan. **Dienų bendroji formulė C_nH_{2n-2}** .

Pagal dvigubųjų ir paprastųjų ryšių išsidėstymą dieniai skirstomi į 3 grupes.

Pirmoji grupė – dieniai su **kumuluotais dvigubaisiais ryšiais**. Jų molekulėse dvigubieji ryšiai yra greta ir susiję su tuo pačiu anglies atomu, kaip pavyzdžiui, aleno $\begin{array}{c} H & & H \\ & \backslash & / \\ & C=C=C \\ & / & \backslash \\ H & & H \end{array}$ molekulėje.

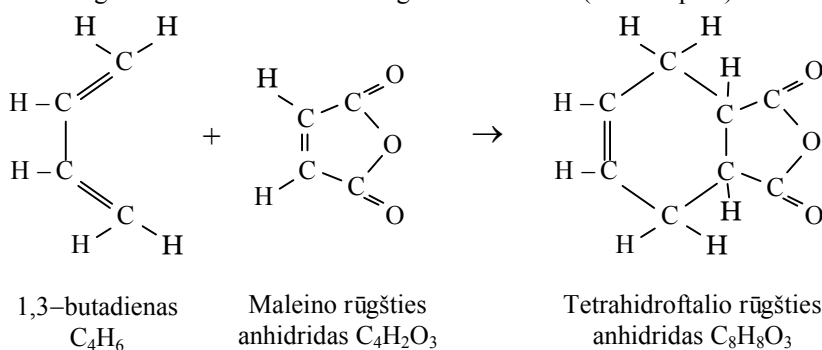
Antroji grupė – dieniai su **konjuguotais dvigubaisiais ryšiais**. Jų molekulėse dvigubieji ir viengubieji ryšiai išdėstyti pakaitomis, kaip, pavyzdžiui, 1,3–butadieno molekulėje, kurios struktūrinės formulės modelis yra $\begin{array}{c} H & & & H \\ & \backslash & & / \\ & C=C & -C=C \\ & / & | & | & \backslash \\ H & & H & H & H \end{array}$.

Trečioji grupė – dieniai su **izoliuotais dvigubaisiais ryšiais**. Jų molekulėse dvigubuosius ryšius vieną nuo kito skiria du ar daugiau viengubųjų ryšių, kaip, pavyzdžiui, dialilo



Dienams būdinga **dieninė sintezė** – dienų jungimosi su nesočiais junginiais (dienofilais) cheminė reakcija, kurios metu susidaro šešianariai ciklai.

Dieninės sintezės pavyzdys – jungimosi reakcija tarp 1,3–butadieno ir maleino rūgšties anhidrido, kurios metu gaunamas tetrahidroftalio rūgšties anhidridas (žiūr. 67 pav.).



67 pav.

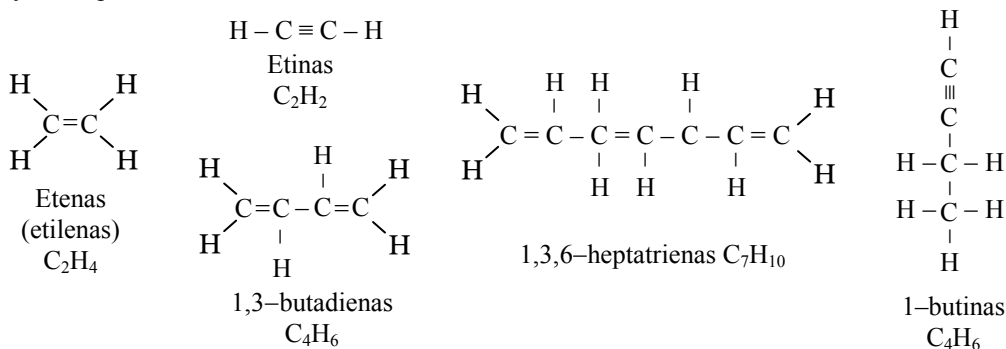
Trienais vadinami alkenai, turintys tris dvigubuosius ryšius. Trienų pavadinimai sudaromi panašiai kaip ir dienų. Tik vietoj priesagos „-dien-“ vartojama priesaga „-trien-“. Taip gaunami pavadinimai: „butatrienas“, „pentatrienas“, „heksatrienas“, „heptatrienas“ ir pan. **Trienų bendroji formulė C_nH_{2n-4}** .

Acetileniniais angliavandeniliais (alkinais) vadinami nesotieji acikliniai angliavandeniliai, turintys trigubųjų ryšių. Jų pavadinimai sudaromi iš alkanų pavadinimų, **pakeičiant priesagą „-an-“ į**

* Keturgubų (ir didesnio skaičiaus) ryšių dėl anglies keturvalentingumo angliavandeniliuose būti negali.

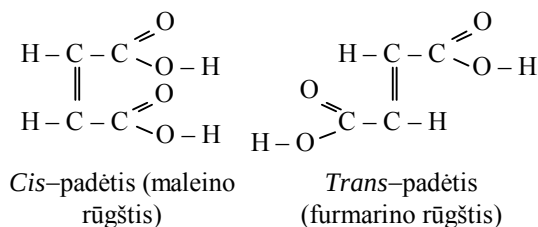
priesagą „-in-“. Taip gaunami pavadinimai: „etinas“, „butinas“ ir pan.

Kadangi alkenuose ir alkinuose, turinčiuose $n > 3$ anglies atomų, dvigubieji bei trigubieji ryšiai cheminio junginio molekulėje gali išsidėstyti įvairiai ir dėl to gali atsirasti **sandaros izomerai**, tai, norėdami atskirti juos vieną nuo kito, prieš alkeno bei alkino pavadinimą rašo **skaičius, nurodančius, po kelinto iš eilės anglies atomo yra dvigubasis ar trigubasis ryšys**. Taip atsiranda pavadinimai: 1,3-butadienas $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$, 1,3,6-heptatrienas $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$, 1-butinas $\text{CH}=\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ ir pan. Šių cheminių junginių, o taip pat eteno ir etino molekulių sandaros formulės parodytos 68 pav.



68 pav.

Cheminiuose junginiuose, turinčiuose dvigubąjį ryšį, atsiranda dar viena izomerijos rūšis – taip vadinamoji **geometrinė izomerija (cistransizomerija)**. Ši izomerijos rūšis gali pasireikšti ir cikliniuose junginiuose, kuriuose dvigubieji ryšiai neleidžia molekulės atomams laisvai suktis. **Geometriniai izomerai** sudaromi, pakeičiant angliavandenilio molekulėje vandenilio atomus, esančius prie anglies atomų, sujungtų dvigubuoju ryšiu, kokiomis nors funkcinėmis atomų grupėmis (alkilais, karboksilo, aldehido, ketono ar pan. grupe*) ir išdėstant jas skirtingai dvigubąjo ryšio atžvilgiu. Funkcinių grupių išsidėstymą vienoje dvigubąjo ryšio pusėje vadina **cis-padėtimi**, o priešingose – **trans-padėtimi**. **Cis-izomero ir trans-izomero** pavyzdžiai – maleino ir fumarino rūgščių molekulių formulės, pavaizduotos 69 pav.



69 pav.

Yra dar viena stereoisomerijos rūšis – **optinė izomerija**. Ją lemia asimetrinis (chiralinis) atomas (dažniausiai anglies) arba pačios molekulės asimetriškumas. Tuomet gali susidaryti du **optiniai izomerai – enantiomerai**, kurių molekulės yra nesutapatinami viena kitos veidrodiniai atspindžiai. Optiniai izomerai turi vienodas chemines savybes, tačiau nevienodas fizikines savybes, nes sukdami vienodu kampu poliarizuotos šviesos plokštumą, suka ją į priešingas puses.

Tie optiniai izomerai, kurie tą plokštumą suka į dešinę, vadinami **dešiniojo sukimo izomerais** ir žymimi ženklų (+), o tie, kurie suka į kairę – **kairiojo sukimo izomerais** ir žymimi ženklų (–). **Geometrinės ir optinės izomerijų egzistavimas verčia dar labiau praplėsti ir pagilinti sistemos struktūros sąvoką.**

Tuo baigsiu aciklinių angliavandenilių ir jų molekulių bei jų struktūrų apžvalgą ir pereisiu prie antrojo angliavandenilių klasės poklasio – ciklinių angliavandenilių.

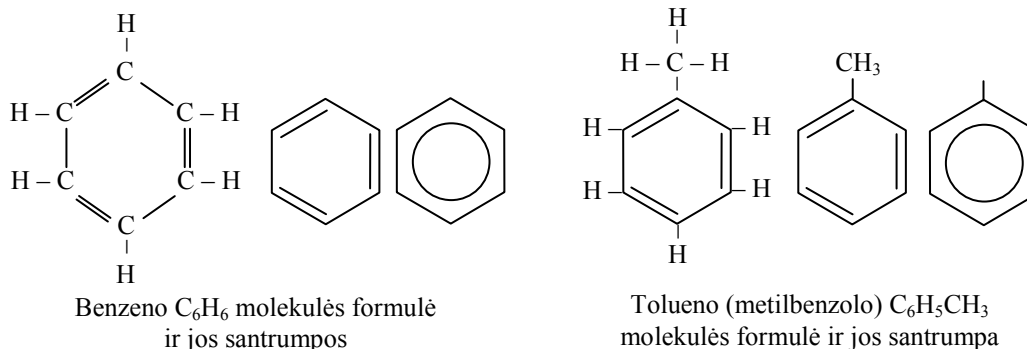
Cikliniai angliavandeniliai – tai angliavandeniliai, kurių molekulių struktūrose yra ciklų. Cikliniai angliavandeniliai skirstomi į **aromatinius ir aliciklinius**.

Prie aromatinių angliavandenilių priskiriami, pavyzdžiui, cikliniai angliavandeniliai, kurių molekulių pagrindą sudaro **šešianariai benzeno žiedai**.

Paprastieji aromatiniai angliavandeniliai turi nors vieną benzeno žiedą. Tokių aromatinių angliavandenilių (benzeno, tolueno) molekulių grafinių formulių pavyzdžiai parodyti 70 pav. Ten pat parodyta, kaip tos formulės vaizduojamos sutrumpintai.

Benzeno žiedas vaizduojamas kaip šešianaris ciklas, kuriame anglies atomai yra išdėstyti to ciklo kampuose (pačių tų atomų galima ir nežymėti) ir yra sujungti pakaitomis tai viengubaisiais, tai dvigubaisiais ryšiais. Tokį vaizdavimo būdą dar 1865 m. pasiūlė F. A. Kekulė, ir jis išliko iki šiol, nors dabar žinoma, kad visi ryšiai tarp anglies atomų benzeno žiede yra vienodi (ir yra tarsi „pusantriniai“). Molekulinės orbitalės yra išplėtos virš žiedo.

* Funkcinės atomų grupės bus aprašytos šiek tiek vėliau.

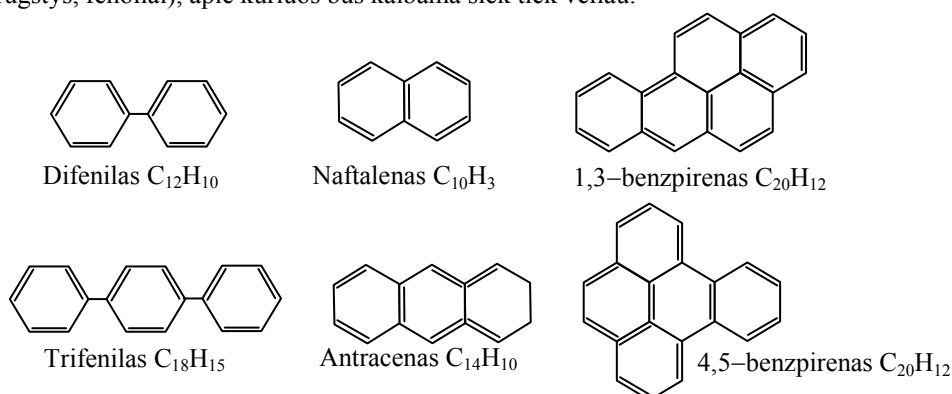


70 pav.

Aromatiniai angliavandeniliai, kurių molekulės turi ne vieną (kaip, pavyzdžiui, benzenas, toluenas, ksilenas ir kiti), o daugiau benzeno žiedų, gali būti **nekondensuoti** (kaip, pavyzdžiui, difenilas, difenilmetanas ir kiti) ir **kondensuoti** (kaip, pavyzdžiui, naftalenas, antracenas, 1,2-benzpirenas, 4,5-benzpirenas ir kiti).

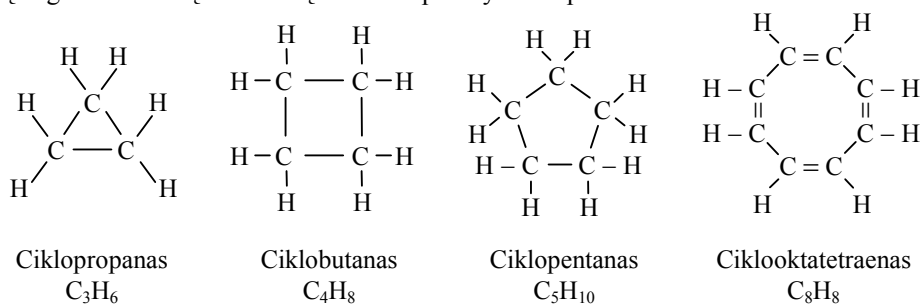
Nekondensuotų (t. y. tokių, kuriuose benzeno žiedai neturi bendrų briaunų) ir kondensuotų (t. y. tokių, kuriuose benzeno žiedai jungiasi tarpusavyje bendromis briaunomis tarsi į korius) aromatinių angliavandenilių molekulių struktūrinių formulių (sutrumpintų taip, kaip buvo parodyta 70 pav.) vaizdavimo pavyzdžiai parodyti 71 pav.

Egzistuoja **aromatiniai angliavandeniliai, neturintys savo molekulių sudėtyje benzeno žiedo** (pavyzdžiui, azulenai $C_{10}H_8$, kurio molekulę sudaro penkianaris žiedas, kondensuotas su septynianariu). Egzistuoja taip pat ne tik aromatiniai angliavandeniliai, bet ir **kiti cheminiai aromatiniai junginiai – aromatinių angliavandenilių dariniai** (aromatiniai nitro junginiai, aromatinės sulfonrūgštys, fenoliai), apie kuriuos bus kalbama šiek tiek vėliau.



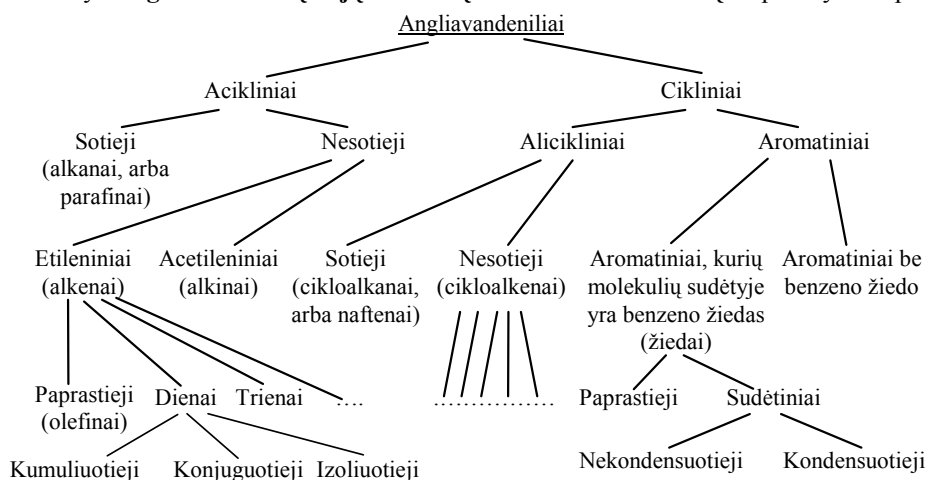
71 pav.

Alicikliniai angliavandeniliai vadinami cikliniai angliavandeniliai, nepriklausantys aromatinių angliavandenilių grupei. Pagal žiedų skaičių molekulėje alicikliniai angliavandeniliai skirstomi į **monociklinius**, **biciklinius**, **triciklinius** ir **policiklinius**; pagal ryšių pobūdį – į **sočiuosius (cikloalkanus)** ir **nesočiuosius (cikloalkenus)**; pagal anglies atomų skaičių žiede – į **trinarius**, **keturnarius**, **penkianarius** ir t. t. Aliciklinių angliavandenilių pavadinimai sudaromi panašiai kaip ir aciklinių, tik prie pavadinimo **pridedamas priešdėlis „ciklo-“**: pavyzdžiui, cikloalkānai – ciklopropanas, ciklobutanas ir t. t.; cikloalkēnai – ciklopropenas, ciklooktatetraenas, kurio molekulės struktūros pagrindą sudaro aštuoniasis ciklas, turintis keturis dvigubuosius ryšius, ir pan. Kai kurių aliciklinių angliavandenilių molekulių formulės parodytos 72 pav.



72 pav.

Baigiant angliavandenilių apžvalgą ir sistematizuojant tai, kas apie juos buvo pasakyta, naudinga susidaryti **angliavandenilių ir jų formulių klasifikavimo schemą**. Ji parodyta 73 pav.



73 pav.

Įdėmesnis skaitytojas, matyt, jau suspėjo pastebėti, jog angliavandenilių formulės galėtų būti išrikiuotos į **dėsningai sudarytas sekas – eiles**. Tokios eilės būdingos ne tik angliavandeniliams, bet ir jų dariniams – kitiems organiniams junginiams. Išskiriamos trys organinių junginių eilių rūšys: genetinės, homologinės ir izologinės eilės.

Genetinės eilės sudaro grupės angliavandenilių darinių, turinčių molekulėse po **ties pat anglies atomų, bet skirtingas funkcines grupes**. Pavyzdžiui, metano genetinę eilę sudaro: metanas CH_4 , metilo chloridas (chlormetanas) CH_3Cl , metilo alkoholis CH_3OH ir t. t.; etano genetinę eilę sudaro: etanas C_2H_6 , etilo chloridas $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$, etilo alkoholis $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ir t. t.

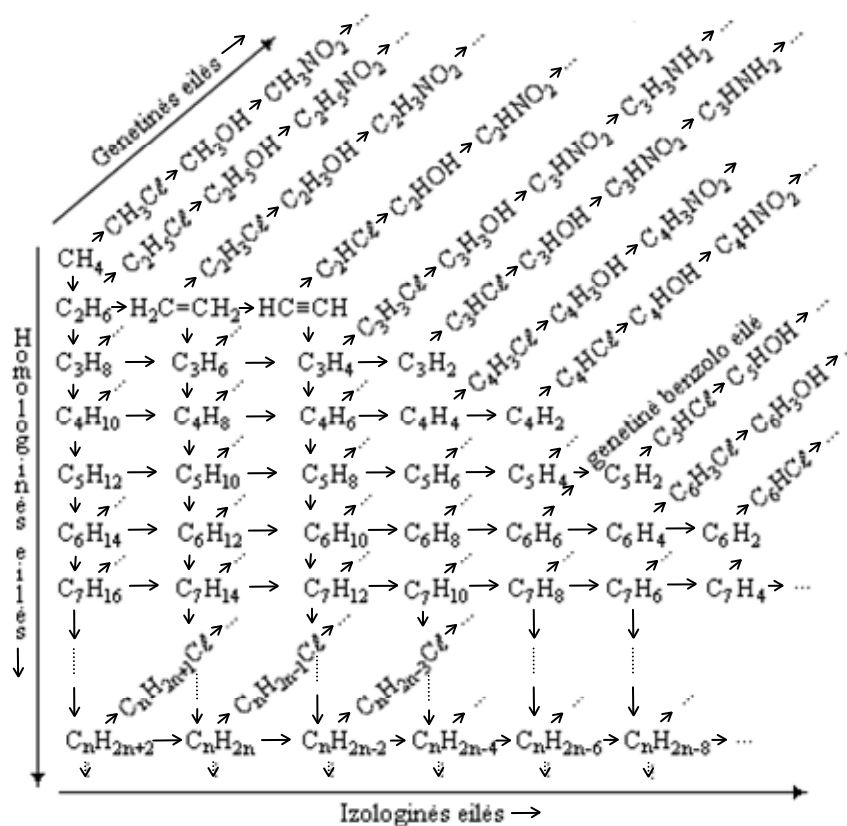
Homologinės eilės sudaro angliavandeniliai bei jų dariniai, besiskiriantys metileno grupių – CH_2 – skaičiumi, bet, turintys **panašias molekulių struktūras, kurias galima aprašyti bendromis formulėmis**, bei **iš struktūrų panašumo išplaukiančias panašias chemines savybes**. Pavyzdžiui, **alkanai**, kurių molekulėse visi anglies atomai viengubais ryšiais sujungti į paprastą grandinę P_n , dėl ko vandenilio atomų molekulėje skaičius yra lygus $(n-2) \cdot 2 + 2 \cdot 3 = 2n+2$ ir todėl alkanų molekulių sudėties bendroji formulė yra $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$. Alkanai sudaro homologinę eilę: metanas CH_4 , etanas C_2H_6 , propanas C_3H_8 , butanas C_4H_{10} , pentanas C_5H_{12} ir t. t. Kitą homologinę eilę sudaro etileniniai angliavandeniliai – **olefinai**, kurių molekulių sudėties bendroji formulė yra C_nH_{2n} , nes olefinų molekulių anglies atomų grandinės turi po vieną dvigubą ryšį, dėl ko vandenilio atomų skaičius jose yra lygus $(n-4) \cdot 2 + 2 \cdot 1 + 2 \cdot 3 = 2n$. Tos eilės nariai: etenas (etilenas) C_2H_4 , propenas (propilenas) C_3H_6 , butenas (butilenas) C_4H_8 , pentenas C_5H_{10} ir t. t. Trečią homologinę eilę sudaro dieniniai angliavandeniliai (**dienai**), turintys po du dvigubuosius ryšius ir bendrąją formulę $\text{C}_n\text{H}_{2n-2}$. Panašią homologinę eilę sudaro acetileniniai nesotieji angliavandeniliai (**alkinai**), turintys savo molekulių sudėtyje po vieną trigubąjį ryšį ir bendrąją formulę $\text{C}_n\text{H}_{2n-2}$. Tos eilės nariai: etinas (acetilenas) C_2H_2 ($\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$), propinas C_3H_4 , butinas C_4H_6 ir t. t. Egzistuoja homologinės eilės, turinčios bendrąsias formules $\text{C}_n\text{H}_{2n-4}$, $\text{C}_n\text{H}_{2n-6}$, $\text{C}_n\text{H}_{2n-8}$.

Homologinės eilės gali sudaryti ne tik angliavandeniliai bet ir jų dariniai. Pavyzdžiui, egzistuoja sočiųjų monohidrosilių alkoholių, turinčių bendrąją formulę $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{OH}$ homologinė eilė; sočiųjų monokarboksi-rūgščių, turinčių bendrąją formulę $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{COOH}$ homologinė eilė; sočiųjų aminių, turinčių bendrąją formulę $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{NH}_2$, homologinė eilė ir pan.

Izologinės eilės sudaro angliavandenilių ir kitų organinių junginių grupės, kurių nariai **turi tą patį anglies atomų skeletą ir tas pačias funkcines grupes, tačiau skiriasi vienas nuo kito nesotumo laipsniu**. Pavyzdžiui, etano izologinę eilę sudaro: etanas C_2H_6 , etenas (etilenas) C_2H_4 , etinas (acetilenas) C_2H_2 ; propano izologinę eilę sudaro: propanas C_3H_8 , propenas (propilenas) C_3H_6 , propinas C_3H_4 ir t. t.

Tarp genetinių, homologinių ir izologinių eilių egzistuoja tarpusavio ryšys. Tą ryšį ir pačias angliavandenilių bei kai kurių jų darinių eiles iliustruoja 74 pav.

Kaip jau buvo ne kartą minėta, iš angliavandenilių galima sudaryti įvairių **angliavandenilių darinių**. Vienas iš būdų tokių darinių formulėms gauti – **angliavandenilių formulėse vieno ar kelių vandenilio atomų pakeitimas atitinkamomis atomų grupėmis, t. y. angliavandenilių radikalų R sujungimas su tomis grupėmis**.



74 pav.

Angliavandenilio radikalų R vadinama angliavandenilio molekulės liekana, kuri gaunama, atėmus iš tos molekulės vieną arba kelis vandenilio atomus. Organinių junginių radikalų pavadinimai gaunami iš tų junginių pavadinimų, įvedant priesagą „-il-“ (pavyzdžiui, metano CH_4 vienvaleintis radikalas $\text{CH}_3\cdot$ vadinamas metilu; etano C_2H_6 radikalas $\text{C}_2\text{H}_5\cdot$ vadinamas etilu; propano C_3H_8 radikalas

$\text{C}_3\text{H}_7\cdot$ vadinamas propilu; metano divaleintis radikalas $\cdot\text{C}-$ vadinamas metilenu ir t.t.). Sočiųjų

angliavandenilių radikalai vadinami **alkilais**, aromatinių – **arilais**.

Radikalai gali būti gaunami ne tik iš angliavandenilių, bet ir iš kitų cheminių junginių. Pavyzdžiui, iš acto rūgšties molekulės CH_3COOH , atmetę hidroksilo grupę $-\text{OH}$, gauname radikalą $\text{CH}_3\text{CO}\cdot$, vadinamą acetilu.

Funkcinėmis grupėmis organinėje chemijoje vadinami chemiškai aktyvūs organinių junginių atomai bei jų grupės. Su funkcinėmis grupėmis mes jau buvome susidūrę neorganinių junginių apžvalgoje (pavyzdžiui, su **vienvaleente hidroksilo grupe** $-\text{O}-\text{H}$, su **grupe** $-\text{O}-\text{O}-$). Organinėje chemijoje funkciinių grupių yra gana daug ir įvairių. Panagrinėsiu tik keletą jų.

Aldehido grupė – tai grupė, kurios grafinės struktūrinės formulės modelis yra $\text{C}=\text{O}$ / H .

Karboksilo grupė – grupė, turinti grafinį struktūrinės formulės modelį $\text{C}=\text{O}$ / $\text{O}-\text{H}$.

Nitrilo grupė – grupė, turinti grafinį struktūrinės formulės modelį $\text{C}\equiv\text{N}$.

Nitrogrupė – grupė $-\text{NO}_2$, turinti grafinį struktūrinės formulės modelį $\text{O}-\text{N}=\text{O}$.

Amino grupė – grupė $-\text{NH}_2$, turinti grafinį struktūrinės formulės modelį N / H / H .

Ketono grupė – grupė, turinti grafinį struktūrinės formulės modelį $\text{C}=\text{O}$ / R , kur R –

vienvaleintis kokio nors angliavandenilio radikalas.

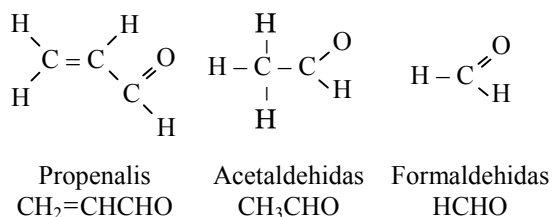
Karbonilo grupė – grupė, turinti grafinį struktūrinės formulės modelį $\text{C}=\text{O}$.

Sulfongrupė – grupė, turinti grafinį struktūrinį formulės modelį $\text{O} \begin{array}{c} \diagup \\ \text{S} \\ \diagdown \end{array} \begin{array}{c} \text{O} \\ \text{O} \end{array} \text{H}$. Sulfongrupė

yra sulfonrūgščių (kurių bendroji formulė RSO_3H) liekana.

Jau neorganinių junginių apžvalgoje mes buvome susidūrę su peroksida ir, bendrai, su peroksijunginiais, pavadintais taip todėl, kad jų molekulių sudėtyje yra peroksido grupė (ar kiti anijonai, sudaryti iš dviejų deguonies atomų). Buvome taip pat susidūrę su bazėmis, turinčiomis savo sudėtyje hidroksilo grupę ir, joms disocijuojant tirpaluose, išskiriančiomis tą grupę kaip vienvalentį anijoną, sugebantį prisijungti protoną. **Hidroksilo grupė** OH gana dažna ir organiniuose junginiuose. Pavyzdžiui, pakeitę benzene C_6H_6 vieną vandenilio atomą hidroksilo grupe, gauname alkoholį $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$, vadinamą fenoliu.

Funkcinės grupės, sujungtos su radikalais, sudaro eilę įvairių cheminių junginių. Kadangi organiniuose junginiuose pasitaiko žymiai daugiau įvairių funkcinių grupių ir įvairių radikalų, tai ir iš jų sudarytų junginių įvairovė yra žymiai didesnė. Išvardinsiu tik kai kuriuos iš tokių junginių: aldehidus, ketonus, ketenus, karboksi–rūgštis, aldehido rūgštis ir t. t.



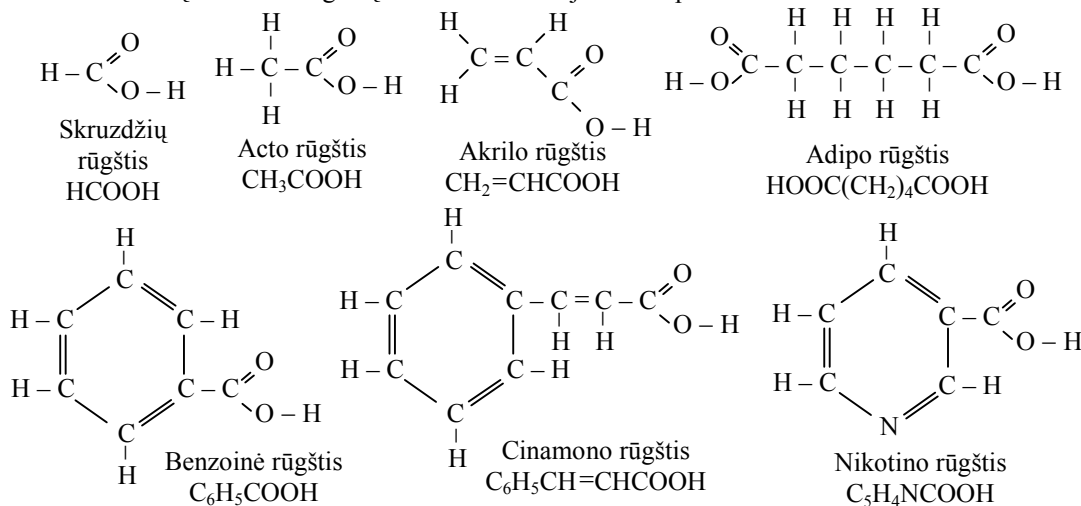
75 pav.

Aldehidai – organinių junginių, turinčių savo molekulių sudėtyje aldehido grupę, klasė. Aldehidų pavadinimai sudaromi, įjungiant į junginių pavadinimą **priesagą** „-al-“ (pavyzdžiui, propenalis $\text{CH}_2=\text{CHCHO}$ – nesotusis aldehidas, kurio formulė sudaroma, sujungus eteno C_2H_4 radikalą – C_2H_3 su aldehido grupe – COH ir gaunant propeno darinį, žiūr. 65 pav.), arba **sujungiant oksiduotojo junginio** (pavyzdžiui,

kokios nors rūgšties) **pavadinimą su žodžiu „aldehidas“** (pavyzdžiui, acetaldehidais CH_3CHO – acto rūgšties aldehidais; formaldehidais HCHO – skruzdžių rūgšties aldehidais, žiūr. 75 pav.).

Karboksi–rūgštys – organiniai junginiai, kurių formulės sudaromos, sujungiant angliavandenilių radikalus R su karboksilo COOH grupėmis. Priklausomai nuo radikalų tipo karboksi–rūgštys gali būti sočiosios ir nesočiosios, o nuo karboksilo grupių kiekio – monokarboksi–, bikarboksi–, trikarboksi–rūgštys ir t. t. Karboksi–rūgštys sudaro homologines eiles. Pavyzdžiui, sočiųjų monokarboksi–rūgščių homologinės eilės bendroji formulė yra $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{COOH}$. Kai $n=0$, gauname skruzdžių rūgštį HCOOH , kai $n=1$ – acto rūgštį CH_3COOH ir t. t. Jungdami nesočiųjų aciklinių angliavandenilių radikalus su karboksilo grupe, gauname nesočiąsias aciklines karboksi–rūgštis (pavyzdžiui, akrilo rūgštį $\text{CH}_2=\text{CHCOOH}$). Kaip jau buvo minėta, karboksi–rūgštys gali turėti ir ne po vieną, o po kelias karboksilo grupes (pavyzdžiui, adipo rūgštis $\text{HOOC}(\text{CH}_2)_4\text{COOH}$ turi dvi tokias grupes). Aromatinių karboksi–rūgščių formulės sudaromos, sujungiant aromatinių angliavandenilių radikalus su karboksilo grupe. Aromatinių rūgščių pavyzdžiai: benzoinė rūgštis $\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$, cinamono rūgštis $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}=\text{CHCOOH}$. Heterociklinių rūgščių formulės sudaromos iš aromatinių rūgščių formulių, pakeičiant jose vieną ar kelis anglies atomus kitų elementų (sieros, azoto, fosforo ir t. t.) atomais. Pavyzdžiui, pakeisdami benzoinės rūgšties formulėje vieną anglies atomą azoto atomu ir atsižvelgdami į tai, kad anglis yra keturvalentė, o azotas – trivalentis, gauname nikotino rūgšties (vitamino PP) formulę $\text{C}_5\text{H}_4\text{NCOOH}$. Apie heterociklinius junginius dar bus kalbama vėliau.

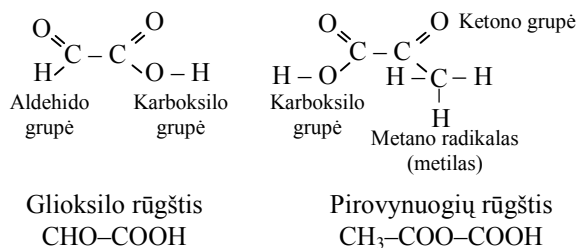
Kai kurių karboksi–rūgščių formulės vaizduojamos 76 pav.



76 pav.

Aldehido rūgštims vadinamos organinės rūgštys, turinčios savo molekulių sudėtyje be karboksilo dar ir aldehido grupę. Paprasčiausias pavyzdys – glioksilo rūgštis $\text{OHC}-\text{COOH}$. Jos formulę vaizduoja 77 pav.

Ketono rūgštims vadinamos organinės rūgštys, turinčios savo molekulių sudėtyje be karboksilo grupės dar ir ketono grupę. Ketono rūgšties pavyzdys – pirovynuogių rūgštis $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{COOH}$. Jos formulę taip pat vaizduoja 77 pav.



77 pav.

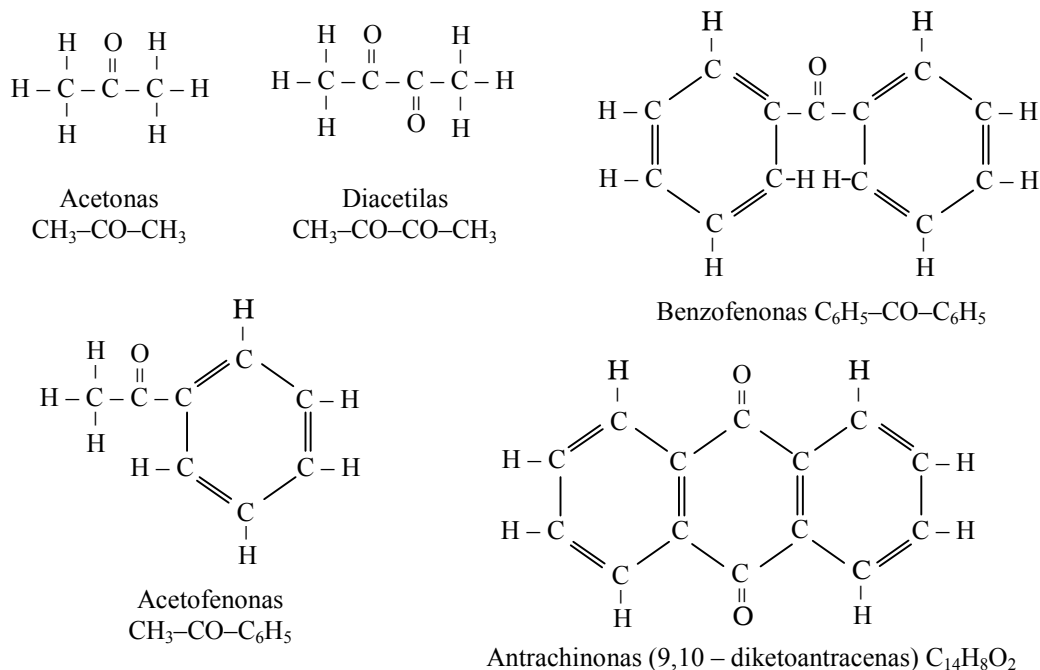
Ketonais vadinami organiniai junginiai, aprašomi formule $\text{R}_1-\text{C}(=\text{O})-\text{R}_2$,

kurioje R_1 ir R_2 – angliavandenilių radikalai.

Iš šios formulės išplaukia, jog į ketono molekulę galima žiūrėti kaip į ketono grupės junginį su vienvalenčiu angliavandenilio radikalu, o iš kitos pusės – kaip į karbonilo grupės junginį su dviem vienvalenčiais angliavandenilių radikalais.

Ketonų pavadinimai sudaromi, įvedant priesagą „-on-“ (pavyzdžiui, acetonas $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{CH}_3$; benzofenonas $\text{C}_6\text{H}_5-\text{CO}-\text{C}_6\text{H}_5$; acetofenonas $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{C}_6\text{H}_5$ ir pan.).

Ketonai (priklausomai nuo radikalų R_1 ir R_2 tipo) gali būti **alifatiniai** ir **aromatiniai**. Ketonai, kurių sudėtyje yra dvi karbonilo grupės, vadinami diketonais. Diketono pavyzdys – diacetilą $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{CO}-\text{CH}_3$. Kitas diketono pavyzdys – antrachinonas $\text{C}_{14}\text{H}_8\text{O}_2$, kurio molekulę sudaro du benzeno žiedai, sujungti dviem karbonilo grupėmis. Ketonų formulių pavyzdžiai parodyti 78 pav.



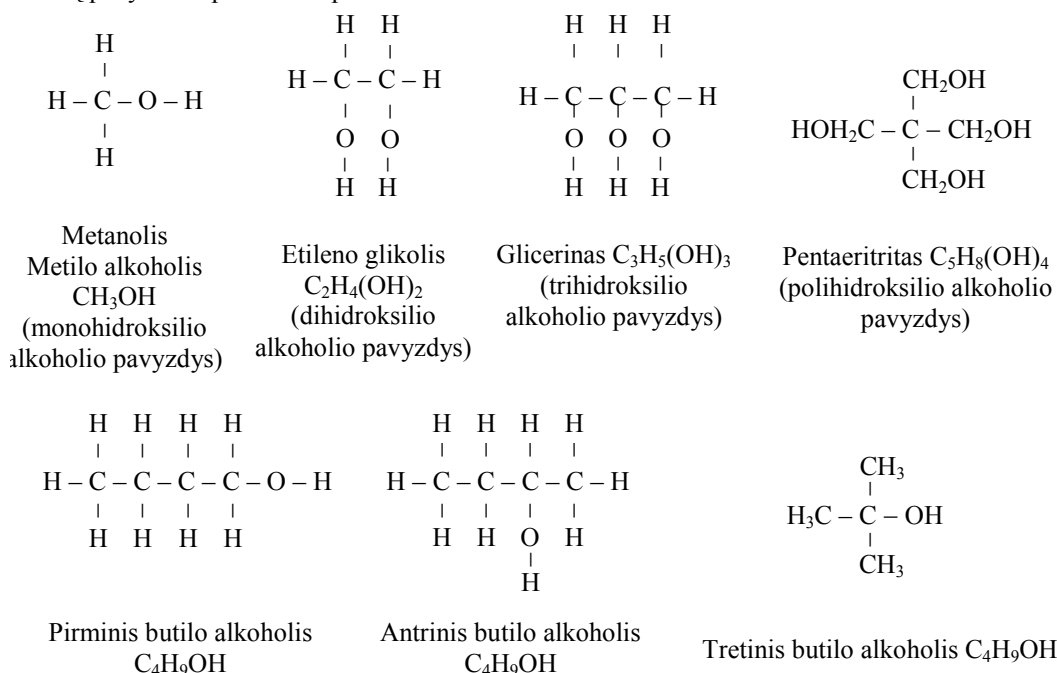
78 pav.

Ketenais vadinami organiniai junginiai, turintys savo molekulių sudėtyje funkcinę grupę $\text{>C}=\text{C}=\text{O}$.

Paprasčiausias ketenų grupės atstovo pavyzdys – cheminis junginys, turintis formulę $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{O}$ ir vadinamas tiesiog ketenu.

Angliavandenilių dariniai, kurių formulės gaunamos jungiant angliavandenilių radikalus su viena ar keliomis **hidroksigrupėmis** $-\text{OH}$, vadinami **alkoliais**. Pagal hidroksigrupių skaičių molekulėje alkoholiai skirstomi į **monohidroksilius**, **dihidroksilius (glikolius)**, **trihidroksilius (glicerinus)** ir **polihidroksilius (poliolius)**. Didžiausią alkoholių grupę sudaro **totieji monohidroksiliai alkoholiai**, kurių formulės sudaromos iš alkanų formulių, pakeičiant jose vieną vandenilio atomą hidroksigrupe. Tokių alkoholių pavyzdžiai: metilo alkoholis CH_3OH , etilo alkoholis $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, propilo alkoholis $\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$ ir t. t. Pradedant propilo alkoholiu, jie gali turėti izomerų ir pagal tai, prie kurio

anglies atomas yra prisijungusi hidroksigrupė, skirstomi į pirminius, antrinius, tretinius. Alkoholių formulių pavyzdžiai pateikti 79 pav.



79 pav.

Alkoholių pavadinimai sudaromi iš atitinkamų angliavandenilių radikalų pavadinimų ir žodžio „alkoholis“, pavyzdžiui, metilo alkoholis CH_3OH , etilo alkoholis $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, propilo alkoholis $\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$, butilo alkoholis $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ ir t. t. Dihidroksiliuose alkoholiuose vietoj žodžio „alkoholis“ dažnai vartoja žodį „glikolis“, pavyzdžiui, etileno glikolis $\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2$, propileno glikolis $\text{C}_3\text{H}_6(\text{OH})_2$ ir t. t. Trihidroksiliai alkoholiai vadinami trioliais. Triolio pavyzdys – propantriolis – 1,2,3 $\text{C}_3\text{H}_5(\text{OH})_3$ (glicerolis).

Glicerolis su organinėmis ir neorganinėmis rūgštimis sudaro **esterius** (žiūr. 553 psl.), vadinamus **gliceridais**. Plačiai žinomas cheminis junginys nitroglicerinas yra gliceridas, o ne glicerinas, tačiau vadinamas taip, lyg jis būtų glicerinų grupės atstovas. Tokių **atvejų, kai tradicija nugali logiką, cheminėje terminologijoje galima rasti gana daug**.

Alkoholių pavadinimai gali būti sudaromi ir pridant galūnę „-olis“ prie atitinkamo angliavandenilio pavadinimo. Taip gaunami pavadinimai: metanolis – metilo alkoholis CH_3OH , etanolis – etilo alkoholis $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, propanolis – propilo alkoholis $\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$ ir t. t.

Bendroji alkoholių formulė yra $\text{R}(\text{OH})_n$, kur R angliavandenilio radikalo formulė. Ji sudaryta iš angliavandenilio formulės, sumažinus joje vandenilio atomų skaičių n vienetais ($n=1, 2, 3, \dots$).

Priklausomai nuo radikalo R tipo organinių junginių aibėje, kurią pagal šį alkoholių apibrėžimą galima būtų vadinti alkoholių aibe, išskiriamos ypatingos grupės.

Kai R – aromatinio angliavandenilio radikalas Ar, tai gauname cheminius junginius $\text{Ar}(\text{OH})_n$, vadinamus **fenoliais**. Priklausomai nuo n, fenoliai (kaip ir visi alkoholiai) skirstomi į monohidroksilius, dihidroksilius, trihidroksilius ir t. t. Monohidroksilio fenolio pavyzdys – fenolis (hidroksibenzenas) $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$.

Kai R yra aromatinio angliavandenilio naftaleno C_{10}H_8 radikalas C_{10}H_7 , tai formulė ROH gali aprašyti **naftolio** molekulę $\text{C}_{10}\text{H}_7\text{OH}$. Taigi, naftolius galima interpretuoti kaip fenolių dalinį atvejį, o fenolių grupę – kaip alkoholių grupės pogrupį.

Monohidroksilio alkoholio molekulės formulėje ROH, pakeitus deguonies atomą jam giminingu (priklausančiu tam pačiam periodinės lentelės VIA pogrupiui) sieros atomu, gausime taip vadinamo **tioalkoholio (tiolio, arba merkaptano)** molekulės formulę RSH. Tiolių pavyzdžiai: metilmerkaptanas CH_3SH , etilmerkaptanas $\text{C}_2\text{H}_5\text{SH}$, propilmerkaptanas $\text{C}_3\text{H}_7\text{SH}$ ir t. t.

Alkoholiai, kaip ir angliavandeniliai, karboksi–rūgštys bei kiti organiniai junginiai, kaip jau buvo minėta, gali sudaryti homologines eiles, patys priklausydami atitinkamų angliavandenilių genetinėms eilėms.

Alkoholiai su šarminiais metalais sudaro junginius, vadinamus alkoholiatais, o su rūgštimis – esterius.

Alkoholiatų formulės sudaromos iš alkoholių formulių, hidroksilo vandenilį pakeitus metalu: $2(R-OH)+2Me \rightarrow 2(R-O-Me)+H_2$, kur Me – šarminis, šarminis žemės metalas, aliuminis, magnis.

Analogiškai sudaromos **fenoliatų, naftoliatų, tioliatų** formulės: C_6H_5ONa , $C_{10}H_7ONa$, C_2H_5SNa .

Metalai gali jungtis su angliavandenilių radikalais ne tik per hidroksi–grupės deguonį, pakeisdami tos grupės vandenilio atomus metalų atomais, bet ir tiesiogiai, t.y. pakeisdami angliavandenilių molekulių formulėse vandenilio atomus metalų atomais. Tokie junginiai vadinami **metalų organiniais junginiais** ir skirstomi į paprastuosius ir mišriuosius.

Paprastųjų junginių molekulėse metalų atomai yra susiję tik su angliavandenilių radikalų anglies atomais. Tokių junginių pavyzdžiai: dimetilcinkas $(CH_3)_2Zn$, trietilaliuminis $(C_2H_5)_3Al$, dietilkadmio $(C_2H_5)_2Cd$.

Mišriuose junginiuose metalų atomai yra susiję ne tik su angliavandenilių radikalų anglies atomais, bet ir su vienu ar keliais anijonais, dažniausiai – su halogenų jonais. Tokių junginių pavyzdžiai: metilcinko jodidas CH_3ZnJ , dietilaliuminio chloridas $(C_2H_5)_2AlCl$.

Metalai gali reaguoti ne tik su alkoholiais, bet ir su organinėmis rūgštimis, pakeisdami jose hidroksi–grupės vandenilio atomus. Jų junginiai, pavyzdžiui, su skruzdžių rūgštimi vadinami **formiatais** (natrio formiatas $HCOONa$), su acto – **acetatais** ir t. t.

Formiatų formulės gali būti sudaromos pakeičiant skruzdžių rūgšties hidroksilo grupės vandenilio atomą ne tik metalo atomu, bet ir angliavandenilio radikalu. Tokių formiatų pavyzdžiai: metilformiatas $HCOOCH_3$, etilformiatas $HCOOC_2H_5$ ir t. t. Jei tokių molekulių formulėse skruzdžių

rūgšties likučio $H-C-O-\overset{O}{\parallel}$ vandenilio atomą pakeistume ne metalo, o kokio nors angliavandenilio radikalu, tai gautume formiato, vadinamo skruzdžių esteriu formulę.

Esteriai (žiūr. 552 psl.) vadinami organiniai junginiai, kuriuose angliavandenilio radikalą R ir rūgšties likutį jungia deguonies atomas. Bendroji esterių formulė $RCOOR'$, kur R ir R' – angliavandenilių radikalai. Esteriai gali būti gaunami ir iš organinių ir neorganinių rūgščių. Organinių rūgščių esterio pavyzdys – etilacetatas $CH_3COOC_2H_5$ – acto rūgšties (CH_3COOH) etilo esteris. Neorganinių rūgščių esterio pavyzdys – dietilsulfatas $(C_2H_5)_2SO_4$ – sieros rūgšties H_2SO_4 etilo esteris. Esteriai gali susidaryti ir alkoholiams reaguojant su rūgščių halogenanhidridais (pavyzdžiui, $R'OH+RCOCl \rightarrow RCOOR'+HCl$) bei bendrai – su rūgščių anhidridais (pavyzdžiui, $R'OH+(RCO)_2O \rightarrow RCOOR'+RCOOH$), alkilų halogenidais veikiant organinių rūgščių druskas (pavyzdžiui, $R'J+RCOOAg \rightarrow RCOOR'+AgJ$).

Esterių susidarymas, reaguojant rūgščiai su alkoholiu, vadinamas **esterinimu**. Pavyzdžiui, reaguojant acto rūgščiai CH_3COOH su metilo alkoholiu CH_3OH , vyksta tokia esterinimo reakcija: $CH_3COOH+HOCH_3 \rightleftharpoons CH_3COOCH_3+H_2O$. Reaguojant sieros rūgščiai H_2SO_4 su etilo alkoholiu

C_2H_5OH vyksta analogiška esterinimo reakcija: $H-O-\overset{O}{\parallel}S-OH+H-O-C_2H_5 \rightleftharpoons H-O-\overset{O}{\parallel}S-O-CH_2CH_3+H_2O$.

Glicerolio ir riebiųjų rūgščių (aciklinių sočiųjų ir nesočiųjų monokarboninių rūgščių) **esteriai** vadinami **riebalais (acilgliceridais, lipidais)**.

Lipidai (nuo žodžio „lipos“ – riebalai) – organinių junginių grupė, kurią sudaro riebalai ir į juos panašios medžiagos. Lipidai skirstomi į paprastuosius ir sudėtinius. Paprastieji lipidai – tai riebalai, vaškas, dioliniai lipidai. Sudėtiniai lipidai – tai lipidai, kurių molekulėse be riebiųjų rūgščių ir alkoholių yra dar fosforo rūgšties likučių, azoto junginių ir t. t. Riebalai susideda iš monogliceridų, di–gliceridų, tri–gliceridų. Riebalų susidaryme dalyvauja apie 70 riebiųjų rūgščių (jų tarpe daugiau nesočiųjų negu sočiųjų).

Riebalai sintetinasi beveik visuose organizmuose daugiausia iš angliavandenilių ir yra svarbūs organizmų ląstelių komponentai, kuriose jie kaupiasi daugiausia kaip atsarginė medžiaga.

Deguonies atomas gali jungti angliavandenilio radikalus, sudarydamas **eterio molekulę**, kurios formulė yra **R–O–R'**. Kai R ir R' yra vienodi angliavandenilio radikalai, tuomet susidaro **simetrinė**

eterio molekulė, kurios formulė yra **R–O–R** (pavyzdžiui, dimetileterio formulė $\begin{array}{c} H & H \\ | & | \\ H-C-O-C-H \\ | & | \\ H & H \end{array}$, t.y.

$H_3C-O-CH_3$). Kai R ir R' yra nevienodi radikalai, tai, naudodamiesi jais, sudarome **nesimetrinio (mišraus) eterio** molekulės formulę, pavyzdžiui, etilmetilo eterio formulę $H_3C-O-C_2H_5$. Pakeitę formulėje $R-O-R'$ deguonies atomą O jam giminingu sieros atomu S, sudarome taip vadinamo **tioeterio** molekulės formulę $R-S-R'$. Tioeteriai – tai **alkilų sulfidai**, sieros organiniai junginiai. Kai R ir R' – vienodi radikalai, tai gauname **simetrinius** tioeterius, o kai R ir R' nevienodi – **nesimetrinius**. Tioeterių

pavyzdžiai: metioninas $\text{CH}_3\text{--S--CH}_2\text{CH}_2\text{CHNHCOOH}$, biotinas (vitaminas H), ipritas (kovinė nuodingoji medžiaga, vadinama dar ir garstyčių dujomis).

Anglies, vandenilio ir deguonies atomų cheminiai junginiai sudaro dar vieną gausią ir svarbią organinių junginių grupę, vadinamą **angliavandeniais**. Toks šių junginių pavadinimas yra kilęs iš to, kad daugelio šių junginių empirinė formulė yra $\text{C}_n\text{H}_{2n}\text{O}_n$ (arba $\text{C}_n(\text{H}_2\text{O})_n$), t. y. atrodo lyg sudaryta iš anglies atomų ir tokio pat skaičiaus vandens molekulių.

Daugumos angliavandenių anglies grandinė nešakota ir turi vieną aldehido ar ketono grupę. Angliavandeniai turi daug **stereoizomerų**, nes jų molekulėse yra nesimetrinių anglies atomų. Cheminės angliavandenių savybės lemia hidroksilo --OH , karbonilo >C=O ir pusiauacetalinio hidroksilo grupės.

Angliavandeniai gamtoje susidaro žaliuose augaluose fotosintezės procese ir kaupiasi juose daugiausia kaip atsarginė medžiaga (panašiai kaip riebalai gyvūnuose). Augaluose angliavandeniai (krakmolas, celiuliozė, sacharozė, gliukozė) sudaro apie 80% sausųjų medžiagų, gyvūnuose (glikogenas, laktozė) – apie 2%.

Angliavandenių klasę sudaro monosacharidai, oligosacharidai ir polisacharidai. Oligosacharidai skirstomi į di-, tri-, tetra-sacharidus ir t. t. (iki 8). Visi kiti – polisacharidai.

Kaip matyti iš pavadinimo, **monosacharidai** yra paprasčiausia angliavandenių grupė. Jų molekulėse gali būti kelios hidroksilo grupės ir aldehido arba ketono grupė. Tie monosacharidai, kurių molekulių sudėtyje yra aldehido grupė, vadinami **aldozėmis**, o turintys ketono grupę – **ketozėmis**.

Pagal anglies atomų molekulėje skaičių monosacharidai skirstomi į **biozes, trioze, tetrozes, pentoze, heksoze** ir t. t.

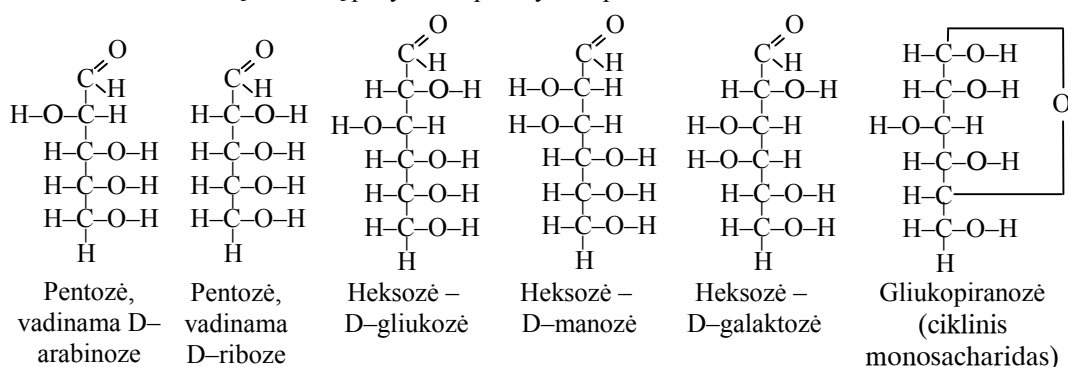
Vienų monosacharidų molekulės gali turėti **aciklinę**, kitų – **ciklinę** struktūrą.

Cikliniai monosacharidai, kurių molekulės turi šešianarį hidrinto pirano žiedą, vadinami **piranozėmis**. To žiedo sandara bus pavaizduota šiek tiek vėliau (83 pav.).

Cikliniai monosacharidai, kurių molekulių sudėtyje yra penkianaris hidrinto furano žiedas, vadinami **furanozėmis**. Furano žiedas taip pat pavaizduotas 83 pav.

Monosacharidų stereoizomerai būna D ir L formų, o stereoizomerų skaičius yra lygus 2^n , kur n – asimetrinių anglies atomų monosacharido molekulėje skaičius.

Monosacharidų formulių pavyzdžiai parodyti 80 pav.



80 pav.

Gamtoje labiausiai paplitę monosacharidai – pentoze ir heksozė (gliukozė, fruktozė) bei jų dariniai: glikozidai, fosforo rūgšties esteriai. Svarbiausi **oligosacharidai** – sacharozė, laktozė.

Polisacharidais vadinami stambiamolekuliniai (molekulės susideda daugiau nei iš 8 monosacharido likučių) angliavandeniniai. Juose monosacharidų likučiai yra susijungę glikozidiniais ryšiais. Polisacharidų molekulių **bendroji formulė** $[\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5]_n$, o jų mol. masė siekia nuo kelių tūkstančių iki kelių milijonų (pavyzdžiui, glikogeno). Polisacharidų pavyzdžiai: krakmolas, celiuliozė, glikogenas, pektinai ir pan.

Trumpai apžvelgę svarbiausias organinių junginių grupes, kurių molekulės sudarytos iš anglies atomų, jų medžių bei ciklų su prijungtais prie jų vandenilio atomais bei tuos vandenilio atomus pakeitusiomis funkcinėmis grupėmis, į kurių sudėtį įeina deguonies atomai, pereisime prie organinių junginių, į kurių sudėtį įeina dar ir kitų elementų atomai.

Pradėsime nuo tam pačiam pogrupiui kaip ir deguonis priklausančios **sieros** – nuo jau minėtos **sulfogrupės** – SO_3H **ijungimo** į organinius junginius, vadinamo sulfoninimu.

Sulfoninimas gali vykti dviem būdais: tiesioginiu ir netiesioginiu. Tiesioginis būdas – tai organinio junginio (pavyzdžiui, angliavandenilio) molekulei priklausančio vandenilio atomo pakeitimas sulfogrupe. Sulfoninimui vykstant netiesioginiu būdu, sulfogrupė pakeičia kito elemento (ne vandenilio) atomą organinio junginio molekulėje. Pirmuoju ir antruoju būdu gauti cheminiai junginiai, į kurių

molekulių sudėtį įeina sulfogrupė, vadinami **sulfojunginiais**. Sulfojunginių pavyzdys – **sulfonrūgštys**. Jų **bendroji formulė** yra RSO_3H , kur R – yra alkilas arba arilas. Sulfonrūgštyse sulfogrupę lengva pakeisti kitomis funkcinėmis grupėmis.

Kitas sulfojunginių pavyzdys – **sulfonilchloridai** (pavyzdžiui, $\text{C}_6\text{H}_5\text{SO}_2\text{Cl}$) ir, bendrai, **sulfonilhalogenidai**.

Dabar papildysime organinių junginių sąrašą junginiais, į kurių molekulių sudėtį įeina **azotas**. Azoto atomų įjungimas į organinius junginius visų pirma vyksta per tokias funkcinės grupės kaip nitrilo, nitro ir amino grupės. Tokiu būdu gaunami nitrilai, nitrojunginiai, aminorūgštys, azojunginiai.

Nitrilai vadinami cheminiai junginiai, kurių molekulės turi savo sudėtyje vienvalentę **nitrilo grupę** – $\text{C}\equiv\text{N}$. Nitrilų formulė yra $\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}$, kur R – kokio nors angliavandenilio (ar kokio nors kito junginio) vienvalentis radikalas. Nitrilo pavyzdys – akrilo nitrilas $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{C}\equiv\text{N}$.

Jungdami angliavandenilių radikalus su vienvalente **nitrogrupe** $-\text{NO}_2$, gauname **nitrojunginius**, kurių pavadinimai sudaromi pridėdant prie angliavandenilio pavadinimo **priešdėlį „nitro-“**, pavyzdžiui, nitrobenzenas $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$.

Kai angliavandenilių radikalai jungiami su **divalente azogrupe** $-\text{N}=\text{N}-$, tai gaunami taip vadinamieji **azojunginiai**. Jų pavadinimai sudaromi iš angliavandenilių pavadinimų, **pridedant priešdėlį „azo-“** (pavyzdžiui, azobenzenas $\text{C}_6\text{H}_5\text{N}=\text{NC}_6\text{H}_5$).

Jungdami **amino grupę** su alifatiniu, aromatinu ar heterocikliniu radikalų R gauname **pirminio amino** formulę $\text{R}-\text{N}\begin{smallmatrix} \text{H} \\ \diagup \diagdown \\ \text{H} \end{smallmatrix}$. Pirminio aromatinio amino pavyzdys yra anilinas $\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$, kurio

formulė sudaryta, pakeitus benzeno formulėje vandenilio atomą amino grupe $-\text{NH}_2$. Pakeisdami pirminio amino formulėje vandenilio atomą angliavandenilio radikalų R, gauname **antrinio amino**

formulę $\text{R}_2\text{N}-\text{H}$. Pakeisdami paskutinį vandenilio atomą antrinio amino formulėje radikalų R,

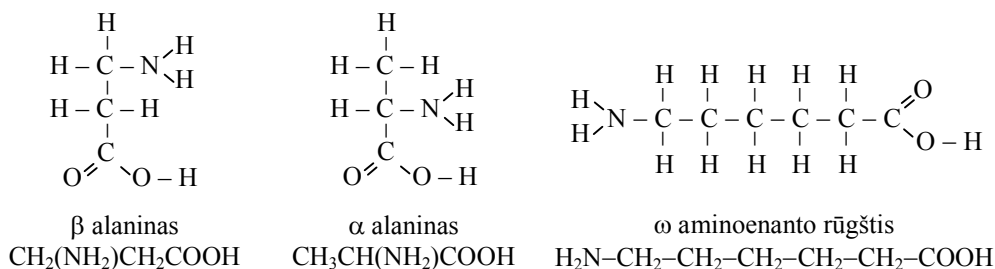
gauname **tercinio amino** formulę R_3N .

Aldehidai, kurių sudėtyje yra amino grupė $-\text{NH}_2$, vadinami **aminoaldehidais**. Alkoholai, kurių molekulėse yra amino grupė $-\text{NH}_2$ ir hidroksilo grupė $-\text{OH}$, prisijungusios prie skirtingų anglies atomų, vadinami **aminoalkoliais**.

Rūgščių RCOOH dariniai, kurių molekulėse karboksilo grupės $-\text{C}\begin{smallmatrix} \text{O} \\ \parallel \\ \text{O} \end{smallmatrix}-\text{H}$ hidroksilas $-\text{OH}$ pakeistas amino grupe $-\text{NH}_2$, vadinami **amidais**. Amidų molekulių **bendroji formulė** RCONH_2 . Amidų pavyzdžiai: acetamidas CH_3CONH_2 , karbamidas $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$.

Angliavandenių dariniai, kurių molekulėse hidroksilo grupė pakeista amino grupe, vadinama **aminocukrumis**. Ketonai, kurių molekulių sudėtyje yra amino grupė, vadinami **aminoketonais**, o fenoliai, kurių žiede yra amino grupė $-\text{NH}_2$, vadinami **aminofenoliais**.

Organiniai junginiai, kurių molekulės savo sudėtyje turi amino grupę $-\text{NH}_2$ ir karboksilo grupes $-\text{COOH}$, vadinami **aminorūgštimis**. Pagal amino grupių padėtį karboksilo atžvilgiu aminorūgštys skirstomos į **α , β , γ ir ω aminorūgštis**. Kai kurių aminorūgščių formulės parodytos 81 pav.



81 pav.

Aminorūgštys vaidina labai svarbų vaidmenį gyvojoje gamtoje, nes visi baltymai sudaryti iš α aminorūgščių, kurių bendroji formulė yra $\text{H}_2\text{N}-\text{CHR}-\text{COOH}$.

Baltymais vadinami stambiamolekuliniai organiniai junginiai, sudaryti iš aminorūgščių, kurios susijungusios tarpusavyje dažniausiai **peptidinėmis jungtimis** $-\text{CO}-\text{NH}-$. Vien tik iš aminorūgščių sudarytieji baltymai vadinami paprastaisiais, arba **proteinais**, o baltymai, turintys savo sudėtyje ir nebaltyminių junginių – prostetinę grupę (cukrų, lipidų, nukleino rūgščių), vadinami, sudėtiniais, arba **proteidais**. Proteinams priskiriami albuminai, globulinai, prolaminai, glutelinai ir t. t., o proteidams –

nukleoproteidai, chromoproteidai (pavyzdžiui, hemoglobinas), gliukoproteidai, fosfoproteidai (pavyzdžiui, kazeinas) ir t. t.

Baltymų yra visuose organizmuose ir tik juose jie susidaro. Baltymai – visos gyvybės, visų organizmo ląstelių struktūros pagrindas. Daugiausia baltymų yra gyvūnų raumenyse (apie 21%), o augalų pasaulyje – jų sėklose (apie 12%).

Baltymuose yra apie 50% anglies, apie 23% deguonies, apie 16% azoto, apie 7% vandenilio, iki 2,5% sieros, apie 0,5% fosforo, šiek tiek geležies, vario, cinko ir kitų elementų. Baltymų mol. masė svyruoja nuo kelių tūkstančių (ribonukleozė ~12700, insulinas ~5700) iki kelių milijonų (hemocianinas ~6,6 mln).

Pagal molekulių struktūrą ir formą baltymai skirstomi į **fibrilinius** ir **globulinius**. Fibrilinių baltymų molekulės yra siūliškos, jos gali sudaryti molekulių agregatus, o globulinių baltymų molekulės yra rutuliškos, elipsinės, lazdelinės.

Aminorūgštys baltymuose, kaip jau buvo minėta, dažniausiai jungiasi peptidine jungtimi –CO–NH– į **dipeptidus, tripeptidus, polipeptidus**. Kadangi aminorūgštys jungiasi į baltymus įvairia tvarka, tai susidaro **daug polipeptidinių izomerų**.

Yra keturi baltymų molekulių **struktūriniai lygiai** (struktūros sudėtingumo laipsniai).

Baltymų, priklausančių **pirmajam struktūriniam lygiui**, aminorūgštys molekulėse išsidėsčiusios grandinė.

Antrinės struktūros sudaro pirminių grandinių erdvinės konfigūracijos (dažniausiai spiralinės), kurias didžiojoje dalyje atvejų fiksuoja vandenilinės jungtys.

Tretinės struktūros sudaro antrinės struktūros spiralės, susilanksčiusios į kompaktiškas globules. Iš tas struktūras stabilizuojančių jungčių svarbiausios yra disulfidinės.

Ketvirtinės struktūros baltymo molekulė yra susidariusi iš kelių tretinę struktūrą turinčių dalelių – subvienetų. Ketvirtinei struktūrai būdingos elektrostatinės ir vandenilinės jungtys.

Aminorūgštys svarbios gyvybei ne tik tuo, kad jos sudaro baltymų pagrindą bei vykdo eilę kitų gyvybės egzistavimui svarbių funkcijų. Svarbu pažymėti dar ir tai, kad **aminorūgščių kodas** sudaro **genetinį kodą**, t. y. **paveldimos informacijos užšifravimo nukleino rūgščių molekulėse sistemą**, kuri realizuojasi organizmuose nukleotidų sekos pavidalu kaip ryšys tarp nukleotidų išsidėstymo nukleino rūgščių molekulėse ir aminorūgščių sekos baltymų polipeptidų grandinėse. **Baltymo, kuris sintetinasi, aminorūgštis vietą polipeptidinėje grandinėje nusako (koduoja) trijų vienas po kito einančių nukleotidų derinys – tripletas, arba kodonas. Tripletų išsidėstymo tvarka informacinės ribonukleino rūgšties (i – RNR) molekulėje yra matrica, pagal kurią sintetinasi baltymai.** Dukterinės ląstelės ir tolesnės palikuonių kartos genetinį kodą gauna iš motininčių ląstelių, vykstant **dezoksiribonukleino rūgšties (DNR) biosintzei. Taip informacija apie motininčių organizmų struktūrą perduodama dukteriniams organizmams.*** Genetiniais tyrimais nustatyta, kad **genetinis kodas yra universalus, t. y., visų organizmų vienodas.**

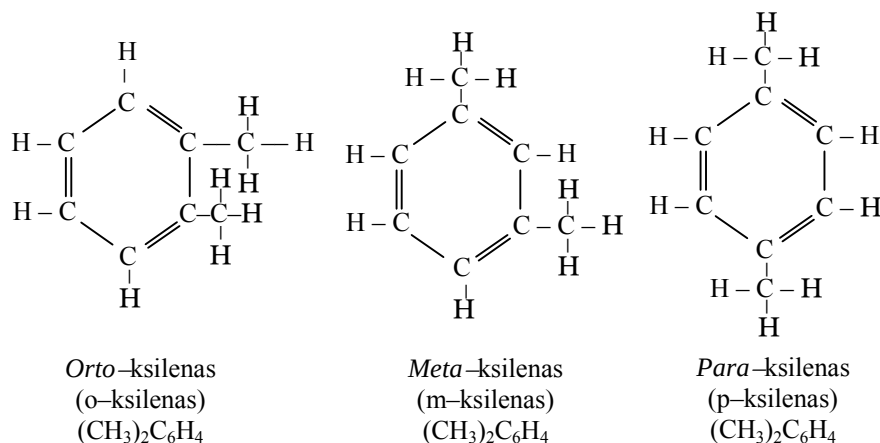
Cheminių junginių savybės priklauso ne tik nuo junginio molekulėje esančių funkcinų grupių tipo, bet ir nuo tų grupių prisijungimo vietos struktūroje. Ši svarbų faktorių stengiamasi atspindėti ne tik cheminių junginių struktūrinėse formulėse, bet ir jų pavadinimuose. Kalbant apie aminorūgštis, buvo pažymėta, jog tos rūgštys pagal aminogrupių padėtį karboksilo grupių atžvilgiu skirstomos į α , β , γ ir ω aminorūgštis. Kalbant apie monosacharidų izomerus, buvo paminėti D ir L izomerai, o atsižvelgiant į vandenilio atomų padėtis etano molekulėje buvo išskirtos užstotoji ir sustabdytoji konformacijos – posūkio izomerai (žiūr. 66 pav.). Taip pat buvo minimos *cis*–padėtis ir *trans*–padėtis (žiūr. 69 pav.) bei optiniai izomerai. **Visi tie reiškiniai svarbūs ir sistematyrai.**

Chemikai dar ne visada laikosi vieningos universalios cheminių junginių pavadinimų sistemos, skirtos junginių dalių padėčiai molekulėje žymėti, todėl įvairiais atvejais vartojami įvairūs pavadinimai, kartais ir nelabai suderinti tarpusavyje, apie ką jau buvo rašyta neorganinių cheminių junginių apžvalgoje. Tačiau tai nepaneigia **chemijos mokslo reikšmės struktūrų teorijoje**, o tik patvirtina tą tiesą, kad **chemikų ir sistematyrininkų bendradarbiavimas galėtų būti abipusiai naudingas.**

Atkreipsiu skaitytojo dėmesį dar į vieną junginių pavadinimų modifikavimo sistemą, skirtą junginių sandaros identifikavimui.

Nurodant dviejų pakaitų vietą benzeno žiede, vartojami priešdėliai „*meta*–“, „*orto*–“ ir „*para*–“ bei tuos priešdėlius žyminčios raidės „*m*–“, „*o*–“ ir „*p*–“. Tų priešdėlių bei raidžių vartojimą dimetilbenzeno (ksileno) (CH₃)₂C₆H₄ izomerų pavadinimuose iliustruoja 82 pav.

* Šiek tiek detaliau DNR ir RNR bei baltymų sintezės procesai gyvuosiuose organizmuose aprašomi 1.14.13. skyrelyje.



82 pav.

Kai metilo radikalai prijungti prie gretimų benzeno žiedo anglies atomų, tai tokią metilo radikalų padėtį vadina **1,2 padėtimi** ir tokį ksileno izomerą vadina **orto-ksilenu**.

Kai metilo radikalai prijungti, tarkim, prie pirmojo ir trečiojo anglies atomų, tai tokią metilo radikalų padėtį vadina **1,3 padėtimi** ir tokį ksileno izomerą – **meta-ksilenu**.

Kai metilo radikalai prijungti prie vienas prieš kitą benzeno žiede esančių anglies atomų, tai tokią metilo radikalų padėtį vadina **1,4 padėtimi** ir tokį ksileno izomerą – **para-ksilenu**.

Lygindami priešdėlių „meta-“ ir „orto-“ vartojimą ksileno izomerų pavadinimuose su tuo, kaip tie priešdėliai buvo vartojami fosforo rūgščių ir fosfatų pavadinimuose, kur priešdėlis „meta-“ reiškė mažiausią hidroksilų skaičių rūgšties molekulėje (pavyzdžiui, metafosforo rūgšties formulė HPO_3 turi tik vieną hidroksilo grupę), o priešdėlis „orto-“ didžiausią jų skaičių (pavyzdžiui, ortofosforo rūgšties formulė $\text{PO}(\text{OH})_3$ turi tris hidroksilo grupes), dar kartą įsitikiname, kad **chemijos moksle cheminių junginių pavadinimuose tie patys terminai įvairiose situacijose vartojami nevienareikšmiškai, t. y. jog chemijos nomenklatura sisteminiu požiūriu dar nėra pakankamai tobula sistema**: joje kartais nesilaikoma net elementarios tvarkos bei elementarios logikos taisyklių.

Angliavandenilių dariniai gali būti sudaromi ne tik keičiant juose vandenilio atomus jau minėtomis funkcinėmis grupėmis, bet ir halogenų atomais, kuriuos taip pat galima laikyti funkcinėmis grupėmis. Taip gaunami **angliavandenilių halogenidai**. Pavyzdžiui, halogenidų apžvalgoje jau buvo minėtas etilo bromidas $\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$, o iš metano CH_4 , pakeitus visus vandenilio atomus chloro atomais, gaunamas anglies tetrachloridas (tetrachlormetanas) CCl_4 , turintis tetraedrinę struktūrą, ir t. t.

Daug įvairių mūsų dar nenagrinėtų cheminių junginių, kurių molekulių formulės yra sudaromos iš angliavandenilių molekulių formulių, galima „sukonstruoti“, **keičiant angliavandenilių formulėse ne tik vandenilio, bet ir anglies atomus anglies grandinėse, medžiuose bei žieduose kitų elementų, pavyzdžiui, deguonies, azoto, sieros, silicio, fosforo, arseno ir t. t. atomais bei sujungiant tas grandines, medžius ir žiedus bei iš jų sudarytus anglies atomų karkasus kitų elementų atomais**.

Pavyzdžiui, benzeno C_6H_6 struktūrinėje formulėje pakeitę anglies atomą (kartu su prie jo prijungtu vandenilio atomu) azoto atomu, gauname piridino molekulės formulę C_5NH_5 . Bendrojoje alkanų formulėje $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$, pakeitę anglies atomus jiems giminingais silicio (priklausančio tam pačiam periodinės lentelės pogrupiui IVA ir turinčio tą patį valentingumą) atomais, gauname jau mūsų minėtųjų **silanų bendrąją formulę $\text{Si}_n\text{H}_{2n+2}$** .

Kai tokie pakeitimai padaromi ciklinių angliavandenilių bei jų darinių formulėse, tai gaunamos taip vadinamųjų **heterociklinių organinių junginių** formulės.

Iš to, kas jau buvo pasakyta apie organinius junginius, išplaukia, jog **į organinių junginių molekules galima žiūrėti kaip į angliavandenilių molekulių darinius, kurie gali būti gauti: 1) keičiant angliavandenilių molekulių kai kuriuos (ar net visus) vandenilio atomus angliavandenilių radikalais, funkcinėmis grupėmis bei kitų elementų atomais; 2) keičiant angliavandenilių bei jų darinių molekulių skeletą sudarančiose anglies atomų grandinėse, medžiuose, cikluose ir tinkluose vieną ar kelis anglies atomus kitų anksčiau išvardintų cheminių elementų atomais**. Pastaruoju atveju gauname **organinių heterojunginių** molekules.

Visus organinius junginius, panašiai kaip ir jų dalį, vadinamą angliavandeniliais, galima suskirstyti į dvi dideles klases: **ciklinius ir aciklinius organinius junginius**.

Ciklinius organinius junginius savo eile galima suskirstyti į **izociklinius (karbociklinius)** ir **heterociklinius**. Tuo organinių junginių klasifikacija jau skiriasi nuo angliavandenilių klasifikacijos (žiūr. 73 pav.).

Kokie organiniai junginiai vadinami heterocikliniais, jau buvo kalbėta, o **karbocikliniais organiniais junginiais** vadinami junginiai, kurių molekulių sudėtyje yra ciklai sudaryti iš anglies (ir tik anglies) atomų. Kitaip tariant, karbocikliniais junginiais vadinami cikliniai angliavandeniliai ir jų dariniai, kurie gaunami iš ciklinių angliavandenilių, pakeitus vieną, kelis ar net visus angliavandenilio molekulės vandenilio atomus kitų elementų atomais, funkcinėmis grupėmis ar angliavandenilių radikalais.

Ir karbociklinius ir heterociklinius organinius junginius savo eile galima suskirstyti į **aromatinus** ir **aliciklinius**.

Aromatinius karbociklinius junginius sudaro junginiai, turintys savo sudėtyje vieną ar kelis benzeno žiedus, o taip pat jau anksčiau minėtieji azulenai bei jų dariniai, kitaip tariant, aromatiniai angliavandeniliai bei jų dariniai, kurių molekulių formulės gali būti gautos iš aromatinių angliavandenilių formulių, keičiant jose vandenilio atomus kitais atomais bei jų grupėmis.

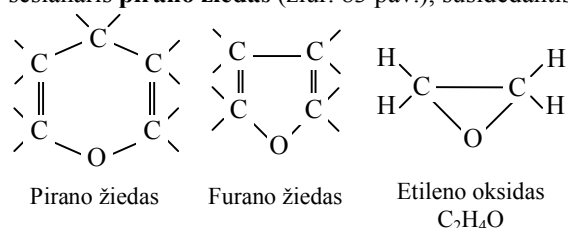
Aromatinių heterociklinių organinių junginių molekulių formulės gali būti sudaromos iš aromatinių karbociklinių organinių junginių molekulių formulių, keičiant jų cikluose vieną ar kelis anglies atomus kitų nevienvalenčių elementų atomais.

Karbociklinių nearomatinių organinių junginių grupei priskiriami tokie angliavandeniliai kaip ciklopropanas C_3H_6 , ciklobutanas C_4H_8 , ciklopentanas C_5H_{10} , cikloheksanas C_6H_{12} ir t. t. bei jų dariniai, kurie gaunami keičiant vandenilio atomus kitais atomais bei jų grupėmis, o taip pat bicikliniai, tricikliniai ir policikliniai alkanai bei jų dariniai, pavyzdžiui, nafteninės rūgštys ir pan.

Heterociklinių nearomatinių organinių junginių molekulių formulės sudaromos iš karbociklinių nearomatinių junginių formulių, keičiant cikluose esančius anglies atomus (vieną ar kelis) kitų nevienvalenčių elementų atomais.

Mes jau esame susidūrę su kai kurių heterociklinių junginių, kurių molekulės turi aromatinus ir nearomatinus ciklus, pavyzdžiais. Pavyzdžiui, dioksano molekulės skeletą (žiūr. 59 pav.) sudaro šešianaris ciklas, kurio nariai – keturi anglies ir du deguonies atomai. Dėl pastarųjų junginys ir buvo pavadintas dioksanu. Tačiau prie heterociklinių junginių nepriskiriamas salicilo aldehidas (žiūr. 61 pav.), nors jo molekulė ir susideda iš benzeno žiedo bei prie jo prisijungusio ciklo iš anglies ir deguonies atomų, kurį vandeniliniu ryšiu uždaro vandenilio atomas, nes šis heterociklas nėra patvarus. Dar vienu mūsų jau nagrinėto heterociklinio junginio pavyzdžiu gali būti gliukopiranozė, kurios molekulės struktūrinės formulės modelis pateiktas 80 pav., nes gliukopiranozė bent jau formaliai galima priskirti heterociklinių junginių, vadinamų piranozėmis, grupei.

Piranozės – tai jau minėti angliavandeniai, kurių molekulių pagrindą sudaro hidrintas šešianaris **pirano žiedas** (žiūr. 83 pav.), susidedantis iš 5 anglies atomų ir vieno deguonies atomo.



83 pav.

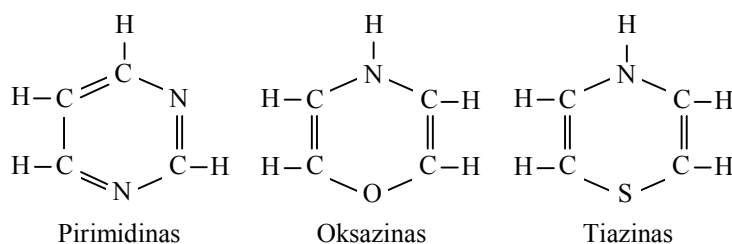
Kiekvienas pirano žiedo anglies atomas dar dviem viengubais ryšiais gali jungtis su vandenilio ar kitų elementų atomais, angliavandenilių radikalais bei su funkcinėmis grupėmis.

Kitą junginių, panašių į piranozes, grupę sudaro **furanozės**. Jų molekulių skeletas – penkianaris **furano žiedas**, susidedantis iš vieno deguonies ir 4 anglies atomų (žiūr. 83 pav.).

Heterocikliniai nearomatiniai organiniai junginiai gali turėti savo molekulių sudėtyje ciklus, susidedančius iš gana įvairaus narių skaičiaus Heterociklo, turinčio mažiausią narių skaičių – tris, pavyzdys pateiktas 83 pav. Tai etileno oksidas C_2H_4O . Egzistuoja heterociklai, turintys septynis ir daugiau narių, o taip pat **heterociklų tinklai**.

Kaip jau buvo minėta, heterocikliniuose junginiuose heteroatomais gali būti ne tik deguonies, bet ir azoto, sieros ir kitų elementų atomai.

Kai benzeno žiede vieną, du, tris ar daugiau anglies atomų pakeičia azoto atomai, tai gaunami heterocikliniai aromatiniai junginiai, vadinami **aziniais**. Priklausomai nuo azoto atomų kiekio benzeno žiede azinai gali būti monazinai, diazinai, triazinai ir t. t. Diazino, vadinamo pirimidinu, formulė pateikta 84 pav.



84 pav.

Kai kurių azinų molekulių skeletą sudarančių benzeno žiedų sudėtyje gali būti ne tik azoto, bet ir deguonies bei sieros atomų. Pirmieji iš jų vadinami **oksazinais**, antrieji – **tiazinais**. Jų formulių pavyzdžiai, taip pat pateikti 84 pav. Nagrinėdami ką tik paminėtų junginių pavadinimų kilmę, eilinį kartą susiduriame su chemijos nomenklatūros vingrybėmis: ne taip jau paprasta atsakyti į klausimą, kodėl junginys H_5C_4NO vadinamas oksazinu, o ne, pavyzdžiui, „azoksinu“.

Ciklinių junginių grupių sąrašą, keičiant ciklą bei ciklų narių skaičių ir ciklų sudėtį (t. y. cheminius elementus, sudarančius ciklą), galima tęsti ir toliau, paminint ne tik čia nagrinėjamus azinus, arsinus, fosfinus ir pan., tačiau čia to nedarysiu, nes šio skyrelio tikslas – ne išsamiai aprašyti ir sistematizuoti visas cheminių junginių grupes (tai galėtų būti atskiros specialios studijos tikslas), o tik supažindinti su tipinėmis cheminių junginių struktūromis. Norėję tik dar kartą atkreipti dėmesį į chemijos terminologijos nepakankamą apibrėžtumą, vartojant priesagas, o taip pat pailiustruoti, kaip konkrečiai pasireiškia anksčiau aprašytasis koordinacinis ryšys tarp atomų ir jų grupių, susidarant kompleksiniams junginiams, bei paaiškinti, ką reiškia kvadratiniai skliausteliai cheminėse formulėse, aprašančiose tokių cheminių junginių sudėtį.

Pradėsimė nuo pavadinime „azinas“ ką tik pavartotos priesagos „-in-“. Šiuo konkrečiu atveju ji leido iš žodžio „azotas“ gauti heterociklinio cheminio junginio, kuriame to junginio skelete esantys vienas ar keli anglies atomai pakeisti azoto atomais, pavadinimą. Atrodytų, kad panašų junginį turėtų reikšti ir žodžiai „arsinas“, „fosfinas“ ir pan. su tuo tik skirtumu, kad vietoj žodžio „azotas“ dabar turėtų figūruoti žodžiai „arsenas“, „fosforas“ ir pan.

Tačiau, pasirodo, taip nėra. **Arsinais** vadinami arseno vandenilio AsH_3 dariniai, kurių formulės gaunamos, pakeičiant vieną, du ar visus tris vandenilio atomus angliavandenilių radikalais R: $RAsH_2$ – pirminis arsinas, R_2AsH – antrinis arsinas, R_3As – tretinis arsinas. Kai R yra aromatinio angliavandenilio (arilo) radikalas, tai čia išrašytos formulės tampa **aromatinių arsinų** formulėmis. Jose gana dažnai ir kai kurie likusieji vandenilio atomai pakeičiami kitų elementų atomais bei jų grupėmis. Tokiu būdu gaunami tokie aromatiniai junginiai kaip difenilarsino chloridas $(C_6H_5)_2AsCl$, difenilarsino cianidas $(C_6H_5)_2AsCN$ ir pan. Arsinai (net aromatiniai arsinai) nepriklauso heterociklinių junginių klasei, nes arsinų molekulių formulės nėra sudaromos, pakeičiant ciklinių angliavandenilių molekulių skeletą sudarančio anglies atomų ciklo anglies atomus arseno atomais, kaip tai buvo daroma sudarant azinų formules. Taigi, **azinų ir arsinų struktūros visiškai skirtingos**, nors pavadinimai ir panašūs.

Priesaga „-in-“ žodyje „fosfinas“ vartojama analogiškai, kaip ir žodyje „arsinas“, nes **fosfinais** vadinami fosforo vandenilio PH_3 dariniai, kurie gaunami, pakeičiant PH_3 vandenilio atomus alkilo arba arilo radikalais R. Taip atsiranda pirminiai, antriniai ir tretiniai fosfinai. Jų pavyzdžiai: metilo fosfinas CH_3PH_2 , dimetilo fosfinas $(CH_3)_2PH_2$ ir trimetilo fosfinas $(CH_3)_3P$. Fosfinai taip pat gali būti ne tik nearomatiniai, bet ir aromatiniai. Pastarieji gaunami, kai radikalas R yra arilo radikalas.

Panašiai kaip arsinai ir fosfinai, sudaromi ir amoniako NH_3 dariniai, vadinami **aminais**. Taigi, išeina, kad azinai yra ypatingas atvejis, lyginant su arsinais bei fosfinais: kai azoto atomai angliavandenilio molekulės skelete keičia anglies atomus, tai gauname azinus, o kai tie patys azoto atomai prisijungia angliavandenilių radikalus, pakeisdami juose vandenilio atomus (t. y., tiesiogiai sujungdami su angliavandenilių skeletu anglies atomais ir sudarydami tų skeletų tinklą), tai gauname tretinius aminus (panašiai, kaip ir tretinius arsinus bei tretinius fosfinus).

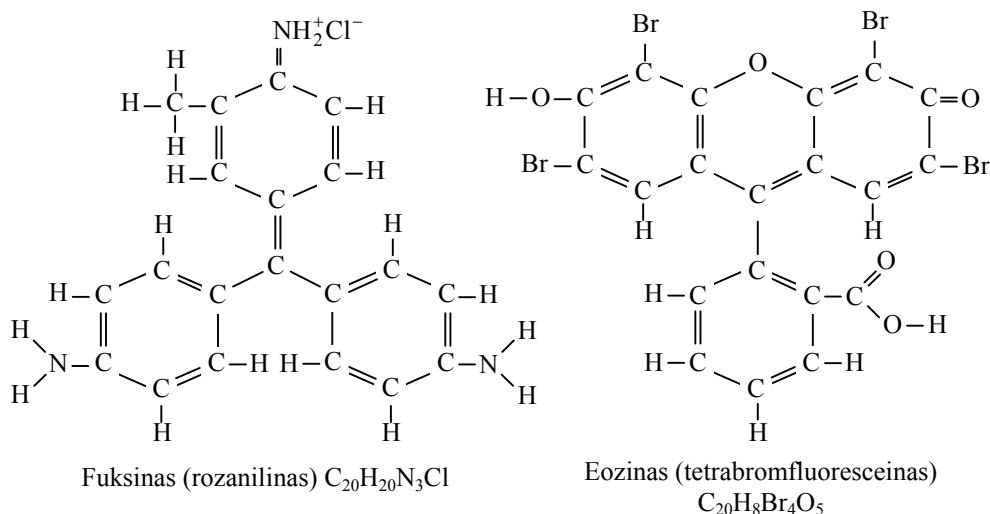
Kadangi azoto atomai gali patekti į angliavandenilio molekulės struktūrą abiem būdais, tai žodis „aminas“ gali būti kombinuojamas su žodžiu „azinas“ (pavyzdžiui, fenotiazino radikalo junginys su amoniaku vadinamas aminazinu).

Priesagos „-in-“ vartojimo sfera dar labiau išsiplečia ir tampa beveik neapibrėžta dėl tos priesagos panaudojimo tokių junginių kaip fuksino (roznilino) $C_{20}H_{20}N_3Cl$ bei eozino (tetrabromfluoresceino) $C_{20}H_8Br_4O_5$ ir pan. pavadinimuose. Šių junginių molekulių formulės vėliau bus reikalingos kaip tam tikro tipo junginių iliustracijos, todėl jos pateikiamos 85 pav.

Pirmąjį junginį – fuksiną – galima priskirti prie karbociklinių junginių, nes jo molekulės skeletą sudaro trys šešianariai ciklai sujungti į A_3 tipo žvaigždę, kurios centre yra vienas anglies C atomas, nepriklausantis nė vienam iš tų ciklų, bet priklausantis visos molekulės skeletui. Heteroatomai, tarp kurių – trys azoto ir vienas chloro atomas, nepriklauso ciklų skeletams, o atsirado fuksino formulėje, pakeitus kai kuriuos vandenilio atomus funkcinėmis atomų grupėmis. Nepriklauso ciklų skeletams ir vieną vandenilio atomą pakeitusi metano CH_4 liekana CH_3 .

Antrąjį junginį – eoziną – jau nebegalima laikyti grynai karbocikliniu junginiu, nes jo molekulę sudaro keturi ciklai, iš kurių trys išoriniai turi skeletus, sudarytus iš anglies atomų, o vidinis turi heteroatomą – deguonį. Šio junginio molekulė įdomi ne tik savo skeletu, bet ir periferija: ji turi hidroksilo $-OH$ ir karboksilo $-COOH$ funkcinės grupės, keturis bromo atomus, pakeitusius vandenilio atomus, o taip pat dar vieną deguonies atomą, dviguba jungtimi prisijungusį prie anglies atomo, priklausančio vienam iš išorinių ciklų. Pakeitę eozino formulėje bromo atomus jodo atomais, gautume

kitą analogišką junginį – eritrozina, arba jodeozina (tetrajodfluoresceina), $C_{20}H_8I_4O_5$. Įdomu, kaip būtų pavadintas analogiškas junginys, jei bromo atomus būtume pakeitę ne jodo, o fluoro atomais?



85 pav.

Palieku skaitytojams patiems spręsti, ką reiškia priesaga „-in-“ čia paminėtuose junginių pavadinimuose, atkreipdamas jo dėmesį, jog žodžio „fluoras“ panaudojimas pavadinimuose „tetrabromfluoresceinas“ ir „tetrajodfluoresceinas“ nereiškia, jog į šių junginių sudėtį įeina fluoro atomai. Šiuo atveju žodis „fluoras“ reiškia tik tai, kad šiems junginiams būdinga fluorescencijos savybė, t. y. šių junginių sužadintų atomų spinduliavimas. Taigi, pabandyk susigaudyti, kokiomis taisyklėmis vadovaujantis, suteikiami kai kuriems cheminiams junginiams jų pavadinimai! O kai dėl priesagos „-in-“, tai, atrodo, ji cheminėje terminologijoje vartojama labai laisvai: beveik bet kur ir beveik bet kaip. O jau žodelytis „oksi“ chemikų yra nepaprastai mėgiamas ir vartojamas taip pat labai plačiai. Tai ne tik mūsų jau nagrinėti oksidai bei peroksidai, hidroksilo ir karboksilo grupės, oksazinas, dioksinas ir dioksanas bei paveldimumo informacijos nešėja – dezoksiribonukleino rūgštis (DNR), bet ir įvairūs oksalatai, oksialdehidai, oksidazės, oksigenazės, oksireduktazės, oksiketonai, oksinitrilai, oksirūgštys, oksimai ir oksonio druskos ir t. t. Pabandyk susigaudyti tokioje įvairovėje!

Išnagrinėtieji pavyzdžiai dar kartą patvirtina, jog **pusiau stichiškai susiklosčiusi cheminė terminologija tikrai yra painoka ir nepakankamai griežtai apibrėžta: nežinant cheminio junginio struktūrinės formulės, vien iš jo pavadinimo ne visada įmanoma nuspręsti, kokia to junginio sudėtis ir tuo labiau – struktūra.**

Priesaga „-in-“ bei žodelis „oks“, kuris vartojamas ir kaip priešdėlis ir kaip priesaga, nėra išimtiniai atvejai. Panašių pavyzdžių galima pririnkti ir su kitomis priesagomis bei priešdėliais.

Paimkime kad ir dažnai pasitaikančią priesagą „-at-“. Ji neretai vartojama žymiai platesne prasme, negu buvo nurodyta šiame skyrelyje pateiktoje neorganinių junginių apžvalgoje, apibūdinant tokias tų junginių grupes kaip chloratai, nitratai, fosfatai, sulfatai ir t. t. Jei į tą anksčiau suformuluotą priesagos „-at-“ vartojimo taisyklę dar galima išprausti ne tik **acetatus**, bet ir **alkoholiatatus** bei **fenoliatatus**, nes pastarųjų formulės gaunamos iš alkoholių ir fenolių formulių hidroksilo vandenilį pakeitus metalu, tai išprausti į tą taisyklę, pavyzdžiui, amoniakatus, vargu, ar įmanoma.

Amoniakatais vadinami kompleksiniai junginiai, kurie gaunami, amoniakui reaguojant su druskomis ir druskos metalu ar jonu, tapusiu centriniu atomu ir akceptoriumi, prisijungiant koordinaciniais ryšiais vieną ar kelias donorines atomų grupes, vadinamas **ligandais**. Tokio **kompleksinio junginio** (o kartu – ir amoniakato) pavyzdžiu gali būti vario amoniakatas $[Cu(NH_3)_4]Cl_2$, kurio formulėje kvadratiniais skliausteliais išskirta šio kompleksinio junginio vidinė koordinacinė sfera – kompleksinis jonas $[Cu(NH_3)_4]^{2+}$. Tą **kompleksinį joną** sudaro **centrinis atomas** – **akceptorius** (šiuo atveju – vario atomas), sujungtas koordinaciniu ryšiu su donorinėmis **atomų grupėmis** – **ligandais** (šiuo atveju – tai azoto vandenilio atomų grupės NH_3). Monodentatinių ligandų, sujungtų koordinaciniu ryšiu su centriniu atomu, skaičius vadinamas kompleksinio junginio **koordinaciniu skaičiumi**, o ligando **dentatiškumas** matuojamas ligando atomų, tiesiogiai sujungtų koordinaciniu ryšiu su centriniu atomu, skaičiumi. Mūsų nagrinėjamu atveju kiekvieno ligando NH_3 dentatiškumas lygus 1, nes su centriniu vario atomu grupėje NH_3 tiesiogiai sujungtas tik azoto N atomas. Todėl vario amoniakato koordinacinis skaičius lygus 4.

Nagrinėjant įvairius kompleksinius junginius (ne tik amoniakatus), galima pastebėti, kad tų junginių koordinaciniai skaičiai dažniausiai būna lygūs 4 ar 6, nors kartais būna ir 2, 3, 5, 7 ir net 8. Taip

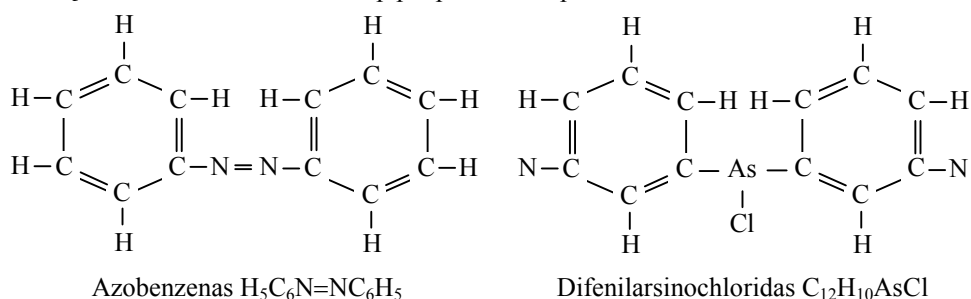
pat galima pastebėti, kad kompleksinių junginių vidinė koordinacinė sfera dažniausiai būna kompleksinis jonas, tačiau gali būti ir neutrali kompleksinė molekulė, pavyzdžiui, $[\text{Fe}(\text{CO})_5]$. Kompleksinių jonų pavyzdžiai: $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{+2}$, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{F}_2]^{+2}$, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_3(\text{NO}_2)_3]^{+2}$.

Kompleksinius junginius, kurių susidaryme dalyvauja koordinaciniai ryšiai, nagrinėja **koordinacinių junginių teorijos** (I ir II), su kuriomis (kaip ir su **molekulinių orbitalių bei valentinio ryšio teorijomis**, o taip pat su **organinių junginių sandaros teorija**) galima susipažinti šiuolaikinės chemijos kursuose. Pažintis su šiomis teorijomis naudinga ne tik chemikams, bet ir dženeralistams, besigilinantiesiems į sistemotyro problematiką, nes padėtų jiems giliau suvokti sudėtingų sistemų susidarymo „mechanizmus“ ir besiruošiantiems bendrauti su chemikais palengvintų minėtąjį bendravimą.

Tačiau grįžkime prie organinių cheminių junginių grupių ir toms grupėms priklausančių junginių molekulių tipinių struktūrų analizės. Pereisime prie tokių junginių, kurie nėra heterocikliniai, bet nėra ir homogeniniai, nes jų molekulių skeletai sudaryti ne vien tik iš anglies atomų. Juos būtų galima vadinti **heterogeniniais karbocikliniais junginiais**.

Tokio junginio pavyzdžiu galėtų būti azobenzeno molekulė, kurios struktūrą sudaro du benzeno žiedai sujungti vienas su kitu ne tiesiogiai (kaip kondensuotuose ir nekondensuotuose karbocikliniuose junginiuose), o per du azoto atomus, besijungiančius vienas su kitu dvigubuoju ryšiu (žiūr. 86 pav.).

Kitas tokio junginio pavyzdys – jau minėtasis difenilarsino chloridas, kurio molekulė taip pat sudaro du benzeno žiedai, sujungti vienas su kitu ne tiesiogiai, o per arseno atomą, prisijungusį dar ir chloro atomą. Šios molekulės formulė taip pat pateikta 86 pav.



86 pav.

Abu šie junginiai negali būti priskirti heterociklinių junginių grupei, nes ciklai, įeinantys į jų molekulių sudėtį, yra homogeniniai karbociklai. Tačiau ryšys tarp tų ciklų yra heterogeninis, ir tuo šie junginiai skiriasi nuo 85 pav. pavaizduoto fuksino, kuriame ryšį tarp trijų ciklų realizuoja anglies atomas. Skiriasi šie junginiai savo struktūra ir nuo 85 pav. pateiktos eozino molekulės sandaros, kurioje visi keturi ciklai sujungti arba bendrais anglies atomais (kondensuotas trijų ciklų jungimas) arba tiesioginiu ryšiu tarp dviejų anglies atomų, priklausančių dviem ciklams (nekondensuotas benzeno žiedo prisijungimas prie vidurinio ciklo). Patį eoziną taip pat reikėtų priskirti prie nehomogeninių junginių, tikrai dėl kitos priežasties: vienas į jo molekulės sudėtį įeinančių ciklų yra heterogeninis, nes jį sudaro ne tik anglies atomai, bet ir deguonis.

Taigi dar kartą pabrėžiu, jog iš **angliavandenilių, keičiant jų molekulėse vandenilio atomus kitų elementų atomais, funkcinėmis grupėmis bei angliavandenilių radikalais, o taip pat molekulių skeletą sudėtyje esančius anglies atomus kitų elementų atomais bei jungiant angliavandenilių skeletus kitų elementų atomais, galima sudaryti daug pačių įvairiausių organinių junginių: pačių angliavandenilių, karbonilinių junginių (aldehidų, chinonų, ketonų ir t. t.), organinių rūgščių ir jų darinių (amidų, esterių, nitrilų ir t. t.), hidroksilinių junginių ir jų analogų (alkoholių, fenolių, naftolių, tioalkoholių, tioeterių ir t. t.), metalų organinių junginių ir t. t., ir t. t.**

Svarbiausias organinių junginių grupės ir joms būdingas tipinės molekulių struktūras, galima sakyti, jau esame apžvelgę, jų tarpe – angliavandenilius ir jų klasifikavimo „medį“ (žiūr. 73 pav.) bei jų homologines ir izologines eiles (žiūr. 74 pav.), organines rūgštis ir tokias jų grupes kaip aldehidinės, karboninės, ketoninės sulfo – ir aminorūgštys, aldehidus, ketonus, chinonus, ketenus, alkoholius, fenolius, naftolius, tioalkoholius, alkoholiatus, fenoliatus, naftoliatus, formiatus, organinius metalų junginius, esterius (tame tarpe ir riebalus), eterius (tame tarpe ir tioeterius), angliavandenius bei tokias jų grupes kaip monosacharidai, oligosacharidai ir polisacharidai, azino – ir azojunginius, nitrilus, aminos, amidas, aminocukrus, aminoketonus ir aminofenolius, azinus, arsinus, fosfinus, tokias baltymų grupes kaip proteinai ir proteidai, pirmines, antrines, tretines ir ketvirtines baltymų struktūras, kompleksinius organinius junginius ir t. t.

Belieka pabandyti sistematizuoti čia išvardintų ir neišvardintų pagrindinių pirminių junginių aibę, panašiai kaip buvo sistematizuoti angliavandeniliai (žiūr. 73 ir 74 pav.), o po to trumpai apžvelgti paprastų organinių junginių sintezę į sudėtingesnius organinius junginius – organinius polimerus.

Priklausomai nuo molekulių skeleto sandaros organinius junginius galima suskirstyti į homogeninius ir heterogeninius, aciklinius ir ciklinius, o pastaruosius – į aliciklinius ir aromatinčius.

Panašiai kaip ir angliavandeniliai visi organiniai junginiai gali būti suskirstyti į sočiųuosius ir nesočiųuosius, o pastarieji – pagal dvigubų bei trigubų jungčių kiekį ir jų išdėstymą molekulės struktūroje – gali būti suskirstyti dar į smulkesnes grupes (panašiai kaip 73 pav.).

Naudojantis mūsų jau nagrinėtomis angliavandenilių homologinėmis ir izologinėmis eilėmis, galima sudaryti **organinių junginių genetines eiles**, t. y. eiles tokių organinių junginių, kurių molekulių formulės sudaromos jungiant vieną ir tą patį angliavandenilio radikalą su įvairiais elementais bei įvairiomis funkcinėmis grupėmis. Genetinės eilės pavyzdžiu gali būti metano genetinė eilė: metanas CH_4 , metilo chloridas (chlormetanas) CH_3Cl , metilo alkoholis (metanolis) CH_3OH , metilaminas CH_3NH_2 , nitrometanas CH_3NO_2 ir t. t. Analogiškai sudaromos etano ir kitų sočiųjų ir nesočiųjų aciklinių angliavandenilių darinių genetinės eilės, o taip pat ir ciklinių angliavandenilių darinių, pavyzdžiui, benzeno genetinė eilė: benzenas C_6H_6 , chlorbenzenas $\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$, fenolis $\text{C}_6\text{H}_5\text{O}$, anilinas $\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$, nitrobenzenas $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$ ir t. t.

Organinius junginius, kurių molekulių formulės turi vienodas funkcines grupes ir skiriasi tik angliavandenilių radikalais, galima išrikiuoti ir į **organinių junginių homologines eiles**. Tokios eilės pavyzdys: metilo alkoholis (metilo spiritas, metanolis) CH_3OH , etilo alkoholis (etanolis) $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, propilo alkoholis (propanolis) $\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$ ir t. t. Analogiškai gali būti rikiuojami aminorai, ketonai, organinės rūgštys ir pan.

Organinius junginius, kurių molekulės turi vienodas funkcines grupes galima išrikiuoti ir į **izologines eiles**: $\text{CH}_3\text{--CH}_2\text{--CH}_2\text{Cl}$, $\text{CH}_2\text{=CH--CH}_2\text{Cl}$, $\text{HC}\equiv\text{C--CH}_2\text{Cl}$ ir pan.

Baigiant organinių cheminių junginių ir jų struktūrų apžvalgą, galima padaryti išvadą, kad **nors žinomų organinių junginių aibė yra žymiai gausesnė už žinomų neorganinių junginių aibę, tačiau ją sistematizuoti, atrodo, yra paprasčiau negu neorganinių cheminių junginių aibę.**

Kaip jau buvo minėta, yra dar viena molekulių dydžio ir jų struktūros atžvilgiu ypatinga organinių ir neorganinių cheminių junginių grupė, kurią, baigiant cheminių junginių struktūrų apžvalgą, derėtų panagrinėti. Šią junginių grupę vadina **polimerais**, nes šių junginių molekulės (**makromolekulės**) susideda iš didelio skaičiaus besikartojančių ir tam tikra tvarka reguliariai ar atsitiktinai išsidėsčiusių „modulių“, vadinamų **monomerinėms** (arba pasikartojančiomis) **grandimis**.

Polimerai gali susidaryti iš nesočiųjų angliavandenilių (pavyzdžiui, etileno C_2H_4 , propileno C_3H_6 , izobutileno C_4H_8 ir t. t.), iš ciklinių angliavandenilių (pavyzdžiui, stireno $\text{C}_6\text{H}_5\text{--CH=CH}_2$), angliavandenių (pavyzdžiui, D–gliukozės $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_6$), o taip pat iš deguonies, sieros, fosforo, azoto, silicio, seleno, germanio, boro ir pan. junginių su vandenilio atomais, angliavandenilių radikalais, funkcinėmis grupėmis bei kitų elementų (pavyzdžiui, halogenų) atomais.

Nemaža dalis polimerų yra **gamtiniai**. Pavyzdžiui, baltymai – tai polimerai, kurie sudaryti iš monomerų – amino–rūgščių likučių; celiuliozė ir krakmolai – polisacharidai, sudaryti iš monomerų – D–gliukozės likučių $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5$; nukleino rūgštys – iš nukleotidų; natūralusis kaučiukas – iš izopreno C_5H_8 molekulių ir t. t.

Labai sparčiai išaugo ir tebeauga **sintetinių polimerų** skaičius. Šiai grupei priklauso žinomas polietilenas, ir polipropilenas, polistirenas, polivinil–chloridas, poliakrilatai, sintetiniai kaučiukai, karbamidinės dervos, įvairūs sintetiniai pluoštai (kapronas, nailonas ir t. t.). Vienas seniausiai žmonijai žinomų polimerų yra stiklas, tačiau tai, kad stiklas yra polimeras, žmonės sužinojo ne taip jau seniai.

Pagal tai, iš kokių monomerų sudarytos polimerų molekulės, polimerai skirstomi į homopolimerus ir kopolimerus.

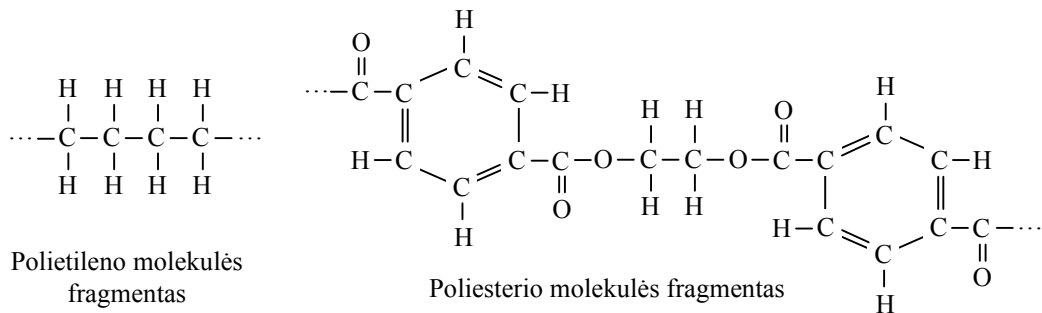
Homopolimerai – tai polimerai, kurie sudaryti tik iš vienos rūšies (vienodų) monomerų. Homopolimerų pavyzdžiai: polietilenas, polipropilenas, polibutilenas, poliizobutilenas, polistirenas, poliakrilatai ir t. t. Homopolimerų formulės sudaromos taip: užrašoma monomero formulė kartu su jo išoriniais ryšiais ir patalpinama į kvadratinį skliaustelį, panašiai kaip kompleksinių jonų formulės. Dešiniojoje žemutinėje skliaustelių pusėje nurodomas indeksas n – polimerizacijos laipsnis (t. y. monomerų skaičius polimero makromolekulėje). Tais atvejais, kai monomere tam tikra atomų grupė gali užimti ne griežtai pastovią vietą, ta grupė patalpinama į apvalius skliaustelius. Homomerų bendrųjų formulių pavyzdžiai: polietileno $\{\text{CH}_2\text{--CH}_2\}_n$, polipropileno $\{\text{CH}_2\text{--CH}\}_n$, polivinilo alkoholio

$\{\text{CH}_2\text{--CH}\}_n$, polivinilo acetato $\{\text{CH}_2\text{--CH}\}_n$, polivinil–chlorido $\{\text{CH}_2\text{--CHCl}\}_n$, poliakrilatų $\{\text{CH}_2\text{--CH}\}_n$, kur R – angliavandenilio radikalas, nuo kurio priklauso poliakrilato tipas; poliakril–nitrilo $\{\text{CH}_2\text{--CH}\}_n$, polivinil–acetalių $\{\text{CH--CH}_2\text{--CH--CH}_2\}_n$. Polietileno (kaip linijinio

homopolimero pavyzdžio) makromolekulės fragmentas pateiktas 87 pav. kairiojoje pusėje.

Kopolimerais vadinami polimerai, sudaryti iš nevienodų monomerų. Dažniausia susidaro **bipolimerai**, tačiau pasitaiko **terpolimerų**, **tetrapolimerų** ir net **multipolimerų**. Kopolimero pavyzdys – poliesteriai $\{OC-R-COO-R'-O\}_n$, kurių makromolekules sudaro periodiškai besikartojančios esterinės grupės $-C(=O)-O-$ ir divalenčiai radikalai R ir R'. Vieno paprasto poliesterio makromolekulės

fragmentas pateiktas 87 pav. dešinėje pusėje.



87 pav.

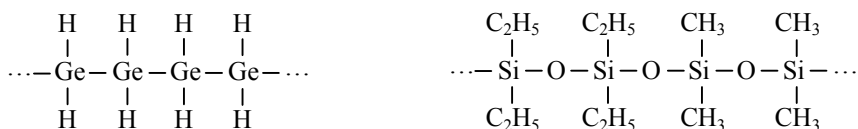
Pagal monomerų grandžių išsidėstymo tvarką makromolekulėje kopolimerai skirstomi į **reguliariusius** ir **statistinius**. Pastaruosiuose monomerų grandys išsidėsčiusios atsitiktinai ir todėl makromolekulės struktūroje nėra griežtai apibrėžto periodiškumo, būdingo reguliariesiems polimerams.

Pagal makromolekulės struktūrą polimerai skirstomi į **linijinius**, **šakotuosius** ir **tinklinius** (erdvinius).

Kopolimerai, kurių makromolekulės sudarytos iš vienas po kito sekančių blokų, sudarančių tų blokų grandinę, vadinami **blokiniais**, o tie, kurių makromolekulės yra šakotos – **priskiepytaisiais**. Priskiepytųjų kopolimerų atšakos gali skirtis savo sudėtimi ir struktūra nuo pagrindinės grandinės sudėties ir struktūros.

Polimerai, kurių pagrindinės grandinės sudarytos iš vieno cheminio elemento atomų, vadinami **homograndiniais**, o tie polimerai, kurių pagrindinės grandinės skeleto sudėtyje yra skirtingų elementų atomų – **heterograndiniais polimerais**. Polietilenas, kurio molekulės fragmentas pavaizduotas 87 pav. kairėje pusėje, priklauso linijinių homograndinių polimerų grupei, o dešinėje pusėje pavaizduotas poliesteris – blokinis heterograndinių kopolimerų grupei.

Tarp homograndinių polimerų labiausiai paplitę **karbograndiniai** polimerai, kurių pagrindinės grandinės skeletą sudaro anglies atomai. Tačiau gali būti sudaryti homograndiniai polimerai, kurių molekulių skeletą sudaro silicio, germanio, sieros, fosforo, seleno ir kitų elementų atomai. Tokių polimerų, nepriklausančių karbograndiniams, makromolekulių fragmentų pavyzdžiai pavaizduoti 88 pav.



88 pav.

Šakoto polimero pavyzdžiu gali būti krakmolo makromolekulė, o erdvinio (arba tinklinio) polimero – kai kurie poliesteriai, suketintos fenol-formaldehidinės karbamidinės dervos.

Polimerų makromolekulės gali susidaryti dviem būdais: **polimerizacijos** ir **polikondensacijos** cheminių reakcijų metu.

Polimerizacijos metu polimero makromolekulė susidaro monomerams nuosekliai jungiantis prie aktyvaus centro, esančio augančios polimero grandinės pabaigoje. Priklausomai nuo aktyvaus centro polimerizacija skirstoma į radikalinę ir joninę.

Radikalinės polimerizacijos metu aktyvusis centras yra laisvasis radikalas $R^\bullet$ (todėl šis polimerizacijos tipas ir vadinamas radikaline polimerizacija). Jis kovalentiniais ryšiais prisijungia monomerą, po to prie to monomero – antrą monomerą ir t. t. Taip prasideda polimero makromolekulės formavimasis. Šis makromolekulės augimo procesas vyksta iki tol, kol auganti makromolekulė susiduria su kitu aktyviuoju centru arba su kitos medžiagos, skirtingos nuo prisijungiamų monomerų, molekule.

Panašiai vyksta ir **joninė polimerizacija**, tik šiuo atveju aktyvusis centras yra jonas (katijonas ar anijonas), prisijungiantis monomerus joniniais ryšiais.

Pagal tai, kokie monomerai prijungiami prie augančios makromolekulės, polimerizaciją skirsto į du tipus: į **homopolimerizaciją** ir į **kopolimerizaciją**.

Polikondensacijos reakcijai būdinga tai, kad jos metu susidaro polimerai iš monomerų, turinčių funkcinių grupių, kurių kai kurie atomai monomerų jungimosi metu eliminuojami ir tokiu būdu monomerai kondensuojasi į makromolekulę (panašiai, kaip ciklinių angliavandenilių ciklai kondensuojasi į kondensuotą struktūrą, susidarant kondensuotiems cheminiam junginiam). Dėl kai kurių atomų eliminavimo, monomerams jungiantis į makromolekulę, polikondensacijos reakcijos metu susidaro ne tik polimero makromolekulė, bet ir mažos molekulinės masės junginiai (vandens, alkoholių, vandenilio halogenidų molekulės ir pan.). Pavyzdžiui, polikondensuojant glikolį HOROH, kur R yra $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$, ir dikarboksi-rūgštį $\text{HOOCR}'\text{COOH}$, kur R' – angliavandenilio radikalas, susidaro ne tik poliesterio $\{\text{OROOCR}'\text{CO}\}_n$ makromolekulė, bet ir vandens H_2O molekulės. Polikondensacijos reakcijos metu susidaro poliesteriai, amino ir fenolio aldehydinės dervos, daugelis poliamidų, kai kurie silicio organiniai polimerai.

Polimerizacija (homopolimerizacija, kopolimerizacija), polikondensacija, o taip pat **depolimerizacija** – struktūrų algebros formalų operacijų, kurios bus nagrinėjamos 1.9.2. skyrelyje, konkretūs pavyzdžiai. Prie tokių operacijų prototipų gali būti priskirtos ir kitos įvairios (visų pirma – tipinės) cheminės reakcijos. **Struktūrų algebros sukūrimas ir taikymas chemijoje – perspektyvi chemijos mokslo matematizavimo ir kompiuterizavimo kryptis.**

Baigdamas tipinių struktūrų chemijoje apžvalgą, norėčiau pažymėti, kad kai kurioms sudėtingoms tipinėms struktūroms suteikiami **specialūs sutrumpinti žymėjimai, susidedantys iš kelių (dažniausiai – trijų) raidžių**. Pavyzdžiui, dezoksiribonukleino rūgštis sutrumpintai žymima DNR, dimetilformamidas – DMF, adenožio trifosfato rūgštis – ATF, nikotinamidadenino dinukleotidas – NAD, adenožindifosforo rūgštis – ADF, polietilenas – PE ir t. t.

Ypatingai dažnai tokie žymėjimai taikomi **biochemijoje**, kurioje vartojamos **blokinės cheminės formulės**, susidedančios iš **tipinių blokų pavadinimų santrumpų**. Pavyzdžiui, **polipeptido grandinė** vaizduojama tokia blokine formule: Gli–Asp–Liz–Glu–Gli–Arg–His–Ala–Gli–Asp–Glu–Arg–Arg–His–Liz–Asp–Glu–Liz–Asp. Žinant, ką žymi tipinės triraidės santrumpos (mnemoniniai žymenys), nesunku atkurti visą polipeptido grandinę, išreiškiant ją struktūrinių cheminių formulių kalba.

Baigdamas šį skyrelį, trumpai suformuluosiu jo tikslus, kurių buvo siekiama, pateikiant čia šio skyrelio tekstą:

1) pratęsti ankstesniuose skyreliuose pradėtą **materijoje egzistuojančių realių struktūrų hierarchinės sistemos nagrinėjimą**, parodant, kaip 1.9.1.2. skyrelyje išnagrinėtos atomų elektroninių apvalkalų struktūros gali jungtis į sudėtingesnes molekulių elektroninių apvalkalų struktūras bei kaip iš palyginti nedidelio atomų rūšių skaičiaus susidaro milžiniška cheminių junginių įvairovė su jų cheminėmis bei fizinėmis savybėmis, ir tuo pačiu **pailiuoti, kaip šioje, palyginti dar elementarioje, materialaus pasaulio sandaros stratoje jau pasireiškia sistematyros mokslui labai įdomus ir svarbus emerdzencijos reiškinys**;

2) **supažindinti skaitytojus su dar viena tipinių struktūrų ir operacijų su jomis aibe – su chemijos moksle nagrinėjamomis pagrindinėmis struktūromis bei su jų sąveikavimo ir vaizdavimo būdais**, nesugaištant tiek daug laiko, kiek prireiktų, studijuojant specialią cheminę literatūrą patiems skaitytojams ir stengiantis savarankiškai susipažinti su molekulių struktūromis (kitą variantą, šių eilučių autoriaus kadaise sugaištas laikas turėtų padėti skaitytojui pasiekti šį tikslą ir sistematyriškai bei dženeralistui pakankamą elementaraus cheminio išprusimo lygį, sugaištant jau žymiai mažiau laiko);

3) atkreipti skaitytojo dėmesį į **erdvinės izomerijos (konformerijos, cistransizomerijos, sandaros izomerijos, optinės izomerijos) ir kitus panašius reiškinis, įrodančius, jog sistemos būseną ir jos savybės gali keistis net tada, kada sistema išlieka izomorfiška tiesioginių tarpelementinių ryšių egzistavimo bei neegzistavimo atžvilgiu, bet keičiasi elementų bei jų grupių padėtis erdvėje vienas kito atžvilgiu, o taip pat į tai, kad ryšiai tarp elementų gali realizuotis įvairiais būdais, nuo ko gali priklausyti sistemos stabilumas ir kitos jos savybės**;

4) padėti skaitytojui, remiantis šiame skyrelyje pateiktomis žiniomis apie cheminių junginių struktūras ir chemines reakcijas, **giliau ir plačiau suvokti bei patikslinti sistemos struktūros ir izomorfizmo, ryšių tarp sistemos elementų bei operacijų struktūrose ir tarp struktūrų sąvokas, konkretizuoti ir interpretuoti besikuriančio naujo mokslo – struktūrų algebros – abstrakčius terminus, sistematizuoti faktines žinias, sudarančias empirinį to mokslo pagrindą**;

5) **šiek tiek sistematizuoti skaitytojų chemines žinias, bandant pažvelgti į cheminių junginių aibę kaip į tai, kas galėtų ir privalėtų būti sujungta į antrojo tipo sistemą, palengvinant sunkiai apžvelgiamos sistemos nagrinėjimą**;

6) **pateikti objektyviai egzistuojančios, tačiau dar pilnai neatrastos ir matematiškai (grafikai ar dar koku nors būdu) neišreikštos antrojo tipo sistemos ir jos atributinės struktūros**

pavyzdį, iliustruojantį 1.7.6. skyrelyje išsakytą mintį apie santykį tarp atributinės ir reliacinės struktūrų, apie realiai egzistuojančią **atributinę** ir apie „užslėptą“ (kol kas dar nepamatytą) **reliacinę struktūrą**;

7) iškelti sistematyvininkams ir chemikams aktualų uždavinį – **cheminių junginių antrojo tipo sistemos sudarymo uždavinį**, t. y. tos sistemos reliacinės struktūros radimo uždavinį, remiantis jos atributinės struktūros nagrinėjimu ir egzistuojančių cheminių ryšių veikimo „mechanizmų“ išsiaiškinimu bei taikant begalinių skaičių aibių elementų kodavimo ir rikiavimo metodus;*

8) šiek tiek **atnaujinti ir papildyti skaitytojų žinias chemijos srityje, integruojant jas su žiniomis atominės fizikos srityje, kad skaitytojai – būsimieji sistematyros (tame tarpe ir – sisteminio modeliavimo ir sisteminio projektavimo) specialistai bei dženeralistai – būtų pajėgūs dalykiškai aptarinėti su chemijos ir fizikos mokslų atstovais bendras mokslines ir technines problemas, suprasti chemijos mokslo atstovų vartojamą terminologiją ir reikšti savo mintis to mokslo atstovams suprantama kalba, kurią pastarieji galėtų laikyti pakankamai informatyvia, kompaktiška ir ne visai diletantiška.**

Šiame skyrelyje pateikta trumpa cheminių junginių ir jų struktūrų apžvalga dar nėra pakankamai pilna tipinių struktūrų chemijoje ir realiai vykstančių operacijų su jomis sisteminė analizė, kuri reikalinga, kuriant cheminių junginių struktūrų algebrą. **Tai tik tokios analizės pradžios iliustracija.** Reikia, kad atsirastų kolektyvas, sudarytas iš chemikų, fizikų, informatikų ir sistematyvininkų, kuris tą analizę pratęstų, **išskirtų elementarias tipines struktūras chemijoje ir elementarias operacijas su jomis** ir sudarytų jų matematinius modelius, sukurdamas cheminių junginių antrojo tipo sistemą. Tas didelis darbas dar priešaky. Kas jam ryšis?

Prieš pradėdant šį didelį darbą, „apšilimui“ būtų naudinga atlikti **dabar žinomų cheminių junginių ir jų pavadinimų inventorizaciją**, naudojantis kompiuterine technika ir sukuriant atitinkamą programinę įrangą, o po to (tos inventorizacijos pagrindu) pabandyti sukurti tų **junginių aprašymo kalbą, savotišką „chemijos esperanto“**, kuri būtų žymiai paprastesnė ir vienareikšmiškesnė negu dabar vartojama taip vadinamoji „chemijos nomenklatūra“ ir neturėtų akivaizdžių trūkumų, neleistinų tiksluosiuose moksluose vartojamose mokslinėse kalbose.

Tie trūkumai, kurių dalis buvo išvardinta ir šioje trumpoje (todėl gana paviršutiniškoje ir nepilnoje) apžvalgoje, atliktoje kaupiant struktūrų algebros kūrimui reikalingą informaciją, dabartinėje „chemijos nomenklatūroje“ atsirado gana natūraliai ir neišvengiamai dėl dviejų priežasčių.

Pirmoji priežastis – **neaprepiamai didelė ir sparčiai auganti atrastų bei sukurtų ir atrandamų bei sukuriamų cheminių junginių įvairovė**, kurią labai sunku apžvelgti net didelio kolektyvo intelektu ir dar sunkiau kaip nors suklasifikuoti.

Antroji priežastis – **chemijos mokslas ir jo kalba istoriškai formavosi ir formuojasi beveik stichiškai**, be išankstinio plano ir projekto, tame procese dalyvavo ir dalyvauja daugybė žmonių ne visada turėjusių bei turinčių galimybę tiesiogiai bendrauti ir derinti savo darbus bei tuos pavadinimus, kurie buvo suteikiami atrandamiems bei sukuriamiems cheminiams junginiams.

Todėl chemijos kalbos „žodynas“ ir „gramatika“ formavosi ir formuojasi pusiau stichiškai, „natūralios atrankos“ keliu. Atėjo laikas apžvelgti tą natūralią kūrybą ir atlikti chemijos mokslo mokslinės kalbos kūrimo darbą nuosekliau, sistemiškiau ir kardinaliau, nei dabar jį atlieka IUPAC sudėtyje veikiančios bent kelios „chemijos nomenklatūros“ komisijos. Jų darbo rezultatas bent jau kol kas negali būti laikomas patenkinamu. Matyt, į tų komisijų darbą reikėtų įtraukti matematikus, informatikus ir sisteminius analitikus bei sisteminius projektuotojus.. Juk šios problemos aktualumas buvo pastebėtas dar XVIII a, tačiau ji patenkinamai neišspręsta iki šiol.

Pavyzdžiui, derėtų sugriežtinti priesagų ir priešdėlių vartojimo taisykles ir jų taikymo tvarką, kad būtų išvengta homonimijos ir sumažinta sinonimija, kad „cheminė nomenklatūra“ galėtų aprašyti visus galimus cheminius junginius ir leistų juos vienareikšmiškai klasifikuoti, atsižvelgiant ne tik į jų sudėtį, bet ir struktūros ypatumus. Reiktų turtinti bei tobulinti ir chemijos formulių kalbą.

Dabar, **tęsdamas hierarchinės materialų struktūrų sistemos nagrinėjimą**, pereisiu prie dar vienos gana turtingos ir gana įdomios gamtoje egzistuojančių struktūrų klasės – **kristalų tipinių struktūrų**. Jų apžvalga ne tik praturtins skaitytojų žinias apie struktūras, egzistuojančias gamtoje, bet ir padės suprasti, **kaip iš mikrostruktūrų atsiranda makrostruktūros bei kaip empirinę indukcinę metodologiją gali papildyti teorinė dedukcinė metodologija.** Tai labai svarbu suvokti, norint pradėti kurti struktūrų algebrą.

1.9.1.4. Kristalų tipinės struktūros

Atomai ne visuomet jungiasi į molekules. Tokiose medžiagose, kaip, pavyzdžiui, metalų halogenidai, atomai, jungdamiesi cheminiais ryšiais, sudaro erdvinį karkasą, kuriame nėra grupuočių,

* Vienas tokių metodų, kaip jau buvo minėta, aprašytas šios mokymo priemonės 1.5.11. skyrelyje.

galinčių būti pavadintomis medžiagos, sudarančios tą karkasą, molekulėmis. Tačiau tame erdviniam karkase **atomai išsidėstę ne bet kaip, o tam tikra tvarka, kuriai būdinga ta ar kita simetrija**, kuri nulemia, kad tos **medžiagos savybės priklauso ne tik nuo jos sudėties**, t. y. nuo to, iš kokių atomų tas erdvinis karkasas sudarytas, **bet ir nuo tų atomų išsidėstymo tvarkos, nuo jų išsidėstymo vektoriaus krypties tame erdviniam karkase**, nuo kampų, kuriuos sudaro tos ar kitos krypties vektorius su to karkaso simetrijos ašimis bei plokštumomis. Medžiagos savybių priklausomybės nuo krypties reiškinių vadina **anizotropija**. Ši sąvoka yra priešinga **izotropijos** sąvokai, kuri reiškia medžiagos savybių nepriklausomybę nuo krypties, jų vienodumą visomis kryptimis.

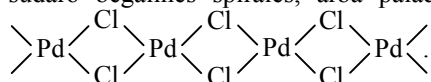
Izotropijos reiškinys būdingas medžiagoms, kurias mes vadiname **amorfinėmis**, o anizotropijos – medžiagoms, kurioms būdinga struktūra, vadinama **kristaline struktūra**, t. y. **medžiagės dalelių išsidėstymas tam tikra tvarka, kurioje egzistuoja daugiau ar mažiau simetrijos elementų** (simetrijos centrų, simetrijos ašių, simetrijos plokštumų ir t. t.). Ši medžiagos dalelių išsidėstymo tvarka kristaliniuose kūnuose dažnai vadinama **tolimąja tvarka**. Amorfiniuose kūnuose galima pastebėti taip vadinamąją **artimąją tvarką**, pasireiškiančią mažuose atstumuose ($\sim 10 \text{ \AA}$). Amorfinius kūnus galima laikyti **peršaldytais skysčiais**, turinčiais didelį **klampumo koeficientą**.

Kai kristalinė struktūra yra sudaryta iškart **tiesiog iš tų medžiagą sudarančių atomų**, jiems prieš tai nesusijungiant į molekules, tai tokią kristalinę struktūrą vadina **homodesmine**. Homodesminę kristalinę struktūrą turi deimantas, šarminių metalų halogenidai, metalai.

Tačiau ne visos kristalinės struktūros yra homodesminės. Žymiai dažniau pasitaiko **heterodesminės kristalinės struktūros**. Šioms struktūroms būdinga tai, kad jos sudarytos ne tiesiogiai iš atomų, o iš tų atomų junginių – **struktūrinių fragmentų** (pavyzdžiui, įvairių molekulių), į kuriuos atomai sujungti ypatingai tvirtais ryšiais (dažniausiai – kovalentiniais). Tie fragmentai gali sudaryti saleles, grandines, sluoksnius, karkasus, todėl heterodesminės kristalinės struktūros gali būti **karkasinės, sluoksninės, grandininės, salelių ir salynų tipo**.

Pastarojo (t. y. salelių ir salynų) tipo kristalinės struktūros būdingos daugeliui organinių junginių, o taip pat tokių neorganinių medžiagų kaip halogenų, kieto (žemoje temperatūroje) deguonies O_2 , azoto N_2 , anglies dioksido CO_2 , azoto oksido N_2O_4 , sulfatų, nitratų, karbonatų kristalams. Salelės sudaro molekules, dėl to tokie kristalai vadinami **molekuliniais**. Tokių kristalų yra daugiausia.

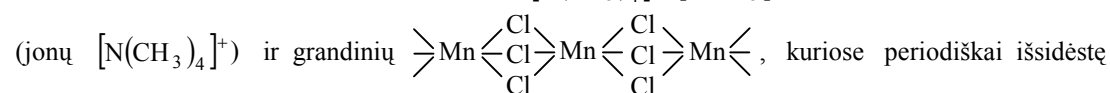
Grandininę struktūrą turi, pavyzdžiui, vienos seleno modifikacijos kristalai, kurių atomai sudaro begalines spirales, arba paladžio chlorido $PdCl_2$ kristalai, kuriuose yra begalinės juostos



Sluoksninę struktūrą turi grafito, boro nitrido BN, molibdeno sulfido MoS_2 kristalai.

Karkasinės kristalinės struktūros pavyzdys – kalcio titanato $CaTiO_3$ kristalai. Šioje struktūroje titano Ti ir deguonies O atomai, jungdamiesi kovalentiniais ryšiais, sudaro ažūrinį karkasą, kurio tarpuose yra įsiterpę kalcio Ca atomai.

Heterodesminės kristalinės struktūros, sudarytos iš skirtingos sudėties ir struktūros fragmentų, pavyzdys – kompleksinio junginio $[N(CH_3)_4]^+ \cdot [MnCl_3]^-$ kristalai. Jie sudaryti iš salelių



mangano atomai ir chloro atomų trejetai. Saleles ir juostas jungia elektrostatinės traukos ryšiai.

Gana dažnai net skirtingos kristalinės medžiagos turi vienodas struktūras. **Izomorfiškų** kristalinių medžiagų pavyzdys – natrio chloridas NaCl, kalio chloridas KCl, chloras Cl_2 , bromas Br_2 . Jų struktūros priklauso kubinei sistemai. Iš izomorfiškų medžiagų neretai susidaro **mišrūs kristalai**. Pavyzdžiui, kalio chloridas KCl ir kalio bromidas KBr gali sudaryti kietuosius pakaitos tirpalus.

Tačiau neretai būna ir taip, kad viena ir ta pati kristalinė medžiaga, gauta skirtingomis sąlygomis, gali turėti skirtingas kristalines struktūras. Tokį reiškinį vadina **polimorfizmu**. Polimorfizmo pavyzdžiai: anglis C turi dvi alotropines atmainas – grafitą, kurio kristalai priklauso heksagoninei sistemai, ir deimantą – kubinės sistemos atstovą; baltasis alavas Sn turi tetragoninę centruoto tūrio gardelę ir yra plastiškas metalas, o pilkasis alavas turi panašią į deimanto kubinę gardelę ir yra trapus puslaidininkis; titano oksidas turi tris polimorfines modifikacijas – rutilą, anatazą ir brukitą; sieros kristalai gali būti monoklininės ir rombinės sistemos. Sluoksninės sandaros kristaluose aptinkamas polimorfizmo atvejis vadinamas **politipizmu**. Politipinių modifikacijų, susidedančių iš skirtingai išsidėsčiusių ir neperiodiškai pasikartojančių vienuodų atomų sluoksnių ar sluoksninių paketų, turi silicio karbidas, žerutis. Viena polimorfinė modifikacija, keičiant sąlygas, gali pereiti į kitą. Polimorfizmą vadina **grįžtamuju (enantiotropiniu)**, kai vienos modifikacijos virtimas į kitą yra grįžtamas. **Negrįžtamasis polimorfizmas** vadinamas **monotropiniu**. Vieninės medžiagos polimorfizmas vadinamas **alotropija**. Alotropijos pavyzdys – jau minėtieji deimantas ir grafitas.

Pagal ryšio tarp atomų homodesminėje struktūroje arba tarp struktūrinių fragmentų heterodesminėje struktūroje pobūdį kristalai skirstomi į **kovalentinius** (pavyzdžiui, silicio karbidas SiC, deimantas C), **joninius** (natrio chloridas NaCl bei kiti šarminių metalų halogenidai), **metalinis** (metalai ir intermetaliniai junginiai), **molekulinius** (jų pavyzdžiai jau buvo nurodyti anksčiau, pridursime dar inertinių dujų kristalus) ir **vandeniliškuosius** (pavyzdžiui, ledo kristalai).*

Toks skirstymas yra sąlyginis, nes vienokios struktūros kristalai gali laipsniškai virsti kitokios struktūros kristalais. Nustatyta, jog **patvariausia kristalinė struktūra yra tokia, kuri tam tikrame slėgyje ir tam tikroje temperatūroje turi mažiausią laisvąją energiją**, t. y. tą energiją, kurią galėtų išskirti kristalas, keisdamas savo struktūrą į dar stabilesnę, jei tokia galėtų būti.

Kristalo laisvąją energiją reikia skirti nuo **kristalinės gardelės energijos**, t. y. nuo energijos, reikalingos kristalinės struktūros suardymui, jos išsklaidymui į elementus: atomus, jonus ar molekules.

Kristalinės gardelės energija visų pirma priklauso nuo cheminio ryšio tarp gardelės elementų tipo, o taip pat ir nuo jos sudėties, t. y. nuo pačių tą gardelę sudarančių elementų (jų branduolių elektrinio krūvio, atomų elektroninio apvalkalo išorinio sluoksnio bei posluoksnio numerių, atstumų tarp elektronų ir branduolių ir t. t.). Kristalinių gardelių energijos priklausomybę nuo cheminio ryšio tipo iliustruoja 36-oji lentelė, pateikta 1.9.1.3. skyrelyje. Kad ta energija priklauso ne tik nuo cheminio ryšio tipo, bet ir nuo kristalo sudėties, iliustruoja tos lentelės eilutės, skirtos geležies ir natrio kristalų gardelėms, kuriose atomai surišti metališkuoju ryšiu. Kaip matyti iš tų eilučių palyginimo, geležies kristalo gardelių išardymui reikia apie tris su puse karto daugiau energijos negu natrio kristalui.

Kristalinėms struktūroms būdinga **simetrija** – vienodų geometrinių ir fizinių savybių kristalo dalių dėsningas kartojimasis erdvėje, leidžiantis tas dalis sutapatinti, atliekant su kristalų struktūra tam tikras operacijas (posūkį, veidrodinį atspindį, lygiagretų poslinkį), vadinamas **simetrijos operacijomis** (o taip pat **standžiaisiais judesiais**).

Kristalų simetriją galima nagrinėti dviem aspektais: išoriniu (atsiėmimo kristalo formos atžvilgiu) ir **vidiniu** (begalinės kristalinės gardelės mikrostruktūros atžvilgiu). Išorinę kristalų simetriją vadina **morfologine**, o vidinę – **erdvine**.

Nagrinėjant kristalų simetriją išoriškai, nagrinėjamas **kristalų išorinės formos simetriškumas** ir pagal tai kristalai klasifikuojami į **klases (taškinės grupės)**, o šios – į **kristalų sistemas (singonijas)**. Tuo tikslu išskiriami taip vadinamieji **makroskopiniai kristalų simetrijos elementai** (posūkio ašys, veidrodinio atspindžio plokštumos, inversijos centras ir t. t.) bei juos atitinkančios **makroskopinės kristalų simetrijos operacijos**, kurias atliekant, sutapatinamos atitinkamos kristalo dalys ir kristalas savo **kristalografinių ašių**, sutampančių su kristalo briaunomis, atžvilgiu vėl užima tokią pat padėtį (tą pačią orientaciją erdvėje), kaip ir prieš tos operacijos atlikimą.

Morfologinės kristalų simetrijos nagrinėjimu užsiima **kristalografijos** (mokslo apie kristalus, nagrinėjančio **atomų išsidėstymo kūnuose dėsningumus** ir iš tų dėsningumų išplaukiančias kūnų savybes) dalis, vadinama **geometrine kristalografija**.

Nagrinėjant vidinę kristalų simetriją, tirama **vidinė kristalų struktūra**, t. y. kristalo elementų (atomų, jonų, molekulių) išsidėstymo kristalo viduje geometrija (konfigūracija), to išsidėstymo simetriškumas ir periodiškumas. Plokštumomis, einančiomis per kristalo elementų centrus, kristalai suskaidomi į **elementarius narvelius**, sudarančius to kristalo erdvinę struktūrą – **kristalinę gardelę** – ir nagrinėjama elementariųjų narvelių forma, nustatomas tą narvelį sudarančių atomų skaičius, jų išsidėstymas vienas kito atžvilgiu, įvedami taip vadinamieji **mikroskopiniai kristalų simetrijos elementai**, atsirandantys, įvedus slinkimo operacijas, ir papildantys makroskopinius kristalų simetrijos elementus **begalinių kūnų simetrijos elementais**. Įvedus **lygiagretaus poslinkio (transliacijos) operaciją**, įvedama **erdvinės gardelės sąvoka**, reiškianti tokią kristalinės gardelės schemą, kurioje atspindimi tik poslinkių geometrijos parametrai ir todėl nenurodomas konkretus atomų išsidėstymas.

Kristalų vidinės struktūros ir jos simetrijos, vadinamos **erdvine kristalų** (tiksliau, kristalinės gardelės) **simetrija**, nagrinėjimu užsiima kita speciali kristalografijos mokslo dalis – **struktūrinė kristalografija**.

Struktūrinė kristalografija, taip pat kaip ir geometrinė, užsiima ir kristalų klasifikacija. Ji, atsižvelgdama į kristalų vidinės struktūros simetriją, išskiria taip vadinamas kristalinės struktūros **erdvinės grupes**.

Suprantama, jog kristalų išorinė (morfologinė) simetrija atsiranda visų pirma dėl pačių kristalų sandaroje egzistuojančios vidinės (erdvinės) simetrijos ir kad tarp tų simetrijų, o kartu ir tarp kristalų

* Plačiau apie **kristalų klasifikaciją pagal cheminio ryšio tipą**, bei apie to **ryšio energiją** skaitytojas gali pasiskaityti labai atsakingai ir nuosekliai parašytame gana turiningame studentės Redos Sendrevičiūtės referate „Kristalų tipinės struktūros“. Šis gerai struktūrizuotas ir nuodugnai parašytas referatas reikšmingai papildė šį – 1.9.1.4. – skyrelį. Jame pateiktas ir **literatūros šaltinių šia tema sąrašas**.

išorinio ir vidinio klasifikavimo sistemų, turi egzistuoti priežastiniai ryšiai, išreiškiami tam tikrais dėsniais, vadinamais **kristalografijos dėsniais**.

Pirmasis toks dėsnis, priklausantis geometrinei kristalografijai, buvo atrastas ir suformuluotas dar 1669 m. danų mokslininko N.Stenseno. Tai **kampų pastovumo (arba Stenseno) dėsnis**: tos pačios medžiagos kristalų (net tuomet, kai tie kristalai turi skirtingą išorinę formą) kampai tarp atitinkamų sienelių yra pastovūs. Toks kampų pastovumas, pastebėtas kaip geometrinės kristalografijos fenomenas, lengvai paaiškinamas struktūrinėje kristalografijoje, prisimenant, jog kristalai formuojasi iš elementarių narvelių, turinčių jiems būdingą formą ir konfigūraciją. Tai, kad kampo tarp kristalo sienų dydis priklauso nuo medžiagos, iš kurios kristalas susideda, nustatė prancūzas Ž. B. Romė de Lilis.

Dar metais anksčiau prieš N.Stenseną (t. y. 1668 m.) anglų mokslininkas R.Hukas buvo nustatęs, jog **kristalinės medžiagos lydosi pastovioje temperatūroje**, t. y., kad kristalinėms medžiagoms lydantis, jų temperatūra nekinta. Šiuolaikinė fizika paaiškina šį dėsningumą tuo, kad, kristalinei medžiagai lydantis, visa šiluminė energija eikvojama kristalinės gardelės suardymui ir tik po to gali kilti medžiagos temperatūra. Griežtai apibrėžta lydymosi temperatūra – tai dar vienas požymis, skiriantis kristalinius kūnus nuo amorfinių: **amorfiniai kūnai šildomi minkštėja palaipsniui** plačiame temperatūrų intervale.

Kitą svarbų kristalografijos dėsnį, permetantį „tiltą“ tarp geometrinės ir struktūrinės kristalografijos, atrado ir 1784 m. suformulavo prancūzų kristalografas R.Ž.Hajuji, kurį galima laikyti ir mokslo apie kristalų simetriją pradininku. Šis dėsnis, dabar vadinamas **Hajuji dėsniu, arba racionalųjų santykių (sveikųjų skaičių) dėsniu**, šiuolaikinėje savo formuluotėje teigia: kai koordinačių ašimis pasirenkamos kristalo briaunos, o matavimo vienetais tose koordinačių ašyse pasirenkami elementaraus narvelio atitinkamų briaunų ilgiai a , b ir c , tai bet kurios kristalo plokštumos, sutampančios su kokio nors kristalo siena, padėtį erdvėje apibūdina trijų mažų sveikųjų skaičių h , k ir ℓ santykis $h:k:\ell$.

Skaičiai h , k ir ℓ dabar vadinami **kristalografiniais, arba Milerio, indeksais**.

Hajuji dėsnis ir Milerio indeksų nustatymo algoritmas išplaukia iš teiginio, jog kristalai sudaryti iš tam tikros formos vienuodų elementarių narvelių, sudarančių periodinę simetrišką struktūrą – kristalinę gardelę, charakterizuojamą **kristalinės gardelės periodais** – skaičiais a , b ir c – elementariojo narvelio briaunų ilgiais. Priėmę šį teiginį, gauname, jog bet kuri plokštuma, sutampanti su kristalo siena, kirsdama kristalografines ašis, atkirs jose atkarpos, kurių ilgiai, išmatuoti atkarpomis a , b ir c kaip ilgio matavimo vienetais, bus kokie tai sveiki skaičiai m , n ir p . Sudarę atvirkštinių jiems skaičių santykį $\frac{1}{m}:\frac{1}{n}:\frac{1}{p}$ ir padauginę kiekvieną to santykio narį iš šių trupmenų bendrojo vardiklio mnp , gausime

sveikųjų skaičių santykį $np:mp:mn$, iš kur ir išplaukia, jog $h=np$, $k=mp$, $\ell=mn$ – sveiki skaičiai.

Skaitytojui gali kilti klausimas, kodėl Milerio indeksais nebuvo pasirinkti sveikieji skaičiai m , n ir p , t. y., kodėl reikėjo sudarinėti atvirkštinius skaičius ir ieškoti tų atvirkštinių skaičių santykio sveikaskaitinės išraiškos. Atsakymas į šį klausimą gana paprastas ir išplaukia iš tos aplinkybės, kad kristalų sienos būna lygiagrečios tai ar kitai kristalografinei ašiai. Tuomet vienas ar net du iš skaičių m , n ir p turėtų būti lygūs begalybei. Atitinkami atvirkštiniai skaičiai tuomet yra lygūs nuliui ir santykis tarp Milerio indeksų išreiškiamas paprastais sveikaisiais skaičiais.

Kadangi kai kurios plokštumos gali kirsti kristalografines ašis ne tik pirmame kvadrante, tai skaičiai m , n ir p gali būti ne tik teigiami, bet ir neigiami sveiki skaičiai. Todėl neigiami gali būti ir Milerio indeksai h , k ir ℓ . Rašant Milerio indeksus, minuso ženklas nerašomas, kaip įprasta, prieš skaičių, o patalpinamas virš jo (panašiai kaip loginis neiginys), o patys Milerio indeksai, charakterizuojantys plokštumą, patalpinami į paprastus (lenktinius) skliaustus (...): (234), ($\overline{203}$), ($\overline{124}$) ir pan. Kai norima Milerio indeksais charakterizuoti ne vieną plokštumą, o visą simetriškai lygiaverčių plokštumų visumą, tai skaičius h , k ir ℓ patalpina į riestinius (figūrinius) skliaustus {...}: {234}, { $\overline{203}$ } ir pan.

Milerio indeksai vartojami ne tik kristalų sienų (plokštumų) apibūdinimui. Kristalų briaunų (ir, bendrai, krypčių) apibūdinimui naudojami tas kryptis aprašantys vektoriai, kurių koordinatės – tų vektorių projekcijos į kristalografines ašis. Tų projekcijų reikšmės u , w ir v vadinamos **kristalo briaunų (ir, bendrai, krypties) Milerio indeksais**. Kad būtų galima atskirti, ką žymi konkretūs Milerio indeksai (plokštumą ar tiesę), skaičiai u , w ir v patalpinami į kvadratinus skliaustus: [100], [$\overline{1}00$] ir pan. Kai norima apibūdinti visas lygiavertes kristalo kryptis, skaičiai u , w ir v patalpinami į skliaustus $\langle \dots \rangle$. Pavyzdžiui, užrašas $\langle 110 \rangle$ reiškia ne tik [110], bet ir [$\overline{1}10$], [$1\overline{1}0$] ir t. t.

Aprašant heksagoninės sistemos kristalų sienas, kristalo pagrindo plokštumoje vietoj dviejų kristalografinių ašių Ox ir Oy įvedamos trys ašys Ox_1 , Ox_2 , Ox_3 , išsidėsčiusios toje plokštumoje taip, kad viena su kita sudaro 120° kampus. Taigi, kartu su kristalografine ašimi Oz , gaunama keturių koordinačių x_1 , x_2 , x_3 , z sistema. Todėl, aprašant plokštumas tokioje koordinačių sistemoje, vietoj trijų Milerio indeksų h , k ir ℓ , vartojami keturi **Milerio ir Bravė indeksai** h , k , i , ℓ , kurie apskaičiuojami panašiai kaip ir Milerio indeksai. Kadangi galioja priklausomybė $i=-(h+k)$, tai trečiąjį Milerio ir Bravė indeksą galima apskaičiuoti žinant pirmuosius du. Kai tas (trečiasis) Milerio ir Bravė indeksas praleidžiamas, tai likę pirmasis, antrasis ir ketvirtasis Milerio ir Bravė indeksai tampa Milerio indeksais.

Struktūrinė kristalografija nesunkiai paaiškina ir dar vieną geometrinės kristalografijos dėsni – 1809 m. vokiečių mokslininko K.S.Veiso suformuluotą **juostų dėsni**, teigiantį, jog kiekviena kristalo siena priklauso bent dviem juostoms, lygiagrečioms vienai ir tai pačiai tiesei, vadinamai tų **juostų ašimi**.

Jau minėtasis R.Ž.Hajuji 1815 m., apibendrindamas kristalų simetrijos nagrinėjimo rezultatus, suformulavo dar vieną geometrinės kristalografijos dėsni, dabar vadinamą **kristalų simetrijos dėsniu**. Šis dėsnis teigia, jog **kristalai gali turėti tik II, III, IV ir VI eilės posūkio simetrijos ašis**. Apie tai, ką vadina kristalo simetrijos ašimis ir kaip nustatoma jų eilė, bus kalbama šiek tiek vėliau, o čia apsiribosiu tik pastaba, jog šis dėsnis davė pradžią **kristalų morfologinės simetrijos teorijai** bei geometrinei kristalografijai ir juo remiantis kristalai skirstomi į kristalų klases (taškinės grupės).

1830 m. vokiečių kristalografas J.F.Heselis, naudodamasis morfologinę kristalų simetriją charakterizuojančiais makroskopiniais simetrijos elementais, apie kuriuos bus kalbama taip pat šiek tiek vėliau, sugrupavo kristalus į **32 kristalų morfologinės simetrijos klases**, o 1849 m. prancūzų kristalografas O.Bravė įrodė, kad tokių klasių ir gali būti tik 32.

Tas pats O.Bravė 1848 m. išskyrė **14 kristalų erdviųjų gardelių tipų**, permetančių „tiltą“ tarp kristalų vidinės simetrijos erdviųjų grupių ir morfologinės simetrijos sistemų (singonijų), o 1850 m. suformulavo dar vieną kristalografijos dėsni, išreiškiantį **sąryšį tarp geometrinės ir struktūrinės kristalografijos** iš vienos pusės ir tarp **fizinės ir cheminės kristalografijos** – iš kitos pusės. Šis dėsnis, vadinamas **Bravė gardelių dėsniu**, teigia, jog **vienodų fizinių ir cheminių savybių, bet skirtingos prigimties kristalai turi tą patį erdvinę gardelės tipą**. Tai dar kartą patvirtina sistemos savybių priklausomybę nuo sistemos struktūros, apie ką buvo rašyta 1.8. skyriuje, kalbant apie **izomorfizmo dėsni**.

Bravė gardelių dėsnio atradimas ir erdviųjų gardelių tipų išskyrimas dar labiau paskatino kristalų vidinės struktūros tyrimus, jų surišimą su kristalų fizinių ir cheminių savybių tyrimais bei tų tyrimų rezultatų taikymu technikoje ir kituose moksluose.

Pirmieji **kristalų optikos dėsniai** buvo atrasti jau anksčiau. Dar 1669 m. danų mokslininkas E.Bartolinas nustatė šviesos **spindulio dvejopo lūžio kristaluose reiškinį**, o 1815 m. Ž.B.Bio (Prancūzija) ir D.Brūsteris (Škotija) suformulavo dabar tų mokslininkų vardais vadinamus **šviesos poliarizacijos kristaluose dėsnius**.

1880 m. prancūzų fizikai P.Kiuri ir P.Ž.Kiuri atrado **pjezoelektros reiškinį**, o 1912 m. V.Fydricho ir F.Knipingo (Vokietija) atrasta **rentgeno spindulių difrakcija kristaluose** leido patikrinti ir eksperimentaliai patvirtinti hipotezę apie gardelinę kristalų struktūrą. 1913 m. V.L.Bragas (Anglija) ir G.Vulfas (Rusija) suformulavo rentgenostruktūrinės analizės dėsni, dabar vadinamą **Brago ir Vulfo sąlyga**. Kristalų tyrimai elektroniniu ir joniniu mikroskopu XX a. 5 ir 6 dešimtmetyje leido tiesiogiai stebėti kristalų struktūros atomus ir molekules, gauti kristalinės gardelės fotografijų.

Tiriant kristalų simetrijos klasių ir jų fizinių savybių simetrijos subordinaciją, buvo nustatyti dėsningumai, leidusieji suformuluoti **kristalų teorijos principus** (Noimano, Kiuri). **Noimano principas** teigia, jog bet kurios kristalų fizinės savybės simetrijos grupė turi visus kristalų taškinės grupės (kristalų klasės) simetrijos elementus. Pavyzdžiui, piroelektra būdinga 10 klasių kristalams, kurie turi vieną simetrijos ašį ir su ja sutampančią simetrijos plokštumą, o pjezoelektra – 20 klasių kristalams, neturintiems inversijos centro. Pagal **Kiuri principą** galima numatyti kristalo, pereinančio dėl fazinių virsmų į feromagnetinę ar segnetoelektrinę būseną, taškinės ir erdvines grupes, t. y. nustatyti **ryšį tarp kristalo kaip fizinio kūno fizinių savybių iš vienos pusės ir to kūno vidinės sandaros bei jo išorinės formos simetriškumo – iš kitos pusės**.

1890 m. rusų kristalografas J.Fiodorovas, o 1891 m. ir vokietis S.Šenflysas nepriklausomai vienas nuo kito nustatė, jog egzistuoja kristalų vidinei struktūrai būdingų **230 erdviųjų grupių**, besiskiriančių viena nuo kitos simetrijos elementais, o todėl ir fizinėmis bei cheminėmis savybėmis, kurios yra panašios visiems kristalams, priklausantiems vienai ar tai pačiai erdvinei grupei.

Kristalų erdviųjų grupių išskyrimas dar labiau suartinio struktūrų kristalografiją su fizine ir chemine kristalografija, padėdamas tiksliau organizuoti fizinius ir cheminius kristalų tyrimus bei greičiau suvokti ir apibendrinti tų tyrimų rezultatus.

Tačiau ilgainiui paaiškėjo, jog geometrinės ir struktūrinės kristalografijos simetrijos elementų vis dėlto nepakanka kai kurių fizinių ir cheminių reikšmių kristaluose suvokimui. Pavyzdžiui, naudojantis erdvinės simetrijos elementais ir terminais galima apibūdinti ir paaiškinti antiferomagnetiko elektronų ir branduolių išsidėstymą, bet tų elementų jau nebepakanka magnetinių momentų išsidėstymui antiferomagnetiko kristale apibūdinti ir paaiškinti.

Todėl, išplečiant ir apibendrinant simetrijos sąvoką, į kristalografijos mokslą buvo įvestos tokios sąvokos kaip antisimetrija ir spalvinė simetrija.

Įvedant **antisimetrijos** sąvoką prie kintamųjų dydžių, atitinkančių tris kryptis fizinėje erdvėje, pridedamas dar ir ketvirtasis dydis, galintis turėti dar dvi reikšmes ± 1 . Įvedus šį dydį, gaunamos jau nebe 32 taškinės simetrijos grupės, o **58 taškinės asimetrinės grupės** ir **1651 erdvinės simetrijos grupė (Šubnikovo grupės)** vietoj Fiodorovo išskirtų 230 erdvinės simetrijos grupių.

Priėmus, kad tas ketvirtasis dydis gali turėti daugiau nei dvi reikšmes (3, 4, 6, 8, ..., 48), gaunama daugiau taškinių grupių (kristalų klasių) turinti simetrija, vadinama **Belovo spalvine simetrija**. Joje išskiriama **81 taškinės spalvinės simetrijos grupė**.

Egzistuoja ir kitos apibendrintos kristalų simetrijos sąvokos bei jas atitinkančios teorijos: **panašumo simetrija**, kurioje kristalo dalių lygybės reikalavimas pakeičiamas jų panašumo reikalavimu, **netiesinė simetrija**, **statistinė simetrija**, kuri taikoma apibūdinant netvarkingųjų kristalų, kietųjų tirpalų bei skystųjų kristalų struktūrą.

Kristalografijos moksle (be jau minėtų tokių jo dalių kaip geometrinė ir struktūrinė kristalografija, kristalų fizika ir kristalų chemija) išskiriama dar ir tokia jo dalis, kuri nagrinėja kristalų susidarymą ir augimą. Ji vadinama **genetine kristalografija**. Šiame skyrelyje apie šią kristalografijos mokslo sritį nekalbėsime, nes joje nagrinėjami procesai – tai jau 1.9.2. skyrelis.

Yra dar viena kristalografijos mokslo dalis, kuri susiformavo apibendrinant geometrinės ir struktūrinės kristalografijos metodus ir pasiekimus. Ji vadinama **apibendrintąja kristalografija** ir tiria **kondensuotos būsenos medžiagų** sandarą ir bendrąsias savybes, išplaukiančias iš tos sandaros ypatybių. Šis mokslas savo dvasia ir metodais gana artimas sistemo tyros mokslui ir jo atstovai galėtų vaisingai dalyvauti struktūrų algebros aparato kūrime ir panaudojime. Tai galėtų praturtinti ir sistemo tyros ir kristalografijos matematinį aparatą.

Dabar kristalografijos mokslo matematinio aparato pagrindą sudaro **grupių teorija**, apie kurią bus kalbama 1.9.1.5. skyrelyje, ir **tenzorinis skaičiavimas**, užsiimantis laukų, kuriuose egzistuoja vienokia ar kitokia įtampa (pats žodis „tenzorius“ yra kilęs iš lotyniško žodžio „tensus“, reiškiančio įtampą, ir yra matricinės diferencialinės konstrukcijos, charakterizuojančios lauko įtampą, pavadinimas), matematine analize bei tuos laukus charakterizuojančių tenzorių algebra (tenzorių sudėtimi, daugyba, sutraukimu, jų indeksų perstatymu, sistematizavimu, alternavimu ir t. t.). Tenzorinis skaičiavimas susiformavo, apibendrinant bei vystant **diferencialinės geometrijos ir vektorinio lauko teorijos** idėjas, bandant sukurti matematinį tų **laukų vektorinės diferencialinės analizės aparatą**. Taip buvo sukurtos tokios konstrukcijos kaip deformacijos tenzorius, klampumo tenzorius, inercijos tenzorius ir t. t. bei tokių konstrukcijų algebra, apibendrinanti skaliarų ir vektorijų algebrą.

Fizikinė kristalografija yra gana artima **kietojo kūno teorijai**, kurios matematinio aparato pagrindą sudaro **kvantinės mechanikos**, apie kurią jau kalbėjome 1.9.1.2. skyrelyje, matematinis aparatas.

Kristalų chemija irgi remiasi **kvantinės chemijos mokslu**.

Baigiant trumpą kristalografijos mokslo apžvalgą, derėtų pažymėti, jog geometrinės ir struktūrinės kristalografijos dėsniai tiksliai galioja tik **idealiems kristalams**. **Realūs kristalai** skiriasi nuo idealių tuo, kad juose dėl įvairių priežasčių gali atsirasti ir egzistuoti tie ar kiti defektai, pažeidžiantys idealaus kristalo struktūros idealią tvarką.

Kristalų defektus skirsto į statinius ir dinامينius.

Statiniai kristalų defektai – tai kristalų struktūros defektai, kurie susidaro, kai augantį kristalą paveikia stiprūs išoriniai poveikiai: neutroninė, rentgeno, ultravioletinė, elektroninė ir t. t. radiacija, mechaninės deformacijos, šiluminiai bei stipraus elektrinio lauko poveikiai ir t. t. Tie defektai gali būti nulmačiai (taškiniai), vienmačiai (linijiniai), dvimačiai (plokštuminiai) ir trimačiai (tūriniai). Statiniai defektai gali atsirasti ir dėl įvairių priemaišų.

Dinaminiai kristalų defektai gali atsirasti dėl kristalinės gardelės elementų šiluminio judėjimo – **kristalinės gardelės mazgų virpesių** apie pusiausvyrišias padėtis. Dėl tų virpesių atsirandančios tam tikros poliarizacijos **plokščios harmoninės bangos** gali būti **išilginės** ir **skersinės**, o pagal dažnį – **optinės** ir **akustinės**. Tų virpesių energijos kvantai vadinami **fononais**. Kristalų defektų nagrinėjimui galima taikyti ir fizikinės ir statistinės kristalografijos metodus.

Grįšime prie kristalų formos išorinės (morfologinės) ir jų vidinės sandaros (erdvinės) simetrijos bei simetrijos elementų nagrinėjimo ir iš jo išplaukiančių kristalų tipinių struktūrų išskyrimo ir klasifikavimo būdų.

Morfologinė kristalų simetrija, kaip jau buvo minėta, charakterizuoja išorinę kristalo formą, jos simetriškumą. Tą simetriją apibūdina **makroskopiniai simetrijos elementai**: posūkio ašis, atspindžio plokštuma, inversijos centras, posūkio atspindžio ašis ir posūkio – inversijos ašis. Pirmieji trys vadinami **paprastaisiais makroskopiniais simetrijos elementais**, o paskutiniai du – **sudėtingaisiais makroskopiniais simetrijos elementais**.

Posūkio, arba simetrijos, ašimi vadinama per kristalo vidų einanti tariamoji ašis, aplink kurią kampu φ pasukto kristalo orientacija nesiskiria nuo pradinės. Pagal mažiausią tokio kampo φ dydį apskaičiuojama **posūkio ašies eilė** $p = \frac{360^\circ}{\varphi}$. Egzistuoja kristalai, turintys II, III, IV ir VI eilės posūkio

ašis, t. y. turintys 180° , 120° , 90° ir 60° posūkio kampus φ , sutapatinančius kristalo orientaciją. Vieni kristalai gali neturėti simetrijos ašių, o kiti gali turėti net kelias tokias ašis.

Atspindžio, arba simetrijos, plokštuma vadinama plokštuma, dalijanti kristalą į dvi dalis, kurių viena yra antrosios veidrodinis atspindys. Kai kurie kristalai gali turėti ne vieną, o kelias atspindžio plokštumas. Kuo daugiau simetrijos plokštumų turi kristalas, tuo jis atrodo „simetriškesnis“. Tą patį galima pasakyti apie simetrijos ašies eilę: kuo didesnė kristalo simetrijos ašies eilė, tuo daugiau kristale „simetrijos“.

Inversijos, arba simetrijos, centru vadinamas kristalo taškas, kurio atžvilgiu kiekvieną kristalo tašką atitinka tiek pat nuo to centro priešinga kryptimi nutolęs to paties kristalo taškas.

Posūkio – atspindžio, arba inversijos, ašį atitinka posūkio ašis ir kristalo simetrijos ašiai statmena atspindžio plokštuma. Apie atspindžio plokštumų, statmenų posūkio ašims, žymėjimą bus kalbama šiek tiek vėliau.

Posūkio – inversijos ašį atitinka posūkio ašis ir inversijos centras. Apie šias ašis ir jų žymėjimą taip pat bus kalbama šiek tiek vėliau.

Atliekant **simetrijos operacijas – sukimą ir atspindį** – bei jų kombinacijas makroskopinių simetrijos elementų atžvilgiu, susidaro jau minėtosios **32 taškinės grupės – kristalų simetrijos klasės** (arba tiesiog – **kristalų klasės**).

Kristalų klasės nusako kristalinių daugiasienių simetriją. Tos pačios simetrinės geometrinės figūros (pavyzdžiui, kristalo) bet kurių dviejų simetrijos elementų atitinkama kombinacija gali būti lygiavertė trečiajam simetrijos elementui, priklausančiam tai pačiai figūrai. Remiantis šia simetrijos elementų savybe **galima įvesti matematinės operacijas su simetrijos elementais** ir nusakyti kristalų savybes, naudojantis jau minėtąja **gruپیų teorija**, kurios pagrindai bus išdėstyti 1.9.1.5. skyrelyje.

Kristalografijoje makroskopinių simetrijos elementų ir kristalų klasių žymėjimui taikoma **tarptautinių, arba Hermano ir Mogeno, simbolių sistema**.

Skaičiais 2, 3, 4, 6 reiškiančiais simetrijos ašies eilę p , žymimos II, III, IV ir VI eilės posūkio ašys, o skaičius 1 žymi simetrijos nebuvimą (asimetriją). Skaičiai su brūkšniais viršuje ($\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$) žymi atitinkamas posūkio – inversijos ašis. Ašis $\bar{1}$ tapati inversijos centrui, ašis $\bar{2}$ – atspindžio plokštumai m , kuri eina per posūkio ašį, ašis $\bar{3}$ – ašies 3 ir inversijos centro kombinacijai, ašis $\bar{4}$ yra savarankiškas simetrijos elementas, o ašis $\bar{6}$ yra ašies 3 ir jai statmenos atspindžio plokštumos kombinacija. Atspindžio plokštumų, statmenų posūkio ašims, simboliai yra trupmenos, kurių skaitikliai – posūkio ašių numeriai, o vardikliai – raidė m (pavyzdžiui, $2/m, 4/m, 6/m$).

Apibūdinant kristalų simetrijos klases (taškinės grupės), paprastai nurodomas minimalus simetrijos elementų skaičius, kuris vienareikšmiškai išskiria tą simetrijos klasę iš kitų. Pavyzdžiui, užrašius simbolį $2/m$, jau nebenurodomas simetrijos centras, nes tokio centro buvimą rodo ašis 2 ir jai statmena atspindžio plokštuma m . Užrašius simbolį $\bar{3}m$, jau nebenurodomos trys antros eilės posūkio ašys ir inversijos centras, nes jų buvimą rodo ašis $\bar{3}$ ir per ją einančios trys atspindžio plokštumos.

Simetrijos operacijos, susidedančios iš posūkių, apibūdina kristalus, susidedančius iš lygių sutampančių dalių, ir vadinamos **pirmos rūšies operacijomis**.

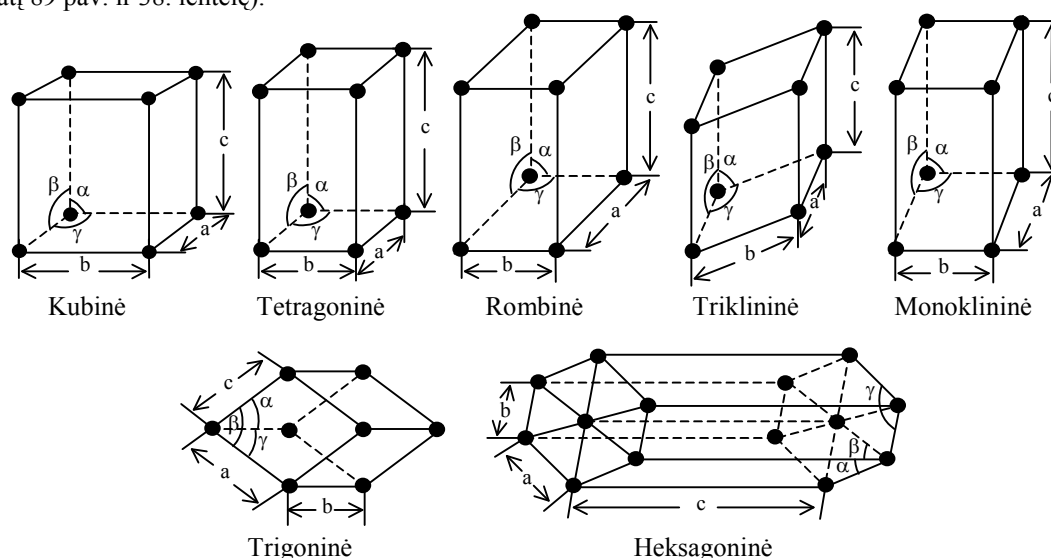
Simetrijos operacijos, susidedančios iš atspindžių ir inversijos, apibūdina kristalus, susidedančius iš veidrodiskai lygių dalių, ir vadinamos **antros rūšies operacijomis**.

Operacijos su struktūromis bus nagrinėjamos 1.9.2. poskyrio skyreliuose ir šias pirmos ir antros rūšies simetrijos operacijas derėtų prijungti prie ten nagrinėjamų tipinių operacijų su struktūromis.

Pagal kristalografinių ašių sistemą simetrijos klasės grupuojamos į **7 kristalų sistemas (singonijas)**, kitaip dar vadinamas **kristalografinėmis sistemomis**.

Singonijos – kristalų simetrijos klasių ansambliai, turintys bendrą simetrijos požymį. Į tas 7 singonijas kristalai grupuojami pagal **elementariojo narvelio** kristalografinių ašių sistemos **kampus**

α , β ir γ tarp kristalografinių ašių (žiūr. 89 pav.) ir to narvelio briaunų ilgius – atkarpas a , b , c (žiūr. tą patį 89 pav. ir 38. lentelę).



89 pav.

Minėtųjų septynių singonijų charakteristikos (kampų α , β ir γ dydžiai bei parametrų a , b ir c santykiai) pateiktos 38. lentelėje. Nurodyti ir singonijas atitinkantys gardelių centruotumo tipai: P – paprastos gardelės, centruotų pagrindų – C, centruoto paviršiaus – F ir centruoto tūrio – I. Iš 38.-sios lentelės matyti, kad egzistuoja 14 tipų gardelės: K singonijoje –3, Q singonijoje –2, O singonijoje –4, T singonijoje –1, M singonijoje –2, R singonijoje –1 ir H singonijoje 1.

38. lentelė

Singonija	Gardelės tipas	Gardelės periodai	Kampai tarp kristalografinių ašių
Kubinė [K]	P, F, I	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
Tetragoninė (Q) kvadratinė	P, I	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
Rombinė [O] ortogonalė	P, C, F, J	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
Triklininė [T]	P	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Monoklininė [M]	P, C	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\gamma=90^\circ, \beta \neq 90^\circ$
Romboedrinė (trigoninė) [R]	P	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$
Heksagoninė [H]	P	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$

Singonijos pagal jų elementų simetriškumo lygį grupuojamos į tris kategorijas.

Didelės simetrijos kategorijai priskiriama kubinė sistema, **vidutinės simetrijos kategorijai** – heksagoninė, trigoninė ir tetragoninė sistemos, **mažiausios simetrijos kategorijai** – triklininė, monoklininė ir rombinė sistemos.

Kristalų klasių paskirstymą į singonijas, o taip pat kiekvienos iš 32 klasių simetrijos apibūdinimą, naudojantis Hermano ir Mogeno simboliais, vaizduoja 39. lentelė – kristalų klasifikavimo sistemos pagal išorinius simetrijos elementus informacinis modelis, sudarytas Hermano ir Mogeno simbolių kalba.

39. lentelė

Singonijos pavadinimas	Kristalų simetrijos klasės pavadinimas	Makroskopinių simetrijos elementų simboliai
Triklininė	Monoedrinė	1
	Pinakoidinė	$\bar{1}$
Monoklininė	Ašinė diedrinė	2
	Beašė diedrinė	m
	Prizminė	2/m
Rombinė	Rombinė tetraedrinė	222
	Rombinė piramidinė	mm2
	Rombinė dipiramidinė	mmm

Singonijos pavadinimas	Kristalų simetrijos klasės pavadinimas	Makroskopinių simetrijos elementų simboliai
Tetragoninė	Tetragoninė piramidinė	4
	Tetragoninė tetraedrinė	$\bar{4}$
	Tetragoninė dipiramidinė	4/m
	Tetragoninė trapecaedrinė	422
	Ditetragoninė piramidinė	4mm
	Tetragoninė sklenoedrinė	$\bar{4}2m$
	Ditetragoninė dipiramidinė	4/mmm
Trigoninė (romboedrinė)	Trigoninė piramidinė	3
	Romboedrinė	$\bar{3}$
	Trigoninė trapecoedrinė	32
	Ditrigoninė piramidinė	3m
	Ditrigoninė sklenoedrinė	$\bar{3}m$
Heksagoninė	Heksagoninė piramidinė	6
	Trigoninė dipiramidinė	$\bar{6}$
	Heksagoninė dipiramidinė	6/m
	Heksagoninė trapecoedrinė	622
	Diheksagoninė piramidinė	6mm
	Ditrigoninė dipiramidinė	$\bar{6}m2$
	Diheksagoninė dipiramidinė	6/mmm
Kubinė	Tritetraedrinė	23
	Didodekaedrinė	m3
	Trioktaedrinė	432
	Heksatetraedrinė	$\bar{4}3m$
	Heksoktaedrinė	m3m

Apžvelgę morfologinę kristalų simetriją, jos makroskopinius elementus ir kristalų klasifikavimo sistemą pagal išorinę jų simetriją, pereisime prie **erdvinės kristalų simetrijos** ir jos **mikroskopinių elementų** (sraigtinio posūkio ašies ir slenkamojo atspindžio plokštumos), papildančių kristalų simetrijos elementų sąrašą.

Mikroskopinį erdvinės simetrijos kristalų elementą – **sraigtinio posūkio ašį** – atitinka tokios operacijos su kristalų struktūromis kaip jau anksčiau minėtas posūkis ir nauja (papildoma) operacija – **slinkimas (lygiagretus poslinkis, arba transliacija)**. Vykdamas posūkio ir slinkimo operacijas kartu, gaunamas **sraigtinis kristalo taškų judėjimas**, ir, jei taip judėdami kristalai gali sutapti vienas su kitu, tai sakoma, jog jie turi sraigtinio posūkio simetrijos ašį.

Kitą mikroskopinį erdvinės kristalų simetrijos elementą – **slenkamojo atspindžio plokštumą** taip pat atitinka dvi operacijos – poslinkis ir atspindys.

Simetrijos operacijos, atliekamos mikroskopinių simetrijos elementų atžvilgiu, sudaro grupę, vadinamą **erdvine, arba struktūrine grupe**. Ši grupė išreiškia **begalinių kūnų simetriją**.

Kombinuojant poslinkį (transliaciją), sraigtinį posūkį ir slenkamąjį atspindį sudaroma **230 erdvinių grupių**. Tai, kaip jau buvo minėta, 1890 m. įrodė J.Fiodorovas, o po metų – ir S.Šenflysas.

Kiekviena tokia grupė atitinka tam tikrą **kristalinės gardelės tipą**, kuriam priklauso cheminių elementų bei jų junginių kristalinės gardelės, turinčios vienodą simetriją ir jos kompleksus (lygiaverčių ir netapatingų kristalinės gardelės mazgų, briaunų ir plokštumų visumą).

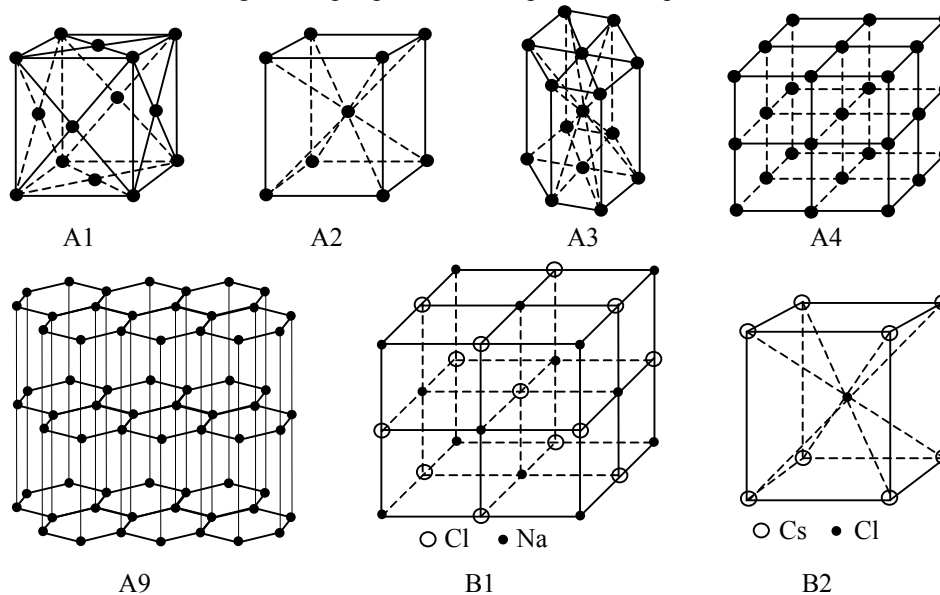
Kristalinių gardelių tipai, gaunami grupuojant tas gardeles į erdvines grupes, žymimi didžiosiomis lotyniškėmis raidėmis. Grupės, vadinamos kristalinių gardelių tipais, skaidomos į **kristalinių gardelių potipius**. Kristalinės gardelės tipo potipiai numeruojami ir jų numeriai rašomi po raidės, žyminčios tipą.

Kristalinių gardelių kai kurių tipų ir potipių pavyzdžiai: A1, arba vario; A2, arba volframo; A3, arba magnio; A4, arba deimanto; A9, arba grafito; B1, arba akmens druskos; B2, arba cezio chlorido; B4, arba viurcito; B8, arba raudonojo nikelio sulfido; C1, arba fluorito; C2, arba piritito; C3, arba kuprito; C4, arba rutilo; G1, arba kalcito; H1, arba špinelio ir t. t.

Potipiui A1 priklauso vario, aliuminio, kalcio, nikelio, aukso, sidabro, γ geležies bei daugelio nemetalų kristalai; potipiui A2 – volframo, molibdeno, vanadžio, šarminių metalų, α geležies kristalai; potipiui A3 – magnio, cinko, kadmio, titano, cirkonio, telūro kristalai; potipiui A4 – deimanto,

germanio, silicio kristalai; potipiui A9 – grafito kristalai; potipiui B1 – šarminių metalų halogenidai, šarminių žemės metalų oksidai ir sulfidai; potipiui B2 – cezio chloridas, cinko, berilio, kadmio sulfidai; potipiui B8 – nikelinas, pirotinas, kobalto sulfidas; potipiui C1 – fluoritas, bario fluoridas; potipiui C2 – piritas, mangano, kobalto sulfidai; potipiui C3 – kupritas, sidabro oksidas; potipiui C4 – NiF_2 , FeF_2 , MgF_2 , rutilas TiO_2 , PbO_2 .

Kai kurių kristalinių gardelių potipių struktūros pateiktos 90 pav.



90 pav.

Kristalinių gardelių pagrindinių tipų žymėjimai bei tuos tipus atitinkančių medžiagų rūšių pavadinimai ir pavyzdžiai pateikti 40-oje lentelėje.

40. lentelė

Tipas	Medžiaga
A	Cheminiai elementai
B	AB formos junginiai, pavyzdžiui, NaCl
C	AB_2 formos junginiai, pavyzdžiui, FeS_2
D	A_mB_n (m ir $n \geq 2$), pavyzdžiui, Al_2O_3
E	Nekompleksiniai cheminių elementų junginiai, pavyzdžiui, CuFeS_2
F	Junginiai su 2 ar 3 atomų radikalais, pavyzdžiui, CoAsS
G	Junginiai su radikalais BX_3 , pavyzdžiui, CaCO_3
H	Junginiai su 5 atomų radikalais BX_4 , pavyzdžiui, FeWO_4
I	Junginiai su 7 atomų radikalais BX_6 , pavyzdžiui, K_2PtCl_6
K	Junginiai su sudėtingais radikalais
S	Silikatai
OB	Neorganiniai junginiai su organiniais radikalais
O	Organiniai junginiai

Jau minėtasis O.Bravė, nagrinėdamas erdvinę kristalų gardelę, sudarytas iš dėsningai išsidėsčiusių atomų ar jonų – gardelės mazgų, kurie lygiagrečiu poslinkiu (transliacija) gali būti sutapatinti vienas su kitu, išskyrė **14 elementarių narvelių tipų**. Dabar tie elementarių narvelių tipai vadinami **Bravė gardelių tipais**. Jie skiriasi vienas nuo kito elementariojo narvelio briaunų ilgio santykiu ir tarpusavio orientacija, t. y. kampais tarp kristalografijos ašių ir, kaip jau buvo minėta, gali būti savo rūšies „tiltu“, rišančiu kristalų erdvinę ir morfologinę klasifikavimo sistemas.

Bravė gardelės skirstomos į 4 rūšis: 1) primityviąją, arba paprastąją, 2) centruoto pagrindo; 3) centruoto paviršiaus (F) ir 4) centruoto tūrio (I).

Paprastajai rūšiai, kuri, naudojantis tarptautiniais Hermano ir Mogeno simboliais, žymima simboliais P ar R, būdinga tai, kad gardelės mazgai yra tik elementariojo narvelio viršūnėse.

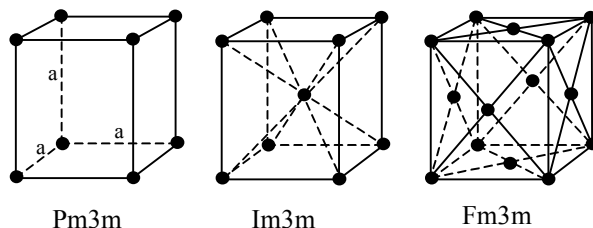
Centruotų pagrindų rūšiai, žymimai simboliu C, priklauso gardelės, kurios skiriasi nuo paprastųjų tuo, kad turi dar po mazgą dviejų priešingų sienelių centruose: vieną – pagrinde, kitą – viršutinėje sienelėje.

Centruoto paviršiaus rūšiai, žymimai simboliu F, priklauso gardelės, kurių narveliai turi po mazgą kiekvienos sienelės centre, t. y. turi mazgus visose narvelio viršūnėse ir visų jo sienų centruose.

Centruoto tūrio rūšiai, žymimai simboliu I, priklauso gardelės, turinčios mazgus visose gretasienio viršūnėse ir dar vieną mazgą narvelio centre.

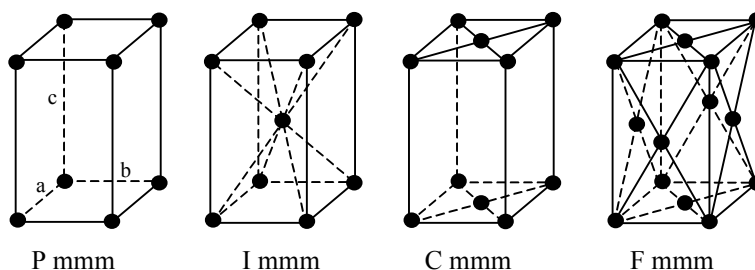
Pagal singonijas Bravė gardelės skirstomos į triklinines (Hermano ir Mogeno simbolis $\bar{1}$), monoklinines ($2/m$), tetragonines ($4/mmm$), rombines (mmm), romboedrinės, arba trigoninės ($\bar{3}m$), heksagonines ($6/mmm$) ir kubines ($m\bar{3}m$).

Kubinei sistemai priklauso 3 Bravė gardelių tipai (žiūr. 91 pav. ir 38. bei 39. lenteles). Šios sistemos kristalų pavyzdžiai: deimantas, valgomosios druskos, piritas ir kieto CO_2 kristalai. Šios sistemos kristalai turi daugiausia simetrijos elementų ir gali turėti ne tik kubo, bet ir oktaedro bei tetraedro formą. Šiai sistemai priskiriama ir tokių brangakmenių kaip granatai grupė (almandinas, heronitas, piropas, demantoidas, spesartinas, grosiulias ir kiti).



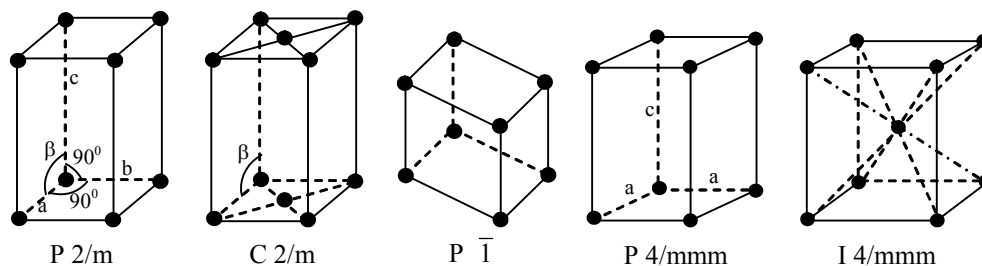
91 pav.

Rombinei sistemai priklauso 4 Bravė narvelių tipai (žiūr. 92 pav. ir 38. bei 39. lenteles). Šios sistemos kristalų pavyzdžiai: baritas, iš kurio gaminamas medicinos reikmėms naudojamas baris, olivinas – geležies ir magnio silikatas (olivino atmaina yra skaidrus žalsvas brangakmenis chrizolitas), įvairūs topazai (auksiniai, rausvieji, melsvieji, daugiaspalviai, bespalviai).



92 pav.

Monoklininei sistemai, kuri yra viena labiausiai paplitusių gamtoje kristalų sistema, priklauso 2 Bravė narvelių tipai (žiūr. 93 pav. ir 38. bei 39. lenteles). Jie pažymėti simboliais $P 2/m$, $C 2/m$ ir šiek tiek panašūs į rombinės sistemos narvelius, nes kaip ir rombinėje sistemoje $a \neq b \neq c$ ir $\alpha = \gamma = 90^\circ$, tačiau skiriasi nuo jos tuo, kad rombinėje sistemoje ir kampas $\beta = 90^\circ$, kai tuo tarpu monoklininėje sistemoje $\beta \neq 90^\circ$. Monoklininės sistemos kristalų pavyzdžiai: gipso, kuris randamas ir Šiaurės Lietuvoje, kristalai; vario junginys lazuritas, iš kurio dar Antikos laikais buvo gaminami puikūs mėlyni dažai; mineralas ortoklazas, kurio kietumas **Moso skalėje** laikomas kietumo, lygaus 6 vienetais, etalonu (kiečiausio mineralo – deimanto – kietumas toje skalėje prilygintas 10 vienetų, o talko – 1; Moso kietumo skalė nėra tiesinė: ortoklazas tikrai yra apie 6 kartus kietesnis už talką, tačiau deimanto kietumas yra ne 10, o apie 40 kartų didesnis). Monoklininei sistemai priklauso taip pat geležies ir magnio silikatas, vadinamas augitu bei eilė kitų mineralų.



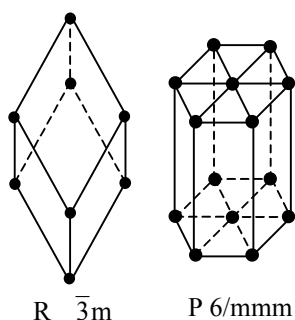
93 pav.

Triklininei sistemai priklauso tik vienas Bravė narvelių tipas. Jis parodytas 93 pav. ir pažymėtas Hermano ir Mogeno simboliu $P\bar{1}$. Šiai sistemai priklauso kristalai turintys mažiausiai simetrijos elementų, nes joje elementaraus narvelio briaunos yra nelygios ($a \neq b \neq c$), nelygūs ir kampai tarp kristalografinių ašių ($\alpha \neq \beta \neq \gamma$) ir be to jie nelygūs 90° . Neveltui kristalų klasės, priklausančios triklininei sistemai (monoedrinė ir pinakoidinė), žymimos Hermano ir Mogeno simboliais $P1$ ir $P\bar{1}$. Šiai sistemai priklausančių kristalų pavyzdžiai: chalkantilo (vario sulfato) kristalai; plagioklazas – magminių uolienų mineralas, kurio sudėtyje randama natrio ir kalcio; aksinito, randamo Brazilijoje, kristalai.

Tetragoninei sistemai priskiriami 2 Bravė narvelių tipai. Jie taip pat pavaizduoti 93 pav. ir pažymėti simboliais $P4/mmm$ ir $I4/mmm$. Kadangi ši sistema skiriasi nuo kubinės tik tuo, kad $c \neq a = b$, tai šios sistemos kristalai turi gana daug simetrijos elementų (žiūr. 39. lentelę). Šiai sistemai priklauso tokie brangakmeniai kaip cirkonai (ryškiai raudoni, auksiniai, žali, mėlyni, rudi ir t. t.), kuriuos nuo amžių naudojo Indijos juvelyrų; tamsiai žali vezuviano kristalai, randami Sibire; oranžiškai raudoni vulfenito kristalai, randami JAV, švino ir molibdeno turinčiose rūdų gyslose. Tetragoninei sistemai priklauso ir mineralo chalkopirito (vario sulfido) kristalai.

Trigoninei (arba romboedrinei) sistemai priklauso tik vienas Bravė narvelių tipas. Jis pavaizduotas 94 pav. kairėje pusėje ir pažymėtas simboliu $R\bar{3}m$. Šiai sistemai priklauso visiems mums žinomo kvarco kristalai. Jiems priklauso ir į ledą panašūs kalnų krištolo kristalai, kurie senovėje buvo laikomi „taip kietai sušalusiu ledu, kuris jau niekada neatitirps“. Iš to ir kilo žodžiai „kristalas“ bei „krištolas“, nes „kryos“ graikų kalboje reiškia šaltį. Todėl ir terminas „kriogeninės technologijos“ reiškia šaldymo technologijas bei įvairias kitas technologijas, surištas su šaldymu.

Trigoninei sistemai priklauso ir korundas bei jo atmainos – brangakmeniai rubinas ir safyras, o taip pat ir eilė kitų mineralų, kaip, pavyzdžiui, gana tobulai skalus kalcitas (kalcio karbonatas), sideritas ir kiti.



94 pav.

Heksagoninei sistemai priskiriamas vienas Bravė gardelės narvelio tipas. Jis pavaizduotas 94 pav. dešinėje pusėje. Heksagoninei sistemai priklauso superfosfato gamybai naudojami apatitų kristalai ir berilai bei jo atmainos – įvairūs smaragdai, akvamarinas, heliodoras, morganitas. Pagal heksagoninės sistemos dėsnius kristalizuojasi ir ledas, pagal tuos dėsnius „auga“ ir „piešiniai“ ant užšalusio lango bei krintančios sniegės, tačiau dėl sniegės kritimo metu atsirandančių joje virpesių kiekviena sniegė yra „individuali“ – skiriasi nuo kitų sniegių savo detalio („mikroskopine“) konfigūracija.

Heksagoninei sistemai priklauso ir jau ne kartą minėtasis grafitas, kurio kristaluose kiekvienas anglies atomas yra susijęs su kitais trimis anglies atomais, esančiais su juo vienoje plokštumoje (žiūr. 90 pav. piešinėlį A9 ir 38. bei 39. lenteles). Visa grafito kristalinė gardelė

sudaryta iš tokių sluoksnių, tarp kurių yra platūs tarpai, dėl ko tie sluoksniai surišti gana silpnai ir todėl gana lengvai gali slinkti vienas kitu. Taigi, iš grafito struktūros išplaukia jo minkštumas (Moslio skalėje jo kietumas lygus $1 \div 2$) ir tokia jo savybė, kad grafitu galima rašyti. Todėl grafitas ir naudojamas pieštukų gamyboje.

Tie patys anglies atomai, susijungę į kubinės singonijos kristalinę gardelę, kurioje kiekvienas anglies atomas stipriais kovalentiniais ryšiais jungiasi su visais keturiais kaimyniniais atomais, sudaro deimantą – kiečiausią gamtoje sutinkamą natūralų mineralą, kurio atskiri kristalai gali turėti oktaedrų, romboedekaedrų bei kubų formas. Ir tik dirbtiniu būdu pavyksta sukurti šiek tiek kietesnes už deimantą medžiagas, pavyzdžiui, volframo karbidą.

Kristalo kurio nors atomo (ar jono) artimiausių gretimų ir vienodai nutolusių atomų (ar jonų) skaičius vadinamas **kristalo koordinacijos skaičiumi**. Ši sąvoka, nors ir artima, tačiau nesutampa su 1.9.1.3. skyrelyje minėtu kompleksinio junginio koordinaciniu skaičiumi.

Tiesės, jungiančios kristalo gretimų atomų (jonų) centrus, sudaro **kristalo koordinacinį daigiasienį**, kurio centre yra tiriamasis atomas. Vienodus koordinacinius daigiasienius atitinka vienodi koordinaciniai skaičiai, tačiau vienodus koordinacinius skaičius gali turėti ir skirtingi koordinaciniai daigiasieniai.

Tetraedrinės bei oktaedrinės struktūros puslaidininkių kristalų koordinaciniai skaičiai būna 4 bei 6, centruoto kubinės struktūros metalų kristalų koordinaciniai skaičiai yra lygūs 8, o glaudžiai supakuotų, kubinės bei heksagoninės struktūros metalų koordinaciniai skaičiai yra lygūs 12. Kristalų koordinacijos skaičius yra tarpatominių ryšių tankio kristalinėje struktūroje charakteristika.

Iš to, kas šiame skyrelyje buvo pasakyta apie kristalus, matome, jog kristalografijoje **kristalai apibūdinami ir savo išorine forma, nurodant kristalo singoniją ir taškinę grupę (klasę), ir savo vidine (t. y. kristalinės gardelės) struktūra, nurodant atomų (jonų, molekulių) išsidėstymą kristale.**

Kristalo vidinė struktūra nusakoma, nurodant Bravė gardelės tipą, erdvinę grupę, elementariojo narvelio formą, jo matmenis, atomų (jonų) skaičių bei jų koordinatas elementariame narvelyje, cheminių ryšių ilgius ir kampus, kristalo koordinacijos skaičių ir tarpatominių ryšių tipą.

Nors kristalinė struktūra ypač būdinga mineralams ir, bendrai, kietoms neorganinėms medžiagoms, tačiau nereikėtų manyti, jog kristalai formuojasi tik medžiagos kietojoje fazėje ir tik negyvojoje gamtoje vykstančiuose procesuose. Egzistuoja ir taip vadinamieji **skystieji kristalai** – organinės medžiagos, kurių molekulės yra pailgos ir srityse, talpinančiose iki 10^4 – 10^5 molekulių, tam tikrame temperatūros bei koncentracijos intervale išsidėsto lygiagrečiai ar beveik lygiagrečiai. Panašiai kaip ir feromagnetikuose, tokios sritys vadinamos **domenais**. Patys domenai dažniausiai būna netvarkingai išsidėstę, tačiau, veikiant išoriniams veiksniams (elektros bei magnetiniams laukams, mechaniniams poveikiams ir pan.), o taip pat paties skysčio tekėjimui, lengvai keičia savo orientaciją ir gali tapti vienodai ar beveik vienodai orientuotais. Skystieji kristalai gana plačiai naudojami elektronikoje, įvairių matavimo prietaisų indikatoriuose, elektroniniuose rankiniuose laikrodžiuose, mikrokalkuliatoriuose, kompiuterių monitorių ir televizorių ekranų gamyboje.

Kristalinę struktūrą turi ir baltymai, tik jų molekulės ir jų kristalinės struktūros yra gana sudėtingos. Baltymų kristalų sudėtyje būna nuo 10^3 iki 10^4 atomų, o to kristalo gardelės periodas – nuo 100 iki 200 Å (angstromų), kai tuo tarpu paprastų cheminių junginių elementarių kristalų sudėtyje būna iki 10 atomų ir jų kristalų gardelių periodai – nuo 3 iki 5 Å, o molekulinį junginių kristalai jau truputį didesni – iki 100 atomų ir iki 5–15 Å. Dar didesnius kristalus gali sudaryti vitaminai (iki 100 atomų ir iki 20–30 Å). Teigiama, jog ir **viena iš gyvybės formų – virusai – taip pat yra stambūs kristalai**. Jų sudėtyje yra apie 10^6 – 10^9 atomų, o jų gardelės periodas – apie 2000 Å.

Kaip jau buvo minėta šio skyrelio pradžioje, didžiajai organinių kristalinių junginių daliai būdinga **salelinė struktūra**, kurioje molekulės surištos palyginti silpnais molekuliniais ryšiais (žiūr. 37-ją lentelę).

Tuo ir baigsiu **kristalų tipinių struktūrų apžvalgą, kurios tikslas buvo ne tik supažindinti su tipinėmis kristalų struktūromis ir jų klasifikavimo sistemomis**, apie kurias (kaip formalaus sistematizavimo pavyzdį) buvo kalbėta šios mokymo priemonės „Įvade“, **bet ir pagilinti tokios svarbios struktūrų teorijai ir visai sistemotyrų sąvokos kaip simetrija suvokimą.**

Pirmąjį šio skyrelio tikslą, manau, galime laikyti jau pasiektu, o ties antruoju tikslu dar derėtų stabtelėti ir simetrijos sąvoką panagrinėti šiek tiek visapusiškiau, t. y. ne tik iš kristalografijos, bet ir iš bendrasisteminių pozicijų.

Tikiuosi, jog po susipažinimo su šiuo skyreliu skaitytojai turėtų paaiškėti, kad **egzistuoja išorinė (kristalo išorinės formos) ir vidinė (kristalų vidinės sandaros) simetrija** ir kad **tos sąvokos, nors ir susijusios, tačiau nėra tapačios**. Dėl šios priežasties kai kurių kristalų kai kurios savybės yra simetrinės vienu simetrijos elementu atžvilgiu ir nesimetrinės kitų elementų atžvilgiu, o nagrinėjant dar kai kurias kristalų savybes **tenka simetrijos sąvoką išplėsti ir apibendrinti, įvedant antisimetrijos, spalvotosios simetrijos, panašumo simetrijos ir pan. sąvokas.**

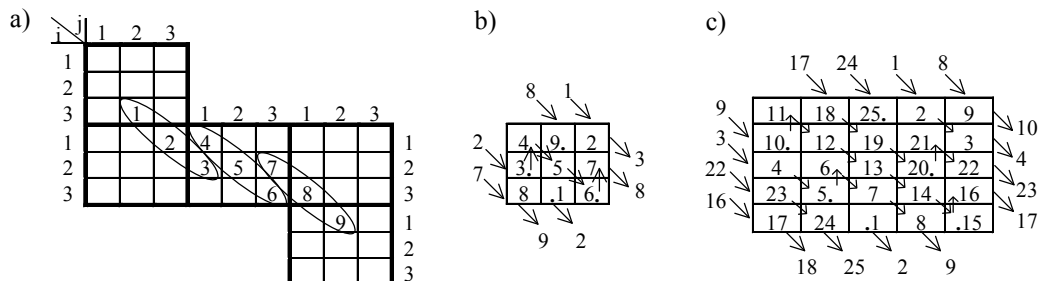
Išorinės ir vidinės simetrijos sąvokų dalinis nesutapimas yra ne tik kristalografijai būdingas reiškinys. Kad tai yra bendrasisteminis reiškinys galima pailustruoti paprastu pavyzdžiu iš „magiškųjų kvadratų“ teorijos.

Tarkime, jog turime skaičių 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 seką, kuri kartu yra ir aritmetinės progresijos pirmųjų devynių narių seka su skirtumu $d=1$ ir pirmuoju nariu $a_1=1$. Šią seką galime laikyti „simetriška“ centrinio nario $a_5=5$ atžvilgiu, nes dviejų vienodai nutolusių nuo „inversijos centro“ $a_5=5$ narių suma visada pastovi ir lygi 10. Tikrai: $a_4+a_6=a_3+a_7=a_2+a_8=a_1+a_9=10$.

Pabandysime šią **vienmatę simetrinę struktūrą transformuoti į dvimatę simetrinę struktūrą** su inversijos centru – elementu $a_5=5$ dvimatės struktūros centre, t. y. pabandysime sudaryti kvadratinę matricą, 3×3 , turinčią tokią savybę, kad tos matricos kiekvieno stulpelio, kiekvienos eilutės ir kiekvienos įstrižainės narių suma būtų pastovi ir lygi 15. Tokia kvadratinė matrica vadinama **trečiosios eilės „magiškuoju kvadratu“**.

Kadangi kiekvienas tos matricos elementas vienu metu turės priklausyti ir eilutei ir stulpeliui, tai išrašysime nagrinėjamos **linijinės simetrinės struktūros** narius dvimatėje erdve, grupuodami po tris elementus, t. y. po tiek narių, kiek jų įeis į matricos eilutę, stulpelį ar įstrižainę. Pačią dvimatę erdvę padalinsime į trečiosios eilės kvadratus, ir į „centrinio kvadrato“ įstrižainę įrašysime „centrinį“ tiesinę simetrinės struktūros narių trejetą su centrinio nariu $a_5=5$ centre, kaip tai parodyta 95 „a“ pav. Kitus trejetus įrašysime pastumtus vienu langeliu į apačią ir į dešinę bei į kairę ir į viršų „centrinio“ trejeto atžvilgiu.

Po to skaičius, nepatekusių į „centrinį“ kvadratą, sukilosime į „centrinio“ kvadrato tuos langelius, į kuriuos tie skaičiai patenka kituose kvadratuose. Pavyzdžiui, skaičius „2“ nepateko į „centrinį“ kvadratą, o pateko į kito kvadrato dešinįjį viršutinį langelį, todėl skaičių „2“ perkelsime į „centrinio“ kvadrato dešinįjį viršutinį langelį. Analogiškai perkelsime ir skaičių „1“, patekusį į kito kvadrato trečiosios eilutės vidurinį langelį, ir skaičių „8“, patekusį į tos pačios eilutės kairinį langelį, ir skaičių „9“, patekusį į kito kvadrato viršutinės eilutės vidurinį langelį. Tokiu būdu gausime trečiosios eilės „magiškąjį kvadratą“ (žiūr. 95 „b“ pav.), kuriame pavaizduoti ir tarpelementiniai ryšiai.



95 pav.

Šio kvadrato užpildymo algoritmą galima gauti ir nedarant piešinėlį „a“ (žiūr. 95 pav.), o iškart konstruojant piešinėlį „b“:

- 1) įrašome skaičių „1“ į kvadrato trečiosios eilutės vidurinį langelį;
- 2) judame iš to langelio įstrižai, t. y. didiname kvadrato eilutės numerį i ir stulpelio numerį j vienu vienetu, atmesdami iš tų sumų po skaičių m , jei tos sumos viršija skaičių m ;
- 3) kadangi pirmasis sekos skaičius („1“) buvo įrašytas į langelį $i=3, j=2$, tai naujojo langelio koordinatės bus $i=3+1-3=1, j=2+1=3$; įrašome į tą langelį skaičių „2“ ir vėl judame įstrižai, pridėdami prie i ir j po vienetą;
- 4) patenkame į langelį $i=2, j=1$ ir įrašome į jį skaičių „3“;
- 5) kadangi skaičiumi „3“ baigiasi pirmasis sekos narių trejetas, tai pereiname į naują „sluoksnį“; koordinatę i sumažiname vienetu, o koordinatės j nekeičiame; patenkame į langelį $i=1, j=1$ ir įrašome į jį skaičių „4“, tuo pradėdami antrojo sekos narių trejeto įrašymą į „magiškąjį kvadratą“;
- 6) judėdami įstrižai į langelį su koordinatėmis $i=2, j=2$ įrašome skaičių „5“ ir į langelį $i=3, j=3$ – skaičių „6“;
- 7) kadangi „6“ – antrojo trejeto pabaiga, tai pakylame į naują (trečiąjį ir paskutinį) „sluoksnį“, t. y. į langelį $i=2, j=3$; įrašome į jį skaičių „7“ ir vėl pradėdami judėjimą įstrižai;
- 8) pridėję prie $i=2$ ir $j=3$ po vienetą patenkame į langelį $i=3, j=1$, į kurį įrašome skaičių „8“;
- 9) judėdami įstrižai, patenkame į langelį $i=1, j=2$ ir įrašome paskutinį skaičių „9“.

Nesunku pastebėti, kad toks algoritmas užtikrina į kvadrato langelius įrašomų skaičių išdėstymo simetriškumą kvadrato centro atžvilgiu ir tuo pačiu tų skaičių sumų eilutėse, stulpeliuose ir įstrižainėse vienodumą, t. y. ir „vidinį“ ir „išorinį“ „magiškojo kvadrato“ simetriškumą.

Naudojantis aprašytu algoritmu sudarytas ir penktosios eilės „magiškasis kvadratas“ (žiūr. 95 „c“ pav.), tik jame langelių grupės („sluoksnius“) sudaro ne langelių trejetai, o jų penketai. Visų to kvadrato eilučių, stulpelių ir įstrižainių langelių turinių sumos lygios $\frac{1+m^2}{2} \cdot m = \frac{1+25}{2} \cdot 5 = 65$, o

centrinio langelio turinys lygus $\frac{1+m^2}{2} = 13$.

Analogiškai sudaryti ir „magiškieji kvadratai“ atvejams $m=7$ ir $m=9$ (žiūr. 96 pav.)

22	31	40	49	2	11	20
21	23	32	41	43	3	12
13	15	24	33	42	44	4
5	14	16	25	34	36	45
46	6	8	17	26	35	37
38	47	7	9	18	27	29
30	39	48	1	10	19	28

$m=7$

37	48	59	70	81	2	13	24	35
36	38	49	60	71	73	3	14	25
26	28	39	50	61	72	74	4	15
16	27	29	40	51	62	64	75	5
6	17	19	30	41	52	63	65	76
77	7	18	20	31	42	53	55	66
67	78	8	10	21	32	43	54	56
57	68	79	9	11	22	33	44	46
47	58	69	80	1	12	23	34	45

$m=9$

96 pav.

Visi „magiškieji kvadratai“, pavaizduoti 95 ir 96 pav., yra „simetriški“ „išoriškai“, nes visų jų stulpelių, eilučių ir įstrižainių sumos yra lygios $\frac{m^2+1}{2} \cdot m$, t. y. 15, 65, 175 ir 369.

Nesunku pastebėti ir tų kvadratų „vidinį simetriškumą“: elementų simetriškų inversijos centro atžvilgiu, porų suma visada lygi dvigubai inversijos centre esančio elemento reikšmei, t. y. visos tokių porų sumos yra vienodos ir lygios m^2+1 .

Visi šie „magiškieji kvadratai“ neturi posūkio simetrijos ašių, gulinčių tų kvadratų plokštumoje, tačiau turi ketvirtos eilės posūkio simetrijos ašį, kertančią inversijos centrą statmenai kvadrato plokštumai: pasukę aplink ašį „magiškojo kvadrato“ elementus 90° kampų, gauname „magiškąjį kvadratą“, turintį tas pačias „išorines“ ir „vidines“ „simetrijos“ savybes.

„Magiškieji kvadratai“, pavaizduoti 95 ir 96 pav., turi ir atspindžio simetrijos plokštumą, sutampančią su kvadrato plokštuma: veidrodinis „magiškojo kvadrato“ atspindys – taip pat „magiškasis kvadratas“, turintis atvirkštinę elementų išdėstymo aplink inversijos centrą tvarką: judėdami „veidrodiniu magiškuoju kvadratu“ aplink inversijos centrą prieš laikrodžio rodyklę, gauname tą pačią skaičių seką, kaip judėdami aplink „originalaus magiškojo kvadrato“ inversijos centrą laikrodžio rodyklės kryptimi.

Čia pavaizduotų „magiškųjų kvadratų“ „išorinis simetriškumas“ yra jų „vidinio simetriškumo“ pasekmė, tačiau „išorinis simetriškumas“ gali atsirasti ir tada, kada „vidinio simetriškumo“ nėra. Tai įrodo 97 „a“ pav. pateiktas penktos eilės „magiškasis kvadratas“, neturintis „vidinės simetrijos“, nes jis neturi nei simetrijos centro, tačiau turintis „išorinę simetriją“: visų stulpelių, eilučių ir įstrižainių sumos yra pastovios ir lygios 65.

a)

1	18	10	22	14
17	9	21	13	5
8	25	12	4	16
24	11	3	20	7
15	2	19	6	23

m=5

b)

1	31	12	42	16	46	27
30	11	41	15	45	26	7
10	40	21	44	25	6	29
39	20	43	24	5	35	9
19	49	23	4	34	8	38
48	22	3	33	14	37	18
28	2	32	13	36	17	47

m=7

c)

1	20	32	44	14	26	38
19	31	43	13	25	37	7
30	49	12	24	36	6	18
48	11	23	42	5	17	29
10	22	41	4	16	35	47
28	40	3	15	34	46	9
39	2	21	33	45	8	27

m=7

m=5

m=7

m=7

97 pav.

Tai, kad galima sudaryti „magiškuosius kvadratus“, turinčius „išorinę simetriją“ ir neturinčius „vidinės simetrijos“, neturėtų stebinti. Juk tam, kad gautume penktosios eilės „magiškąjį kvadratą“, pakanka išspręsti dvylikos tiesinių lygčių sistemą

$$x_{11}+x_{12}+x_{13}+x_{14}+x_{15}=65,$$

$$x_{21}+x_{22}+x_{23}+x_{24}+x_{25}=65,$$

$$\dots\dots\dots$$

$$x_{51}+x_{52}+x_{53}+x_{54}+x_{55}=65,$$

$$x_{11}+x_{21}+x_{31}+x_{41}+x_{51}=65,$$

$$x_{12}+x_{22}+x_{32}+x_{42}+x_{52}=65,$$

$$\dots\dots\dots$$

$$x_{15}+x_{25}+x_{35}+x_{45}+x_{55}=65,$$

$$x_{11}+x_{22}+x_{33}+x_{44}+x_{55}=65,$$

$$x_{15}+x_{24}+x_{33}+x_{42}+x_{51}=65,$$

turinčią 25 nežinomuosius. Tokia sistema gali turėti be galo daug sprendinių, kurių tarpe gali būti ir sveikaskaitinių simetriškų bei nesimetriškų, ką ir demonstruoja 95 ir 97 pav. penktosios eilės „magiškieji kvadratai“.

„Magiškojo kvadrato“, neturinčio „vidinės simetrijos“, kuri vaizduoja 97 „a“ pav., sudarymo algoritmas yra panašus į tą algoritmą, kuriuo naudojantis buvo sudaryti turintys „vidinę simetriją“ „magiškieji kvadratai“, pavaizduoti 95 ir 96 pav. Abiejų algoritmų pagrindą sudaro „judėjimas įstrižai“ sluoksnių ribose ir „šuoliukas, pereinant iš sluoksnio į sluoksnį“.

Tačiau šie algoritmai šiek tiek skiriasi:

1) norint gauti „magiškąjį kvadratą“, neturintį „vidinės simetrijos“, pradinis langelis, į kurį įrašomas skaičius „1“, pasirenkamas ne paskutinės eilutės viduryje, o kvadrato viršutiniame kairiajame kampe;

2) judėjimas „sluoksnio“ ribose vyksta ne žemyn į dešinę, didinant eilutės ir stulpelio numerius i ir j vienetu, o aukštyn į dešinę, didinant j vienetu ir mažinant i tuo pačiu vienetu;

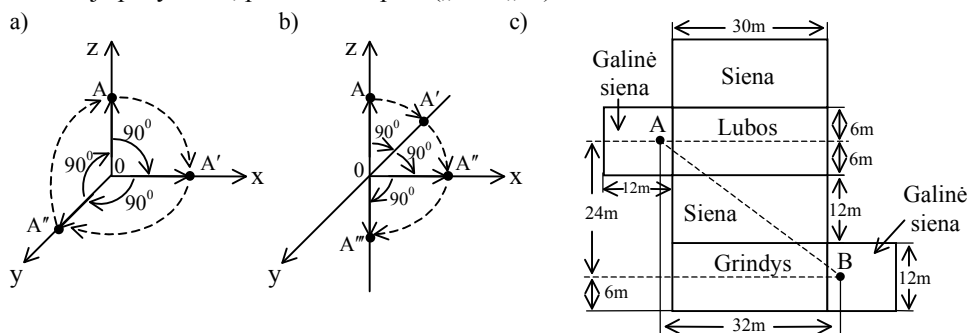
3) pereinant į naują sluoksnį, eilutės numeris i mažinamas 3 vienetais, o stulpelio j – vienu vienetu, kas irgi žymiai skiriasi nuo „vidinio simetriškų“ „magiškųjų kvadratų“ gavimo algoritmo.

Naudojantis ką tik aprašytu algoritmu ir buvo sudarytas 97 „b“ pav. vaizduojamas septintosios eilės „magiškas kvadratas“, neturintis vidinės simetrijos.

Jeį, pereidami iš „sluoksnio į sluoksnį“, būtume koordinatę i ne mažinę 3 vienetais, o didinę dviem vienetais, tai būtume gavę tą patį penktosios eilės „magišką kvadratą“, kuris pateiktas 97 „a“ pav. Tačiau septintosios eilės kvadratas, sudarytas, naudojantis šiuo (paskutiniu) algoritmu (žiūr. 97 „c“ pav.), jau **nebebūtų pilnai „magiškas“**, nes jo neigiamoji įstrižainė jau nebetenkintų „išoriško simetriškumo“ sąlygos: jos elementų suma būtų jau ne 175 (kaip visų stulpelių ir eilučių bei teigiamosios įstrižainės), o 263. **Turėtume „nepilną išorinę simetriją“.**

Pavyzdėliai su „magiškaisiais kvadratais“ rodo, jog **išorinės ir vidinės simetrijos sąvokų nesutapimas yra ne tik fizinis (būdingas, pavyzdžiui, kristalams), o ir matematinis reiškinys, galintis būti būdingas bet kurios prigimties struktūroms ir pačiai simetrijos sąvokai.** Todėl ši reiškinį galima laikyti bendrasisteminiu. Tarp pačių vidinės ir išorinės simetrijos sąvokų nėra simetrijos: išorinė simetrija gali atsirasti ir tada, kada sistemos vidinė struktūra neturi simetrijos.

Įdomu pažymėti, kad ir **simetrijos operacijų** (posūkio, atspindžio, inversijos) **algebra nėra pilnai simetriška**: kelių tokių operacijų rezultatas priklauso ne tik nuo pačių operacijų, bet ir nuo jų vykdymo tvarkos, kitaip tariant, **simetrijos operacijos sudaro grupę, kuri nėra komutatyvi grupė.** Ši teiginį iliustruoja pavyzdėlis, pateiktas 98 pav. („a“ ir „b“).



98 pav.

Jeį vektorių OA , gulintį ant koordinatės ašies Oz , pradžioje pasuktume aplink ašį Oy laikrodžio rodyklės kryptimi 90° kampu, tai gautume vektorių OA' , gulintį ant koordinatės ašies Ox (žiūr. 98 „a“ pav.). Po to, pasukę gautąjį vektorių OA' laikrodžio rodyklės kryptimi 90° kampu aplink ašį Oz , gautume vektorių OA'' , gulintį ant koordinatės ašies Oy . Pasukę pastarąjį vektorių laikrodžio rodyklės kryptimi 90° kampu aplink ašį Ox , gautume vektorių OA''' , sutampantį su pradiniu vektoriumi OA . Tai reiškia, jog trys posūkiai 90° kampu aplink koordinatės ašis Oy, Oz, Ox grąžino vektorių OA į pradinę padėtį.

Jeį vektorių OA pradžioje būtume pasukę ne aplink ašį Oy , o aplink ašį Ox , po to – aplink ašį Oz , o dar po to – aplink ašį Oy ta pačia laikrodžio rodyklės kryptimi, tai vektorių OA , kaip parodyta 98 „b“ pav., būtume pervedę į padėtį OA''' , priešingą OA kryptiai. Tai reiškia, jog trys posūkiai 90° kampu aplink koordinatės ašis Ox, Oz, Oy pakeitė vektoriaus OA kryptį į priešingą.

Tai ir įrodo, jog **simetrijos operacijų (posūkių) rezultatas gali priklausyti ne tik nuo pačių operacijų, bet ir nuo jų sekos.** Ir tai būdinga daugeliui operacijų, sutinkamų gyvenime: jei pradžioje nušveistume duris, o po to jas nudažytume, gautume ne tą patį rezultatą, lyginant su tuo, kuris būtų, jei pradžioje duris nudažytume, o po to nušveistume. Tai rodo, jog **ne visos operacijos yra komutatyvios.** Nekomutatyvios matematinės operacijos pavyzdys – matricų daugybos operacija, kai tuo tarpu skaičių daugybos bei skaliarinė vektorių daugybos operacijos yra komutatyvios.

Išorinės ir vidinės simetrijos sąvokų netapatumą iliustruoja ir žmogaus anatinė sandara: ideali žmogaus figūra yra išoriškai simetriška (ar beveik simetriška), tačiau ne visų vidaus organų išsidėstymas žmoguje yra simetriškas.

Įdomu, kad elektrinis ir magnetinis laukai, kurie, sklindant elektromagnetinei bangai, sklinda kartu, virsdami vienas kitu, nėra absoliučiai simetriški: elektrinio lauko šaltiniai – elektriniai krūviai (teigiamasis ir neigiamasis) – gali egzistuoti atskirai, o magnetiniai poliai (šiaurinis ir pietinis) atskirai (vienas be kito) egzistuoti negali.

Tai, **simetrija ir asimetrija – du objektyvūs pilnateisiai reiškiniai, galintys egzistuoti kartu vienoje sistemoje**: sistema, pavyzdžiui, gali būti išoriškai simetriška, o vidiniai – asimetriška, kaip, pavyzdžiui, jau minėtoji žmogaus anatinė struktūra (arba 97 pav. „magiškieji kvadratai“). **Tokie reiškiniai negali nedominti sistemos mokslo atstovų, nes juose pasireiškia savybės, bendros daugeliui įvairių sistemų.**

Baigiant simetrijos ir asimetrijos sąvokų aptarimą, norėtusi atkreipti skaitytojų dėmesį į „magiškų kvadratų“ sudarymo algoritmo radimo būdą, kuris iliustruoja vieną gana bendrą ir vertą

dėmesio idėją. Neretai, **sprendžiant tą ar kitą sudėtingesnę uždavinį, būna naudinga transformuoti erdves, t. y. pervesti uždavinį iš erdvės, turinčios vieną matavimų skaičių, į erdvę, turinčią kitą matavimų skaičių**, kaip tai buvo padaryta, ieškant „magiškųjų kvadratų“ sudarymo algoritmo (žiūr. 95 pav.): prieš sudarant trečios eilės magiškąjį kvadratą, buvo sudaryta linijinė (vienmatė) simetrinė visų skaičių, kuriuos reikės įrašyti į „magiškojo kvadrato“ langelius, struktūra (seka), po to ji buvo transformuota į dvimatę struktūrą (kvadratinę matricą).

Pateiksiu dar vieną žaismingą pavyzdėlį, iliustruojantį, kaip atrodantis pradžioje nelengvu „erdvinis“ uždavinys labai lengvai išsprendžiamas, jį pervedus iš trimatės erdvės į dvimatę.

Šio uždavinėlio sąlyga yra tokia: „Ant 30m ilgio angaro priešingų (galinių) sienų, turinčių kvadrato su kraštine $a=12\text{m}$ formą, gyvena blakė ir blakėnas. Blakė gyvena taške A, vienodai nutolusiame nuo garažo šoninių sienų, 1m atstumu nuo lubų. Blakėnas gyvena kitame angaro gale taške B, vienodai nutolusiame nuo angaro šoninių sienų, 1m atstumu nuo grindų. Blakėnas dažnai aplanko blakę ir, turėdamas automatinį „žingsniamatį“, seniai įsitikino, kad abu galimi „trumpiausi“ keliai (lubomis ar grindimis) turi vienodą ilgį, lygų 42 m.

Tačiau kartą, kai jis, pasveikinęs blakę su jos gimtadieniu, truputį įkaušęs dainuodamas grįžo namo, jo „žingsniamatis“ parodė 40m. Blakėnui po to teko ilgai palaužyti galvą, kol jis vėl surado tą dar trumpesnį kelią, kurį jis buvo aptikęs atsitiktinai. Raskite tą kelią ir Jūs.“

Pradžioje daugeliui bandančių spręsti šį uždavinį atrodo, jog kelio, trumpesnio nei 42m, būti negali, nes tai – „pats tiesiausias kelias“. Tačiau tai, pasirodo, netiesa. Uždavinys lengvai išsprendžiamas, sudarius garažo vidinio paviršiaus išklotinę, kaip tai parodyta 98 „c“ pav. Atstumas $/AB/$, t. y. jungiančios tuos taškus tiesės atkarpos, einančios per galinę sieną, lubas, šoninę sieną, grindis ir kitą sieną, ilgis yra lygus $/AB/ = \sqrt{32^2 + 24^2} = 8\sqrt{4^2 + 3^2} = 8 \cdot 5 = 40 \text{ (m)}$.

Atvirkstinę situaciją, kuomet naudinga iš dvimatės erdvės pereiti į trimatę, gauname sprenddami galvosūkių, kaip iš šešių degtukų sudaryti keturis trikampus, kurių kraštinės būtų tie degtukai (ne jų pusės ar kitos jų dalys, o patys degtukai).

Erdvių transformavimo metodu mes jau ne kartą naudojome, keisdami modeliuojamo objekto įėjimo, išėjimo ir būsenos erdvių koordinačių skaičių (pavyzdžiui, koduodami tų koordinačių reikšmes dvejetainėje sistemoje), ir dar ne kartą naudosimės kituose šios mokymo priemonės skyreliuose.

Tačiau grįšime prie šio skyrelio **tikslų apžvalgos** tęsinio.

Trečiuoju šio skyrelio tikslu buvo **periodiškumo reiškinių** nagrinėjimo pratęsimas ir **periodiškumo sąvokos apibendrinimas**.

Su **periodiškumo reiškiniu laike** jau esama susidūrę 1.3. skyriuje bei 1.4.6. skyrelyje ir dar ne kartą susidursime vėliau (pavyzdžiui, 1.11.9. skyrelyje). **Periodiškumas laike – labai paplitęs reiškinys, nes ten, kur yra sukimasis bei virpesiai, visur susiduriame su šiuo reiškiniu. O sukimasis ir virpesiai – labai dažnai sutinkami reiškiniai, kuriuos galima priskirti prie bendrasisteminių reiškinių.**

Nagrinėdami šiame skyrelyje kristalų struktūras, susidūrėme dar su viena sistematyrai labai įdomia periodiškumo rūšimi – su **periodiškumu erdvėje**, t. y. su **periodiškumu sistemų struktūroje bei sudėtyje**.

Yra ir tokių labai įdomių reiškinių, kuriuose **periodiškumas laike sintezuojasi su periodiškumu erdvėje**. Tokio reiškinių pavyzdys – **bangos sklidimas**. Panagrinėsime šį reiškinį ir tuo pačiu įvykdysime 1.9.1.2. skyrelyje duotą pasižadėjimą **paaikškinti stovinčiųjų bangų reiškinį ir savybes**. Stovinčios bangos atsiranda sąveikaujant **bėgančioms bangoms**.

Tarkime, jog plokštumos (pavyzdžiui, vandens paviršiaus) taške O, kurį priimsime dekartinės koordinačių sistemos pradžia, dėl kurių nors priežasčių (pavyzdžiui, dėl to, kad į vandens paviršių smogė įmestas akmenukas) atsiranda vertikalūs svyravimai $z = A \sin \omega t$, kurie sklinda nuo taško O su pastoviu greičiu v .

Nagrinėsime tų svyravimų sklidimą ašies Ox, gulinčios toje plokštumoje, kryptimi tuo idealiau atveju, kai nėra trinties bei kitų energetinių nuostolių. **Bėgančios bangos sklidimu** vadinamas **jis fazės sklidimas erdvėje**, nes bėgančios bangos sklidimo kryptimi sklinda ne pati svyruojanti terpė, o tik tų svyravimų fazė ir svyravimų energija, nepernešdama medžiagos. Tai nesunku pastebėti, stebint šapelį vandens paviršiuje: jis tik svyruoja aukštyn – žemyn, bet neplaukia kartu su bėgančia banga.

Rasime, kaip, laikui bėgant, keisis bangos aukštis z kiekviename ašies Ox taške x , kur x – nuotolis nuo taško O.

Momentu t į tašką x ateis banga, kuri išėjo iš taško O laiko intervalu $\Delta t = \frac{x}{v}$ anksčiau, t. y. mo-

mentu $t - \frac{x}{v}$. Todėl momentu t taške x turėsime bangos aukštį z , lygų $A \sin \omega \left(t - \frac{x}{v} \right) = A \sin \frac{2\pi}{T} \left(t - \frac{x}{v} \right)$, t. y.

svyravimus $z(t,x)=A\sin\frac{2\pi}{T}\left(t-\frac{x}{v}\right)=A\sin2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{x}{Tv}\right)=A\sin2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{x}{\lambda}\right)$, kur A – **svyravimų amplitudė**,

$\omega=\frac{2\pi}{T}$ – **svyravimų ciklinis dažnis**, T – **svyravimų periodas**, $\lambda=Tv$ – **bėgančios bangos ilgis**,

$2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{x}{\lambda}\right)$ – **bėgančios bangos fazė taške x momentu t** .

Kai nėra trinties ir kitų svyravimų energijos nuostolių, tai svyravimai taške x turės tą pačią amplitudę A ir tą patį periodą T kaip ir pirminiai svyravimai taške O ir skirsis nuo pastarųjų tik svyravimų faze, priklausančia nuo atstumo x .

Jei fiksuotume momentą t ir žiūrėtume, kaip kinta bangos aukštis z , keičiantis koordinatei x , tai gautume to **aukščio periodišką kitimo erdvėje matematinį modelį** $z(x)=A\sin2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{x}{\lambda}\right)$, kur dydžiai

A , $\frac{t}{T}$ ir λ būtų **pastovūs**, o dydis x – **kintamas**. Aukščio z kitimo grafikas $z(x)$ momentu t būtų sinusoidė, turinti amplitudę A ir atstumus tarp maksimumo taškų lygius λ . Šis grafikas vaizduotų **periodinį aukščio z kitimą erdvėje periodu λ** .

Jei fiksuotume tašką x , tai gautume **laike t vykstančių harmoninių bangos aukščio z svyravimų taške x matematinį modelį** $z(t)=A\sin2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{x}{\lambda}\right)$, kuriame dydžiai A , T ir $\frac{x}{\lambda}$ būtų **pastovūs**, o dydis t – **kintamas**. Taigi, grafikas $z(t)$ fiksuotame taške x vėlgi būtų sinusoidė, turinti amplitudę A ir periodą T . Ši sinusoidė vaizduotu procesą, periodiškai keičiantį savo fazę laike periodu T , t. y. vaizduotų **periodinį aukščio z kitimą laike periodu T** .

Keičiantis t ir keičiant x , gaunama dviejų argumentų **funkcija** $z(t,x)=A\sin2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{x}{\lambda}\right)$,

vaizduojanti sklindančių iš taško O harmoninių svyravimų $z=A\sin\omega t$ periodiškumą laike ir erdvėje. Abiejų šių svyravimų periodai T ir λ surišti lygtimi $\lambda=Tv$. **Fiksuodami laiko momentą arba erdvės tašką, mes tuos periodiškus svyravimus galime stebėti atskirai** (pavyzdžiui, fotografuodami banguotą plokštumos paviršių ar filmuodami bangos aukščio kitimą taške x). **Judėdami erdvėje ir laike, galime stebėti abi tas vykstančio proceso periodiškumo puses kartu**.

Lygtį $z(t,x)=A\sin2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{x}{\lambda}\right)$ vadina **bėgančios bangos lygtimi**, arba jos **matematinio**

modeliu.

Tarkime dabar, kad banga, sklisdama ašies Ox kryptimi, taške $x=\ell$ sutinka plokščią kliūtį ir, atsitrenkusi į ją, pradeda judėti atgal taško O link, sutikdama ateinančias iš to taško bangas ir interferuodama su jomis.

Panagrinėsime du atsitrenkimo į kliūtį ir grįžtančios bangos formavimosi atvejus.

Gali būti toks atvejis, kai atsispindėjusi banga yra atėjusio svyravimų proceso tęsinys, t. y., kai, bangai atsispindint, jos fazė nesikeičia. Taip, pavyzdžiui būna, kai garso banga, sklindanti vamzdžiu, pasiekia jo atvirą galą. Tada grįžtančioji banga turi tą pačią fazę kaip ir atėjusi banga.

Antruoju atveju, pavyzdžiui, kai vamzdžio galas yra uždaras, remdamiesi trečiuoju Niutono dėsnio, kad atoveiksmis lygus poveikiui ir turi priešingą kryptį, gauname, jog atsispindėjusi banga turės priešingą fazę, (t. y. bangos fazė sumažės dydžiu π , o tai reiškia, jog bus prarasta pusė bėgančios bangos ilgio λ).

Panagrinėsime abu tuos atvejus, apskaičiuodami **bangų interferencijos** rezultatus abiem atvejais.

Pirmuoju atveju fiksuotame taške x momentu t susitiks dvi bangos: ateinančioji iš taško O , suspėjusi praeiti kelią x , ir grįžtančioji po atsispindėjimo nuo kliūties, jau suspėjusi praeiti nuo taško O kelią $\ell + \ell - x = 2\ell - x$. Interferencijos rezultatas bus tų dviejų susitikusių bangų algebrinė suma, t. y.

$$\text{banga } z(t,x)=A\sin\frac{2\pi}{T}\left(t-\frac{x}{v}\right)+A\sin\frac{2\pi}{T}\left(t-\frac{2\ell-x}{v}\right)=2A\sin\frac{2\pi}{T}\frac{t-\frac{x}{v}+t-\frac{2\ell-x}{v}}{2}\times$$

$$\times \cos \frac{2\pi}{T} \frac{t - \frac{x}{v} - t + \frac{2\ell - x}{v}}{2} = 2A \sin \frac{2\pi}{T} \left(t - \frac{\ell}{v} \right) \cos \frac{2\pi}{T} \left(\frac{\ell}{v} - \frac{x}{v} \right) = 2A \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{\ell}{\lambda} \right) \times$$

$$\times \cos 2\pi \left(\frac{\ell - x}{\lambda} \right) = 2A \cos 2\pi \frac{\ell - x}{\lambda} \cdot \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{\ell}{\lambda} \right).$$

Kaip matome, interferencijos rezultate gauname svyravimus, kurių aukštis z priklauso nuo dviejų vieno argumento funkcijų sandaugos. **Pirmoji funkcija priklauso tik nuo argumento x ir vaizduoja bėgančių bangų interferencijos rezultato periodiškumą erdvėje, antroji – tik nuo t ir vaizduoja gautų svyravimų periodiškumą laike.**

Taškuose $x^* = \ell - (2k+1)\frac{\lambda}{4}$, kur $k=0, 1, 2, 3, \dots$ ir λ yra bėgančios bangos $z(t,x) = 2A \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda} \right)$ ilgis, t. y. tos bangos kelias, nueitas per laiko intervalą, lygų svyravimų periodui T , svyravimų $z(t,x) = 2A \cos 2\pi \frac{\ell - x}{\lambda} \cdot \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{\ell}{\lambda} \right)$ aukštis z visą laiką bus lygus 0, nes $z(t,x^*) = 2A \cos 2\pi \frac{\ell - \ell + (2k+1)\frac{\lambda}{4}}{\lambda} \cdot \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{\ell}{\lambda} \right) = 2A \cos(2k+1)\frac{\pi}{2} \cdot \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{\ell}{\lambda} \right) = 0$. Tai reiškia, jog taškuose $x^* = \ell - (2k+1)\frac{\lambda}{4}$, kai $k=0, 1, 2, 3, \dots$, jokių svyravimų nebus ir svyruos tik taškai x , esantys tarp jų.

Taškų x , esančių tarp gretimų taškų x^* , svyravimams bus būdinga tai, kad jie visi kiekvienu momentu t turės vienodą svyravimų fazę $2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{\ell}{\lambda} \right)$ ir skirsis tik svyravimų amplitudės dydžiu.

Tai reiškia, jog bėgančių bangų interferencijos metu gauti svyravimai skirsis nuo bėgančios bangos svyravimų tuo, kad jų fazė ne bėgs ašimi Ox , o keisis tik laike, būdama kiekvienu momentu vienoda visuose taškuose tarp gretimų taškų x^* . Kitaip tariant, svyravimų $z(t,x) = 2A \cos 2\pi \frac{\ell - x}{\lambda} \times \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{\ell}{\lambda} \right)$ fazė $2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{\ell}{\lambda} \right)$, nepriklausydama nuo x , „stovės vietoje“, besikeisdama tik laike.

Todėl svyravimus $z(t, x) = 2A \cos 2\pi \frac{\ell - x}{\lambda} \cdot \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{\ell}{\lambda} \right)$ ir pavadino **stovinčia banga**.

Taškai $x^* = \ell - (2k+1)\frac{\lambda}{4}$, kuriuose **stovinčios bangos aukštis visada lygus 0**, vadinami **stovinčios bangos mazgais**, o dydis $\left| 2A \cos 2\pi \frac{\ell - x}{\lambda} \right|$ – **stovinčios bangos amplitudė**. Kaip matyti iš šios formulės, **stovinčioje bangoje skirtinguose taškuose x svyravimai vyksta su skirtingomis amplitudėmis**: taškuose $x^* = \ell - (2k+1)\frac{\lambda}{4}$ svyravimų amplitudė lygi nuliui, o taškuose $x^{**} = \ell - 2k\frac{\lambda}{4} = \ell - k\frac{\lambda}{2}$, dalinančiuose intervalus tarp dviejų gretimų taškų x^* pusiau, stovinčių svyravimų

amplitudė yra didžiausia ir lygi $\left| 2A \cos 2\pi \frac{\ell - x^{**}}{\lambda} \right| = \left| 2A \cos 2\pi \frac{\ell - \ell + k\frac{\lambda}{2}}{\lambda} \right| = |2A \cos k\pi| = 2A$. Taškai

$x^{**} = \ell - k\frac{\lambda}{2}$ vadinami **stovinčios bangos pūpsniais**. Juose **stovinčios bangos amplitudė dvigubai didesnė už bėgančios bangos amplitudę**. Atstumai tarp gretimų mazgų ir pūpsnių lygūs $\frac{\lambda}{4}$.

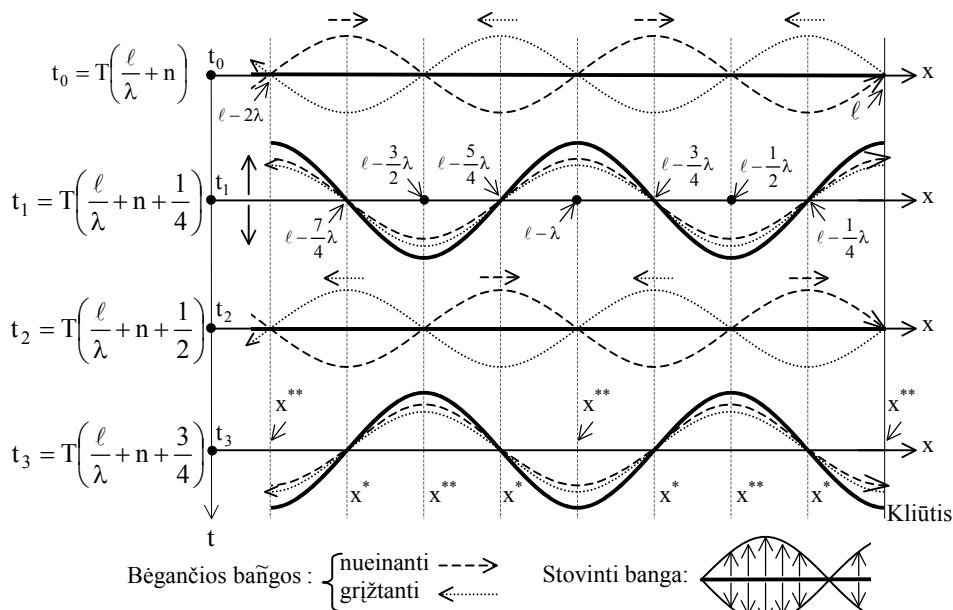
Laiko momentais $t^*=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+\frac{n}{2}\right)$, kur $n=0,\pm 1,\pm 2,\pm 3,\dots$, **stovinčios bangos aukštis visuose**

taškuose x (o ne tik taškuose x^*) tampa lygus 0, nes tuomet $\sin 2\pi\left(\frac{t^*}{T}-\frac{\ell}{\lambda}\right)=\sin 2\pi\left(\frac{\ell}{\lambda}+\frac{n}{2}-\frac{\ell}{\lambda}\right)=\sin n\pi=0$. Taip atsitinka todėl, kad tais laiko momentais visuose taškuose x abi bėgančios bangos – ateinančioji ir grįžtančioji – susitikdamos turi lygias, bet priešingo ženklo fazes ir interferuodamos gesina viena kitą: $z_1(t^*,x)+z_2(t^*,x)=A\sin 2\pi\left(\frac{t^*}{T}-\frac{x}{\lambda}\right)+A\sin 2\pi\left(\frac{t^*}{T}-\frac{2\ell-x}{\lambda}\right)=A\sin 2\pi\left(\frac{\ell}{\lambda}+\frac{n}{2}-\frac{x}{\lambda}\right)+A\sin 2\pi\left(\frac{\ell}{\lambda}+\frac{n}{2}-\frac{2\ell-x}{\lambda}\right)=A\sin 2\pi\left(\frac{n}{2}+\frac{\ell-x}{\lambda}\right)+A\sin 2\pi\left(\frac{n}{2}-\frac{\ell-x}{\lambda}\right)=A\sin\left(n\pi+2\pi\frac{\ell-x}{\lambda}\right)+A\sin\left(n\pi-2\pi\frac{\ell-x}{\lambda}\right)=A\sin\left(n\pi+2\pi\frac{\ell-x}{\lambda}\right)-A\sin\left(n\pi+2\pi\frac{\ell-x}{\lambda}\right)=0$.

Kai laikas t didėja nuo $t=t_0=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n\right)$ iki $t=t_1=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{1}{4}\right)$, funkcija $\sin 2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{\ell}{\lambda}\right)$ didėja nuo 0 iki 1 ir pasiekia maksimumą. Kai t didėja nuo $t=t_1=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{1}{4}\right)$ iki $t=t_2=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{1}{2}\right)$, funkcija $\sin 2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{\ell}{\lambda}\right)$ pradeda mažėti ir mažėja nuo 1 iki 0. Laikui t toliau didėjant nuo $t=t_2=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{1}{2}\right)$ iki $t=t_3=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{3}{4}\right)$, funkcija $\sin 2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{\ell}{\lambda}\right)$ toliau mažėja nuo 0 iki -1, ir pasiekia minimumą. Po to, laikui t toliau didėjant nuo $t=t_3=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{3}{4}\right)$ iki $t=t_4=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+1\right)$, funkcija $\sin 2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{\ell}{\lambda}\right)$ vėl pradeda didėti nuo -1 iki 0. Nuo momento $t=t_4=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+1\right)$ vėl kartojasi tas pats periodinis procesas kaip ir nuo momento t_0 .

Todėl **stovinčioji banga, stovėdama vietoje, „pulsuoja“**: 1) laiko intervaluose nuo $t=t_0=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n\right)$ iki $t_1=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{1}{4}\right)$ ašies Ox intervaluose $\ell-(4k+1)\frac{\lambda}{4}<x<\ell-(4k+3)\frac{\lambda}{4}$ ji kyla nuo $z=0$ iki $z=2A\cos 2\pi\frac{\ell-x}{\lambda}$, pasiekdama taškuose $x^{**}=\ell-(4k+2)\frac{\lambda}{4}$ maksimalų aukštį $z=2A$, o intervaluose $\ell-(4k+3)\frac{\lambda}{4}<x<\ell-(4k+5)\frac{\lambda}{4}$ stovinčioji banga leidžiasi nuo $z=0$ iki $z=2A\cos 2\pi\frac{\ell-x}{\lambda}$, pasiekdama taškuose $x^{**}=\ell-(4k+4)\frac{\lambda}{4}$ minimalų aukštį (maksimalų gylį) $z=-2A$; 2) laiko intervaluose nuo $t_1=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{1}{4}\right)$ iki $t_2=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{1}{2}\right)$ ašies Ox intervaluose $\ell-(4k+1)\frac{\lambda}{4}<x<\ell-(4k+3)\frac{\lambda}{4}$ stovinčioji banga pradeda slūgti, nuslūgdama nuo $z=2A\cos 2\pi\frac{\ell-x}{\lambda}$ iki $z=0$, o intervaluose $\ell-(4k+3)\frac{\lambda}{4}<x<\ell-(4k+5)\frac{\lambda}{4}$ ta banga pradeda kilti ir momentu $t=t_2=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{1}{2}\right)$ pasiekia lygį $z=0$; 3) laiko intervaluose nuo $t=t_2=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{1}{2}\right)$ iki $t=t_3=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+n+\frac{3}{4}\right)$ ašies Ox intervaluose $\ell-(4k+1)\frac{\lambda}{4}<x<\ell-(4k+3)\frac{\lambda}{4}$ stovinčioji banga pradeda leisti žemyn ir pasiekia minimalų lygį $z=-2A\cos 2\pi\frac{\ell-x}{\lambda}$, o intervaluose $\ell-(4k+3)\frac{\lambda}{4}<x<\ell-(4k+5)\frac{\lambda}{4}$ stovinčioji banga pradeda kilti ir pasiekia maksimalų

aukštį $z = \left| 2A \cos 2\pi \frac{\ell - x}{\lambda} \right|$, kuris taške $x = \ell - (4k+4) \frac{\lambda}{4}$ tampa lygus $2A$; 4) laiko intervaluose nuo $t=t_3=T(\frac{\ell}{\lambda} + n + \frac{3}{4})$ iki $t=t_4=T(\frac{\ell}{\lambda} + n + 1)$ ašies Ox intervaluose $\ell - (4k+1) \frac{\lambda}{4} < x < \ell - (4k+3) \frac{\lambda}{4}$ stovinčioji banga vėl pradeda kilti ir pasiekia lygį $z=0$, o intervaluose $\ell - (4k+3) \frac{\lambda}{4} < x < \ell - (4k+5) \frac{\lambda}{4}$ stovinčioji banga slysta žemyn nuo maksimalaus aukščio $z = \left| 2A \cos 2\pi \frac{\ell - x}{\lambda} \right|$ iki 0. Keturi stovinčios bangos „pulsavimo“ proceso ypatingi momentai t_0, t_1, t_2 ir t_3 pavaizduoti 99 pav.



99 pav.

Taigi, momentu t_0 nueinančioji ir grįžtančioji bangos, būdamos priešingų fazių, slopina viena kitą ir stovinčios bangos aukštis tampa lygus 0. Po to per $\frac{1}{4} T$ nueinančioji banga pasistumia $\frac{1}{4} \lambda$ į dešinę, o grįžtančioji banga $\frac{1}{4} \lambda$ į kairę. Šitų postūmių rezultate bėgančiųjų bangų fazės tampa vienodos, todėl tų dviejų bangų sudėties rezultatas – stovinčioji banga – vienuose ašies Ox intervaluose per tą ketvirtį periodo pakyla į maksimalų aukštį, pasiekdama taškuose x^{**} aukštį $z=2A$, o kituose intervaluose maksimaliai nusileidžia, pasiekdama taškuose x^{**} lygį $z=-2A$. Dar per $\frac{1}{4} T$ dėl bėgančių bangų judėjimo jų fazės vėl tampa priešingos ir bėgančios bangos nuslopina viena kitą. Todėl momentu $t=t_2$ stovinčios bangos aukštis visuose taškuose x vėl tampa lygus 0. Dar per $\frac{1}{4} T$, per kurį bėgančių bangų fazės artėja viena prie kitos, stovinčioji banga vėl pradeda kilti ir leisti (tik priešinguose ašies Ox intervaluose, lyginant su intervalu tarp momentų t_0 ir t_1). Momentu t_3 (panašiai, kaip momentu t_1) bėgančiųjų bangų fazės vėl sutampa ir stovinčiosios bangos aukštis (ir gylis) vėl pasiekia maksimumą. Dar per ketvirtį periodo (nuo t_3 iki t_4), per kurį bėgančiųjų bangų (nueinančios ir grįžtančios) fazių skirtumas didėja, stovinčioji banga slūgsta ir momentu t_4 jos aukštis visuose taškuose vėl tampa lygus 0. Momentas t_4 yra visiškai analogiškas momentui t_0 , todėl toliau viskas vėl kartojasi.

Atstumą tarp stovinčios bangos gretimų pūpsnių, kuris yra lygus atstumui tarp tos bangos gretimų mazgų, vadina **stovinčios bangos ilgiu**. Jis lygiai du kartus trumpesnis už bėgančiųjų bangų ilgį, t. y. $\lambda_{\text{stov.}} = 0,5 \lambda_{\text{bėg.}}$.

Antrasis stovinčiųjų bangų susidarymo atvejis, kai atsispindinti banga praranda pusę bangos ilgio, yra analogiškas. Skirtumas atsiranda tik mazgų ir pūpsnių koordinatų pasiskirstyme erdvėje ir laike.

Pirmuoju (jau išnagrinėtu) atveju stovinčiosios bangos aukščio z kitimo formulė $z(t,x)=A\sin 2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{x}{\lambda}\right)+A\sin 2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{2\ell-x}{\lambda}\right)=2A\cos 2\pi\left(\frac{\ell-x}{\lambda}\right)\sin 2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{\ell}{\lambda}\right)$, o antruoju atveju

$$z(t,x)=A\sin 2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{x}{\lambda}\right)+A\sin 2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{2\ell-x-\frac{\lambda}{2}}{\lambda}\right)=2A\cos 2\pi\left(\frac{\ell-x}{\lambda}-\frac{1}{4}\right)\sin 2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{\ell}{\lambda}+\frac{1}{4}\right). \quad \text{Tai}$$

reiškia, jog pirmuoju atveju taške $x=\ell$ (kadangi $\cos 2\pi\frac{\ell-\ell}{\lambda}=1$) turėsime pūpsnį, taške $x=\ell-\frac{1}{4}\lambda$ – mazgą, taške $x=\ell-\frac{1}{2}\lambda$ naują (tik priešingos fazės) pūpsnį, taške $x=\ell-\frac{3}{4}\lambda$ – vėl mazgą ir t. t., o

antruoju atveju (kadangi $\cos 2\pi\left(\frac{\ell-\ell}{\lambda}+\frac{1}{4}\right)=\cos \frac{\pi}{2}=0$) taške $x=\ell$ turėsima mazgą, taške $x=\ell-\frac{\lambda}{4}$ –

pūpsnį, taške $x=\ell-\frac{\lambda}{2}$ – vėl mazgą, taške $x=\ell-\frac{3}{4}\lambda$ – vėl pūpsnį (tik priešingos fazės) ir t. t. Skirsis ir

momentai, kada stovinčiosios bangos aukštis tampa 0 ir kada jis pasiekia maksimumą. Pirmuoju atveju, kaip jau buvome nustatę, momentais $t^*=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+\frac{n}{2}\right)$ (t. y., kas pusė periodo T) stovinčios bangos aukštis

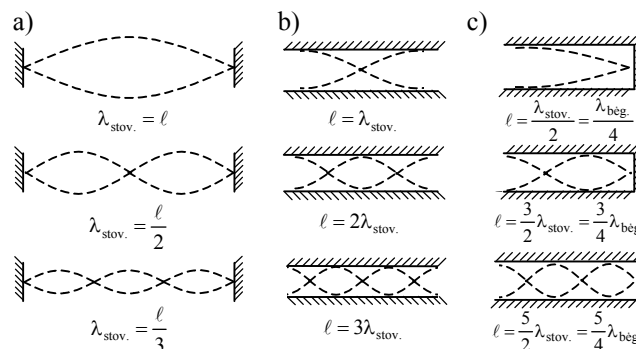
z visuose taškuose taps lygus 0, o praėjus ketvirčiui periodo po to – pasieks maksimumą. Antruoju atveju funkcija $\sin 2\pi\left(\frac{t}{T}-\frac{\ell}{\lambda}+\frac{1}{4}\right)$ taps lygi 0 (o kartu ir stovinčios bangos aukštis z visuose taškuose x)

ne momentais $t=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+\frac{n}{2}\right)$, o momentais $t=T\left(\frac{\ell}{\lambda}+\frac{n}{2}-\frac{1}{4}\right)$, t. y. momentais, pastumtais ketvirčiu

periodo T . Todėl tais momentais, kai pirmuoju atveju stovinčios bangos aukštis z bus lygus 0, antruoju atveju tos bangos aukštis bus maksimalus (ir atvirkščiai).

Kaip jau buvo minėta, pirmąjį stovinčiųjų bangų susidarymo atvejį galima stebėti, papūtus į vamzdelį kiaurais galais, o antrąjį – papūtus į vamzdelį su uždaru galu arba užgavus įtemptą stygą. Ir pirmąjį ir antrąjį atvejį galime stebėti įvairiuose muzikos instrumentuose.

Kadangi virpančioje įtemptoje stygoje susidarantios stovinčios bangos visuomet turės mazgus stygos galuose, tai virpančioje stygoje gali susidaryti tik tokios stovinčios bangos, kurių ilgiai $\lambda_{\text{stov.}} = \frac{\lambda_{\text{bėg.}}}{2}$ yra „kartotiniai“ stygos ilgiui ℓ (žiūr. 100 pav. „a“), t. y. $\ell = k\lambda_{\text{stov.}} = \frac{k}{2}\lambda_{\text{bėg.}}$, kur $k=1,2,3,4,\dots$



100 pav.

Analogišką priklausomybę gauname tarp vamzdelio atvirais galais ilgio ℓ ir stovinčios bangos ilgio $\lambda_{\text{stov.}}$ (žiūr. 100 pav. „b“).

Kai vamzdelio vienas galas atviras, o kitas uždaras, tai gauname, jog $\ell = (2k-1)\frac{\lambda_{\text{stov.}}}{2} = (2k-1)\frac{\lambda_{\text{bėg.}}}{4}$, kur $k=1, 2, 3,\dots$ (žiūr. 100 pav. „c“).

Muzikoje tą toną, kurį duoda muzikos instrumentas, kai $k=1$, t. y., kai stovinčios bangos ilgis λ_{st} yra didžiausias (o garso tonas – žemiausias), vadina **pagrindiniu tonu**, o vis kitus – **obertonais**.

Nuo to, kiek ir kokių (kokio dažnio ir stiprumo, t. y. kokios amplitudės) obertonų susidaro, priklauso gaunamo garso **tembras**. Jo **aukštis** priklauso nuo pagrindinio tono bangos ilgio, t. y. nuo dažnio $v = \frac{1}{T}$: kuo dažnis didesnis (t. y. kuo bangos ilgis trumpesnis), tuo garsas aukštesnis. Garso

stiprumas priklauso nuo stovinčios bangos amplitudės, t. y. nuo svyravimų energijos, ir matuojamas logaritminėje skalėje stiprumo (garsumo) vienetais – decibelais.

Taigi, **periodiškumo reiškinys (kaip ir simetrijos reiškinys) priklauso tai reiškinių grupei, kuriuos galima rasti įvairiose sistemose, nepriklausomai nuo jų prigimties**: ne tik kristaluose, kur mes galime pastebėti periodiškumą ir kristalų struktūroje ir jų elementų virpesiuose, ne tik akustikoje, bet ir optikoje, radijo bangų susidaryme ir sklidime, atomo viduje vykstančiuose procesuose, žvaigždžių judėjime, metų laikų bei dienos ir nakties kaitoje ir t. t. ir t. t.

Todėl **periodiškumo (kaip ir simetrijos) reiškinį reikia priskirti prie bendrasisteminių reiškinių, egzistuojančių ir erdvėje, ir laike, ir pačiose įvairiausiose sistemose. Todėl tokie reiškiniai nagrinėtini sistematyros kurse**. Todėl šie reiškiniai ir buvo šiek tiek panagrinėti šiame skyrelyje.

Yra dar ir **ketvirtas tikslas, kurio buvo siekiama šiame skyrelyje**: ne tik supažindinti skaitytoją su tipinėmis kristalų struktūromis, ne tik pagilinti tokių kardinalių sąvokų kaip simetrija ir periodiškumas laike ir erdvėje bendrasisteminių suvokimą, bet ir **papildyti 1.9.1.2. ir 1.9.1.3. skyreliuose pateiktas žinias apie medžiagos sandarą**, parodant, kad atomai ne visuomet jungiasi iškart tik į molekules, kad gali egzistuoti ir tokios kristalinės struktūros, kurių elementais gali būti ne tik molekulės, bet ir įvairūs kompleksiniai junginiai, o taip pat ir pavieniai atomai bei jonai, t. y. parodyti **galimų struktūrų ir jų formavimosi procesų įvairovę, hierarchinę struktūrų sistemą**, kurios žemutinę pakopą sudaro atomų struktūros, vidurinę – cheminių junginių struktūros, trečiąją – kristalų struktūros.

Kristalinių struktūrų nagrinėjimas ir kristalografijos raida parodė, jog, nagrinėjant sudėtingas struktūras ir jų įvairovę, **vien tik empirinio indukcinio metodo jau nebepakanka, kad žymiai daugiau galima pasiekti sukuriant nagrinėjamos srities teorinį modelį ir empirinį indukcinį metodą papildant teoriniu dedukciniu metodu, kad reikalinga abiejų metodų sintezė**. Todėl dabar pertrauksiu konkrečių tipinių struktūrų, sutinkamų fizikoje, chemijoje ir kitose srityse, nagrinėjimą, ir pereisiu prie gana abstrakčių struktūrų, vadinamų **algebrinėmis, t. y. pereisiu nuo empirinio indukcinio struktūrų algebros konstravimo metodo prie abstraktaus teorinio dedukcinio metodo**.

Susipažinimas su algebrinių struktūrų teorijos pradmenimis **leis pažvelgti į 1.9.1.1+1.9.1.4. skyreliuose aprašytas struktūras ir jų formalizuotus modelius iš formalių bendrasisteminių pozicijų**, kas yra būtina, norint suformuoti matematinius struktūrų algebros, kurią būtų galima taikyti bet kokių sistemų struktūroms, pradmenis, naudojantis empirinio indukcinio ir teorinio dedukcinio metodų sintezės metodu.

1.9.1.5. Algebrinės struktūros

Šios mokymo priemonės 1.7. skyriuje buvo įvestos sistemos struktūros ir sistemos vidinės struktūros sąvokos. **Sistemos vidinė struktūra** buvo pavadinta tos sistemos **sudėties elementų vietų sistemoje** (sudėties elementų **vaidmenų**), vadinamų sistemos **struktūros elementais**, ir jų tarpusavio **santykių**, vadinamų **tarpelementiniais ryšiais**, visuma. Uždarose pirmojo tipo sistemose (žiūr. 1.6.4.1. skyrelį), o taip pat antrojo tipo sistemose vidinės struktūros sąvoka sutampa su sistemos struktūros sąvoka, tačiau tos sąvokos skiriasi atvirose pirmojo tipo sistemose (žiūr. **pirmojo tipo sistemos struktūros apibrėžimą** 1.7.3. skyrelio pabaigoje). Abi tas sąvokas galima sutapatinti ir atvirose pirmojo tipo sistemose, įvedus jose papildomus atviros sistemos struktūros elementus – **sistemos polius** (sistemos išorinių įėjimų ir išorinių išėjimų kontaktus), nes tuomet sistemos sudėties elementų ryšius su sistemos išorine aplinka galima interpretuoti kaip tų sistemos sudėties elementų vietas vaizduojančių sistemos struktūros elementų ryšius su tos pačios struktūros elementais – sistemos poliais.

Šiame skyrelyje nagrinėsime **algebrinius sistemų vidinės struktūros modelius**, kuriuose **struktūrų elementų modeliais bus abstrakčių aibių abstraktūs elementai**, o **tarpelementinių santykių (tarpelementinių ryšių) modeliais – aibių elementų sąryšiai**.

Nors šiuolaikinėje formalioje **aibių teorijoje** aibės sąvoka apibrėžiama aksiomatiškai (žiūr. implicitinio apibrėžimo sąvoką 1.5.5. skyrelyje), to apibrėžimo šiame skyrelyje dėstymo paprastumo dėlei nenagrinėsiu ir juo nesinaudosiu, o kartu su aibių teorijos pradininku G.Kantoru (G.Cantor) **aibės sąvoką laikysiu pirmine intuityviai suprantama sąvoka**, kurią visi šios mokymo priemonės skaitytojai, būdami susipažinę su aibių teorijos pradmenimis, tikiuosi, intuityviai suvokia vienareikšmiškai ir vienodai.