ვალენტური ორბიტალების ელექტრონული წყვილების განზიდვის თეორია

ვალენტური ორბიტალების ელექტრონული წყვილების განზიდვის თეორიის მიზანია მოლეკულის (ან იონის) გეომეტრიული ფორმის დადგენა და მისი ცენტრალური ატომის ატომური ორბიტალების ჰიბრიდიზაციის ტიპის განსაზღვრა. ამ თეორიას საფუძვლად უდევს მიდგომა, რომლის არსი ასეთია: მოლეკულა ისწრაფვის, მიიღოს ისეთი ფორმა, რომ ატომების სავალენტო ელექტრონული წყვილები მაქსიმალურად იყოს დაშორებული ერთმანეთს.

ეს თეორია ლუისის ფორმულებს ეყრდნობა. გავიხსენოთ, რომ ლუისის ფორმულა გვიჩვენებს როგორც მოლეკულაში (ან იონში) არსებულ ატომებს შორის ბმების წარმომომქმნელ, ისე თავისუფალ (გაუზიარებელ) ელექტრონულ წყვილებსაც.

იმისთვის, რომ სწორად შევადგინოთ ლუისის ფორმულა, განვსაზღვროთ მოლეკულის გეომეტრიული ფორმა და ცენტრალური ატომის ატომური ორბიტალების ჰიბრიდიზაციის ტიპი, საჭიროა რამდენიმე წესის დაცვა. განვიხილოთ ეს წესები წყლის მოლეკულის მაგალითზე ლუისის ფორმულის შედგენის პარალელურად.

წესი I. განვსაზღვროთ მოლეკულაში შემავალი ატომების სავალენტო ელექტრონების საერთო რაოდენობა. ამისთვის თითოეული ელემენტის ატომთა რიცხვი გავამრავლოთ სავალენტო ელექტრონების რაოდენობაზე და მიღებული რიცხვები შევკრიბოთ:

ცხრილი N1

ატომი	ატომების რაოდენობა მოლეკულაში	თითოეული ატომის სავალენტო ელექტრონების რაოდენობა	ყველა ატომის სავალენტო ელექტრონების ჯამური რაოდენობა
H	2	1	$2 \times 1=2$
O	1	6	$1 \times 6= 6$
			$2 + 6 = 8$

მაშასადამე, წყლის მოლეკულაში ყველა ატომის სავალენტო ელექტრონების ჯამი არის 8, რაც იმას ნიშნავს, რომ მოლეკულაში უნდა იყოს სულ 8/2 = **4** ელექტრონული წყვილი.

წესი II. თუ იონს აქვს უარყოფითი მუხტი, მუხტის სიდიდე უნდა მივუმატოთ სავალენტო ელექტრონების ჯამურ რაოდენობას, ხოლო თუ იონი დადებითად არის დამუხტული, დადებითი მუხტის სიდიდე აკლდება სავალენტო ელექტრონების ჯამურ რაოდენობას (რაც ხდება ამონიუმის იონის შემთხვევაში). წყალი ნეიტრალური მოლეკულაა, ამიტომ ამ შემთხვევაში ამ წესის გამოყენება საჭირო არ არის.

წესი III. განვსაზღვროთ, რომელი ატომია წყლის მოლეკულაში ცენტრალური და რომელი - ლიგანდი (ამ თეორიის მიხედვით, ლიგანდი ეწოდება ცენტრალურ ატომთან დაკავშირებულ ყველა სხვა ატომს).

როგორც წესი, ცენტრალურად მიიჩნევა ელემენტებიდან ყველაზე ნაკლებად ელექტროუარყოფითის ატომი, თუმცა წყალბადი გამონაკლისია, რაც იმას ნიშნავს, რომ იგი არასოდეს გვევლინება ცენტრალურ ატომად. სხვაგვარად რომ ვთქვათ, წყალბადის ატომი ყოველთვის იქნება ლიგანდის როლში. ახლა ზემოთქმული გამოვსახოთ ცხრილის სახით:

ცხრილი N2

ცენტრალური ატომი	ლიგანდი	მუხტი
O	H H	0

დავალაგოთ ლიგანდები ცენტრალური ატომის გარშემო:

H O H

ახლა დავუბრუნდეთ I წესს, რომლის მიხედვითაც დავადგინეთ, რომ წყლის მოლეკულაში ელექტრონული წყვილების საერთო რაოდენობაა 4 (||||). აქ ერთი ხაზი ნიშნავს ერთ ელექტრონულ წყვილს, რომელიც შეიძლება გამოვსახოთ ორი წერტილითაც (••). ამ ოთხი ელექტრონული წყვილიდან ორით წყალბადის ატომები (ლიგანდები) დავაკავშიროთ ჟანგბადის ატომთან (ცენტრალურ ატომთან):

H – O – H

ვინაიდან წყალბადის ატომებს შეევსოთ ერთადერთი ენერგეტიკული დონე, დარჩენილი ორი ელექტრონული წყვილი უნდა მივუწეროთ ცენტრალურ ატომს:

H – $\underline{\overline{O}}$ – H **(1)**

წესი IV. გამოვთვალოთ მოლეკულაში შემავალი თითოეული ატომის ფორმალური მუხტი (**ფ.მ.**).

გავიხსენოთ, რომ ფორმალური მუხტი გამოითვლება ფორმულით:

ფ.მ.=სავალენტო ელექტრონების რ-ბა - [(თავისუფალ ელექტრონულ წყვილებში შემავალი ელექტრონების რ-ბა) + ½ ქიმიურ ბმებში მონაწილე ელექტრონების რ-ბისა]

ჟანგბადის ატომის ფორმალური მუხტია:

ᲤᲛ.(O) = 6 –(4+1/2 × 4)=0

წყალბადის ატომის ფორმალური მუხტია:

ᲤᲛ.(H)=1-(0+1/2×2) = 0

წესი V. დავუბრუნდეთ ცენტრალური ატომის ფორმალურ მუხტს. ნაერთის ფორმულა სწორად დაწერილად ითვლება, თუ:

ა) ცენტრალური ატომის ფორმალური მუხტი ემთხვევა მოლეკულის (ან იონის) მუხტის სიდიდეს

ან

ბ) ცენტრალური ატომის ფორმალური მუხტი უარყოფითია.

ჩვენს შემთხვევაში ძალაშია პირველი(ა) პირობა.

მაშასადამე, ფორმულა სწორად არის დაწერილი და შეგვიძლია, გადავიდეთ მთავარ საკითხზე: როგორ განვსაზღვროთ ფორმულის მიხედვით მოლეკულის გეომეტრიული ფორმა და ცენტრალური ატომის ატომური ორბიტალების ჰიბრიდიზაციის ტიპი.

ამისთვის დავუბრუნდეთ (1) ფორმულას და დავწეროთ წყლის მოლეკულის ზოგადი ფორმულა. სახელდობრ, ცენტრალური ატომი (აქ: ჟანგბადის ატომი) აღვნიშნოთ A ასოთი, ლიგანდები (აქ: წყალბადის ატომები) - B ასოთი, ხოლო ცენტრალური ატომის გაუზიარებელი ელექტრონული წყვილები - E ასოთი. მაშინ წყლის მოლეკულის ზოგადი ფორმულა იქნება AB_2E_2. ამ ზოგად ფორმულაში ცენტრალურ ატომთან დაკავშირებულია ორი ლიგანდი და ორი გაუზიარებელი ელექტრონული წყვილი, რაც ჯამში გვაძლევს ოთხს. ციფრი 4 მიუთითებს იმაზე, რომ ჰიბრიდიზაციაში მონაწილეობს ოთხი - ერთი s და სამი p - ორბიტალი, ე.ი. ადგილი აქვს sp^3ჰიბრიდიზაციას.

მოლეკულის გეომეტრიული ფორმის დასადგენად კი დავიხმაროთ ცხრილი N3, რომელშიც ერთმანეთთან დაკავშირებულია ნაერთის ზოგადი ფორმულა, ცენტრალური ატომის ატომური ორბიტალის ჰიბრიდიზაციის ტიპი და მოლეკულის გეომეტრიული ფორმა. როგორც ვხედავთ, ცხრილის მე-6 სტრიქონის შესაბამისად, წყლის მოლეკულას და, საზოგადოდ, ყველა იმ ნაერთის მოლეკულას, რომელთა ზოგადი ფორმულაა AB_2E_2, ექნება კუთხური ფორმა.

ცხრილი N3

N	ზოგადი ფორმულა	ცენტრალური ატომის ატომური ორბიტალების ჰიბრიდიზაციის ტიპი	მოლეკულის გეომეტრიული ფორმა	მაგალითები
1	AB_2	sp	ხაზოვანი	CO_2 $BeCl_2$
2	AB_3	sp^2	ბრტყელი სამკუთხა	BCl_3 CO_3^{2-} NO_3^- BF_3 $AlCl_3$ SO_3

3	AB_2E	sp^2	კუთხური	$SnCl_2$ SO_2
4	AB_4	sp^3	ტეტრაედრული	SiF_4 NH_4^+ PO_4^{3-} CH_4 $AlCl_4^-$
5	AB_3E	sp^3	სამკუთხა პირამიდული	PCl_3 H_3O^+ NH_3 SO_3^{2-}
6	AB_2E_2	sp^3	კუთხური	H_2O H_2S

ამრიგად, ჩვენ მოკლედ მიმოვიხილეთ ვალენტური ორბიტალების ელექტრონული წყვილების განზიდვის თეორიის ძირითადი პრინციპები და შევეცადეთ, წყლის მოლეკულის მაგალითზე გვეჩვენებინა, როგორ გვეხმარება აღნიშნული თეორია მოლეკულის გეომეტრიული ფორმისა და ცენტრალური ატომის ჰიბრიდიზაციის ტიპის დადგენაში. მომდევნო წერილში მიმოვიხილავთ სხვა მოლეკულებისა თუ იონების გეომეტრიულ ფორმასა თუ ცენტრალური ატომის ჰიბრიდიზაციის ტიპებს. აღნიშნული თეორიის შესახებ დამატებითი ინფორმაცია შეგიძლიათ მოძებნოთ ინტერნეტში. ძებნის გასაადვილებლად გთავაზობთ ამ თეორიის ინგლისურ და რუსულ აბრევიატურებს და ზოგიერთი ვებგვერდის მისამართს:

VSEPRtheory - **V**alence **S**hell **E**lectron **P**air **R**epulsiontheory

ОЭПВО - теория **О**тталкивания **Э**лектронных **П**ар **В**алентных **О**рбиталей

http://www.kentchemistry.com/links/bonding/lewisdotstruct.htm

http://intro.chem.okstate.edu/1314F00/Lecture/Chapter10/VSEPR.html

https://people.ok.ubc.ca/wsmcneil/vsepr.htm

http://www.chemistry-drills.com/VSEPR.php