

ვალენტური ორბიტალების ელექტრონული წყვილების განზიდვის თეორია

II ნაწილი

განვავარძოთ ვალენტური ორბიტალების ელექტრონული წყვილების განზიდვის თეორიის თემას. საკითხის აქტუალობიდან გამომდინარე, საჭიროდ მივიჩნიე კიდევ ორი იონის გეომეტრიული ფორმისა და ამ იონებში შემავალი ცენტრალური ატომის ატომური ორბიტალების ჰიბრიდიზაციის ტიპის დადგენის განხილვა. ეს იონებია კარბონატ-იონი და სულფატ-იონი. შევადგინოთ ლუისის ფორმულა თითოეული მათგანისთვის.

მაგ. 1. ლუისის ფორმულა კარბონატ-იონისთვის (CO_3^{2-})

დავიცვათ იგივე წესები, რომლებიც წინა პუბლიკაციაში განვიხილეთ.

წესი I. დავთვალოთ იონში შემავალი ატომების სავალენტო ელექტრონების საერთო რაოდენობა. ამისთვის ელემენტების ატომთა რიცხვი გავამრავლოთ სავალენტო ელექტრონების რაოდენობაზე.

წესი II. თუ იონს აქვს უარყოფითი მუხტი, მუხტის სიდიდე უნდა მივუმატოთ სავალენტო ელექტრონების ჯამურ რაოდენობას, ხოლო თუ იონი დამუხტულია დადებითად, დადებითი მუხტის სიდიდე აკლდება სავალენტო ელექტრონების ჯამურ რაოდენობას (რაც ხდება კიდევ ამონიუმის იონის შემთხვევაში).

ორივე წესის გამოყენებით შევაგსოთ **ცხრილი N1**.

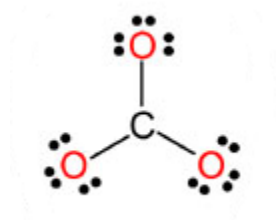
ცხრილი N1

ატომი	ატომების რ-ბა	ცალკეული ატომის სავალენტო ელექტრონების რ-ბა	ყველა ატომის სავალენტო ელექტრონების ჯამური რ-ბა
C	1	4	$1 \times 4 = 4$
O	3	6	$3 \times 6 = 18$
მუხტის სიდიდე			-2
			$4 + 18 + 2 = 24$

ვინაიდან კარბონატ-იონის მუხტის სიდიდეა -2, ამიტომ ელექტრონების ჯამური რაოდენობაა **24** (ანუ უარყოფითი მუხტის სიდიდე ემატება სავალენტო ელექტრონების ჯამურ რაოდენობას).

24 ელექტრონი ნიშნავს, რომ იონში უნდა იყოს სულ $24/2 = 12$ ელექტრონული წყვილი.

წესი III. განვსაზღვროთ, რომელი ატომია კარბონატ-იონში ცენტრალური და რომელი - ლიგანდა. ცენტრალური ატომი იქნება ნახშირბადის ატომი (როგორც უფრო ნაკლებად ელექტროუარყოფითი ელემენტისა), ხოლო ლიგანდები - ჟანგბადის ატომები. 12 ელექტრონული წყვილიდან სამით ნახშირბადის ატომი დავაკავშიროთ ჟანგბადის ატომთან; ამის შემდეგ ჟანგბადის ატომებს მივუწეროთ იმდენი ელექტრონული წყვილი, რომ ჟანგბადის თითოეულ ატომს ჰქონდეს სრული/შევსებული ელექტრონული ოქტეტი (ამისთვის კიდეც 9 ელექტრონული წყვილი დაგვჭირდება).



მაშასადამე, თორმეტივე ელექტრონული წყვილი გამოვიყენეთ. როგორც ვხედავთ, ნახშირბადის ატომს არასრული ოქტეტი აქვს.

წესი IV. გამოვიანგარიშოთ კარბონატ-იონში შემავალი თითოეული ატომის ფორმალური მუხტი (ფ. მ.).

გავიხსენოთ, რომ ფორმალური მუხტი გამოითვლება ფორმულით:

ფ.მ. = სავალენტო ელექტრონების რ-ბა $\square$ [(თავისუფალ/გაუზიარებელ ელექტრონულ წყვილებში შემავალი ელექტრონების რ-ბა) + $\frac{1}{2}$ ქიმიურ ბმეებში მონაწილე ელექტრონების რ-ბისა]

ახლა გამოვიანგარიშოთ ნახშირბადის ატომის ფორმალური მუხტი:

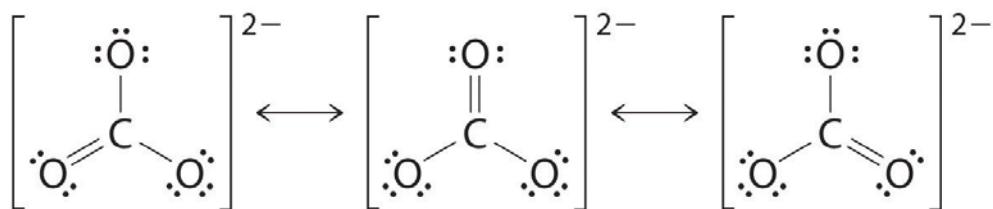
$$\text{ფ.მ.}(C) = 4 - (0 + \frac{1}{2} \times 6) = +1$$

ჟანგბადის ატომის ფორმალური მუხტი კი იქნება:

$$\text{ფ.მ.}(O) = 6 - (6 + \frac{1}{2} \times 2) = -1$$

ახლა გვჭირდება **წესი V**-ის გამოყენება (იხ. პირველი პუბლიკაცია). ამ წესიდან გამომდინარე, ვინაიდან ცენტრალური ატომის ფორმალური მუხტი არ ემთხვევა იონის მუხტს და არც უარყოფითია, ამიტომ კარბონატ-იონის სტრუქტურულ ფორმულას სჭირდება მოდიფიცირება, რაც იმას ნიშნავს, რომ ჟანგბადის ერთ-ერთი ატომიდან ერთი

ელექტრონული წყვილი გადმოდის ნახშირბადისა და ჟანგბადის ატომებს შორის და წარმოიქმნება ორმაგი ბმა. ვინაიდან ამის გაკეთება შეუძლია ჟანგბადის სამივე ატომს, ამიტომ შესაძლებელია სამი რეზონანსული სტრუქტურული ფორმულის არსებობა:



ფორმალური მუხტი რომც არ გვეანგარიშა, ისედაც ჩანდა, რომ ნახშირბადის ატომს აქვს არასრული ოქტეტი, რაც იმთავითვე გულისხმობს არსებული სტრუქტურის მოდიფიკაციის აუცილებლობას. თუმცა არსებობს მოლეკულები/იონები, რომელთა სწორად დასაწერად აუცილებელია ფორმალური მუხტის გამოთვლა (მაგ., სულფატ-იონი, რომლის შესახებაც ქვემოთ ვისაუბრებთ).

ახლა დავადგინოთ ზოგადი ფორმულა კარბონატ-იონისთვის. თუ **A** ცენტრალური ატომი არის ნახშირბადის ატომი და **B** ლიგანდები - ჟანგბადის ატომები, მაშინ კარბონატ-იონისთვის ზოგადი ფორმულა იქნება **AB₃**. ცენტრალურ ატომთან დაკავშირებულია სამი **ატომი**, ამიტომ ჰიბრიდიზაციაში მონაწილეობს ცენტრალური ატომის **სამი** ორბიტალი: ერთი s და ორი p, ე.ი. ადგილი აქვს **sp²** ჰიბრიდიზაციას.

ცხრილი N2

N	ზოგადი ფორმულა	ცენტრალური ატომის ატომური ორბიტალების ჰიბრიდიზაციის ტიპი	მოლეკულის გეომეტრიული ფორმა	მაგალიტები
1	AB ₂	sp	ხაზოვანი	C ₂ H ₂ CO ₂ BeCl ₂
2	AB ₃	sp ²	ბრტყელი სამკუთხა	BCl ₃ C ₂ H ₄ CO ₃ ²⁻ NO ₃ ⁻ BF ₃ AlCl ₃ SO ₃
3	AB ₂ E	sp ²	კუთხური	SnCl ₂ SO ₂
4	AB ₄	sp ³	ტეტრაედრული	SiF ₄ NH ₄ ⁺ PO ₄ ³⁻ CH ₄ AlCl ₄ ⁻ SO ₄ ²⁻
5	AB ₃ E	sp ³	სამკუთხა პირამიდული	PF ₃ H ₃ O ⁺ NH ₃

6	AB_2E_2	sp^3	კუთხური	H_2O H_2S

შევხედოთ მეორე ცხრილს, სადაც AB_3 ზოგად ფორმულას შეესაბამება იონის ბრტყელი სამკუთხა გეომეტრიული ფორმა.

ფორმალური მუხტის ცოდნა გვეხმარება განსაკუთრებით მაშინ, როდესაც ამა თუ იმ მოლეკულისა თუ იონის ლუისის სტრუქტურის რამდენიმე ვარიანტია შესაძლებელი და ყველა მათგანი აკმაყოფილებს ელექტრონული ოქტეტის წესს, შესაბამისად, სწორი ფორმულის ამორჩევა რთულია. მაგ., სულფატ-იონის შემთხვევაში.

მაგ.3. შევადგინოთ ლუისის ფორმულა სულფატ-იონისთვის.

წესი I. დავთვალოთ სულფატ-იონში შემავალი ატომების სავალენტო ელექტრონების საერთო რაოდენობა. ამისთვის თითოეული ელემენტის ატომების რიცხვი გავამრავლოთ სავალენტო ელექტრონების რაოდენობაზე:

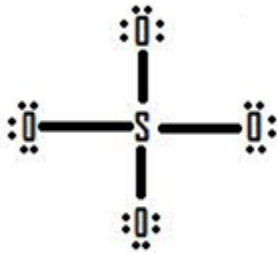
ცხრილი N3

ატომი	ატომების რ-ბა	ცალკეული ატომის სავალენტო ელექტრონების რ-ბა	ყველა ატომის სავალენტო ელექტრონების ჯამური რ-ბა
S	1	6	$1 \times 6 = 6$
O	4	6	$4 \times 6 = 24$
მუხტის სიდიდე			-2
			$6 + 24 + 2 = 32$

წესი II. ვინაიდან სულფატ-იონის მუხტის სიდიდეა -2, ამიტომ ელექტრონების ჯამური რაოდენობა არის 32 (ანუ უარყოფითი მუხტის სიდიდე ემატება სავალენტო ელექტრონების ჯამურ რაოდენობას).

32 ელექტრონი ნიშნავს, რომ მოლეკულაში უნდა იყოს სულ $32/2 = 16$ ელექტრონული წყვილი.

წესი III. განვსაზღვროთ სულფატ-იონში ცენტრალური ატომი და ლიგანდები. ცენტრალური იქნება გოგირდის ატომი (როგორც უფრო ნაკლებად ელექტროუარყოფითი ელემენტის ატომი), ხოლო ლიგანდები - ჟანგბადისა. 16 ელექტრონული წყვილიდან ოთხით გოგირდის ატომი დავაკავშიროთ ჟანგბადის ატომთან; ამის შემდეგ ჟანგბადის ატომებს მივუწეროთ იმდენი ელექტრონული წყვილი, რომ ჟანგბადის თითოეულ ატომს ჰქონდეს სრული/შევსებული ელექტრონული ოქტეტი (ამისთვის დაგვჭირდება კიდევ 12 ელექტრონული წყვილი).



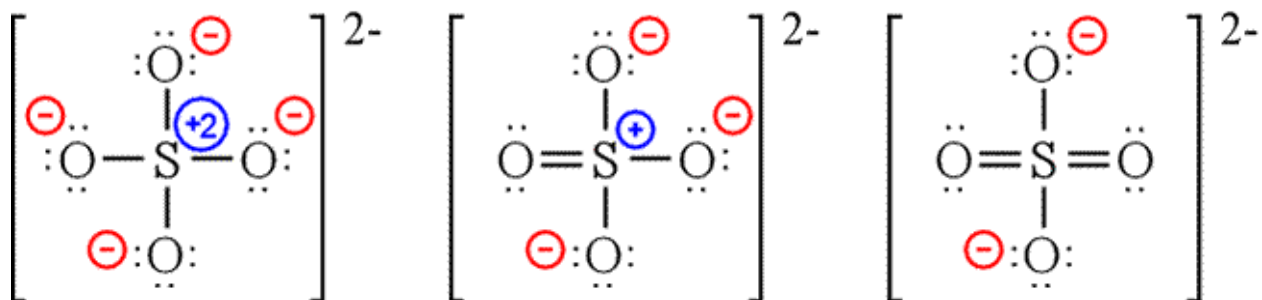
როგორც ვხედავთ, გოგირდისა და ჟანგბადის ატომებს უკვე აქვთ შევსებული ელექტრონული ოქტეტი. მაშინ უნდა გვეფიქრა, რომ ფორმულა სწორად არის შედგენილი. სწორედ აქ გვეხმარება ფორმალური მუხტის ცოდნა.

ვიანგარიშოთ ეს უკანასკნელი როგორც გოგირდის, ისე ჟანგბადის ატომებისთვის (**წესი IV**).

$$\text{ფ.მ.}(S) = 6 - (0 + \frac{1}{2} \times 8) = +2$$

$$\text{ფ.მ.}(O) = 6 - (6 + \frac{1}{2} \times 2) = -1$$

ცენტრალური ატომის (ჩვენს შემთხვევაში - გოგირდის ატომის) ფორმალური მუხტი (+2) არ ემთხვევა სულფატ-იონის მუხტს (-2) და არც უარყოფითია (იხ. **წესი V**), ამიტომ ფორმულას სჭირდება მოდიფიცირება. როგორ? ეს მოხდება ჟანგბადის ატომების გაუზიარებელი ელექტრონული წყვილების გადასვლით გოგირდისა და ჟანგბადის ატომებს შორის და ამის შედეგად ორმაგი ბმების წარმოქმნით. მესამე და შემდგომი პერიოდის ელემენტებისთვის ეს პროცესი გრძელდება მანამდე, სანამ ცენტრალური ატომის ფორმალური მუხტი არ გახდება ნულის ტოლი. ეს მოხდება შემდეგნაირად: გოგირდის ატომის ფორმალური მუხტია +2 (იხ. I ფორმულა); ჟანგბადის ერთ-ერთი ატომის გაუზიარებელი ელექტრონული წყვილის გადასვლით გოგირდისა და ჟანგბადის ატომებს შორის გოგირდის ატომის ფორმალური მუხტი შემცირდება ერთი ერთეულით და გახდება +1 (II ფორმულა), ხოლო ჟანგბადის კიდევ ერთი ატომის ერთი გაუზიარებელი ელექტრონული წყვილის გადასვლით გოგირდისა და ჟანგბადის ატომებს შორის ეს სიდიდე კიდევ ერთი ერთეულით შემცირდება და გახდება 0-ის ტოლი (III ფორმულა), ე.ი. წარმოიქმნება ორი ორმაგი ბმა:



I II III

მაშადამე, სულფატ-იონისთვის, რომელიც შეიცავს ცენტრალურ ატომთან (გოგირდის ატომთან) დაკავშირებულ **ოთხ** ლიგანდს (ჟანგბადის 4 ატომს), ზოგადი ფორმულა იქნება **AB₄**. ციფრი 4 იმაზე მიუთითებს, რომ ჰიბრიდიზაციაში მონაწილეობს ცენტრალური ატომის 4 ატომური ორბიტალი - ერთი s და სამი p - და საქმე გვაქვს **sp³** ჰიბრიდიზაციასთან. რაც შეეხება სულფატ-იონის გეომეტრიულ ფორმას, იგი ტეტრაედრული იქნება (იხ. **ცხრილი N2**).

ამით ვასრულებთ ვალენტური ორბიტალების ელექტრონული წყვილების განზიდვის თეორიის განხილვას. იმედს ვიტოვებ, ამ ორ სტატიაში განხილული მასალა დაგეხმარებათ სხვა მოლეკულებისა და იონების გეომეტრიული ფორმისა თუ ცენტრალური ატომის ატომური ორბიტალების ჰიბრიდიზაციის ტიპის დადგენაში. ამ თემის გარშემო ინტერნეტში მასალის მოძიების გასაადვილებლად კიდევ ერთხელ შეგახსენებთ ამ თეორიის ინგლისურ და რუსულ აზრევიატურებს და ზოგიერთი ვებგვერდის მისამართს:

VSEPR theory - **V**alence **S**hell **E**lectron **P**air **R**epulsion theory

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>