

## الفصل الخامس: الروابط الكيميائية

### مقدمة

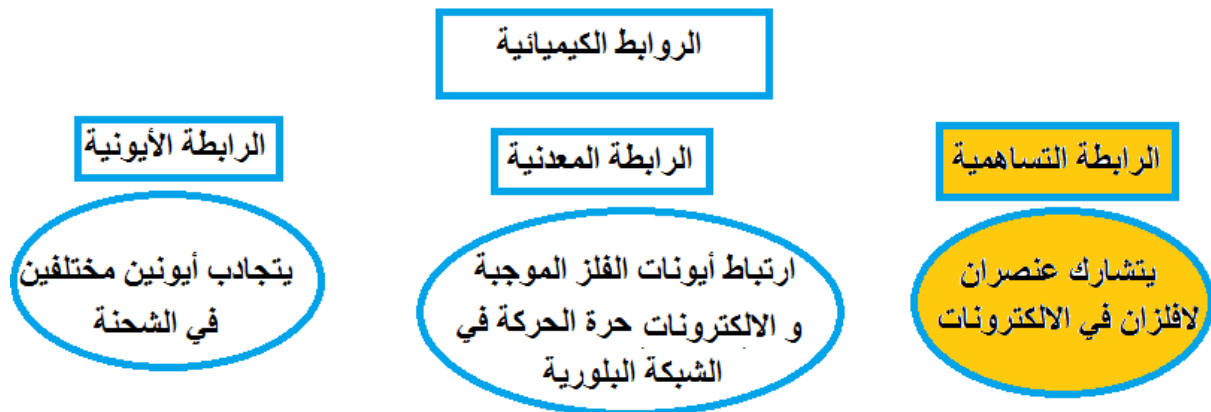
العنصر الأكثر أهمية بالنسبة للكيميائي هو الجزيء: الذي يعتبر مركبا مكونا من ذرات مرتبطة ببعضها البعض بواسطة روابط كيميائية. إن عدد الذرات المختلفة المتوفرة لتشكيل الجزيئات محدود نسبياً، وهي مرتبة في الجدول الدوري لمندلييف. على الرغم من هذا العدد المحدود من الذرات ، فإننا نعرف حالياً الملايين من الجزيئات الطبيعية أو الاصطناعية.

### 1. تعريف الرابطة الكيميائية

الرابطة الكيميائية هي تفاعل دائم بين عدة ذرات أو أيونات أو جزيئات، على مسافة تسمح بتشكيل العنصر الكيميائي. تتجذب الإلكترونات سالبة الشحنة حول نواة مكونة من بروتونات موجبة الشحنة. يجذب الجسمان بعضهما البعض بسبب القوة الكهروستاتيكية التي تعمل بين الإلكترونات والبروتونات. وهكذا ، فإن الإلكترون الموضوع بين نواتين سوف يجذب بواسطة الجسمين الموجبي الشحنة ، وسوف تجذب النوى بواسطة الإلكترون. هذا الجذب هو الذي يشكل الرابطة الكيميائية. تتشكل هذه الرابطة عموماً عن طريق ارتباط إلكترونين متواجدين على الطبقة الخارجية للذرات (طبقة التكافؤ). كما يمكن ان تتشكل بفعل التفاعلات الكهروستاتيكية (التجاذب الإلكتروني). تصنف الروابط الكيميائية إلى فئتين: الروابط القوية بين الذرات والروابط الضعيفة بين الجزيئات.

### 1.1. الروابط بين الذرات (أو ضمن الجزيئات) (الروابط القوية)

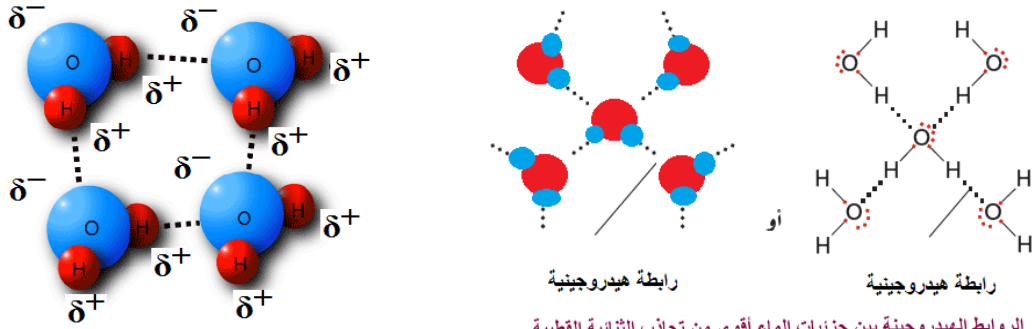
في الطبيعة، غالباً ما تتواجد الذرات في شكل جزيئات، باستثناء الغازات النبيلة (الخاملة). عند الارتباط، يكون مستوى طاقة الذرات المرتبطة أقل مما لو كانت وحدها. تأخذ الذرات نفس التوزيع الإلكتروني لأقرب غاز نبيل لها. تنقسم الروابط القوية إلى ثلاثة أنواع: الأيونية والمعدنية والتساهمية (القطبية وغير القطبية).



الشكل 11 : أنواع الروابط الكيميائية.

## 2.1. الروابط بين الجزيئات (الروابط الضعيفة)

تؤدي القوى المتواجدة بين الجزيئات إلى تجميع الأنظمة المجهرية. وهي المسؤولة عن تماسك المادة في المراحل المرئية. هذه القوى ضعيفة مقارنة بقوى الترابط بين الذرات. فهي لا تغير طبيعة الأنواع الجزيئية إنما تؤثر فقط على طريقة ارتباطها. أشهر الروابط بين الجزيئات هي رابطة فان دير فال (Van Der Waalls) والرابطة الهيدروجينية.



رابطة هيدروجينية

رابطة هيدروجينية

الروابط الهيدروجينية بين جزيئات الماء أقوى من تجاذب الشحنة القطبية ( لأن الرابطة بين الهيدروجين والأكسجين ذات قطبية كبيرة )

## رابطة فان دير فال (Waalls Van Der)

الشكل 12 : الروابط بين الجزيئات.

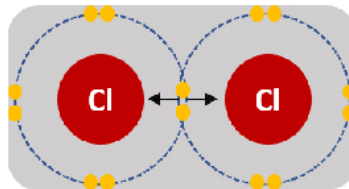
## 2. أنواع الروابط القوية ( بين الذرات)

### 1.2. الرابطة التساهمية

الرابطة التساهمية هي رابطة كيميائية ناتجة عن مشاركة إلكترونين على الأقل توفرهما الطبقات الخارجية لذرتين مترابطتين و هي تتشكل بين الذرات التي لديها كهروسالبية متقاربة أو متطابقة. في هذه الرابطة، لا تسعى الذرات إلى اكتساب أو فقدان إلكترونات، بل تسعى إلى مشاركة إلكترونات التكافؤ الخاصة بها. وبالتالي، فإن هذه الرابطة تعني مشاركة زوج من الإلكترونات بين ذرتين مما يجعل من الممكن إكمال طبقة التكافؤ الخاصة بهما و تحقيق الاستقرار، وينتج عن ذلك قوة جذب بينهما. ينتج عن هذه الرابطة ظهور زوج الكتروني رابط بين الذرتين. تنقسم الروابط التساهمية إلى فئتين: تساهمية قطبية و تساهمية غير قطبية.

### 1.1.2. الرابطة التساهمية غير القطبية

تكون الرابطة التساهمية غير القطبية عندما يكون فرق الكهروسالبية بين الذرتين معدوما كما هو الحال في رابطة تتكون من ذرتين من نفس العنصر. مثال :  $H_2$ ,  $Cl_2$



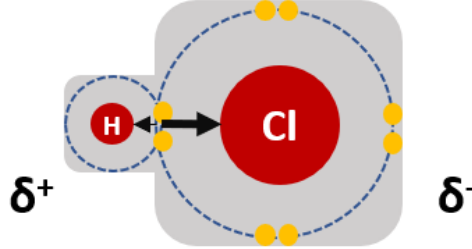
### الرابطة التساهمية الغير قطبية

يتم تقاسم الإلكترونات بالتساوي بين الذرتين

الرابطة التساهمية غير القطبية.

### 2.1.2. الرابطة التساهمية القطبية

تكون الرابطة التساهمية قطبية عندما لا يكون فرق الكهروسالبية بين الذرتين معدوماً. هذا يعني أن الإلكترونات لا تتوزع بالتساوي بين الذرتين (كلما زادت كهروسالبية الذرة ستجذب الزوج الإلكتروني للرابطة نحوها). في الرابطة التساهمية القطبية، ستظهر الشحنات الجزئية ( $\delta^-$ ،  $\delta^+$ ) وينشأ عزم ثنائي القطب ( $\mu$ ). مثال: جزيء حمض كلور الماء HCl.



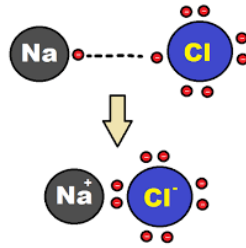
### الرابطة التساهمية القطبية

لا يتم تقاسم الإلكترونات بالتساوي بين الذرتين

الشكل 13 : الرابطة التساهمية القطبية (HCl).

### 2.2. الرابطة الأيونية

تنتج عن انتقال للإلكترون بين ذرتين بينهما فرق كبير في الكهروسالبية، حيث كلما كان الفرق ( $\Delta\chi$ ) أكبر، زاد احتمال أن تكون الرابطة أيونية على سبيل المثال: ملح الطعام NaCl تتكون الرابطة الأيونية بين ذرة الصوديوم Na، وهو متبرع بالإلكترون يصبح أيوناً موجب الشحنة (كاتيون ذو كهروسالبية منخفضة)، وذرة الكلور، مستقبل للإلكترون الذي يصبح أيون مشحون سالباً (أنيون ذو كهروسالبية عالية).



### الرابطة الأيونية

الشكل 14 : الرابطة الأيونية (جزيء كلوريد الصوديوم NaCl).

نستطيع تحديد نوع الرابطة (تساهمية أو أيونية) وذلك بحساب فرق الكهروسالبية ( $\Delta\chi$ ) حيث:

- إذا كان ( $\Delta\chi < 0.5$ ) فإن الرابطة تساهمية غير قطبية
- إذا كان ( $0.5 \leq \Delta\chi \leq 1.7$ ) فإن الرابطة تساهمية قطبية
- إذا كان ( $\Delta\chi \geq 1.7$ ) فإن الرابطة أيونية.

### 3.2. الرابطة المعدنية

الرابطة المعدنية هي رابطة تتكون بين ذرات المعادن يتعلق الأمر بعدد كبير جداً من الذرات التي تشترك في واحد أو أكثر من الإلكترونات تسمى الإلكترونات الحرة (هذه الإلكترونات هي أصل الناقلية الكهربائية للمعادن). تتشكل شبكة من الشوارد الموجبة مغمورة في الإلكترونات الحرة. وهذه الرابطة قوية هي المسؤولة عن متانة وقساوة المعدن وارتفاع درجة انصهاره.



### 3. نموذج لويس للرابطة التساهمية

وفقاً لـ **Lewis** ، يمكننا تجاهل الإلكترونات التي تنتمي إلى الطبقات الداخلية للذرة (إلكترونات القلب) ، فقط إلكترونات الطبقة الخارجية للذرة (إلكترونات التكافؤ) يمكن أن تشارك في تكوين الروابط. يُطلق على تمثيل لويس أيضاً اسم صيغة لويس أو بنية لويس.

### 1.3. تمثيل الذرة

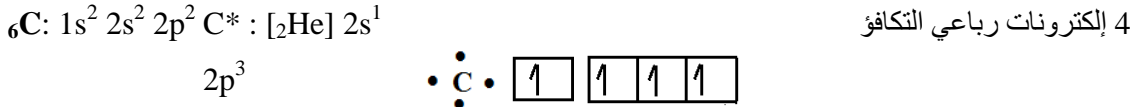
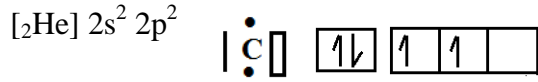
تمثيل لويس هو مخطط للبنية الإلكترونية الخارجية ، أو طبقة التكافؤ. حيث نمثل ب:

- الزوج الإلكتروني الحر بخط: —
- الإلكترون الحر بنقطة: .
- الخانة الكمية الفارغة بمربع □
- **التكافؤ:** عدد الإلكترونات العازبة يعطي تكافؤ الذرة ؛ وبالتالي عدد الروابط التي يمكن أن تشكلها الذرة.
- **طبقة التكافؤ:** الطبقة الخارجية للذرة (الأبعد عن النواة) التي تحمل إلكترونات التكافؤ.

أمثلة :

#### عدد الإلكترونات العازبة

$1\text{H}: 1s^1$	$\text{H} \cdot$	□ 1	إلكترون واحد أحادي التكافؤ
$8\text{O}: 1s^2 2s^2 2p^4$	$\cdot \text{O} \cdot$	□ 1 □ 1 □ 1 □ 1	إلكترونين ثنائي التكافؤ
$7\text{N}: 1s^2 2s^2 2p^3$	$ \cdot \text{N} \cdot$	□ 1 □ 1 □ 1 □ 1	3 إلكترونات ثلاثي التكافؤ

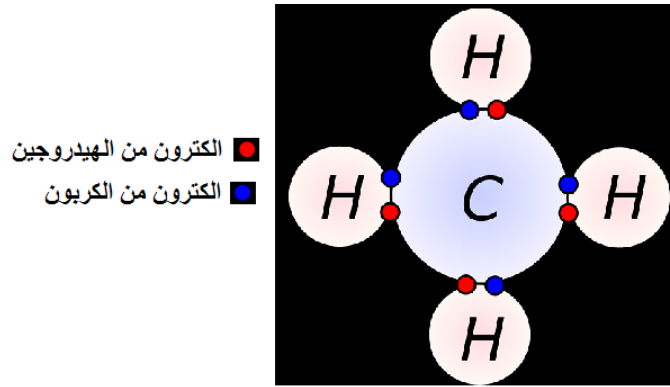


### 2.3. تمثيل الجزيئات

بشكل عام ، ترتبط الذرات بروابط تساهمية لتكوين جزيئات. تتكون هذه الرابطة من مشاركة الإلكترونات بين ذرتين. يتم تمثيل الرابطة التساهمية بخط يشار إليه أيضًا باسم الزوج الإلكتروني.

#### 1.2.3. الرابطة التساهمية البسيطة ( $\sigma$ )

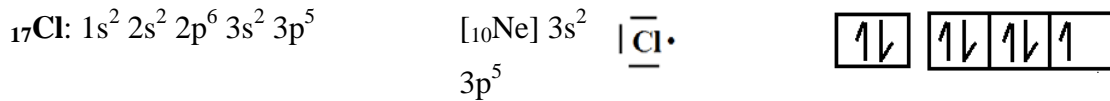
الرابطة التساهمية البسيطة هي رابطة تتقاسم فيها ذرتان إلكترونين عازبين. تنتمي الإلكترونات المشتركة إلى كلتا الذرتين في نفس الوقت، وهو ما يتوافق مع كسب إلكترون واحد لكل ذرة.



الشكل 15 : جزيء الميثان  $\text{CH}_4$ .

- الزوج الرابط (DL: Doublet Liant): هو زوج الكتروني يربط بين ذرتين (الإلكترونان العازبة المشتركة بين الذرتين).
- الزوج غير الرابط (DNL: Doublet Non Liant): هي زوج الكتروني للذرة غير مشترك في إنشاء رابطة.

مثال

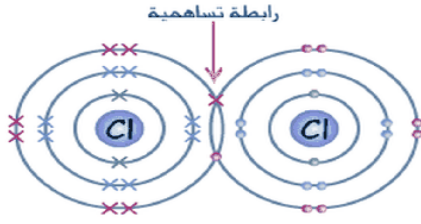


$\text{Cl}_2$  : الزوج الرابط (DL: Doublet Liant)

1 :

الزوج الغير الرابط ( Doublet non )

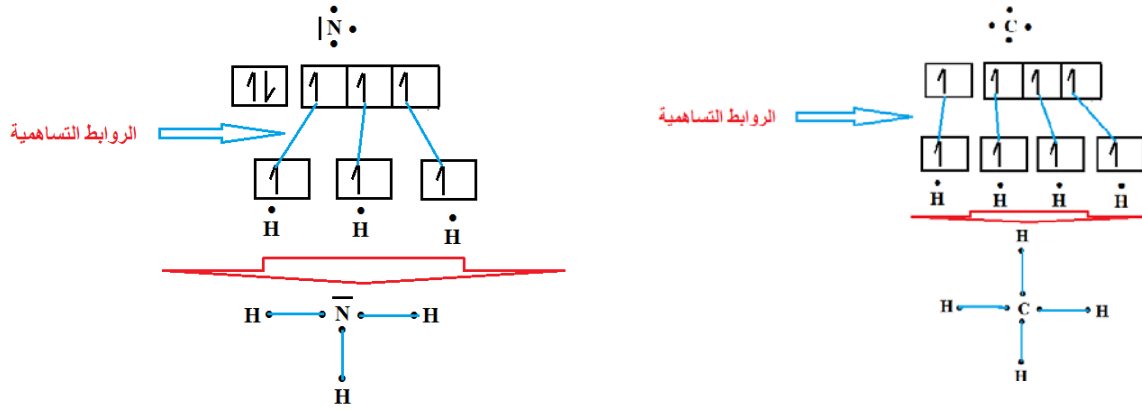
6 : (DNL:Liant



جزيء Cl<sub>2</sub>

➤ أمثلة على الرابطة التساهمية البسيطة لجزيء متعدد الذرات:

- يتكون جزيء CH<sub>4</sub> من ذرة C و 4 ذرات H مرتبطة ببعضها البعض بواسطة روابط أحادية من النوع σ.
- يتكون جزيء NH<sub>3</sub> من ذرة N و 3 ذرات H مرتبطة ببعضها البعض بواسطة روابط أحادية من النوع σ.

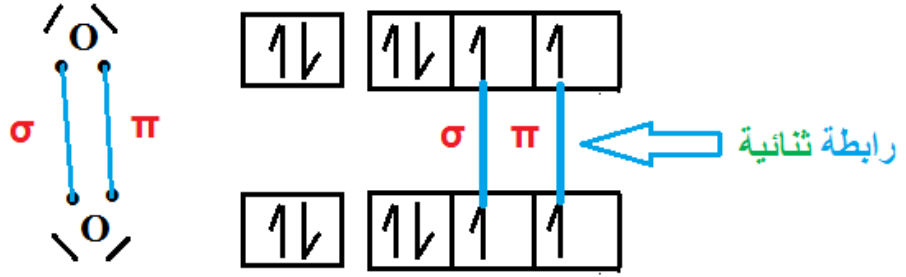


جزيئي CH<sub>4</sub> و NH<sub>3</sub>.

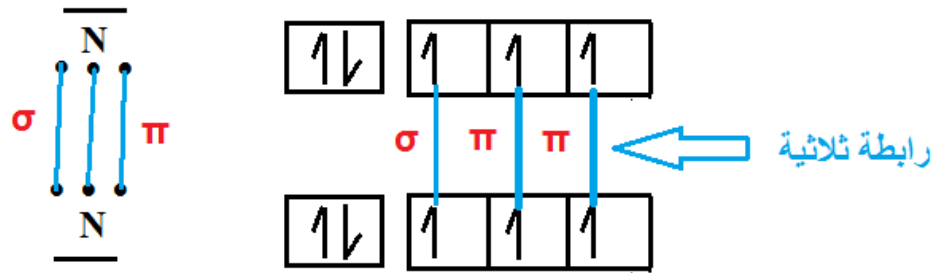
### 2.2.3. الرابطة المتعددة ، الثنائية (σ ، π) والثلاثية (σ ، π ، π)

يمكن أن تشكل الذرات روابط ثنائية أو ثلاثية من خلال مشاركة إلكترونين أو ثلاثة إلكترونات عازبة من كل ذرة. يتم تمثيل الرابطة الثنائية بخطين ويتم تمثيل الرابطة الثلاثية بثلاثة خطوط.

➤ مثال على رابطة مزدوجة من النوع (σ ، π) : يتكون جزيء O<sub>2</sub> من ذرتين من الأكسجين مرتبطة ببعضها البعض برابطة ثنائية.



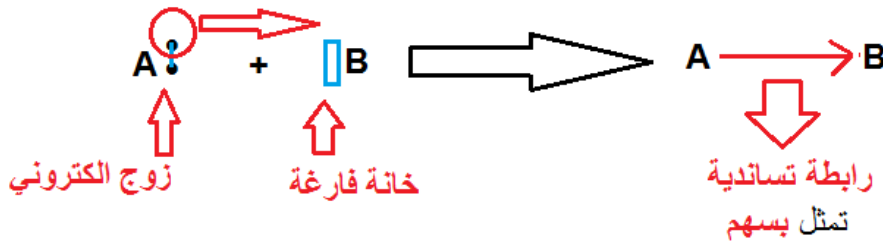
➤ مثال على رابطة ثلاثية من النوع ( $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\pi$ ): يتكون جزيء  $N_2$  من ذرتين من النيتروجين مرتبطة ببعضها البعض بواسطة رابطة ثلاثية.



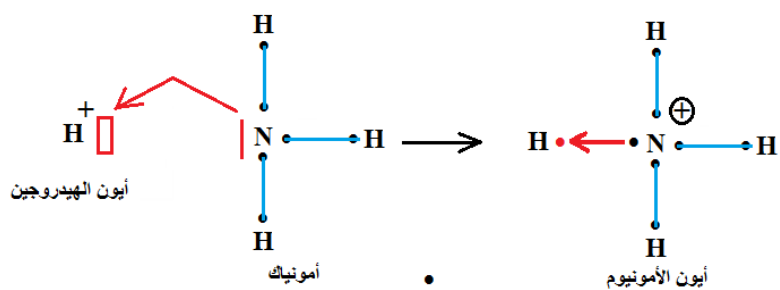
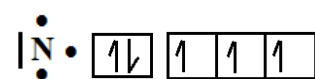
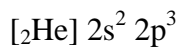
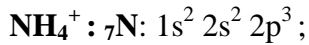
### 3.2.3. الرابطة التساهمية التساندية (La liaison dative)

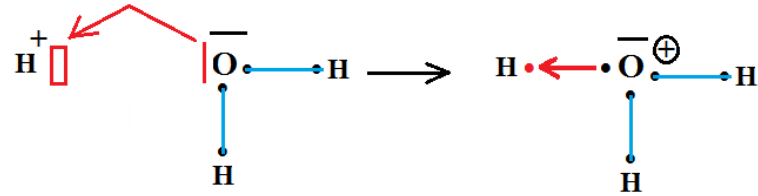
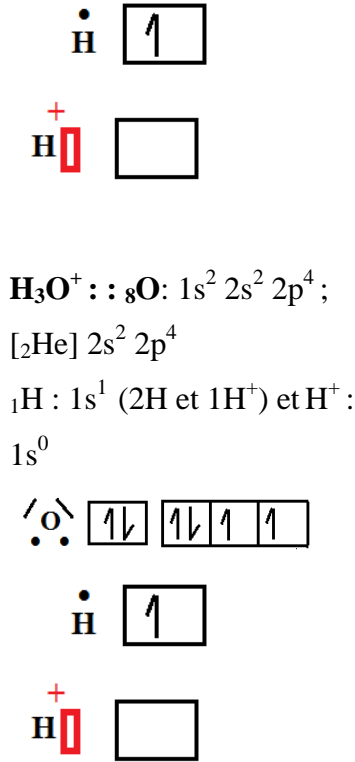
في هذه الرابطة، توفر إحدى الذرتين زوجا الكترونيا من طبقتها الخارجية (الذرة المانحة: A) والأخرى (الذرة المستقبلة: B) تستقبل هذا الزوج في خانتها الفارغة من طبقتها الخارجية.

الرابطة التساندية هي نفسها الرابطة التساهمية، ولكن يتم تمثيلها بسهم من المتبرع إلى المتلقي.



أمثلة:  $H_3O^+$  و  $NH_4^+$





#### 4. قاعدة الثمانية وقاعدة الثنائية (Règle d'octet et du duet)

هدف الذرات هو أن تكون مستقرة قدر الإمكان من أجل الحصول على هيكل إلكتروني خارجي أقرب ما يمكن إلى أقرب غاز نبيل (خامل) لها.

##### 1.4. قاعدة الثنائية

وفقاً للقاعدة الثنائية، تكون الذرة أو الأيون مستقرًا إذا كان غلافها الخارجي يحتوي على إلكترونين. و تتعلق بالذرات التي تحتوي على أقل من 4 إلكترونات. و هي تتعلق فقط بالهيدروجين من أجل الحصول على تكوين قريب من تكوين الهيليوم.

##### 2.4. قاعدة الثمانية

ابتداء من الدور الثاني من الجدول الدوري، تميل الذرات إلى إحاطة نفسها بأربعة أزواج من الإلكترونات من أجل الحصول على التكوين الإلكتروني المستقر في  $ns^2 np^6$  لأقرب غاز نبيل في الجدول الدوري (أي ثمانية إلكترونات).

أمثلة:

1- تحتوي ذرة الكربون  $\text{C}$  ( $Z = 6$ ) على 4 إلكترونات محيطية ولا تحتوي على أزواج الكترونية غير رابطة، لذا من أجل احترام قاعدة الثمانية، يجب أن تكمل غلافها  $L$  باكتساب 4 إلكترونات. يمكنها تكوين 4 روابط تساهمية أو إنشاء روابط ثنائية وثلاثية. يقال أن ذرة الكربون رباعية التكافؤ.

2- تحتوي ذرة النيتروجين  $\text{N}$  ( $Z = 7$ ) على 3 إلكترونات عازية وزوج الكتروني غير رابط. لاحترام قاعدة الثمانية، يجب أن تكمل غلافها  $L$  باكتساب 3 إلكترونات. و ذلك بإنشاء 3 روابط تساهمية.

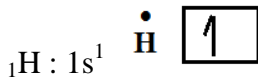
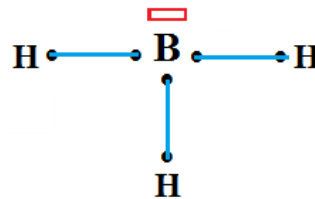
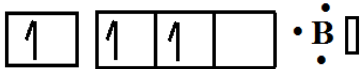
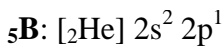
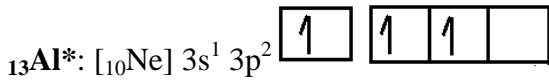
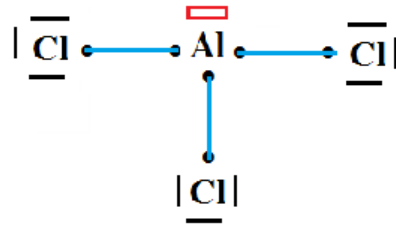


- 3- تحتوي ذرة الأكسجين O ( $Z = 8$ ) على إلكترونين عازبين وزوجين الكترونيين غير رابطين. لاحترام قاعدة الثمانية، يجب أن تكمل ذرة الأكسجين غلافها L من خلال اكتساب إلكترونين. وذلك بإنشاء رابطتين تساهميتين أو رابطة ثنائية.
- 4- تحتوي ذرة الكلور Cl ( $Z = 17$ ) على إلكترون واحد عازب و 3 أزواج الكترونية غير رابطة. لاحترام قاعدة الثمانية، يجب أن تكمل ذرة الكلور غلافها L من خلال اكتساب 1 إلكترون و يتم ذلك بإنشاء رابطة تساهمية.
- ومع ذلك ، هناك استثناءات لقاعدة الثمانية: يمكن أن تحتوي الذرات على أكثر أو أقل من 8 إلكترونات في غلافها المحيطي.

### 3.4. استثناءات من القاعدة الثمانية

- 1- بعض عناصر المجموعة III<sub>A</sub> من الجدول الدوري (B، Al، Ga) لها ثلاثة إلكترونات خارجية. إعادة ترتيب ( $ns^2 np^1$ ) يتيح الحصول على ( $ns^1 np^2$ ) وتشكيل ثلاث روابط تساهمية مع ثلاث ذرات أحادية التكافؤ.

مثال: هيدريد البورون BH<sub>3</sub> وكلوريد الألمنيوم AlCl<sub>3</sub>



- 2- العناصر الفائقة التكافؤ: في حالة العناصر ذات العدد الكمي  $n \geq 3$  ، يمكن أن تتدخل المدارات الذرية nd وتسمح بوجود أكثر من ثمانية إلكترونات في غلاف التكافؤ.

مثال: 10 إلكترونات لذرة الفوسفور في جزيء PCl<sub>5</sub> ، و 12 إلكترونًا لذرة الكبريت في جزيء SF<sub>6</sub>. فيكون P خماسي التكافؤ (PCl<sub>5</sub>) و S سداسي التكافؤ (SF<sub>6</sub>)، حيث:

- إعادة ترتيب ( $P: 3s^2 3p^3$ ) يجعل من الممكن الحصول على فوسفور خماسي التكافؤ ( $P: 3s^1 3p^3 3d^1$ ).

- إعادة ترتيب (S: 3s<sup>2</sup>3p<sup>4</sup>) يجعل من الممكن الحصول على الكبريت سداسي التكافؤ (S: 3s<sup>1</sup>3p<sup>3</sup>3d<sup>2</sup>).  
: SF<sub>6</sub> : PCl<sub>5</sub>



### 5. طريقة تمثيل الجزيء ببنية لويس

- 1- أكتب الصيغة الإجمالية: وبذلك نعرف جميع ذرات الجزيء.
- 2- كتابة التشكيل الإلكتروني لكل ذرة.
- 3- أوجد عدد الإلكترونات الخارجية لكل ذرة (الإلكترونات التكافؤ)  $N_e$ .
- 4- أوجد عدد الروابط التساهمية  $N_L$  التي يجب أن تنشأها الذرة للحصول على بنية ثمانية ( $N_L = 8 - N_e$ ) (استثناء لـ H،  $N_L = 2 - 1$ ).
- 5- أحسب عدد الأزواج غير الرابطة  $N_{nL}$  لكل ذرة:

$$N_{nL} = (N_e - N_L)/2$$

- 6- الذرة ذات الروابط التساهمية الأكثر (الأزواج الرابطة) هي الذرة المركزية
- 7- رتب الذرات الأخرى حول الذرة المركزية بطريقة تحترم صيغة الجزيء و عدد الروابط التساهمية لكل ذرة.
- 8- ضع الأزواج الرابطة بين ذرات الجزيء (الروابط التساهمية).
- 9- ضع الأزواج غير الرابطة حول ذراتها.
- 10- تحقق من أن كل ذرة من الجزيء تحقق قاعدة الثمانية من خلال كونها محاطة بأربعة أزواج.
- 11- تعيين لكل ذرة شحنتها الرسمية.

### 6. الشحنت الرسمية

تشير الشحنة الرسمية ( $C_f$ ) إلى عدد الإلكترونات التي اكتسبتها الذرة أو فقدتها أثناء تكوين الروابط التساهمية. لإكمال مخطط لويس، نحسب الشحنة الرسمية ( $C_f$ ) لكل ذرة حيث مجموع الشحنت الرسمية لجميع الذرات يساوي إجمالي الشحنة الكلية ( $Q$ ) للجزيء.

$$C_f = N_e - N_L - (2 \cdot N_{nL})$$

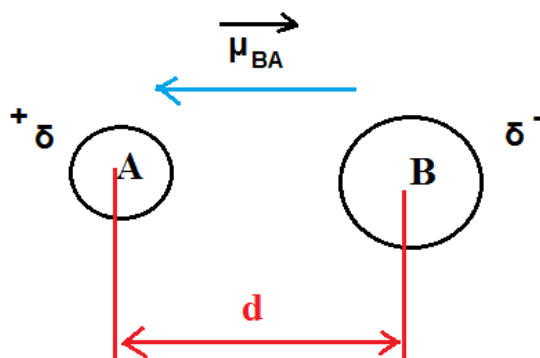
- $N_e$ : عدد الإلكترونات في طبقة التكافؤ للذرة في حالتها الأساسية.
- $N_L$ : عدد الروابط المكونة من الذرة المركزية في الجزيء المدروس.
- $N_{nL}$ : عدد الأزواج الإلكترونية الحرة (غير الرابطة) للذرة المركزية في الجزيء المدروس.
- في حالة الجزيء المتعادل كهربائياً يكون مجموع الشحنت الرسمية للذرات يساوي صفراً.
- في حالة الأيون يكون مجموع الشحنت الرسمية للذرات يساوي الشحنة الكلية للأيون.

### 7. عزم ثنائي القطب

ينشأ عزم ثنائي القطب عن وجود شحنتين  $\delta^+$  و  $\delta^-$  يقعان عند نقطتين معينتين في الفضاء و هو قيمة شعاعية.

#### 1.7. عزم ثنائي القطب لجزيء ثنائي الذرة

إذا كانت الكهروسالبية للذرتين A و B مختلفة ، فستكون الرابطة مستقطبة وستجذب الذرة الأكثر كهروسالبية الزوج الرابط نحوها.



$\delta^+$  و  $\delta^-$  عبارة عن شحنة جزئية ( $\delta < e$ ) مع  $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$  ، d هي المسافة بين الذرتين (A-B).

$$|\vec{\mu}| = q \cdot d$$

$$\mu = |\delta \times e| \times d$$

- الوحدة الدولية هي (C.m) و لكن تطبيقيا نستعمل وحدة الديباي (D) مع :  $1\text{D} = 3,33 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$

- إذا كانت  $\delta > 0$  ، فيقال إن الرابطة تساهمية قطبية.

- إذا كانت  $\delta = 0$  ، تكون الرابطة تساهمية بحتة.

- إذا كانت  $\delta = 1$  ، تكون الرابطة أيونية بحتة:  $\mu_{\text{ionic}} = \mu_i = e \times d = 1.6 \times 10^{-19} \text{ (كولوم)} \times d \text{ (m)}$

لدينا التحويلات التالية :  $1\text{Å} = 10^{-10} \text{ m}$  و  $1\text{D} = 3,33 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$

$$\mu_i \text{ (D)} = 4,8 \times d \text{ Å} \quad \text{و منه}$$

يتم تحديد النسبة المئوية الأيونية ( $\%_i$ ) و يسمى أيضا الطابع الأيوني (C.I. %) من خلال نسبة العزم ثنائي القطب المقاس

(حقيقي أو تجريبي) إلى العزم ثنائي القطب الأيوني

$$.(\mu_i = e \times d)$$

$$\% \text{ C.I} = \%_i = (\mu_{\text{réel}} / \mu_i) \times 100 = (e \times \delta \times d / e \times d) \times 100$$

$$\text{و منه : } \%_i = \delta \times 100$$

مثال:

المسافة بين ذرتين من جزيء حمض كلور الماء الغازي.  $d = 126 \text{ pm}$  (pico-mètre). عزم ثنائي القطب التجريبي  $\mu_{\text{réel}} = 1.08 \text{ D}$ . احسب النسبة المئوية  $\%i$  (الأيونية الطابع الأيوني (% C.I)) هل هي رابطة تساهمية، تساهمية قطبية أم رابطة أيونية.

الحل: الجزيء خطي H - Cl بمسافة  $d = 126 \text{ pm}$  بين H و Cl. يتم الحصول على عزم ثنائي القطب الأيوني من خلال:

$$\mu_i = 4,8 \times d \text{ \AA}$$

$$126 \text{ pm} = 1,26 \text{ \AA}, 1 \text{ \AA} = 100 \text{ pm}$$

$$\mu_i = 4,8 \times d \text{ \AA} = 1,26 \times 4,8 = 6,05 \text{ D}$$

$$\%i = (\mu_{\text{réel}} / \mu_i) \times 100 = (1,08/6,05) \times 100 = 18\%$$

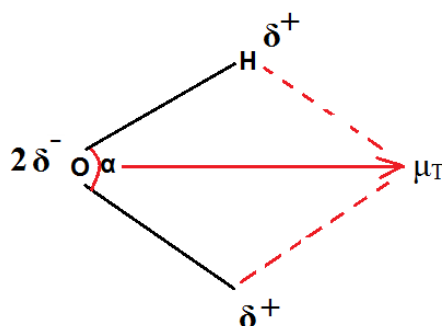
$$\%i = \delta \times 100, = 0,18 \cdot 100 < \delta < 1$$

الرابطة بين الذرتين تساهمية قطبية.

## 2.7. عزم ثنائي القطب لجزيء متعدد الذرات

يتم حساب عزم ثنائي القطب من المجموع الشعاعي لعزوم ثنائي القطب لروابط الجزيء.  $\vec{\mu} = \sum \vec{\mu}_i$

مثال: عزم ثنائي القطب لجزيء الماء. عزم ثنائي القطب لرابطة OH تساوي  $\mu_{\text{OH}} = 1.51$ . زاوية التكافؤ لجزيء الماء هي  $\alpha = 104.5^\circ$ . احسب عزم ثنائي القطب للجزيء.



الشكل 10: عزم ثنائي القطب لجزيء الماء.

شعاع عزم ثنائي القطب الكلي هو المجموع الشعاعي لعزم ثنائي القطب لرابطتين. الزاوية الرأسية  $\alpha/2 = 52,25^\circ$ . تلغي المكونات الأفقية بعضها البعض وبالتالي يتم توجيه مجموع عزوم الرابطة من المحور الرأسي

$$\mu_{\text{(H}_2\text{O)}} = 2 \mu_{\text{(OH)}} \times \cos(\alpha/2) = 2 \times 1,51 \times \cos(52,25^\circ) = 1,85 \text{ D.}$$

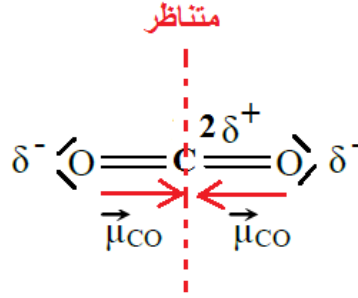
يتم حساب عزم ثنائي القطب لجزيء متعدد الذرات حسب القاعدة  $\mu_{\text{Total}} = 2 \mu_i \times \cos(\alpha/2)$

وتجدر الإشارة إلى أن عزم ثنائي القطب الكلي يمكن أن يكون صفرًا عن طريق تعويض عزوم الرابطة ثنائية القطب في حالة الجزيئات المتناظرة.

مثال:

جزيء  $CO_2$  مع الزاوية  $\theta (OCO) = 180^\circ$  (جزيء خطي)

$$\mu_{CO_2} = 2 \mu_{CO} \times \cos (\alpha / 2) = 2 \mu_{CO} \times \cos (180 / 2) = 2 \mu_{CO} \times \cos (90^\circ) = 0$$



### 8. هندسة الجزيئات

وصف الشكل الهندسي للجزيئات ، أي تموضع الذرات بالنسبة إلى لبعضها البعض في الفضاء يكون من خلال نظريتين:

- نظرية (V.S.E.P.R) أو نموذج Gillespie.

- نظرية تهجين المدارات الذرية (OA).

### 1.8. نظرية V.S.E.P.R أو نموذج Gillespie

(Valence Shell Electron Pairs repulsion or repulsion) **V.S.E.P.R**

(Répulsion des Paires Electroniques de la couche de Valence)

(تنافر الأزواج الإلكترونية لطبقة التكافؤ)

في هذا النموذج، ترتيب الأزواج الإلكترونية في الفضاء يتأثر بالتنافر بين السحب الإلكترونية للإلكترونات التكافؤ من كل ذرة. هذه طريقة بسيطة وفعالة لمعرفة هندسة الجزيئات بتطبيق قواعد جيليسبي.

**القاعدة 1:** نهتم بجميع أزواج الإلكترونات في طبقة التكافؤ للذرة المركزية A. نشير ب m إلى عدد الأزواج الرابطة (التي تشارك في الرابطة) و n عدد الأزواج غير الرابطة. نشير بواسطة (n+m) إلى العدد الإجمالي للثنائيات. وهكذا نحصل

على صيغة من النوع:  $AX_mE_n$

**سؤال: كيف نختار الذرة المركزية؟**

الشرط الأول: نختار الذرة التي يكون معامل التكافؤ (nombre stoechiométrique) لها هو الأصغر. خلاف ذلك ، انتقل إلى الشرط الثاني.

الشرط الثاني: نختار الذرة التي تحتوي على أكبر عدد من الإلكترونات العازية. خلاف ذلك ، انتقل إلى الشرط الثالث.

الشرط الثالث: نختار الذرة التي يكون رقمها الذري Z هو الأعلى.

**مثال – هندسة الجزيء  $NH_3$  تبعال Gillespie:**

- الذرة المركزية هي N (اختيرت حسب القاعدة 1)

- الذرة المرتبطة هي H مع 3 أزواج رابطة....  $X_3 \dots m=3$

- الذرة N في هذا الجزيء تملك زوج غير رابط...  $E_n = E \dots n=1$

- النتيجة  $AX_3E \dots NH_3 \dots$  هندسة هرم

- من أجل  $CH_4$  يكون  $AX_4$ .....هندسة رباعي الوجوه.


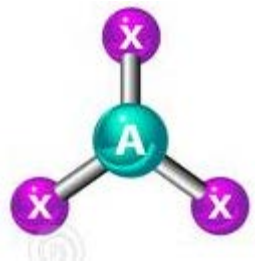
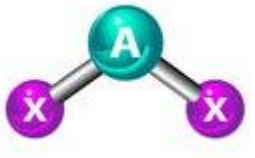
**القاعدة 2:** في حالة وجود روابط تساهمية متعددة للجزيء  $(\sigma + \pi)$  يتم فقط اعتبار الروابط الفردية  $(\sigma)$

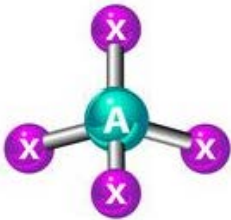
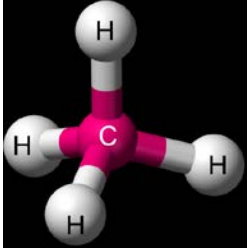
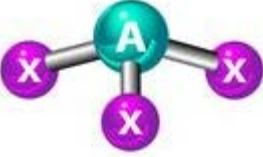
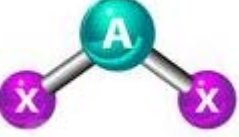
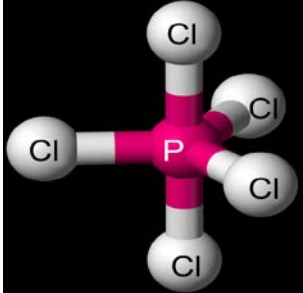
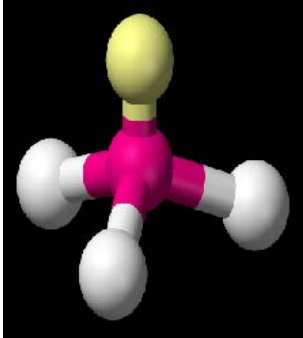
مثال – هندسة الجزيء  $C_2H_4$  تبعاً لـ Gillespie

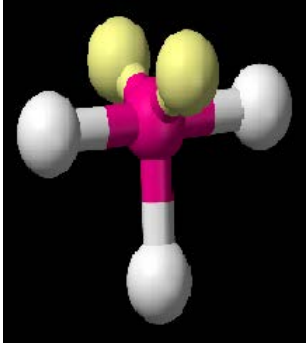

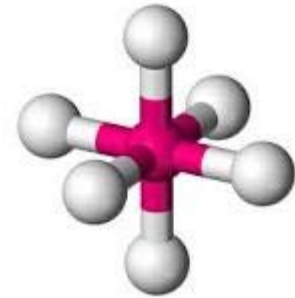
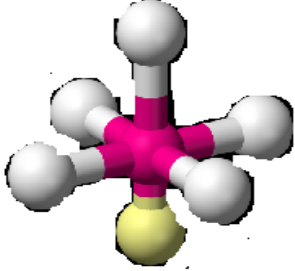
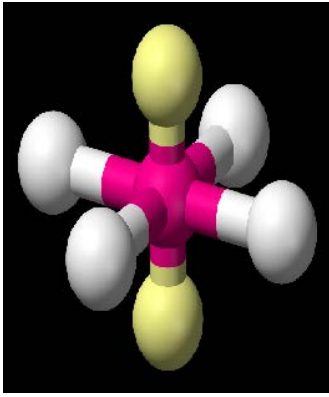
- الذرة المركزية هي C (اختيرت حسب القاعدة 1)
- الذرة المرتبطة هي H و  $C_1$  مع 3 أزواج رابطة....  $X_3 \dots m=3$
- الذرة C في هذا الجزيء لا تملك زوج غير رابط...  $E_n=0 \dots n=0$
- النتيجة  $C_2H_4 \dots AX_3 \dots$  هندسة ثلاثي الوجوه من أجل كل كربون.

**القاعدة 3:** في الجزيء، لا تمتلك الأزواج الإلكترونية نفس طبقة التكافؤ.

- يشغل الزوج غير الرابط مساحة أكبر من الزوج الرابط. الرابطة المتعددة تشغل مساحة أكبر من الرابطة البسيطة.
- تشغل الذرة الكهروسالبة مساحة أكبر من الذرة الكهروإيجابية.
- كلما زاد عدد الأزواج غير الرابطة الحرة ، زاد التنافر بينها ، وهو ما يؤدي إلى تصغير زوايا الشكل الهندسي المدروس نتيجة لتشوه البنية.

$AX_mE_n$	$m + n$	$m$	Hybridation التهجين	Géométrie الهندسة	أمثلة	Géométrie الهندسة
$AX_2$	2	2		Linéaire $(\alpha=180^\circ)$ خطي	$CO_2$ ; $BeCl_2$ ; $HCN$	
$AX_3$	3	3		Trigonal plan $(\alpha=120^\circ)$ ثلاثي الوجوه مستوي	$AlCl_3$ ; $BF_3$ ; $COCl_2$ ; $NO_3^-$ ; $CO_3^{2-}$	
$AX_2E_1$	3	2		en V (coudée) $(\alpha < 180^\circ)$ على شكل V	$SO_2$ ; $NO_2$ ; $SnCl_2$	

$AX_4$	4	Tétraèdre رباعي الوجوه	$CH_4 ; NH_4^+$ ; $PO_3^{3-}$	
	4			
$AX_3E_1$	3	Pyramide ( $\alpha < 120^\circ$ ) هرم	$NH_3 ; PCl_3$ $H_3O^+$	
$AX_2E_2$	2	en V ( $\alpha = 104,5^\circ$ ) على شكل V	$H_2O ; H_2S ;$ $TeF_2$	
$AX_5$	5	Bipyramide Trigonale ثنائي هرم بقاعدة ثلاثية	$PCl_5$	
$AX_4E_1$	4	Pyramide هرم	$TeCl_4 ; SF_4$ ; $TeF_4$	

$AX_3E_2$	3	en T على شكل T	$ICl_3 ; ClF_3$	
$AX_2E_3$	2	Linéaire خطي	$XeF_2$	
$AX_6$	6	Octaèdre ثمانى الوجوه	$SF_6 ; SeF_6 ;TeF_6$	
$AX_5E_1$	5 6	Pyramide à base carrée	$BrF_5 ; IF_5$	
$AX_4E_2$	4	Carrée	$XeF_4 ;ICl_4^-$	



## 2.8. نظرية تهجين المدارات الذرية (OA)

تسمح هذه النظرية بوصف المدارات التي تشترك عند تكون الرابطة في الواقع عند تشكل الرابطة تتحد المدارات الذرية لإلكترونات التكافؤ للذرة المركزية لتشكل مدارات جديدة تسمى المدارات الهجينة.

### 1.2.8. تهجين $sp^3$

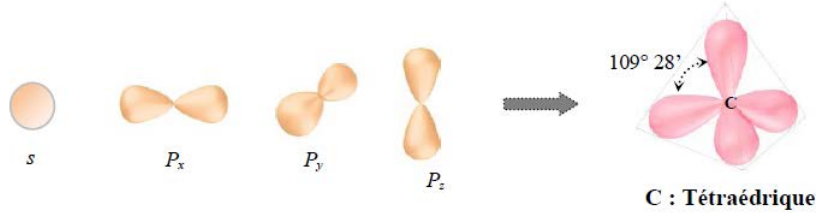
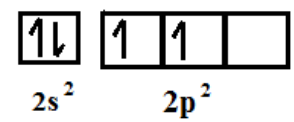
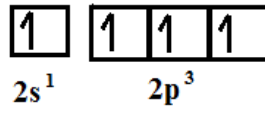
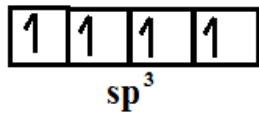
ينتج عن تهجين 1 مدار s و 3 مدارات p

**مثال :** في جزيء الميثان  $CH_4$ ، يتم تكوين 4 روابط C-H متطابقة. لا يمكن تحقيق ذلك إلا بوجود أربعة مدارات متطابقة. في الواقع، يتم تهجين مدار التكافؤ s مع المدارات الثلاثة p ( $p_x$ ،  $p_y$ ،  $p_z$ ) مما يعطي مدارات هجينة متطابقة:  $sp^x p^y p^z \equiv sp^3$ . موقع هذه المدارات بالنسبة لبعضها البعض يعطي هندسة رباعي السطوح متساوية الأضلاع، مع زوايا بين المحاور  $109.5^\circ$ . التهجين الذي تم الحصول عليه بهذه الطريقة يقدم شكل رباعي السطوح أو رباعي الوجوه.

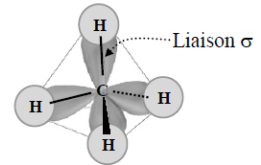
C\* : الحالة عند التهجين

C\* : الحالة المثارة

C : الحالة الأساسية



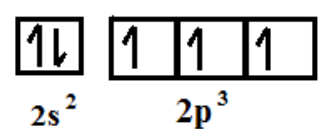
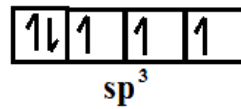
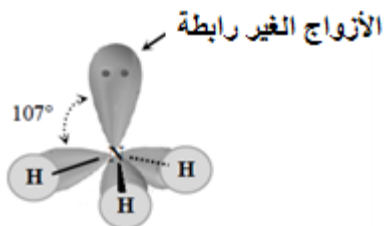
التداخل المحوري للمدارات الهجينة الأربعة  $sp^3$  من الكربون و المدار  $1s$  من الهيدروجين يشكل 4 مدارات  $\sigma$  تسمى بالروابط  $\sigma$   
 $\sigma$ : دوران حر حول المحور C-H



**مثال:**  $NH_3$  يحتوي جزيء الأمونياك على 3 روابط N-H. وبالمثل، بالنسبة لـ الميثان، تهجين مدارات التكافؤ لذرة النيتروجين يعطي المدارات الهجينة  $sp^3$  بزوايا  $107^\circ$  قريبة من  $109^\circ$ . هذا الاختلاف الطفيف يرجع إلى التنافر بين مدار الترابط والمدار غير الرابطة.

N\* : الحالة عند التهجين

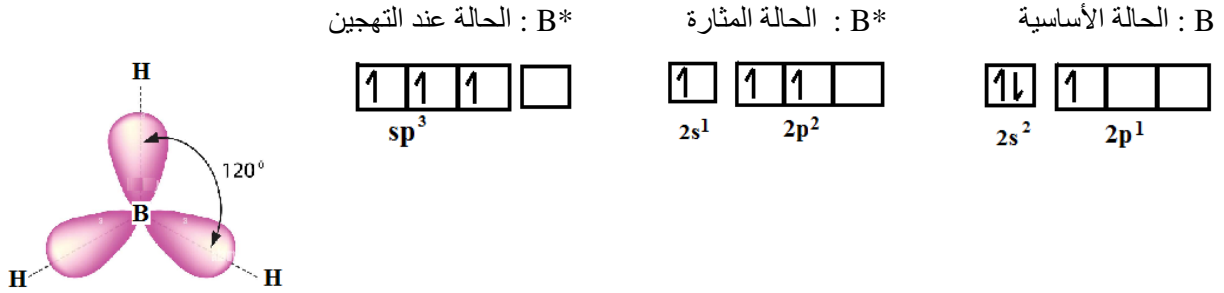
N : الحالة الأساسية



### 2.2.8 تهجين $sp^2$

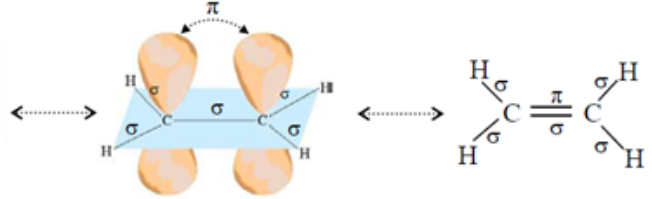
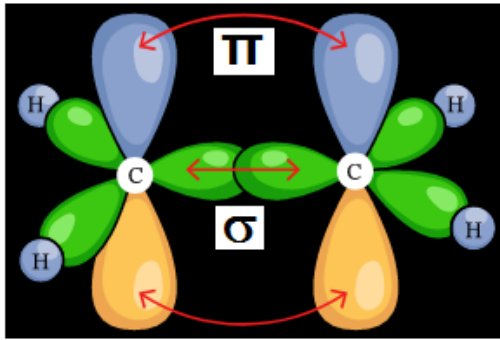
ينتج عن تهجين مدار واحد  $s$  مع مدارين  $p$ . هذا التهجين يترافق مع تداخل بين ثلاثة مدارات ويؤدي إلى مدارات هجينة متطابقة  $sp^2$ . يعتمد موقع هذه المدارات بالنسبة لبعضها البعض هندسة مثلث متساوي الأضلاع ، بزوايا بين المحاور 120 درجة. وبالتالي يتم الحصول على تهجين له شكل هندسي مثلث.

مثال :  $BH_3$ :



التداخل المحوري للمدارات الذرية الثلاثة  $sp^2$  للبور و المدار الذري الواحد للهيدروجين يشكل 3 مدارات جزيئية أي 3 روابط  $\sigma$  (دوران حر حول المحور B-H).

:  $C_2H_4$



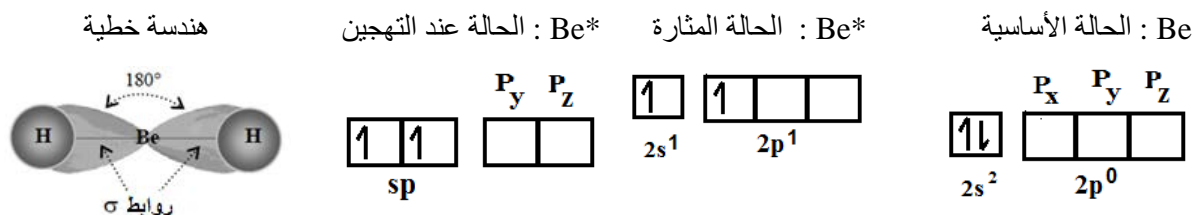
يعطي التداخل المحوري ل 5 روابط في المجموع: 4 روابط  $(C - H)$  + 1 رابطة  $(C - C)$ . يؤدي التوضع القريب للمدارات  $2p_z$  غير المهجنة (لكل ذرة  $C$ ) إلى التداخل الجانبي الذي يعطي رابطة  $\pi$  (لا يوجد دوران حول المحور  $C-C$ ).

### 3.2.8 تهجين $sp$

ينتج عن تهجين مدار واحد  $s$  و مدار واحد  $p$ . موقع هذه المدارات بالنسبة لبعضها البعض يعتمد هندسة خطية مع الزاوية بين المحاور 180 درجة.

مثال :

:  $\text{BeH}_2$



التداخل المحوري للمدارين الهجينين  $sp$  من البريليوم و المدار  $1s$  للهيدروجين يشكل رابطتان  $\sigma$  (دوران حر حول محور  $(\text{Be} - \text{H})$ ).

#### 4.2.8. تهجين $spd$

يوجد هذا النوع من التهجين بشكل عام في عناصر القسم  $d$  بحيث يتم تهجين المدارات  $d$  مع المدارين  $s$  و  $p$  لتتكون مدارات هجينة متطابقة. هذا التهجين هو الأساس لتشكيل شوارد مثل  $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$

ملاحظة

من الممكن أن نعرف تهجين جزيء ما من خلال هندسة  $AX_mE_n$  (V.S.E.P.R) ، يكون الإجراء كما يلي:

$$\sigma + NL = X$$

$\sigma$  : عدد الروابط التساهمية البسيطة.

NL : عدد الأزواج الالكترونية.

- التهجين:  $\Rightarrow sp$  تهجين "s 1" و "p 1" و "OA"  $\Rightarrow \sigma + NL = m + n = 2$
- التهجين:  $\Rightarrow sp^2$  تهجين "s 1" و "p 2" و "OA"  $\Rightarrow \sigma + NL = m + n = 3$
- التهجين:  $\Rightarrow sp^3$  تهجين "s 1" و "p 3" و "OA"  $\Rightarrow \sigma + NL = m + n = 4$
- $\Rightarrow sp^2d$  تهجين "s 1" و "p 2" و "d 1" و "OA"  $\Rightarrow \sigma + NL = m + n = 4$
- $\Rightarrow sp^3d$  تهجين "s 1" و "p 3" و "d 1" و "OA"  $\Rightarrow \sigma + NL = m + n = 5$
- $\Rightarrow sp^3d^2$  تهجين "s 1" و "p 3" و "d 2" و "OA"  $\Rightarrow \sigma + NL = m + n = 6$

**Dr. BOUANIMBA NOUR**