

الفصل السادس:

الروابط الكيميائية

• مقدمة:

من دراستنا للتركيب الالكتروني لعناصر الجدول الدوري لاحظنا أن أكثر ذرات العناصر استقرارا هي ذرات الغازات النبيلة مثل الهيليوم والنيون والأرغون... ولا تشترك في تفاعلات كيميائية وذلك لاكتمال مستوى الطاقة الخارجي لها بالإلكترونات، بينما باقي عناصر الجدول الدوري تدخل في تفاعلاتها الكيميائية لتعدل التوزيع الالكتروني لمستوياتها الخارجية بأن تكتسب أو تفقد أو تشارك بعدد من الالكترونات حتى تصل هذه المستويات إلى حالة الاستقرار التي تماثل أقرب غاز خامل لها في العدد الذري. ونتيجة لهذا التغير في عدد إلكترونات مستوى الطاقة الخارجي تتكون روابط أو تنكسر روابط بين الذرات وهو ما يسمى بالتفاعل الكيميائي.

أي أن التفاعل الكيميائي ما هو إلا عملية كسر الروابط الموجودة في جزيئات المواد المتفاعلة وتكوين روابط جديدة في جزيئات المواد الناتجة من التفاعل. وعدد الروابط المتشكلة تعتمد على عدد الالكترونات الحرة المتواجدة في المجال الخارجي أي على عدد الكترونات التكافؤ.

كان العالم الأمريكي لويس *G.N. Lewis* أول من افترض سنة 1916 م تمثيلا مقبولا للرابطة الكيميائية، فبالنسبة له الربط بين الذرات يتم بواسطة أزواج إلكترونات أثناء اتحاد ذرتين مع بعضهما لتشكيل جزيء، تحاول كل ذرة الحصول على التشكيلة الإلكترونية للغاز النادر الأقرب منها وتسمى هذه العملية بالقاعدة الثمانية لأن أغلب الحالات تؤدي إلى الحصول على 8 إلكترونات في الطبقة الخارجية.

I- أنواع الروابط:

I-1- الروابط المكونة للجزيء:

تختلف طبيعة الرابطة الكيميائية المتشكلة بين ذرتين حسب الطريقة التي تشكلت بها هذه الرابطة و حسب طبيعة الذرتين المتحدتين و لهذا نميز الأنواع التالية:

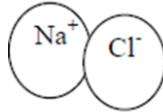
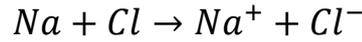
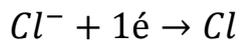
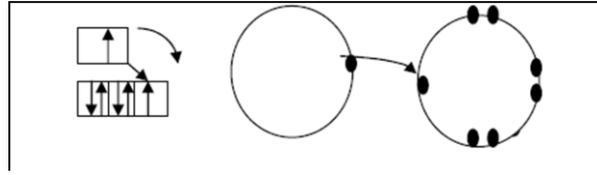
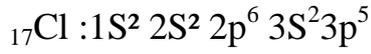
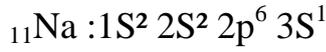
أ- الرابطة الأيونية (*la liaison ionique*):

عندما تتحد ذرتين متعادلتين مع بعضهما و يحدث انتقال كلي لإلكترون أو أكثر من إحدى الذرتين إلى أخرى، تتشكل شاردة موجبة و أخرى سالبة فتتكون رابطة كيميائية تدعى بالرابطة الأيونية. تصادف الرابطة الشاردية في المركبات الناتجة عن اتحاد عناصر ذات كهروسالبية كبيرة جدا مثل الهالوجينات مع ذرات أخرى ذات كهروجابية كبيرة جدا مثل عناصر العمود الأول للجدول الدوري.

مثال:

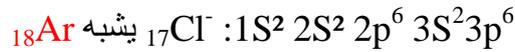
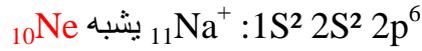
الاختلاف في الكهروسلبية كبير بين ذرتي Na و Cl و لهذا الرابطة بينهم أيونية.

الإلكترون الوحيد الموجود في الطبقة الأخيرة للصوديوم ينتقل لمليء الطبقة الأخيرة لذرة Cl و الشكل التالي يوضح ذلك:



الرابطية الأيونية هي على الشكل: $(\text{Na}^+, \text{Cl}^-)$

الأيونيين المتشكّلين لديهما التشكيل الإلكتروني للغازات النبيلة (الناذرة) التي تكون طبقتها الخارجية مشبعة.



ب- الرابطة التكافؤية أو المشتركة (la liaison covalente):

روابط تنتج لما تكون قوة جذب الإلكترونات بين الذرات متساوية أو متقاربة و تكون بين عناصر متماثلة أو بين عناصر لها كهروسلبية أو كهروجابية متقاربة.

تنشأ الرابطة التساهمية (المشتركة) عندما تساهم ذرتان بثنائية إلكترونية، تساهم كل ذرة فيها بالإلكترون متممة بنيتها إلى بنية الغاز الخامل.

• تمثيل لويس:

كان العالم لويس أول من اقترح تمثيلاً مقبولاً للرابطة التكافؤية، حيث بين إلكترونات الطبقة الخارجية في الذرة هي المسؤولة عن تكوين الروابط، فمثل الإلكترونات الحرة على شكل نقاط و الأزواج الإلكترونية على شكل خطوط و مثل الرابطة بخط يربط الإلكترونين الحرين في الذرتين.

مثال:

يمكن تمييز عدة أنواع من الرابطة التكافؤية:

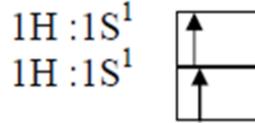
ب-1- الرابطة المشتركة غير المستقطبة:

• الرابطة المشتركة البسيطة:

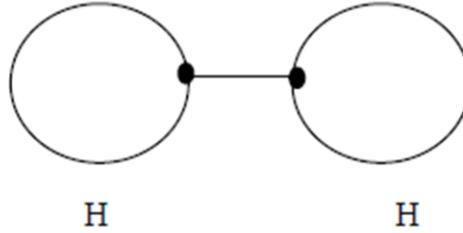
مثال: الجزيء H_2

مخطط لويس لهذا الجزيء هو كالاتي:

1- نقوم بالتوزيع الالكتروني للذرتين:



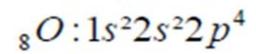
2- الرابطة المشتركة تتم باشتراك كل ذرة بالكترون الطبقة الأخيرة كما هو مبين في الشكل :



3- تمثيل لويس للرابطة يكون بخط:

• الرابطة المشتركة الثنائية:

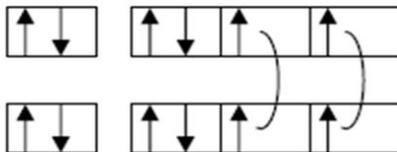
مثال: الجزيء O_2

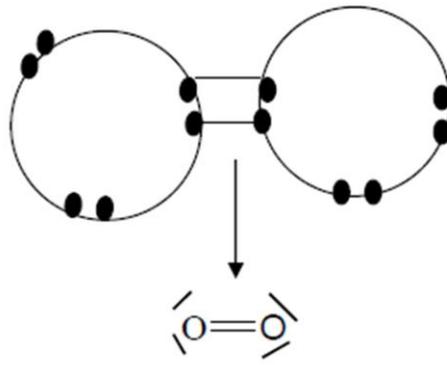


تمثيل الطبقة الأخيرة للذرتين هو:

O :

O :

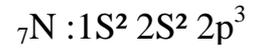




نمثل الزوج الالكتروني الحر بخط فوق الذرة (أنظر الشكل).

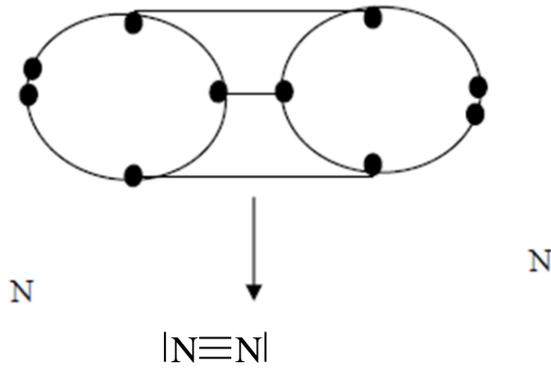
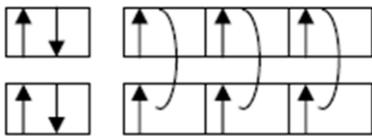
• الرابطة المشتركة الثلاثية:

مثال: الجزيء N_2



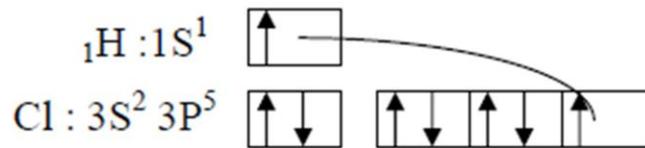
N :

N :



ب-2- الرابطة المشتركة المستقطبة:

مثال: HCl

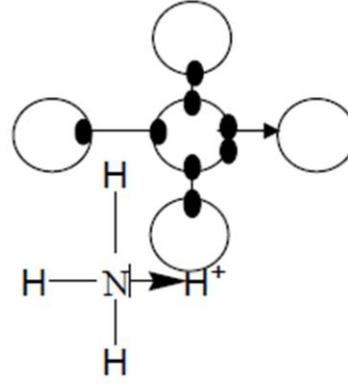
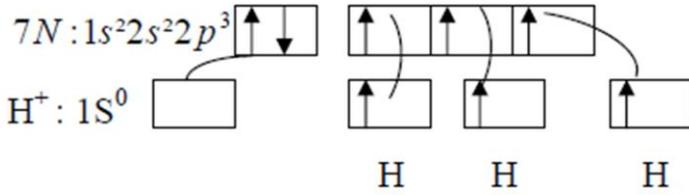


ب-3- الرابطة المشتركة المانحة أو التساندية

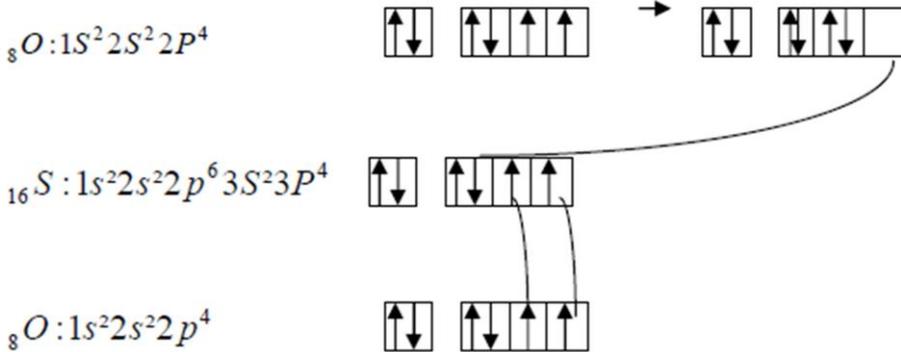
(liaison covalente dative ou de coordination)

يمكن لذرتين من وضع زوج إلكتروني في حالة الاشتراك بغية الحصول على التشكيلة الإلكترونية الخارجية للغاز الخامل، بحيث يمنح هذا الزوج الإلكتروني من قبل إحدى الذرتين، في حين تشارك الذرة الأخرى بمحط فارغ (حجرة كمية فارغة) لاستقبال هذا الزوج الإلكتروني.

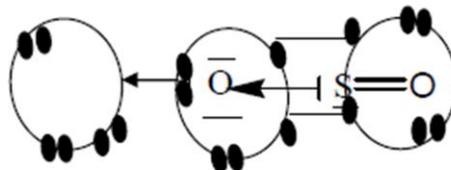
في الرابطة المانحة الإلكترونان اللذان يكونان الرابطة هما من طرف ذرة واحدة.
مثال 1: شاردة الأمونيوم NH_4^+



مثال 2: SO_2

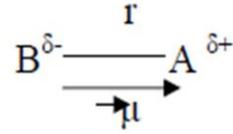


ملاحظة: في هذه الحالة يجب على الأكسجين أن يكون خانة فارغة وهذا يستلزم جمع إلكترونين عازبين لتكوين زوج مرتبط كما هو مبين في التخطيط.



ب-4- الجزيئات الثنائية لذرتين مختلفتين AB (الرابطية المستقطبة):

في الجزيء AB يكون هناك اختلاف في الكهروسلبية. إذا كان $X_B > X_A$ يكون الثنائي الإلكتروني متركز أكثر من جهة B فالكثافة الإلكترونية تقل من جهة A و من هنا يكون اختلاف التوازن فتخلق شحنة δ^- من جهة B و δ^+ من جهة A.



يكون خلق عزم ثنائي القطب للرابطية μ متوجهة من δ^+ إلى δ^-

✓ عزم ثنائي القطب:

هو خاصية تميز كل رابطية مستقطبة و يساوي جداء القيمة المطلقة للشحنة الجزيئية المحمولة على إحدى الذرتين و طول الرابطية. و هو شعاع اتجاهه من القطب السالب نحو القطب الموجب.

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

$$\vec{\mu} = \delta \cdot e \cdot \vec{d}$$

حيث: q الشحنة و δ الشحنة الجزيئية.

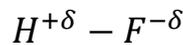
وحدته في النظام الدولي هي: Coulomb.mètre (C.m) أو Debye مع العلم أن:

$$1\text{Debye} = 0,333 \cdot 10^{-29} \text{ C.m}$$

مثال:

عزم HF يساوي 1,91 D و المسافة بين H و F تساوي $d = 0,92 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$

ذرة الفلور أكثر كهروسلبية من ذرة الهيدروجين اذن الشحنة الجزيئية السالبة δ تكون من جهة F و الموجبة من جهة H.



أحسب الشحنة q و الشحنة الجزيئية δ .

$$\vec{\mu}_{HF} = 1,91 \times 0,333 \cdot 10^{-29} = 0,636 \cdot 10^{-29} \text{ C.m}$$

$$\vec{\mu} = q \cdot \vec{d} \Rightarrow q = \frac{\vec{\mu}}{\vec{d}} = \frac{0,636 \cdot 10^{-29}}{0,92 \cdot 10^{-10}} = 0,69 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

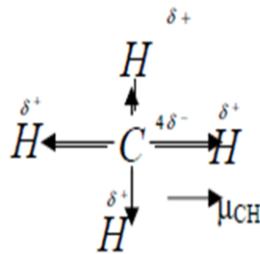
$$q = \delta \cdot e \Rightarrow \delta = \frac{q}{e} = \frac{0,69 \cdot 10^{-19}}{1,6 \cdot 10^{-19}} = 0,43$$

• العزم الكلي للجزيء:

في الجزيئات المتعددة الذرات، لكل رابطة عزم ثنائي القطب مسمى بعزم الرابطة. يساوي العزم الكلي للجزيء مجموع الهندسي لعزوم الروابط.

$$\vec{\mu} = \sum \vec{\mu}_i$$

مثال 1: CH₄

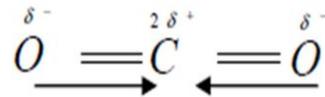


يوجد تناظر في هندسة جزيء الميثان CH₄. وبهذا يكون مجموع العزوم معدوم.

$$\vec{\mu}_{CH_4} = \sum \vec{\mu}_{CH} = \vec{0}$$

مثال 2: CO₂

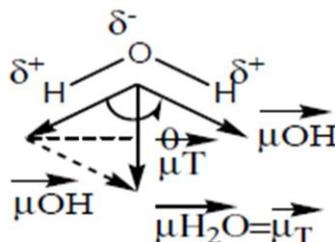
ان هذا الجزيء خطي و تمثيل لويس يعطي الشكل الموضح في الأسفل: ان الأكسجين أكثر كهروسلبية من الكربون اذن يوجد عزمين متعاكسين و مجموعهما يساوي الصفر.



$$\vec{\mu}_{CO_2} = \sum \vec{\mu}_{CO} = \vec{0}$$

مثال 3: جزيء الماء H₂O.

جزيء الماء غير خطي و الزاوية $\theta = \widehat{HOH}$ تساوي 105°.



$$\cos \frac{\theta}{2} = \frac{\frac{\mu_T}{2}}{\mu_{oH}} \Rightarrow \cos \frac{\theta}{2} = \frac{\mu_T}{2 \mu_{oH}}$$

الرابطه تتكون إذا كانت المسافة بين الذرتين أدنى. الجزيء يكون أكثر استقرار من الذرتين المنفصلتين.

ت- الرابطة المعدنية (la liaison métallique):

هي رابطة كيميائية مشتركة تسمح بترابط ذرات المعادن مع بعضها. تكون الالكترونات المشتركة فيها موزعة على شكل سحابة الكترونية على كل ذرات المعدن، هذا ما يجعل المعدن ناقل للكهرباء.

I-2- الروابط بين الجزيئات:

الروابط بين الجزيئات هي الروابط التي تصل الجزيئات ببعضها البعض وهي ضعيفة مقارنة بالروابط الداخلية إذ يمكن أن تكسر بتسخين بسيط وهي نوعين:

أ- رابطة فان ديرفالس (liaison de Van Der Waals):

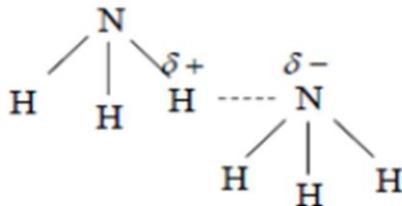
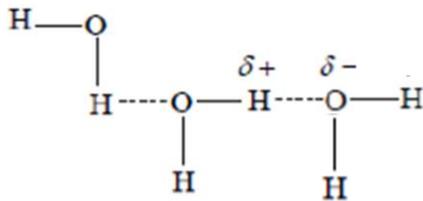
تتميز بقوى تجاذب ما بين الذرات و الجزيئات تؤثر حتى ما بين الغازات الخاملة (المشبعة)، تكون هذه الرابطة مهمة تقريبا في الغازات ذوات الضغط الخفيف أو المحاليل الممددة عندما تكون المسافة ما بين الجزيئات كبيرة نسبيا. كلما كانت السحابة الالكترونية للذرة أو الجزيء كبيرة كلما كانت قوى فندرفالس كبيرة. أقوى قوى فندرفالس هي الرابطة الهيدروجينية.

ب- الرابطة الهيدروجينية (liaison hydrogène):

هي أقوى القوى بين الجزيئات و هذا لان ذرة الهيدروجين H هي أصغر ذرة يمكنها أن تقترب بمسافة أدنى من الجزيئات الأخرى. الرابطة تتكون اذن بين ذرة هيدروجين مرتبطة و ذرة من جزيء آخر أكثر كهروسلبية و يحتوي على الأقل على زوج الكتروني حر مثل الذرات: N, O, F.

مثال: ترابط جزيئات الماء H₂O مع بعضها.

ترابط جزيئات النشادر NH₃ مع بعضها.



-II- البنية الإلكترونية للجزيئات:

لا تعطي نظرية لويس للرابطة إلا تمثيلاً بسيطاً عن تكوين الجزيئات وليس بإمكان هذا التمثيل توضيح شكل المحطات الجزيئية و لا طاقتها و لا يمكن التنبؤ بالشكل الهندسي للجزيئات. من أجل دراسة أحسن للجزيئات تم وضع عدة فرضيات جديدة عن الرابطة بالاعتماد على الميكانيك الكمي.

1-II- فرضية المحطات الجزيئية:

يفترض أن تخضع الإلكترونات في الجزيء إلى نفس القوانين التي تخضع لها في ذرة معزولة، حيث يمكن وصف كل إلكترون بموجة ψ . الدالة الموجية ψ تحقق نفس الشروط التي حققتها الدالة ψ في الذرة:

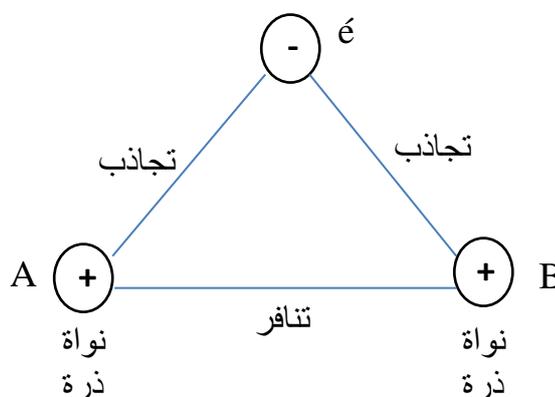
- ψ^2 يمثل كثافة احتمال وجود الإلكترون و يحدد شكل المحط الجزيئي.
 - الإلكترونات تشغل مختلف المحطات الجزيئية حسب ترتيبها الطاقوي المتزايد.
 - مبدأ باولي و قاعدة هوند يطبقان كذلك على الجزيئات و لكل إلكترون سبين $+\frac{1}{2}$ أو $-\frac{1}{2}$.
- دراسة الرابطة الكيميائية في النظرية الكمية يعود إلى دراسة خواص المحطات الجزيئية و مستوياتها الطاقوية.

1-1-II- المحطات الجزيئية أحادية الإلكترون:

أ- طريقة الاتحادات الخطية للمحطات الذرية LCAO:

(Linear Combinations of Atomic Orbitals)

أبسط رابطة يمكن دراستها هي رابطة بين ذرتين من الهيدروجين فقدت إحداهما إلكترون (H_2^+):



معادلة شرودنجر تكتب بالشكل:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m}\Delta\Psi + (E_{Pr} + E_{pa})\Psi = E\Psi$$

m : كتلة الإلكترون

E_{Pr} : الطاقة الكامنة للتناثر بين النواتين.

E_{pa} : الطاقة الكامنة للإلكترون الخاضع إلى قوة التجاذب من قبل النواتين.

في حالة ذرة هيدروجين معزولة يوصف الإلكترون بالمحط الذري Ψ ، بينما في حالة الأيون الجزيئي H_2^+ يوصف الإلكترون بالدالة الموجية Φ وهي عبارة عن محط جزيئي. و توصف الدالة Φ حسب طريقة

LCAO بأنها اتحاد خطي للمحطين الذريين Ψ_A و Ψ_B لذرتي الهيدروجين A و B.

$$\Phi = C_A\Psi_A + C_B\Psi_B$$

Ψ_B و Ψ_A محطين ذريين و المعاملين C_B و C_A عدنان حقيقيان مجهولان يمكن حسابهما.

الحلول المتحصل عليها هي:

$$\Phi^+ = \frac{1}{\sqrt{2(1+s)}}(\Psi_A + \Psi_B)$$

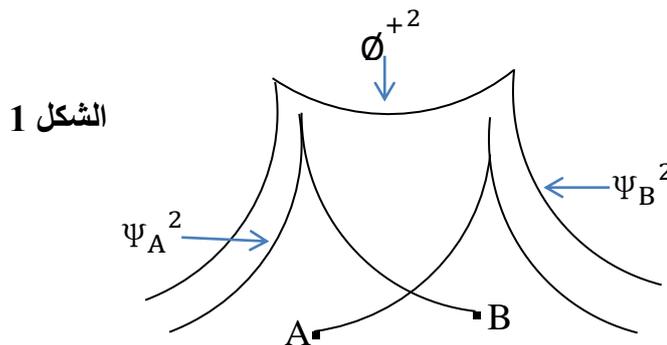
$$\Phi^- = \frac{1}{\sqrt{2(1-s)}}(\Psi_A - \Psi_B)$$

Φ^+ و Φ^- عبارة عن محطان جزيئيان.

يمثل s مدى التداخل بين المحطين Ψ_A و Ψ_B و يعرف بتكامل التداخل و الذي يقيس مجموع النقاط المشتركة بين المحطين، كلما كان التداخل بين المحطين كبير كلما ارتفعت قيمة s .

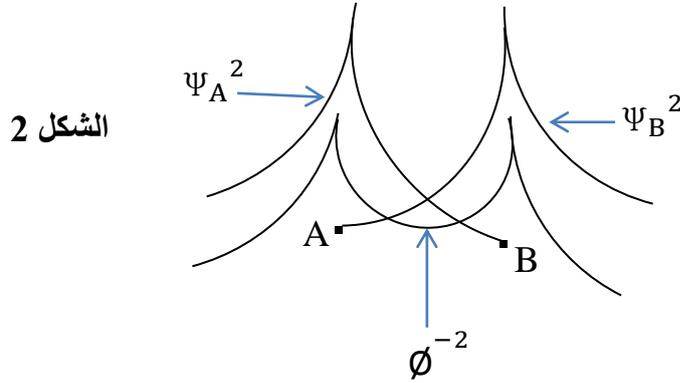
ب- التفسير الفيزيائي للدالتين الموجيتين الجزيئيتين:

1- الدالة Φ^+ : لنقارن بين Φ^{+2} و $(\Psi_A^2 + \Psi_B^2)$: (الشكل 1)



إن ϕ^2 أكبر من $(\psi_A^2 + \psi_B^2)$ بين النواتين. و هذا يعني أن احتمال وجود الإلكترون بين النواتين يكون أكبر، يقال عن المحط ϕ^+ أنه محط رابط (orbitale liante).

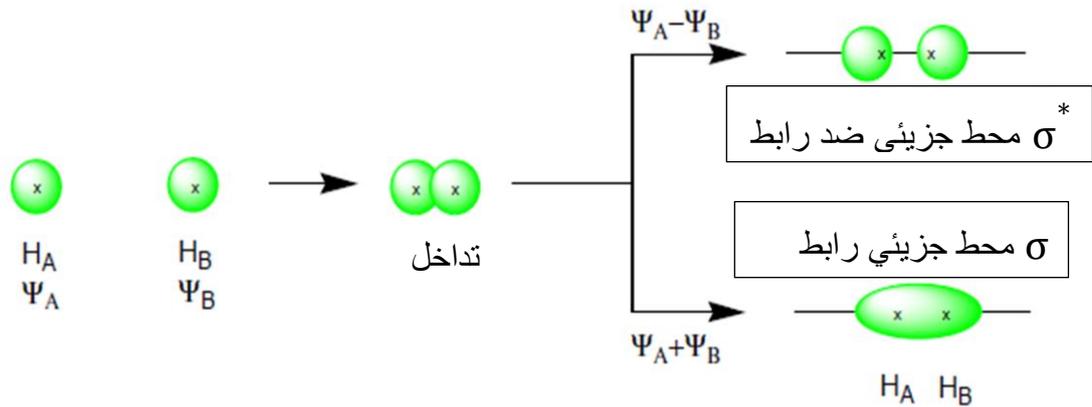
2- الدالة ϕ^- : لنقارن بين ϕ^- و $(\psi_A^2 + \psi_B^2)$: (الشكل 2)



نلاحظ احتمال وجود الإلكترون بين النواتين احتمال ضعيف، يقال عن المحط ϕ^- أنه محط ضد رابط (orbitale antiliante).

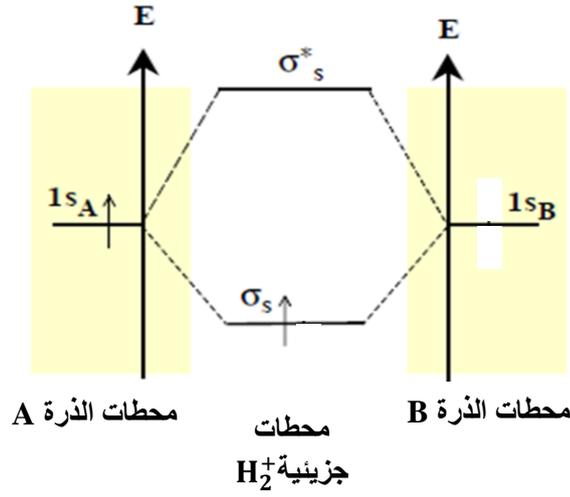
- الحل ϕ^+ يوافق وجود H_2^+ في حالة مستقرة و منه شرط تكوين الرابطة هنا يكون محقق بين النواتين.

ت- الشكل الهندسي للمحطات ϕ^+ و ϕ^- :



ث- طاقة المحطات الجزيئية:

- وجد أن الإلكترون يكون أكثر استقرار في محط جزئي رابط منه في محط ذري.
- كذلك وجد أن طاقة المحط المضاد للربط أكبر من طاقة المحطات الذرية المشكلة له.



مستويات الطاقة للمحطات الجزيئية في أيون H_2^+

II-1-2- المحطات الجزيئية متعددة الإلكترونات:

يمكن تعميم النتائج المحصل عليها أثناء دراسة الأيون H_2^+ إلى جزيئات تحمل عدة إلكترونات.

أ- المحطات الجزيئية σ و π :

إن المحطات p و d كالمحطات s قادرة على تشكيل محطات جزيئية. نميز حسب التناظر:

■ المحطات الجزيئية σ :

يتم الحصول عليها بالتداخل المحوري لمحطين ذريين (recouvrement axial)، الرابطة σ هي رابطة مستقرة.

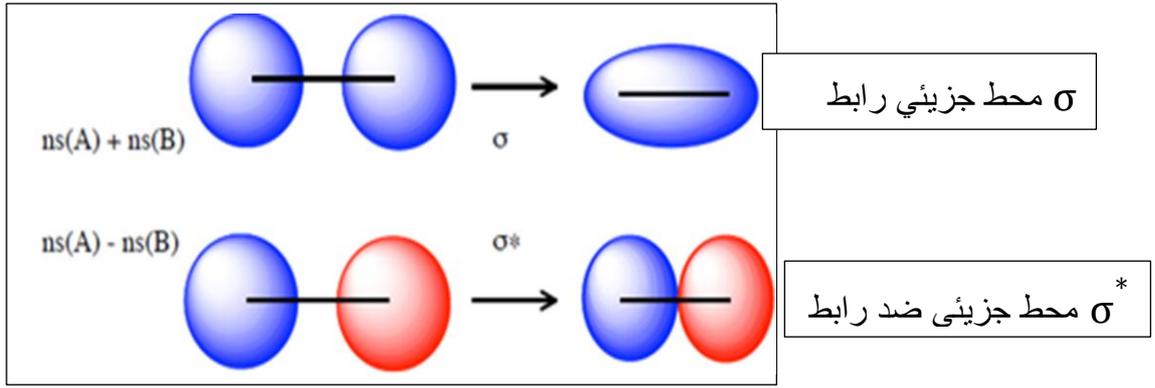
■ المحطات الجزيئية π :

يتم الحصول عليها بالتداخل الجانبي لمحطين ذريين (recouvrement latéral):

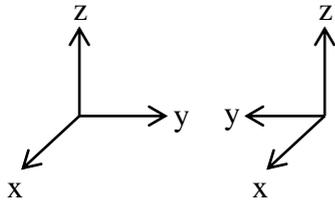
ب- شكل المحطات الجزيئية:

يحدده نوع المحطات الذرية المتداخلة.

1- تداخل محط S مع محط S:



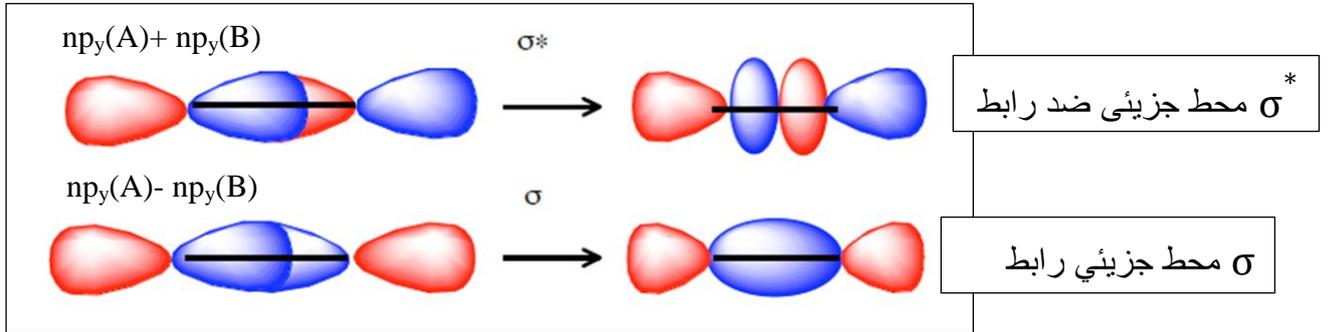
تداخل المحطات S يكون دائما محوري ليعطي محطات من نوع σ .



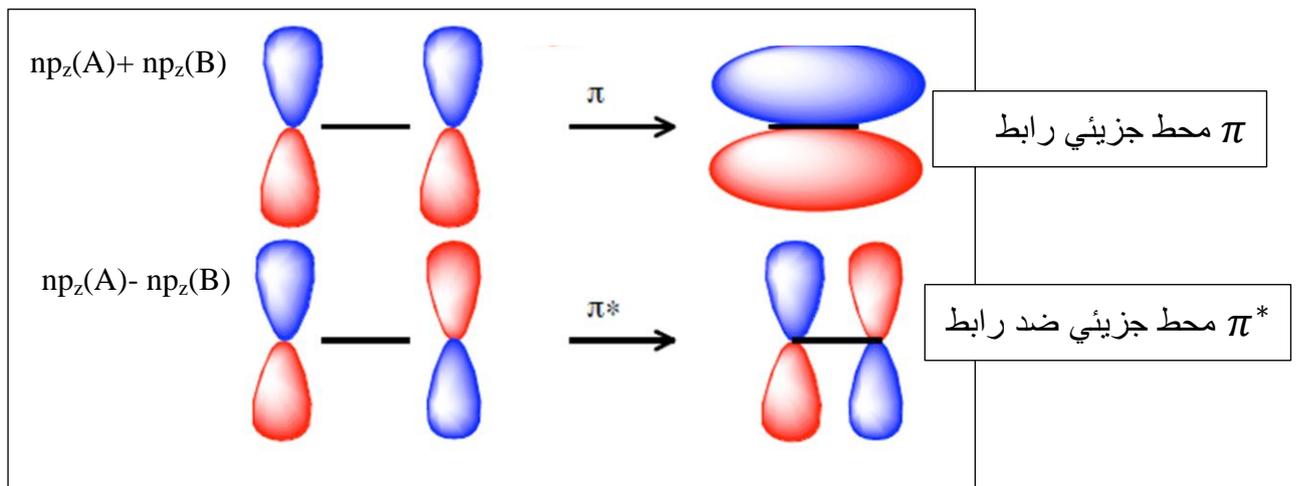
2- تداخل محط p مع محط p:

لنختار جملة المحاور التالية لدرتين A و B.

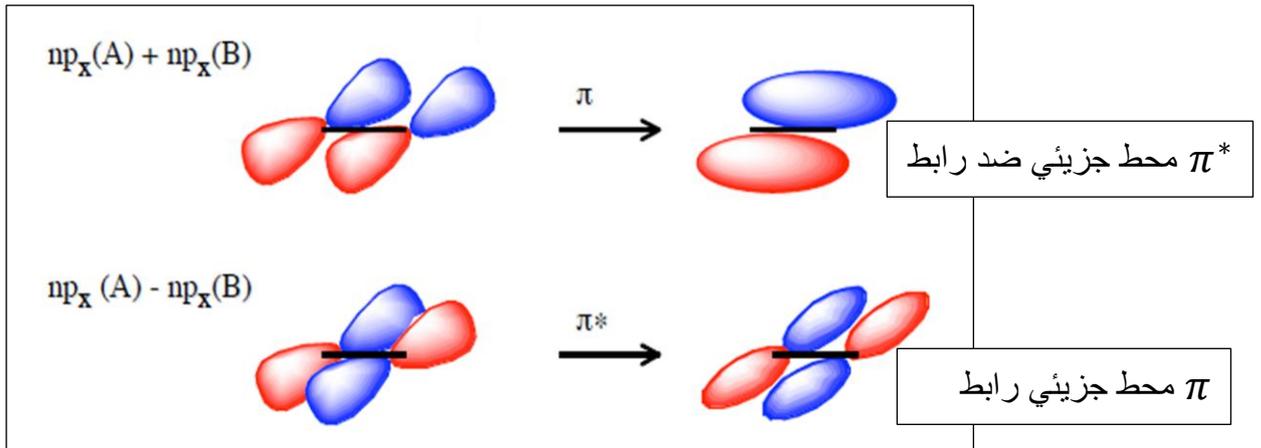
- تداخل محط p_y مع محط p_y :



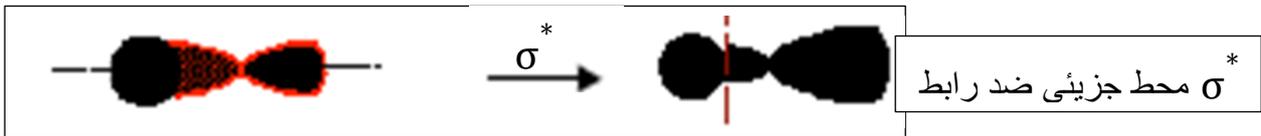
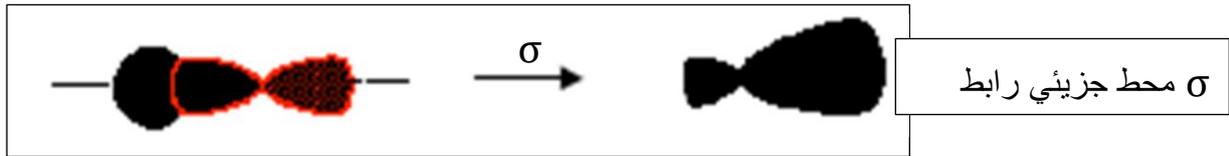
- تداخل محط p_z مع محط p_z :



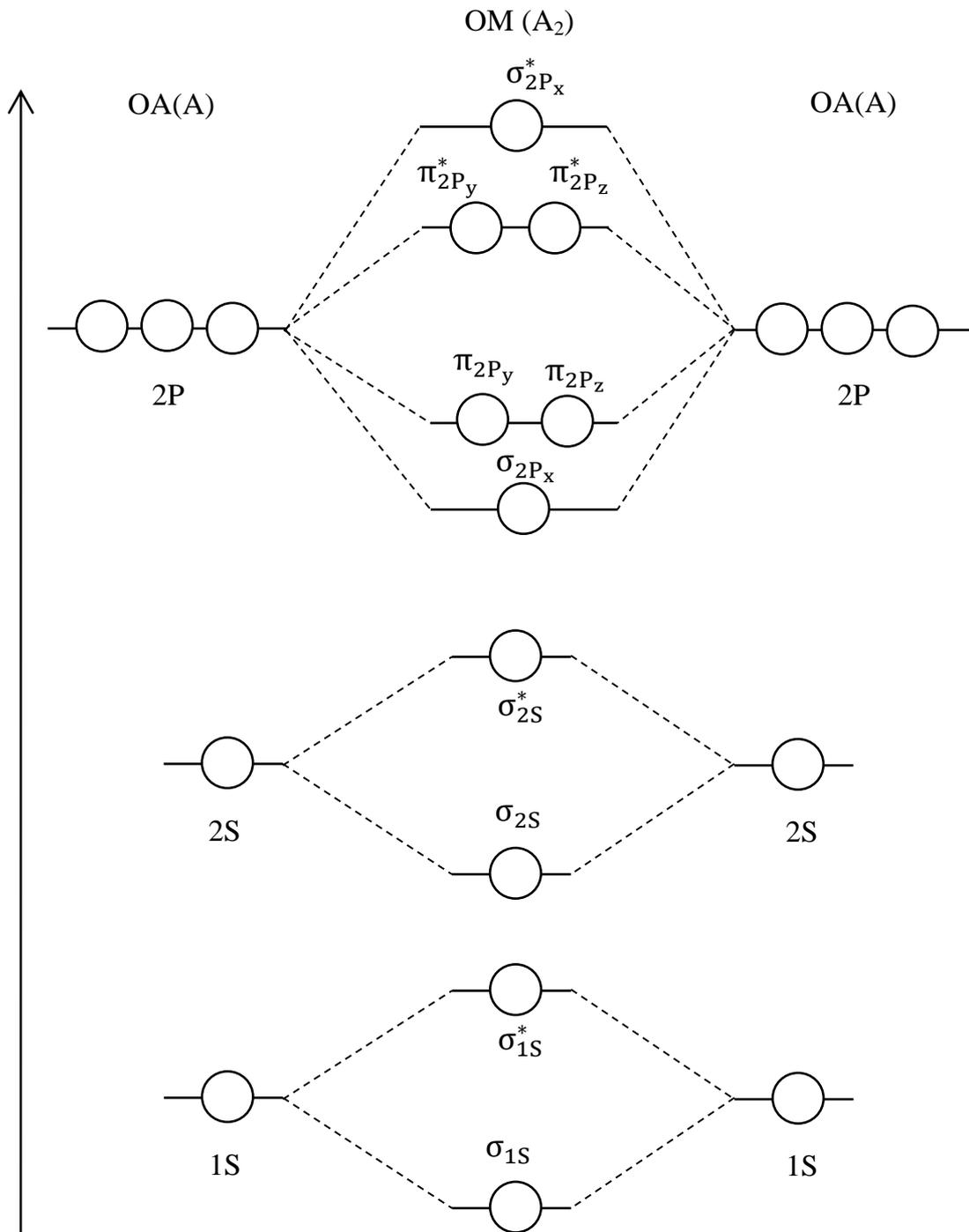
- تداخل محط p_x مع محط p_x :



3- تداخل محط S مع محط p:



ج- طاقة المحطات الجزيئية:
 • جزيء من نوع A_2 :



مخطط الطاقة للمحطات الجزيئية للجزيء A_2

- ترتيب مستويات الطاقة عموماً يكون:

$$\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \sigma_{2px} < \pi_{2py} = \pi_{2pz} < \pi_{2y}^* = \pi_{2z}^* < \sigma_{2px}^*$$

ملاحظة:

في بعض الجزيئات المسماة جزيئات خفيفة و التي عامة يكون لديها عدد إلكترونات أقل أو يساوي 14،

يلاحظ أن طاقة المحط σ_{2px} تكون أكبر من طاقة المحطات π_{2py} و π_{2pz} .

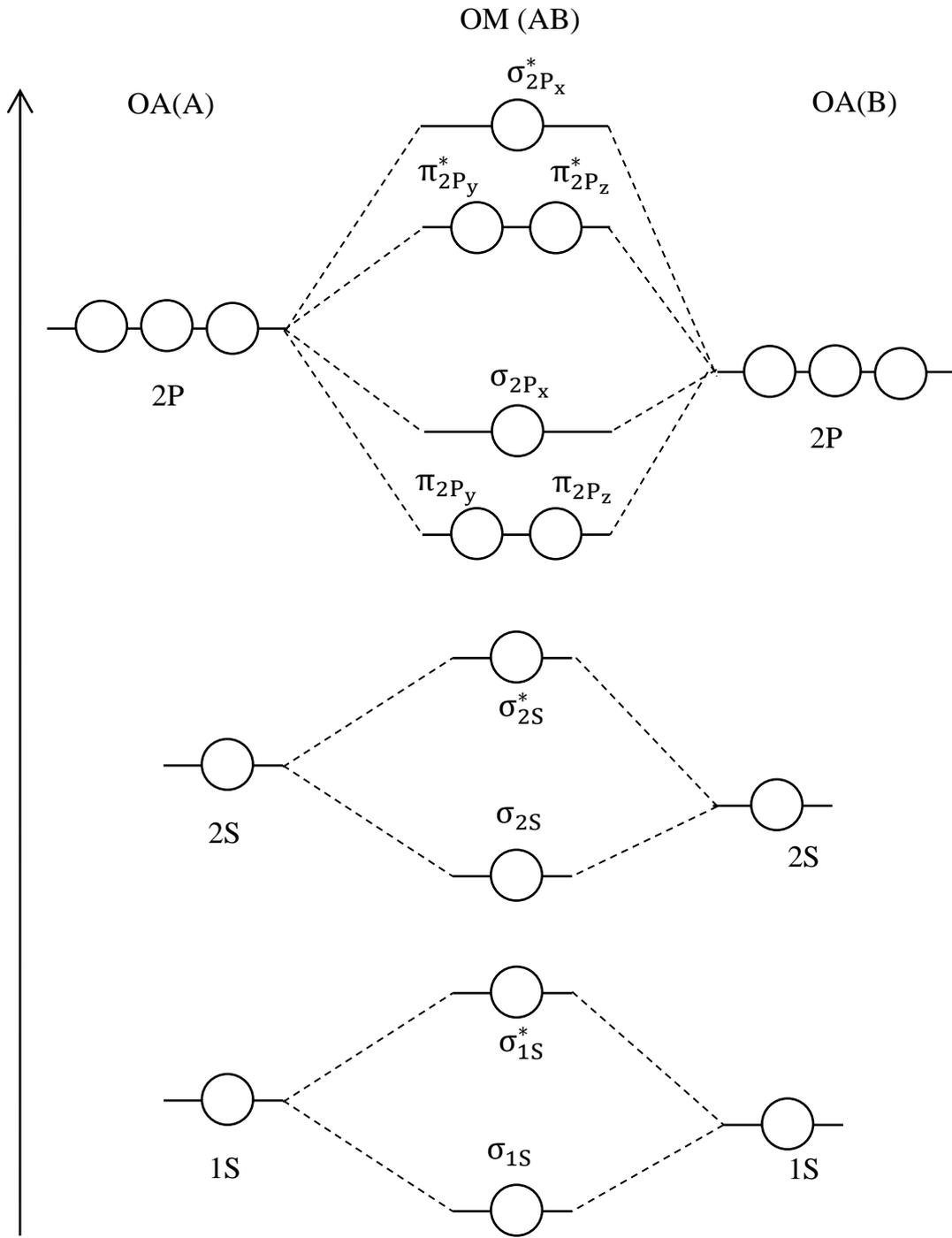
- ترتيب مستويات الطاقة يكون:

$$\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \pi_{2py} = \pi_{2pz} < \sigma_{2px} < \pi_{2y}^* = \pi_{2z}^* < \sigma_{2px}^*$$

ملئ المحطات الجزيئية يتبع نفس قواعد المحطات الذرية.

• جزيء من نوع AB (B أكثر كهروسلبية من A):

الذرة B أكثر كهروسلبية من A، B توضع على يمين المخطط، تمثل بمحطات ذرية لها طاقة أقل من طاقة A.



مخطط الطاقة للمحطات الجزيئية للجزيء AB

- ترتيب مستويات الطاقة مماثل للجزيء A_2 الخفيف:

$$\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \pi_{2py} = \pi_{2pz} < \sigma_{2px} < \pi_{2y}^* = \pi_{2z}^* < \sigma_{2px}^*$$

د- الصيغة الإلكترونية للجزيئات:

هي كتابة المحطات الجزيئية أفقياً مع ترتيبها وفق التزايد في الطاقة و وضع كل محط بين قوسين، فوق القوس نضع عدد إلكترونات المحط.

مثال جزيء O_2 :

$$O_2 : (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\pi_{2py}^*)^1 (\pi_{2pz}^*)^1 (\sigma_{2px}^*)^0$$

ه- رتبة الرابطة:

$$\text{رتبة الرابطة} = \frac{\text{عدد الإلكترونات الرابطة} - \text{عدد الإلكترونات ضدالرابطة}}{2}$$

كلما كانت رتبة الرابطة كبيرة كلما كان الاستقرار أكبر.

و- الخواص المغناطيسية للجزيئات:

صفة تميز سلوك الجزيئات عند وضعها ضمن مجال مغناطيسي.

- المواد الديامغناطيسية:

مواد أقل إنفاذية لخطوط القوى المغناطيسية من الفراغ و تميل المواد إلى الحركة من جهة المجال المغناطيسي القوي إلى الضعيف و هي المواد المكونة من ذرات أو جزيئات ليس لها إلكترونات حرة.

- المواد البارامغناطيسية:

مواد تقدم عكس السلوك السابق أي تتحرك من جهة المجال المغناطيسي الضعيف إلى القوي و هي المواد المكونة من ذرات أو جزيئات لها إلكترونات حرة.

III- الأشكال الهندسية للجزيئات:

رغم النجاح الذي حققته فرضية الاتحادات الخطية للمحطات الذرية في توضيح الخواص المغناطيسية للجزيئات و تحديد طاقة المحطات الجزيئية إلا أنها فشلت في تعيين الأشكال الهندسية لأغلب الجزيئات.

III-1- باستخدام نظرية جيلسبي (Gillespie):

هي نموذج يستخدم في الكيمياء بغرض تعيين الشكل الهندسي الذي يتخذه جزيء على أساس عدد الإلكترونات المزدوجة التي تحيط بالذرة المركزية. تسمى هذه النظرية باسم مكتشفها "نظرية جيلسبي-نيهولم". وتعرف كذلك باسم نظرية (VSEPR) وتعني نظرية تدافع الزوج الإلكتروني في مدارات التكافؤ (Valence shell electron pair repulsion theory). حيث استند العالمان في نظريتهما إلى ان إلكترونات التكافؤ المزدوجة التي تحيط بذرة تتنافر عن بعضها البعض بسبب شحنتها السالبة؛ وعلى هذا السبيل فإنهما سوف يتخذان دورانا في شكل هندسي يخفض من شدة تنافرهما؛ بذلك يشكلان الشكل الهندسي للجزيء ككل .

- القواعد المستنبطة من نظرية جيلسبي:

- استنبطت من نموذج (VSEPR) القواعد التالية للجزيئات من النوع: AX_nE_m
- A : الذرة المركزية، X: الذرة المرتبطة بـ A ، n: عدد الذرات X المرتبطة بـ A ، E: الزوج الإلكتروني الحر حول الذرة المركزية A ، m: عدد الأزواج الحرة لـ A.
- الزوج الإلكتروني الخاص بالذرة المركزية A في الجزيء يتشكل بحيث تكون المسافة بينهما أكبر ما يمكن.
 - أزواج الإلكترونات الحرة تشغل حجما أكبر من الحجم الذي تشغله أزواج الإلكترونات الرابطة، وتؤدي إلى تضخيم الزاوية X-A-E وتصغير الزاوية X-A-X.
 - وجود اختلاف كبير في الكهروسلبية بين A و X تقلل من حجم الرابطة الكيميائية.
 - تحتاج الرابطة المتعددة (رابطة ثنائية أو رابطة ثلاثية) إلى شغل حجم أكبر مما تحتاجه الرابطة الأحادية، حيث يتصاعد الحجم اللازم للرابطة بتصاعد رتبة الرابطة.
 - وبغرض تعيين البنية التقديرية لجزيء تؤخذ فقط الروابط سيغما في الحساب.

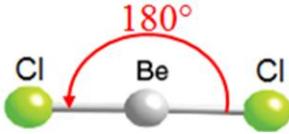
AX_nE_m

الهندسة الفراغية	n+m
خطي	2
مثلث متساوي الأضلاع	3
رباعي الوجوه	4
ثنائي الهرم ذو قاعدة مثلثة متساوية الأضلاع	5
ثماني الوجوه أو ثنائي الهرم ذو قاعدة مربعة	6

أمثلة:

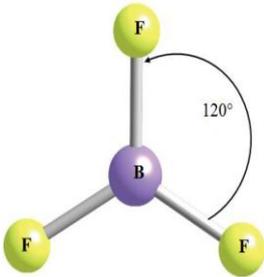
1. حالة زوجان رابطان : مثال $\text{Cl-Be-Cl} \leftrightarrow \text{BeCl}_2$

جزيء من نوع AX_2 ، فيه $n+m = 2$ وعليه فان الجزيء يكون خطي حيث تكون الزاوية بين الرابطين 180° .



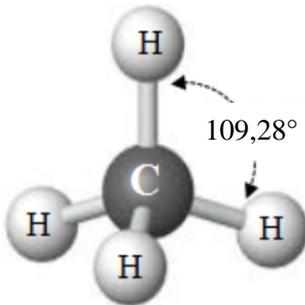
2. حالة ثلاثة ازواج رابطة مثال BF_3 , SnCl_2

جزيئان من نوع AX_3 , AX_2E_1 على الترتيب فيهما $n+m = 3$ وعليه فان الجزيئان يكونان عبارة عن مثلث متساوي الاضلاع، حيث تكون الزاوية بين كل رابطتين 120° (على شكل V).



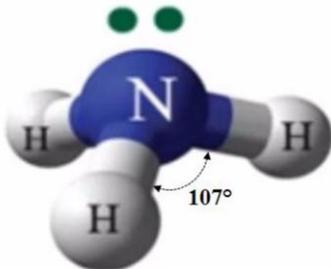
3. حالة أربعة ازواج رابطة : مثال CH_4

جزيء من نوع AX_4 فيه $n+m = 4$ وعليه فان الجزيء عبارة عن رباعي الوجوه حيث تكون الزاوية بين كل رابطتين $109,28^\circ$ (على شكل V).



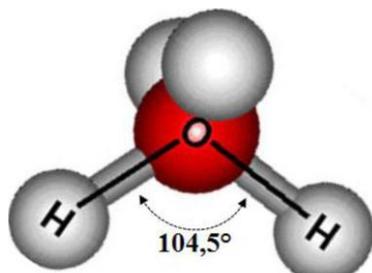
4. حالة ثلاثة ازواج رابطة وزوج غير رابط مثال NH_3

جزيء من نوع AX_3E_1 فيه $n+m = 4$ وعليه فان الجزيء عبارة عن رباعي الوجوه حيث تكون الزاوية بين كل رابطتين 107° (على شكل V).

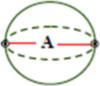
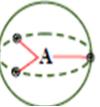


5. حالة زوجان رابطان وزوجان حران (غير رابطان) مثال جزيء الماء H_2O :

جزيء من نوع AX_2E_2 فيه $n + m = 4$ وعليه فان الجزيء عبارة عن رباعي الوجوه حيث تكون الزاوية بين كل رابطتين $104,5^\circ$.



كملخص:

الشكل الهندسي للجزيء	m	n	نوع الجزيء	عدد الأزواج الإلكترونية (الرابطية + الحرة)
 خطي ($\alpha = 180^\circ$)	0	2	AX_2	2
 مثلث متساوي الأضلاع ($\alpha = 120^\circ$)	0	3	AX_3	3
مثلث متساوي الأضلاع ($\alpha < 120^\circ$)	1	2	AX_2E_1	3
 رباعي الوجوه ($\alpha = 109^\circ 28'$)			AX_4	4
رباعي الوجوه ($\alpha < 109^\circ 28'$)	1	3	AX_3E_1 AX_2E_2	4
 ثنائي الهرم ذو قاعدة مثلثة متساوية الأضلاع ($\alpha = 120^\circ, \beta = 90^\circ$)	0	5	AX_5	5
	1	4	AX_4E_1	
	2	3	AX_3E_2	
	3	2	AX_2E_3	
 ثماني الوجوه ($\alpha = 90^\circ$)	0	6	AX_6	5
	1	5	AX_5E_1	
	2	4	AX_4E_2	
	3	3	AX_3E_3	
	4	2	AX_2E_4	

III-2- باستخدام نظرية تهجين المحطات الذرية (الأشكال الهندسية للجزيئات باستخدام فرضية

التهجين و فرضية LCAO):

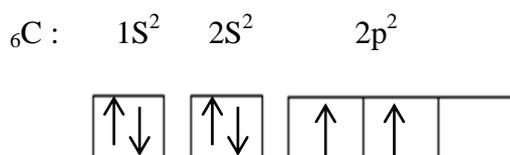
■ **التكافؤ:** هو عدد الروابط المتكافئة التي يمكن لذرة أن تشكلها.

أمثلة:

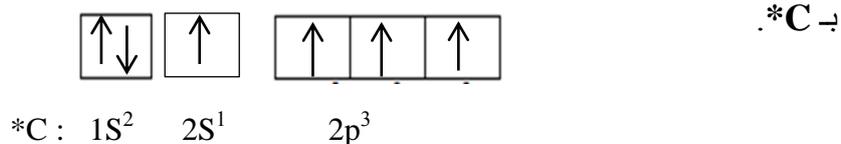
- تكافؤ N في NH_3 يساوي 3.
- تكافؤ P في PCl_3 يساوي 3 و في PCl_5 يساوي 5.

■ الحالة الأساسية، حالة تكافؤ:

الكربون ${}^6\text{C}$ في حالته الأساسية صيغته الإلكترونية بالحجيرات:



يملك إلكترونين حريين و تكافؤه يساوي 2 في أغلب الأحيان يكون للكربون تكافؤ 4 حيث عند اقتراب ذرات أخرى من ذرة الكربون يجعل هذا الأخير يغير صيغته الإلكترونية لينتقل إلى حالة تكافؤ يرمز لها



و لشرح هذه الظاهرة يجب علينا إدخال التهجين للمحطات الذرية.

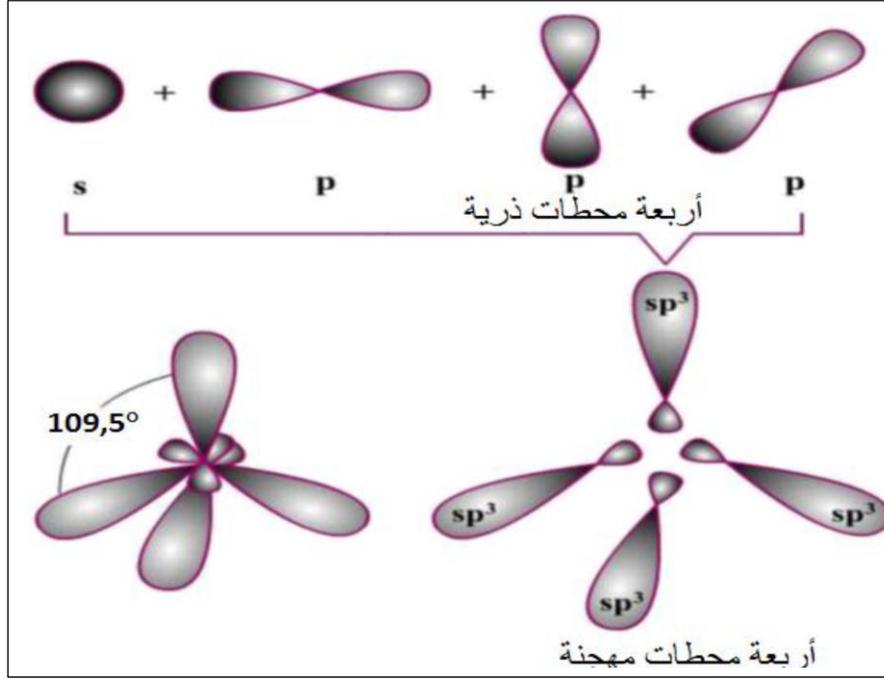
- التهجين:

هو عبارة عن اتحاد خطي لمحطات ذرية في نفس الذرة، المحطات المهجنة لا تظهر إلا عند اقتراب ذرات أخرى لتكوين روابط و هي محطات ذرية.

(أ) أنواع المحطات المهجنة:

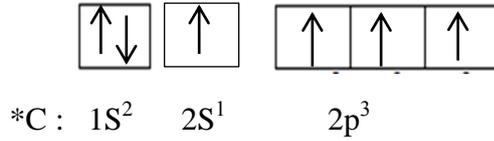
- تهجين SP^3 (Hybridation tétragonale):

تجري الذرات المركزية تهجين SP^3 اذا اختلط المحط S مع ثلاثة محطات من نوع p لنفس الذرة، وبالتالي تتكون اربعة محطات مهجنة SP^3 وتتجه هذه المحطات المهجنة في الفراغ، بحيث يكون التنافر بين الكتروناتاها اقل ما يمكن لتأخذ شكل رباعي الالوجه.

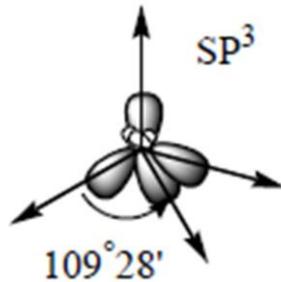


مثال: جزيء CH_4 .

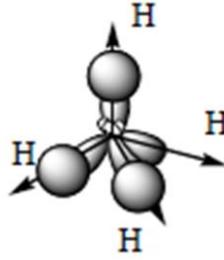
عند اقتراب ذرات الهيدروجين من ذرة الكربون



تقوم ذرة الكربون بإعادة تشكيل المحطات المعنية بالترابط بحيث تصبح لها نفس الطاقة و التناظر: المحطات المعنية هنا هي محط s و محطات P_x, P_y, P_z ، و نوع التهجين يكون $SP_xP_yP_z$ أو SP^3 ، الرقم 3 يعني ثلاث محطات، تتكون في الأخير أربع محطات مهجنة SP^3 كما هي موضحة في الشكل:

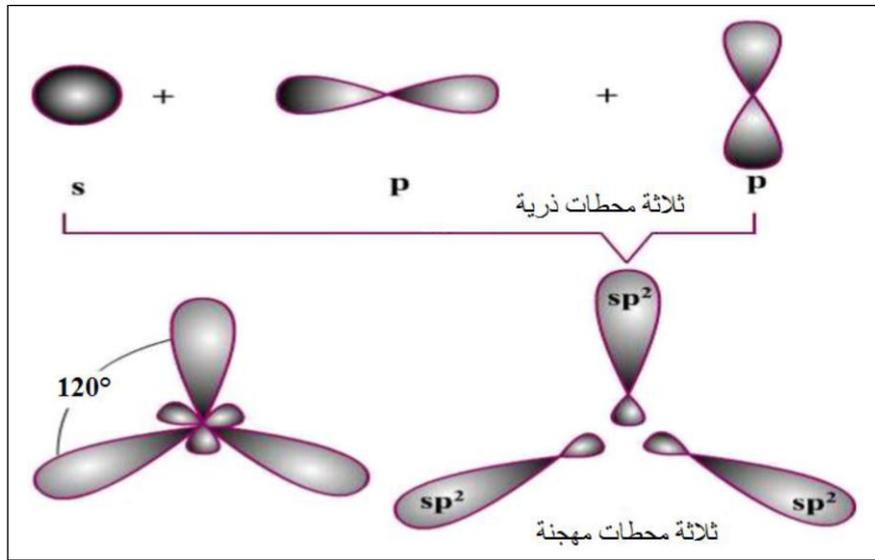


يلقب التهجين برباعي الوجوه بعد ذلك يحدث تداخل المحطات الهجينة مع محطات $1s$ لذرات الهيدروجين لتكوين روابط بسيطة و متينة تسمى روابط سيغما.

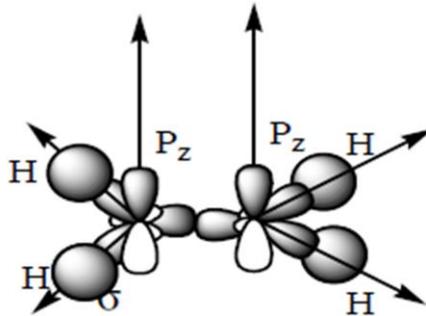


- تهجين SP^2 (Hybridation Trigonale):

التهجين SP^2 عبارة عن اتحاد خطي للمحط الذري S و محطتين P (P_x, P_y) للوصول إلى 3 محطات SP^2 متكافئة (المحط P_z المتبقي يبقى في حالته الأساسية)، محاور المحطات الثلاثة تشكل فيما بينها زوايا قدرها 120° و في نفس المستوى:



مثال: C_2H_4

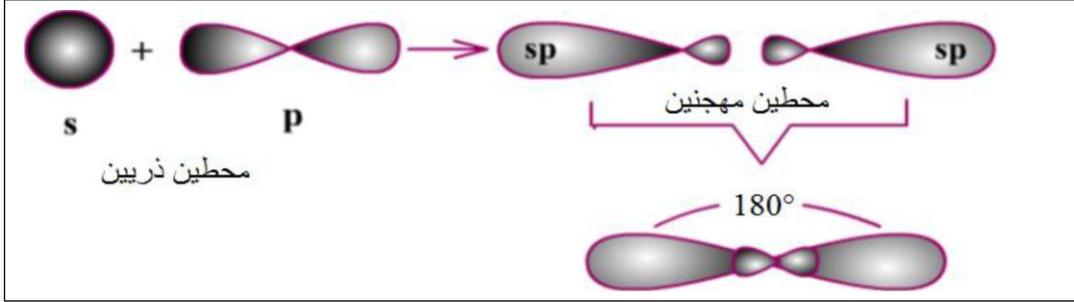


كل كربون في هذا الجزيء تهجينه SP^2 .

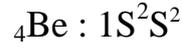
المحطان P_z غير المهجنين للكربونين يكونان رابطة جانبية π باشتراك الكترونيهما العازبين. المحط P_z غير المهجن يلقب بمحط نقي Pure.

- تهجين SP (hybridation Diagonale):

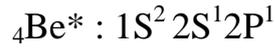
المحطات المهجنة SP تنتج من اتحاد خطي لمحطين ذريين S و P.



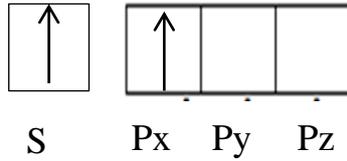
مثال 1: BeH_2



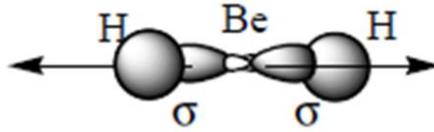
في الحالة الطبيعية



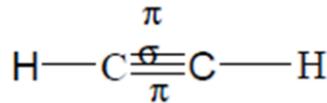
في الحالة المثارة



البيريليوم يكون في حالة تهجين SP (بخلط المحط S مع المحط P_x نتحصل على محطين هجينين SP). إن المحطان P_y و P_z محطان نقيان و فارغان. المحطين المهجنين SP يكونان رابطة سيغما مع المحط S لكل هيدروجين.



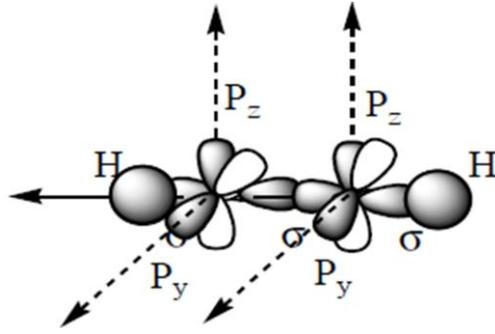
مثال 2: C_2H_2



الكربون في حالة تهجين SP .

إن الرابطة σ (C-C) ناتجة عن ترابط المحطين الهجينين (SP-SP).

الرابطة σ (C-H) (SP-S) ناتجة عن ترابط المحط S للهيدروجين مع المحط الهجين SP للكربون . يبقى على كل ذرة كربون محطان (P_y, P_z) غير مهجنين. المحطان المتقابلان P_y للكربونين يشكلان رابطة π باشتراك الكترونيهما و نفس الشيء بالنسبة للمحطين المتقابلين P_z كما هو مبين في الشكل



ملاحظة:

يمكن أن تشترك المحطات d في التهجين ويحدث هذا غالبا في الجزئيات أو الشوارد الكبيرة أو المعقدة.