الفصل الأول : أشكال الجزيئات

1-نظرية تنافر أزواج إلكترونات غلاف التكافؤ

تفترض هذه النظرية أن الذرات تتخذ ترتيباً فراغياً حول الذرة المركزية اعتماداً على أزواج الإلكترونات الرابطة وغير الرابطة في غلاف التكافؤ للذرة.

أ-الجزيئات التي تحمل الصيغة العامة AB_2

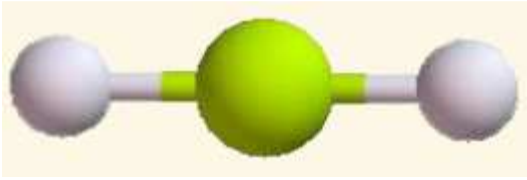
لهذه الجزيئات احتمالان:

أولاً: خطي

إذا ارتبطت الذرة المركزية بذرتان بشرط أن لا تحتوي الذرة المركزية على أزواج من الإلكترونات غير الرابطة، وتكون قيمة الزاوية بين الروابط 180°.

مثال:

جزيء BeH_2

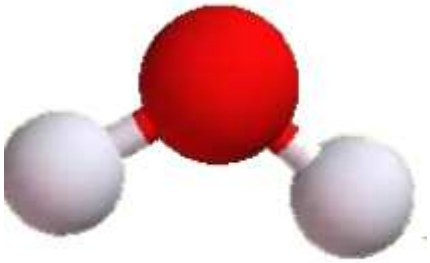


ثانياً: منحنى

إذا ارتبطت الذرة المركزية بذرتان بشرط أن تحتوي الذرة المركزية على أزواج من الإلكترونات غير رابطة، وتكون قيمة الزاوية بين الروابط 104.5˚ تقريباً.

مثال:

جزيء H_2O



ب-الجزيئات التي تحمل الصيغة العامة AB_3

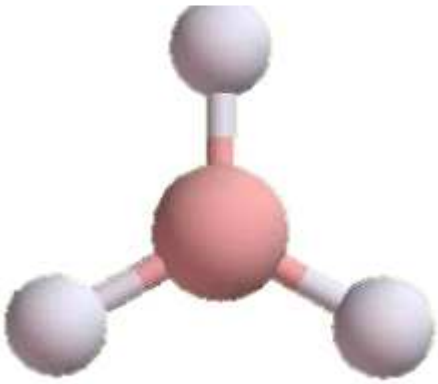
لهذه الجزيئات احتمالان:

أولاً: مثلث مسطح

إذا ارتبطت الذرة المركزية بثلاث ذرات بشرط أن لا تحتوي الذرة المركزية على أزواج من الإلكترونات غير الرابطة، وتكون قيمة الزاوية بين الروابط 120˚.

مثال:

جزيء BH_3



ثانياً: هرم ثلاثي

إذا ارتبطت الذرة المركزية بثلاث ذرات بشرط أن تحتوي الذرة المركزية على أزواج من الإلكترونات غير الرابطة، وتكون قيمة الزاوية بين الروابط 107,3˚ تقريباً.

مثال:

جزيء الأمونيا NH_3

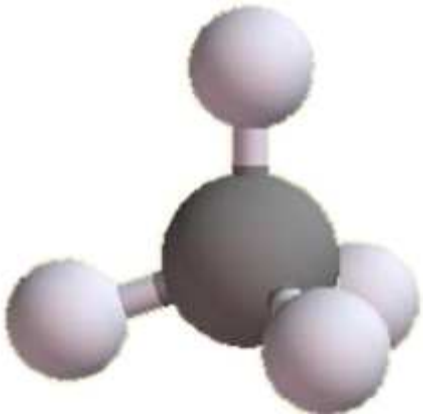
ج- الجزيئات التي تحمل الصيغة العامة AB_4

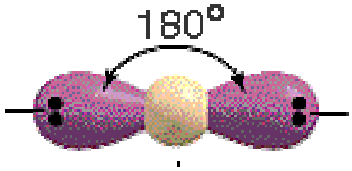
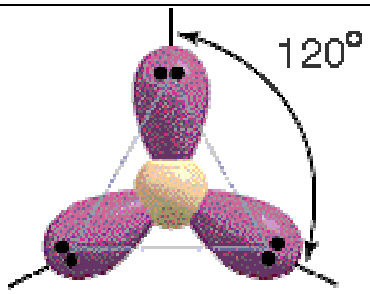
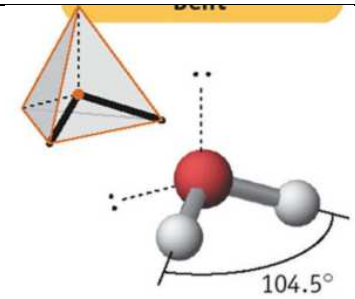
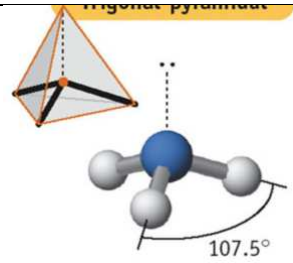
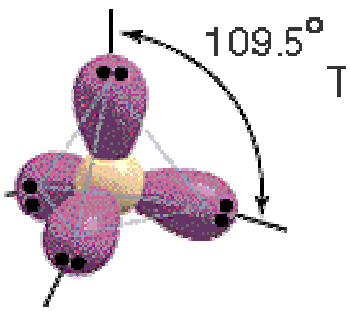
رباعي الأوجه منتظم:

إذا ارتبطت الذرة المركزية بأربع ذرات، ولا تحتوي الذرة المركزية على أزواج من الإلكترونات غير الرابطة، وتكون قيمة الزاوية بين الروابط 109,5˚.

مثال:

جزيء الميثان CH_4



أشكال الجزيئات	عدد أزواج الالكترونات الرابطة حول الذرة المركزية	عدد أزواج الالكترونات غير الرابطة حول الذرة المركزية	الزاوية بين الأربطة	أمثلة	أشكال الجزيئات
خطي	2	0	180	CO_2, HCN	
مثلث مستوي (على الأغلب الذرة المركزية هي من العائلة 3)	3	0	120	BH_3, CH_2O	
زاوية (على الأغلب الذرة المركزية هي من العائلة 6)	2	2	104.5	H_20, H_2S	
هرم ثلاثي (على الأغلب الذرة المركزية هي من العائلة 5)	3	1	107.5	NH_3, PCl_3	
تتراهيدر (على الأغلب الذرة المركزية هي من العائلة 4)	4	0	109.5	CH_4, CCl_4	

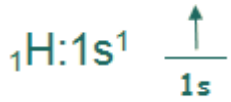
2-نظرية الربط التساهمي

تمكنت نظرية تنافر أزواج إلكترونات غلاف التكافؤ من تفسير أشكال الجزيئات، ولكنها لم توضح كيفية توزيع إلكترونات الرابطة بين أغلفة التكافؤ بين الذرتين المكونتين للرابطة، ومن أهم النظريات التي وضحت ذلك نظرية الربط التساهمي.

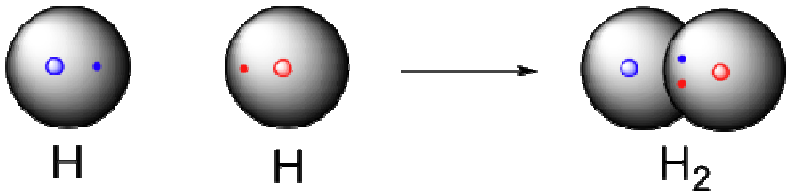
ويمكن استخدام هذه النظرية في تفسير بعض الجزيئات البسيطة ثنائية الذرة مثل: H_2, O_2, N_2, HCl

جزيء الهيدروجين H_2

تحتوي كل ذرة هيدروجين على إلكترون منفرد.



عند اقتراب فلكين ذريين نصف ممتلئين من نوع s1 من ذرتي هيدروجين تتشكل رابطة تساهمية، ومن المتوقع أن يتواجد الإلكترونان في المنطقة بين النواتين، إذ يخضع كل منهما لقوة جذب نواتين في آن واحد، لذلك تزداد الكثافة الإلكترونية منطقة التداخل على المحور الواصل بين نواتي الذرتين المرتبطتين، وتسمى هذه الرابطة بالرابطة (سيجما).



جزيء كلوريد الهيدروجين HCl

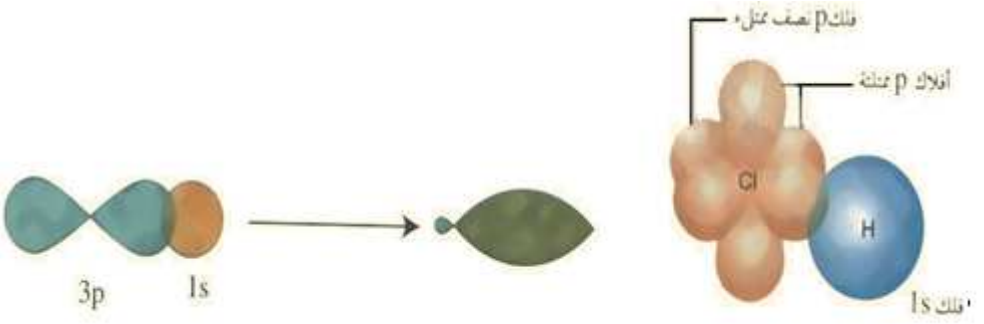
تحتوي ذرة الهيدروجين على إلكترون منفرد، وذرة الكلور على إلكترون منفرد.

$_1H:1s^1$ ↑ (1s)

$_{17}Cl:[Ne]\,3s^2 3p^5$ ↑↓ (3s) ↑↓ (3p) ↑↓ (3p) ↑ (3p)

عند تداخل فلك ذري نصف ممتليء من نوع p3 من ذرة كلور مع فلك ذري من نوع s1 من ذرة الهيدروجين تتشكل رابطة تساهمية.

وفي هذا التداخل تتركز الكثافة الإلكترونية في المنطقة بين النواتين، حول المحور الواصل بين النواتين، وتكون الرابطة التساهمية في هذه الحالة من نوع (سيجما).



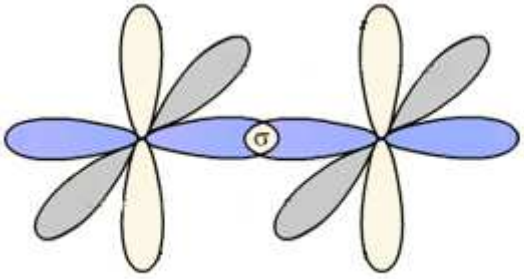
جزيء الكلور Cl_2

تحتوي كل ذرة كلور على إلكترون منفرد.

$_{17}Cl : [Ne]\, 3s^2 3p^5$

عند اقتراب فلكين ذريين نصف ممتلئين من نوع p3 من ذرتي كلور، تتشكل رابطة تساهمية، وبما أن الرابطة التساهمية أحادية فإنه من المتوقع حدوث تداخل رأسي بين فلكي p من الذرتين.

وفي هذا التداخل تتركز الكثافة الإلكترونية في المنطقة بين النواتين، حول المحور الواصل بين النواتين، وتكون الرابطة التساهمية في هذه الحالة من نوع (سيجما).



Cl_2

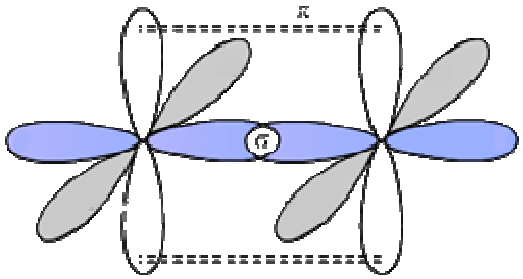
جزيء الأكسجين O_2

تحتوي كل ذرة أكسجين على إلكترونين منفردين.

$_{8}O : 1s^2\ 2s^2\ 2p^4$

يتداخل فلكين نصف ممتلئين من نوع p2 بين ذرتي الأكسجين، وينشأ عن ذلك رابطتان، إحداها من نوع (سيجما) ناتجة عن تداخل رأس لرأس بين فلكين متماثلين ونصف ممتلئين من كلتا الذرتين وتتوزع الكثافة الإلكترونية بين النواتين حول المحور الواصل بين النواتين.

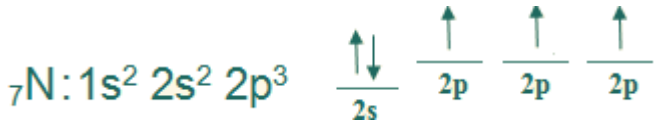
كما تتكون رابطة من نوع (باي) من التداخل الجانبي لفلكي p2 الآخرين من كلتا الذرتين، وتتوزع الكثافة الإلكترونية في كلتا الرابطتين في منطقتين على جانبي الخط الواصل بين النواتين، لذا فإن هذا التداخل أضعف من التداخل (سيجما).



O_2

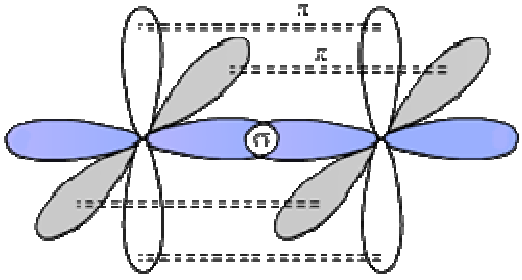
جزيء النتروجين N_2

تحتوي كل ذرة نتروجين على ثلاث إلكترونات منفردة.



تتداخل ثلاثة أفلاك نصف ممتلئة من نوع p2 بين ذرتي النتروجين، وينشأ عن ذلك ثلاث روابط، إحداها من نوع (سيجما) ناتجة عن تداخل رأس لرأس بين فلكين متماثلين ونصف ممتلئين من كلتا الذرتين وتتوزع الكثافة الإلكترونية بين النواتين حول المحور الواصل بين النواتين.

كما تتكون رابطتين من نوع (باي) تتشكلان من التداخل الجانبي لفلكي p2 الآخرين من كلتا الذرتين، وتتوزع الكثافة الإلكترونية في كلتا الرابطتين في منطقتين على جانبي الخط الواصل بين النواتين، لذا فإن هذا التداخل أضعف من التداخل (سيجما).



N_2