شارح: نظرية تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ

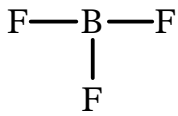
في هذا الشارح، سوف نتعلَّم كيف نُحدِّد شكل الجزيئات باستخدام نظرية تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ.

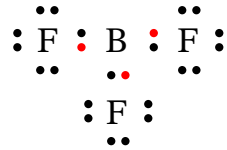
يمكن استخدام نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ (فيسبر) مع مخططات بِنى لويس لتوقُّع أشكال الجزيئات المختلفة.

نستخدم مخططات بِنى لويس لتحديد إلكترونات التكافؤ في الجزيئات المتعدِّدة الذرات، ونستخدم نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ لفهم كيفية ترتيب إلكترونات التكافؤ في فضاء ثلاثي الأبعاد. يَفترض هذا النموذج أنه سيكون هناك دائمًا تنافر كهروستاتيكي بين أزواج من إلكترونات التكافؤ. وستضطر إلكترونات التكافؤ إلى اتخاذ أشكال محدَّدة ثلاثية الأبعاد تقلِّل من التداخلات الكهروستاتيكية المتنافرة ذات الطاقة العالية.

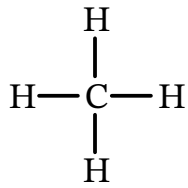
يوضِّح الشكل الآتي بِنى لويس لبعض الأيونات والجزيئات المتعدِّدة الذرات البسيطة. يُستخدَم اللون الأحمر لتمثيل إلكترونات التكافؤ في الذرة المركزية، ويُستخدم اللون الأسود لتمثيل إلكترونات التكافؤ في الذرات الأخرى.

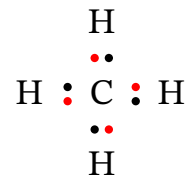
ثلاثي فلوريد البورون



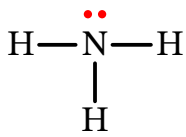


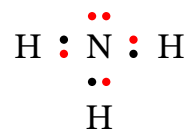
ميثان



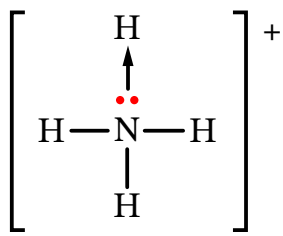


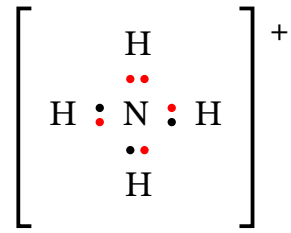
أمونيا





أمونيوم



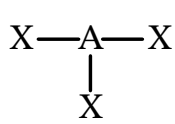
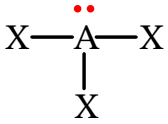
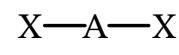
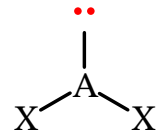
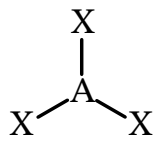
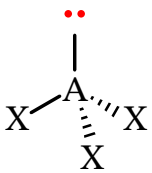


تعريف: الزوج الحر

الأزواج الحرة هي أزواج من إلكترونات التكافؤ غير المشتركة في رابطة تساهمية.

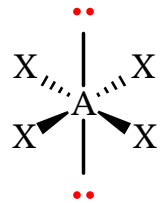
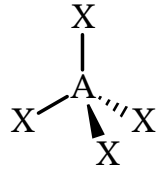
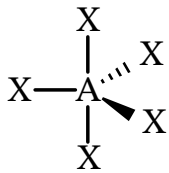
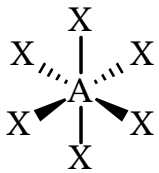
تُستخدم طريقة AX_mE_n مع مخططات بِنى لويس لتصنيف الجزيئات المتعدِّدة الذرات والأيونات إلى مجموعات مختلفة. كل مجموعة لها شكل هندسي ثلاثي الأبعاد مفضَّل يمكن أن يتضمَّن، على سبيل المثال، البِنى الخطية أو الثلاثية المستوية. يمكن تحديد الفئة الصحيحة عن طريق اختيار حدود مناسبة تمثِّل A وX_m وE_n. يمثِّل A الذرة المركزية، ويمثِّل كلٌّ من X_m وE_n أزواج الإلكترونات المترابطة وغير المترابطة. دائمًا ما تكون قيمتا m وn عددين صحيحين، وهما يمثِّلان عدد أزواج الإلكترونات المترابطة وغير المترابطة.

يوضِّح الشكل الآتي مخططات بِنى لويس والأشكال الهندسية التي تعبِّر عن تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ لبعض أنواع الجزيئات المتعدِّدة الذرات البسيطة لـ AX_mE_n.

ترميز AX_mE_n	AX_2	AX_2E	AX_3	AX_3E
بنية لويس				
الشكل الهندسي لتنافر أزواج إلكترونات التكافؤ	خطي	منحنى (على شكل حرف V)	ثلاثي مستوٍ	هرمي ثلاثي
				

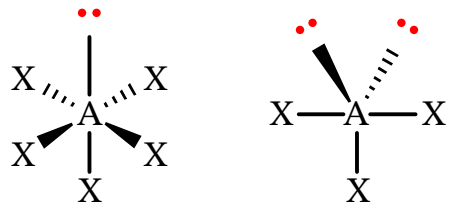
يوضِّح الشكل أن عدد إلكترونات التكافؤ يُحدِّد كيفية ترتيبها حول الذرة المركزية (A). تميل الجزيئات إلى الترتيبات الإلكترونية الخطية البسيطة عندما لا يكون لدينا سوى زوجين مترابطين من إلكترونات التكافؤ، وتميل إلى الترتيبات الإلكترونية الأكثر تعقيدًا عند وجود ثلاثة أو أربعة أزواج من إلكترونات التكافؤ المترابطة أو غير المترابطة.

تميل إلكترونات التكافؤ دائمًا إلى بِنى ثلاثية الأبعاد محدَّدة تقلِّل من شدة التداخلات الكهروستاتيكية المتنافرة بين أزواج الإلكترونات المترابطة وغير المترابطة. ويمكن استخدام هذه الفكرة لتوقُّع البِنى الثلاثية الأبعاد للجزيئات الأكثر تعقيدًا. يوضِّح الشكل الآتي شكل فئة من الجزيئات AX_mE_n ذات الرتب العليا.

ترميز AX_mE_n	AX_4E_2	AX_4	AX_5	AX_6
الشكل الهندسي لتنافر أزواج إلكترونات التكافؤ	مربع مستوٍ	رُباعي الأوجه	شكل هرمي مزدوج ثُلاثي	ثُماني الأوجه
				

تتكوَّن جزيئات AX_mE_n ذات الرتب العليا الأقل شيوعًا بسبب زيادة عدد أزواج إلكترونات التكافؤ المترابطة أو غير المترابطة.

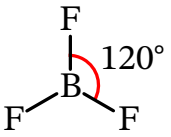
ترميز AX_mE_n	الشكل الهندسي لتنافر أزواج إلكترونات التكافؤ	AX_3E_2	AX_5E
	على شكل حرف T		هرمي مربع

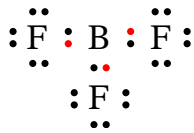


من المفيد أن نترك بِنى الجزيئات العامة ونركّز على الجزيئات الحقيقية بدلًا من ذلك. فثلاثي فلوريد البورون (BF_3) هو أحد أبسط الجزيئات الذي يمكننا دراسته لفهم نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ بطريقة أفضل. الذرة المركزية (A) هي ذرة بورون واحدة تحتوي على ثلاثة أزواج إلكترونات تكافؤ مترابطة ولا تحتوي على أزواج إلكترونات غير مترابطة.

تميل جزيئات ثلاثي فلوريد البورون إلى تكوين بنية ثلاثية مستوية؛ لأنها جزيئات مجموعة AX_3. تعمل ذرات الفلور على تقليل الطاقة الكهروستاتيكية المتنافرة في جزيئات BF_3 عن طريق الانتقال إلى رءوس المثلث الذي مركزه ذرة البورون. تُوجَد زاوية قياسها 120° بين كل رابطة من الروابط التساهمية الثلاث لـ F–B.

بنية لويس	نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ





تُعَد جزيئات الميثان (CH_4) أكثر تعقيدًا بنسبة قليلة، وتُصنَّف على أنها جزيئات مجموعة AX_4. وهي تحتوي على ذرة كربون مركزية واحدة وأربعة أزواج من إلكترونات التكافؤ المترابطة. تقلِّل ذرات الهيدروجين الطاقة الكهروستاتيكية المتنافرة في جزيئات الميثان عن طريق الانتقال إلى أربعة رءوس في بنية رباعية الأوجه ثلاثية الأبعاد يقع مركزها عند ذرة الكربون. تُوجَد زاوية قياسها 109.5° بين كل رابطة من الروابط التساهمية الأربع لـ H–C.

بنية لويس نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ

ينتمي كلٌّ من أيونات الميثان والأمونيوم (NH_4^+) إلى مجموعة AX_4، وتميل إلى أن تكوِّن بِنى رباعية الأوجه متماثلة. تحتوي هذه الجزيئات على أربعة أزواج متكافئة ومترابطة من إلكترونات التكافؤ؛ لأن الروابط التناسقية تُطابِق الروابط التساهمية «العادية» بين إلكترونين بشكل أساسي.

وتُعَد جزيئات الأمونيا أكثر إثارة للاهتمام؛ لأنها تحتوي على ثلاثة أزواج متكافئة ومترابطة من إلكترونات التكافؤ وزوج إلكترونات حر واحد غير مترابط. يشغل الزوج الحر غير المترابط مساحة أكبر في غلاف التكافؤ لذرة النيتروجين، وهو ما يجعل الأزواج الثلاثة المترابطة (H–N) تقترب بعضها من بعض. في النهاية، يصبح لجزيء الأمونيا بنية هرمية ثلاثية مائلة، ونجد زاوية صغيرة نسبيًّا قياسها 107° فقط بين الروابط التساهمية الثلاث لـ H–N.

بنية لويس نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ

مثال ١: فهم كيفية تصنيف الجزيئات باستخدام طريقة AX E

باستخدام طريقة AXE، أيُّ ترميزات AXE الآتية يُمثِّل جزيئًا له شكل هرمي ثلاثي؟

AX_3E_3

AX_4

AX_2E_2

AX_3

AX_3E

الحل

في طريقة AXE، يُشار إلى الذرة المركزية بالحرف A. ويمثِّل كلٌّ من X_m وE_n أزواج الإلكترونات المترابطة وغير المترابطة.

يعتبر جزيء الأمونيا (NH_3) مثالًا على الجزيء الذي له شكل هرمي ثلاثي. تحتوي ذرة النيتروجين المركزية على خمسة إلكترونات تكافؤ. تُستخدم ثلاثة إلكترونات منها لتكوين روابط تساهمية مع ذرات الهيدروجين. والإلكترونان الآخران من إلكترونات التكافؤ لا يُكوِّنان أي روابط. تُوجَد ثلاثة أزواج مترابطة من إلكترونات التكافؤ وزوج إلكترونات حر واحد فقط.

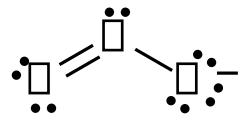
وهذا يعني أن جزيء NH_3 ينتمي إلى مجموعة AX_3E. يمكننا بذلك تحديد أن الخيار (هـ) هو الإجابة الصحيحة لهذا السؤال.

تشغل الأزواج الحرة من الإلكترونات أكبر مساحة من غلاف التكافؤ للذرة المركزية، وينتج عنها أقوى تداخلات كهروستاتيكية متنافرة في نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ. تحدث أقوى التداخلات الكهروستاتيكية المتنافرة بين زوجين من الإلكترونات الحرة، وتحدث أضعف التداخلات الكهروستاتيكية المتنافرة بين زوجين مترابطين من الإلكترونات. أما الجمع بين زوج حر واحد وزوج مترابط واحد، فله قوة ما بين هاتين الحالتين.

تُوجَد قواعد متعدِّدة تساعد علماء الكيمياء على فهم زوايا الروابط. وتنص هذه القواعد، على سبيل المثال، على أن قياس زاوية الرابطة X–A–X سيكون أصغر بمقدار 2.5° تقريبًا مع كل زوج إضافي من الإلكترونات غير المترابطة التي يتم عدها في أي ذرة مركزية رباعية مترابطة A. وتتضمَّن جزيئات AX_4 زوايا الرابطة X–A–X التي قياسها 109.5°، وتتضمَّن جزيئات AX_3E وAX_2E_2 زوايا الرابطة X–A–X التي قياسها 107° و104.5°.

مثال ٢: تحديد الشكل الجزيئي لجزيء نيتريت

يوضِّح الشكل بنية لويس لأيون نيتريت (NO_2^-).



ما شكل هذا الجزيء؟

أ. رباعي الأوجه

ب. هرمي ثلاثي

جـ. مُنحنٍ

د. ثلاثي مستوٍ

هـ. خطي

الحل

الذرة المركزية لأيون نيتريت هي ذرة نيتروجين. تحتوي ذرة النيتروجين على خمسة إلكترونات تكافؤ؛ ثلاثة منها مُضمَّنة في تكوين الروابط التساهمية، واثنان منها متبقيان على صورة زوج إلكترونات حر.

في نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ، تعتبر الروابط المزدوجة مكافئة للروابط الأحادية، وهو ما يعني أنه يُوجَد بالأساس زوجان مترابطان من إلكترونات التكافؤ وزوج إلكترونات حر واحد فقط.

يُوجَد تداخل كهروستاتيكي متنافر بين زوج حر وزوج إلكترونات مترابط أقوى ممَّا يقع بين زوجَي إلكترونات مترابطين. وهذا يغيِّر الشكل الخطي المرتبط بالترتيب الإلكتروني لـ AX_m، ويكوِّن شكلًا مُنحنيًا أو شكلًا يُشبه حرف V يتطابق مع AX_mE_n في ترميز AXE.

يمكننا بذلك تحديد أن الخيار (ج) هو الإجابة الصحيحة لهذا السؤال.

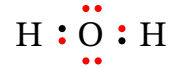
تعريف: زاوية الرابطة

تَصِف زوايا الرابطة متوسط قياس الزوايا بين رابطتين تساهميتين.

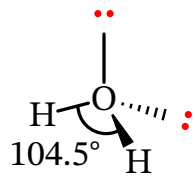
يمكن لجزيئات الماء إذابة المواد القطبية كالكحولات والأحماض الكربوكسيلية؛ لأن لها بنية غير خطية أو «منحنية». جزيئات الماء لها توزيع غير متماثل لكثافة الإلكترونات، ولها عزم ثنائي القطب دائم يمتد من مستوى ذرات الهيدروجين إلى الأزواج الحرة لذرة الأكسجين. يمكن استخدام مخططات بِنى لويس ونموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ لفهم شكل جزيئات الماء.

يوضِّح مخطط بنية لويس لجزيئات الماء أن ذرة الأكسجين المركزية لها ستة إلكترونات تكافؤ. يُستخدَم اثنان من إلكترونات التكافؤ هذه لتكوين رابطتين تساهميتين (H–O)، ونجمع الإلكترونات الأربعة الأخرى على صورة زوجين حرين.

بنية لويس



نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ



يُصنَّف الماء ضمن مجموعة AX_2E_2، وهذا يعني أن إلكترونات التكافؤ ستميل إلى تكوين بنية رباعية الأوجه مائلة. يشغل الزوجان الحران مساحة في غلاف تكافؤ الأكسجين أكبر من المساحة التي يشغلها الزوجان المترابطان، وسيكون قياس زاوية الرابطة H–O–H أصغر من 109.5° دائمًا في النهاية. وعادةً ما تكون قيمة قياس زاوية الرابطة H–O–H هي 104.5°؛ لأن لدينا زوجَي إلكترونات حرين، وكل زوج إلكترونات حر يجعل زاوية الرابطة X–A–X تقل بمقدار 2.5° تقريبًا عن 109.5°.

مثال ٣: المقارنة بين زوايا الرابطة للجزيئات البسيطة

رتِّب الجزيئات الآتية حسب زاوية الرابطة من الأصغر إلى الأكبر.

١. الماء
٢. ثاني أكسيد الكربون
٣. ثاني أكسيد الكبريت
٤. ثلاثي فلوريد الكلور

أ. 1، 3، 2، 4

ب. 2، 1، 4، 3

جـ. 3، 2، 1، 4

د. 4، 1، 3، 2

هـ. 2، 3، 4، 1

الحل

لكي نجيب عن هذا السؤال بشكل صحيح، علينا أولًا استخدام نموذج AX_mE_n وتحديد الترميز الصحيح لكل جزيء من الجزيئات الأربعة.

يحتوي الماء على زوجَي إلكترونات مترابطين وزوجين حرين، وسيكون له ترميز AX_2E_2. وهذا يتطابق مع شكل غير خطي، أو مُنحنٍ، بزاوية رابطة قياسها 104.5° نتيجة زيادة التنافر من مجموعتَي الأزواج الحرة.

يحتوي ثاني أكسيد الكربون على زوجَي إلكترونات مترابطين، ولا يُوجَد به زوجان حران، وسيكون له الترميز AX_2. وهذا يتطابق مع شكل خطي بزاوية رابطة قياسها 180°.

يحتوي ثاني أكسيد الكبريت على زوجَي إلكترونات مترابطين وزوج حر واحد، AX_2E. وهذا يتطابق مع ترتيب إلكتروني آخر يتخذ شكلًا منحنيًا بزاوية رابطة قياسها 118° تقريبًا.

يحتوي ثلاثي فلوريد الكلور على ثلاثة أزواج مترابطة وزوجين حرين، AX_3E_2. بالنسبة إلى ثلاثي فلوريد الكلور، فإنه يتطابق مع ترتيب إلكتروني على شكل حرف T، بزوايا رابطة قياسها 90°.

بجمع هذه المعلومات، يمكننا ملاحظة أن الجزيء 4؛ أي ثلاثي فلوريد الكلور، له زاوية الرابطة الصغرى، يليه الجزيء 1، وهو الماء. يلي ذلك الجزيء 3، ثم نجد أن زاوية الرابطة الكبرى هي الزاوية الموجودة في ثاني أكسيد الكربون؛ أي الجزيء 2. إذن يكون ترتيب قياسات زوايا الروابط تصاعديًّا هو 4، 1، 3، 2، والإجابة الصحيحة هي (د).

تحتوي ذرة الأكسجين على زوجين حرين غنيين بالإلكترونات، وهذا يفسِّر بشكل جزئي لماذا يمكن أن تكوِّن روابط هيدروجينية مع جزيئات أخرى. والسبب الآخر هو أن ذرات الأكسجين ذات قيمة سالبية كهربية عالية. تجذب ذرة الأكسجين كمية غير متناسبة من كثافة الإلكترونات من الرابطتين التساهميتين H–O، ويصبح جزيء الماء شديد الاستقطاب. تُستنفَد كثافة الإلكترونات من ذرات الهيدروجين ($\delta+$) في النهاية وتصبح ذرات الأكسجين غنية بكثافة الإلكترونات ($\delta-$). يوضِّح نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ أن جزيء الماء سيميل دائمًا إلى تكوين بنية رُباعية الأوجه مائلة. فسيكون هناك دائمًا عزم ثنائي القطب كهربي يمتد من مستوى ذرات الهيدروجين إلى أزواج ذرة الأكسجين الحرة. وسيكون لجزيئات الماء عزم ثنائي القطب دائم أيضًا، وسيكون بإمكانها دائمًا تكوين روابط هيدروجينية مع جزيئات أخرى.

تعريف: السالبية الكهربية

السالبية الكهربية هي التي تحدِّد ميل ذرة ما لجذب زوج إلكترونات مترابط.

هيا نلخِّص ما تعلَّمناه في هذا الشارح.

النقاط الرئيسية

- توضِّح مخططات بِنى لويس أزواج الإلكترونات المترابطة وغير المترابطة.
- يمكن من خلال نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ توقُّع شكل الأيونات والجزيئات المتعدِّدة الذرات.
- كل فئة من فئات طريقة AX_mE_n لها شكل هندسي للجزيء المرتبط.
- تُوجَد تداخلات كهروستاتيكية متنافرة في الأزواج الحرة أقوى من هذه التداخلات في الأزواج المترابطة.
- جزيئات الماء لها عزم ثنائي قطب دائم، ويمكن أن تكوِّن رابطة هيدروجينية.