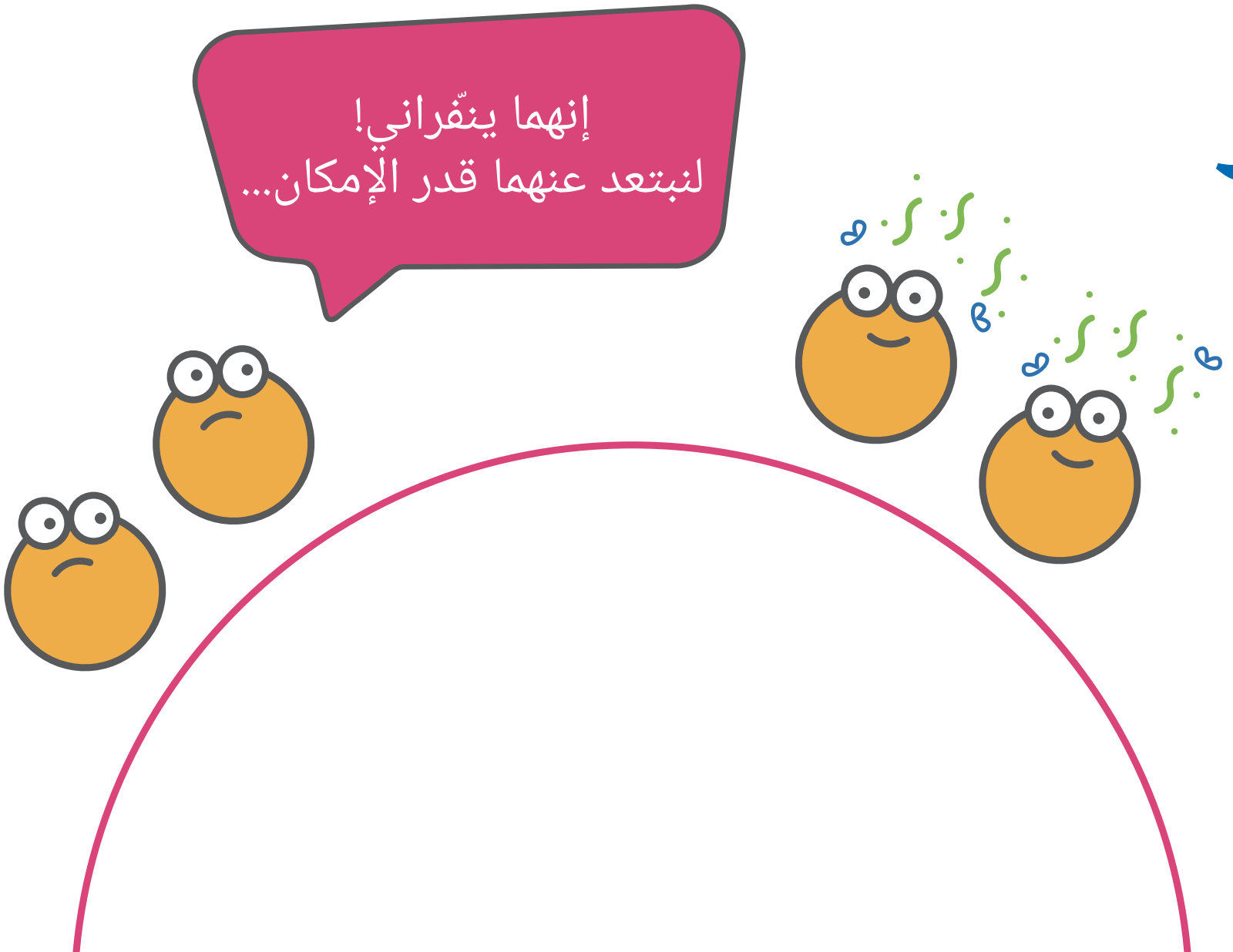
نظرية تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ



أهداف الدرس

ستتمكَّن من:

- وصف مفهوم تنافُر أزواج إلكترونات التكافؤ
- تذكر كيفية رسم بنى لويس للجزيئات البسيطة
- استخدام نظرية تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ لتوقع أشكال وزوايا الرابطة للجزيئات البسيطة
- تحديد أزواج إلكترونات الترابط وأزواج الإلكترونات الحرة داخل الجزيئات
- تطبيق طريقة AXE لتعيين أزواج الترابط والأزواج الحرة وتحديد العدد الفراغي
- ربط عدد أزواج الترابط والأزواج الحرة بشكل الجزيء

تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ ومخططات بنى لويس

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

نستخدم مخططات بنى لويس لتحديد إلكترونات التكافؤ في الجزيئات المتعدِّدة الذرات، ونستخدم نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ لفهم كيفية ترتيب إلكترونات التكافؤ في فراغ ثلاثي الأبعاد.

يَفترض هذا النموذج أنه سيكون هناك دائمًا تنافر كهروستاتيكي بين أزواج إلكترونات التكافؤ.

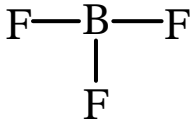
وستضطر إلكترونات التكافؤ إلى اتخاذ أشكال محدَّدة ثلاثية الأبعاد تقلِّل من تداخلات التنافر الكهروستاتيكي ذات الطاقة العالية.

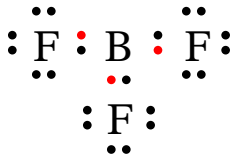
بنى لويس لبعض الجزيئات المتعددة الذرات

يوضِّح الشكل المقابل بنى لويس لبعض الأيونات والجزيئات المتعدِّدة الذرات البسيطة.

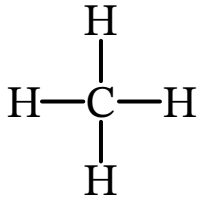
يُستخدَم اللون الأحمر لتمثيل إلكترونات التكافؤ في الذرة المركزية، ويُستخدم اللون الأسود لتمثيل إلكترونات التكافؤ في الذرات الأخرى.

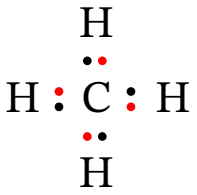
ثالث فلوريد البورون



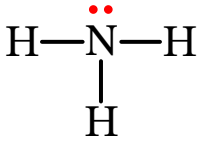


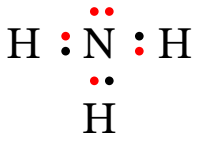
ميثان



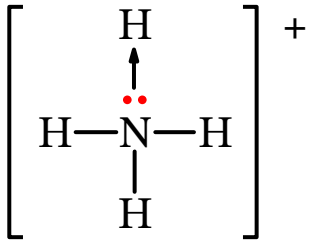


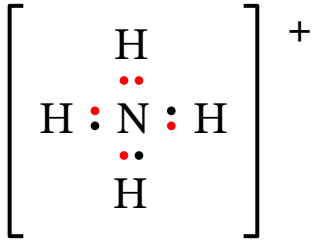
أمونيا





أمونيوم





تعريف: الزوج الحر

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

تصنيف الجزيئات المتعددة الذرات

تُستخدم طريقة AX_mE_n مع مخططات بنى لويس لتصنيف الجزيئات والأيونات المتعددة الذرات إلى مجموعات مختلفة.

يمكن تحديد الفئة الصحيحة عن طريق اختيار حدود مناسبة تمثِّل A وX_m وE_n.

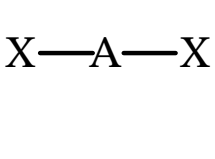
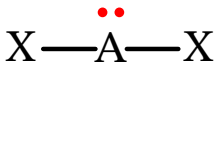
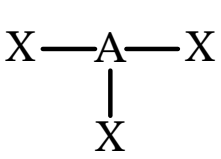
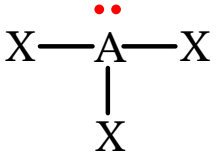
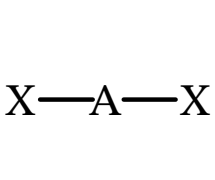
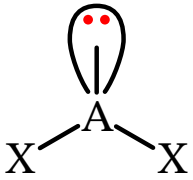
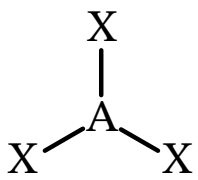
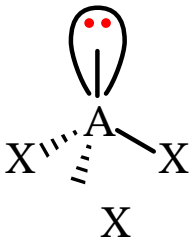
يمثِّل A الذرة المركزية، ويمثِّل كلٌّ من X_m وE_n أزواج الإلكترونات المترابطة وغير المترابطة.

دائمًا ما تكون قيمتا m وn أعدادًا صحيحة.

تصنيف الجزيئات المتعددة الذرات (متابعة)

يوضِّح الشكل المقابل مخططات بِنى لويس والأشكال الهندسية التي تعبِّر عن تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ لبعض فئات AX_mE_n للجزيئات المتعدِّدة الذرات البسيطة AX_mE_n.

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.

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

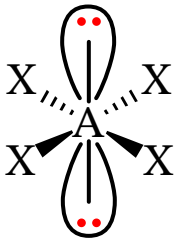
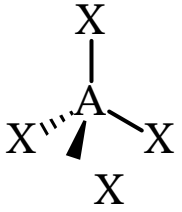
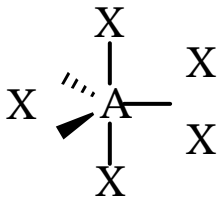
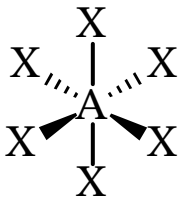
تصنيف الجزيئات المتعددة الذرات (متابعة)

يوضِّح الشكل أن عدد إلكترونات التكافؤ يُحدِّد كيفية ترتيبها حول الذرة المركزية (A).

تميل إلكترونات التكافؤ دائمًا إلى بِنى ثلاثية الأبعاد محدَّدة تقلِّل من شدة تداخلات التنافر الكهروستاتيكي بين أزواج الإلكترونات المترابطة وغير المترابطة.

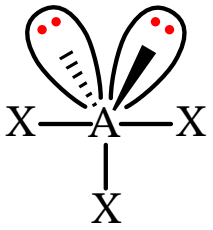
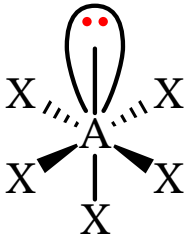
ويمكن استخدام هذه الفكرة لتوقُّع البِنى الثلاثية الأبعاد للجزيئات الأكثر تعقيدًا.

يوضِّح الشكل الآتي شكل جزيئات الفئة 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
				

تصنيف الجزيئات المتعددة الذرات (متابعة)

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

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

نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ ثالث فلوريد البورون

ثالث فلوريد البورون (BF_3) هو أحد أبسط الجزيئات الذي يمكننا دراسته لفهم نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ بطريقة أفضل.

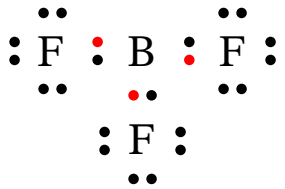
الذرة المركزية (A) هي ذرة بورون واحدة تحتوي على ثلاثة أزواج إلكترونات تكافؤ مترابطة ولا تحتوي على أزواج إلكترونات غير مترابطة.

تميل جزيئات ثالث فلوريد البورون إلى تكوين بنية ثلاثية مستوية؛ لأنها جزيئات مجموعة AX_3.

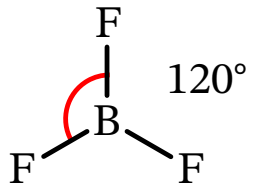
تعمل ذرات الفلور على تقليل طاقة التنافر الكهروستاتيكي في جزيئات BF_3 عن طريق الانتقال إلى رءوس المثلث الذي مركزه ذرة البورون.

تُوجَد زاوية قياسها 120° بين كل من الروابط التساهمية الثلاث B–F.

بنية لويس



نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ



نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ لجزيء الميثان

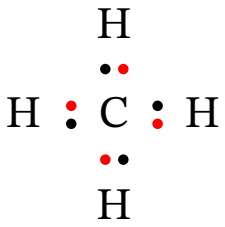
جزيئات الميثان (CH_4) أكثر تعقيدًا بنسبة قليلة، وتُصنَّف على أنها جزيئات مجموعة AX_4.

وهي تحتوي على ذرة كربون مركزية واحدة وأربعة أزواج من إلكترونات التكافؤ المترابطة.

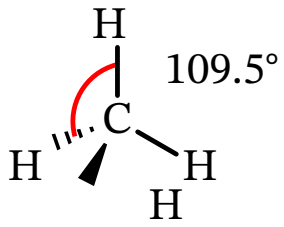
تقلِّل ذرات الهيدروجين طاقة التنافر الكهروستاتيكي في جزيئات الميثان عن طريق الانتقال إلى أربعة رءوس في بنية رباعية الأوجه ثلاثية الأبعاد يقع مركزها عند ذرة الكربون.

تُوجَد زاوية قياسها 109.5° بين كل من الروابط التساهمية الأربع C–H.

بنية لويس



نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ



الفرق بين نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ لجزيء الميثان وأيون الأمونيوم

ينتمي كلٌّ من الميثان وأيونات والأمونيوم (NH_4^+) إلى مجموعة AX_4، وتميل إلى أن تكوِّن بنى رباعية الأوجه متماثلة.

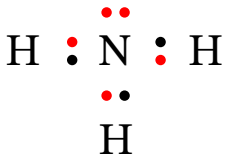
تحتوي هذه الجزيئات على أربعة أزواج ترابط متكافئة من إلكترونات التكافؤ؛ لأن الروابط التناسقية تطابق بشكل أساسي الروابط التساهمية «العادية» بين إلكترونين.

وتُعَد جزيئات الأمونيا أكثر إثارة للاهتمام؛ لأنها تحتوي على ثلاثة أزواج ترابط متكافئة من إلكترونات التكافؤ وزوج إلكترونات حر واحد غير مترابط.

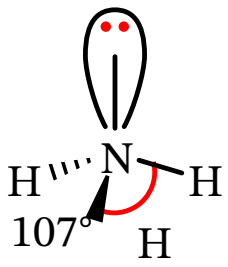
يشغل الزوج الحر غير المترابط مساحة أكبر في غلاف التكافؤ لذرة النيتروجين، وهو ما يجعل الأزواج الثلاثة المترابطة (N–H) تقترب بعضها من بعض.

في النهاية، يصبح لجزيء الأمونيا بنية هرمية ثلاثية مائلة، ونجد زاوية صغيرة نسبيًّا قياسها 107° فقط بين الروابط التساهمية الثلاث N–H.

بنية لويس



نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ



مثال ١: فهم كيفية تصنيف الجزيئات باستخدام طريقة $\mathbf{AX}_m\mathbf{E}_n$

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

A. AX_1E_3
B. AX_4
C. AX_2E_2
D. AX_3
E. AX_3E

مثال ١ (متابعة)

الحل

في طريقة AXE، يُشار إلى الذرة المركزية بالحرف A. ويمثِّل كلٌّ من X_m و E_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.

التداخلات الكهروستاتيكية التنافرية بين أزواج الإلكترونات

تشغل الأزواج الحرة من الإلكترونات أكبر مساحة من غلاف التكافؤ للذرة المركزية، وينتج عنها أقوى تداخلات تنافر كهروستاتيكي في نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ.

تحدث أقوى تداخلات تنافر كهروستاتيكي بين زوجين من الإلكترونات الحرة.

تحدث أضعف تداخلات تنافر كهروستاتيكي بين زوجين مترابطين من الإلكترونات.

أما الجمع بين زوج حر واحد وزوج مترابط واحد، فله قوة ما بين هاتين الحالتين.

قواعد لفهم زوايا الروابط

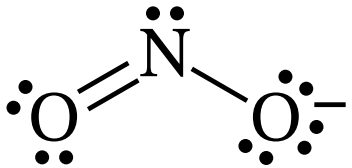
تُوجَد قواعد متعدِّدة تساعد علماء الكيمياء على فهم زوايا الروابط.

تنص 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 لأيون النيتريت

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



ما شكل هذا الجزيء؟

أ. رباعي الأوجه
ب. هرمي ثلاثي
ج. مُنحنٍ
د. ثلاثي مستوٍ
هـ. خطي

مثال ٢ (متابعة)

الحل

الذرة المركزية لأيون النيتريت هي ذرة النيتروجين.

تحتوي ذرة النيتروجين على خمسة إلكترونات تكافؤ؛ ثلاثة منها تشترك 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.

التداخل الكهروستاتيكي التنافري 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 $\mathrm{AX}_m\mathrm{E}_n$ في ترميز AXE.

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

تعريف: زاوية الرابطة

تَصِف زوايا الرابطة المتوسط الفراغي للزوايا بين رابطتين تساهميتين.

فهم الشكل V لجزيئات الماء

يمكن لجزيئات الماء إذابة المواد القطبية كالكحولات والأحماض الكربوكسيلية؛ لأن لها بنية غير خطية أو «منحنية».

جزيئات الماء لها توزيع غير متماثل للكثافة الإلكترونية، ولها عزم ثنائي القطب دائم يمتد من مستوى ذرات الهيدروجين إلى الأزواج الحرة لذرة الأكسجين.

يمكن استخدام مخططات بنى لويس ونموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ لفهم شكل جزيئات الماء.

فهم الشكل V لجزيئات الماء (متابعة)

يوضِّح مخطط بنية لويس لجزيئات الماء أن ذرة الأكسجين المركزية لها ستة إلكترونات تكافؤ.

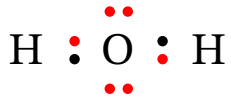
يُستخدَم اثنان من إلكترونات التكافؤ هذه لتكوين رابطتين تساهميتين (O–H)، وتظل الإلكترونات الأربعة الأخرى على صورة زوجين حرين.

يُصنَّف الماء ضمن مجموعة AX_2E_2، وهذا يعني أن إلكترونات التكافؤ ستميل إلى تكوين بنية رباعية الأوجه مائلة.

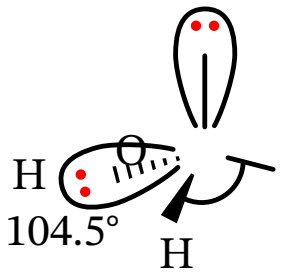
يشغل الزوجان الحران مساحة في غلاف تكافؤ الأكسجين أكبر من المساحة التي يشغلها الزوجان المترابطان، وسيكون قياس زاوية الرابطة H–O–H أصغر من 109.5° دائمًا في النهاية.

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°.

بنية لويس



نموذج تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ



مثال ٣: المقارنة بين زوايا الرابطة للجزيئات البسيطة

رتِّب الجزيئات الآتية حسب زاوية الرابطة من الأصغر إلى الأكبر.

أ. الماء
ب. ثاني أكسيد الكربون
ج. ثاني أكسيد الكبريت
د. ثالث فلوريد الكلور

(أ) أ، ج، ب، د
(ب) ب، أ، د، ج
(ج) ج، ب، أ، د
(د) د، أ، ج، ب
(هـ) ب، ج، د، أ

مثال ٣ (متابعة)

الحل

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 أزواج حرة، 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 توزيع آخر يتخذ شكلًا منحنيًا بزاوية رابطة قياسها $118°$ تقريبًا.

مثال ٣ (متابعة)

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

بجمع هذه المعلومات، يمكننا ملاحظة أن الجزيء د؛ أي ثلاثي فلوريد الكلور، له زاوية الرابطة الصغرى، يليه الجزيء أ وهو الماء.

يلي ذلك الجزيء ج، ثم نجد أن زاوية الرابطة الكبرى هي الزاوية الموجودة في ثاني أكسيد الكربون؛ أي الجزيء ب. إذن يكون ترتيب قياسات زوايا الروابط تصاعديًّا هو د، أ، ج، ب، والإجابة الصحيحة هي د.

ما سبب استقطاب جزيئات الماء؟

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 الكثافة الإلكترونية من الرابطتين التساهميتين O–H.

تنعدم الكثافة الإلكترونية ($\delta+$) على ذرات الهيدروجينفي النهاية وتصبح ذرات الأكسجين غنية بالكثافة الإلكترونية ($\delta-$).

ويصبح جزيء الماء شديد الاستقطاب.

تنافر أزواج إلكترونات التكافؤ وجزيئات الماء

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 الأزواج الحرة لذرة الأكسجين.

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 الترابط.

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 AX_mE_n لها شكل هندسي للجزيء المرتبط.
- تُوجَد تداخلات كهروستاتيكية تنافرية بين الأزواج الحرة أقوى من مثيلاتها بين الأزواج المترابطة.
- جزيئات الماء لها عزم ثنائي قطب دائم، ويمكن أن تكوِّن رابطة هيدروجينية.