Valance Shell Electronic Pair Repulsion (VSEPR)

نظرية تنافر المزدوجات الالكترونية في غلاف التكافؤ لتحديد اشكال الجزيئات .

* تعريف نظرية تنافر الالكترونات : جميع ازواج الالكترونات الموجودة في غلاف التكافؤ للذرة المركزية تكون في وضع بحيث تتباعد عن بعضها البعض بقدر المستطاع لتقلل من الطاقة الناتجة من التنافر .

* نظرا لكون الالكترونات تحمل شحنة سالبة لذلك سوف تتباعد عن بعضها ما امكن ذلك ، وهذا التنافر له فائدة في تحديد الشكل الهندسي للجزيء او الايون في الفراغ .

* تركيب لويس لم يستطيع ان يحدد اشكال الجزيئات او الايونات .

* نظرية تنافر المزدوجات الالكترونية استخدمت تركيب لويس للتنبؤ بالأشكال الهندسية للجزيئات والايونات حيث اعتمدت على مبدأ تنافر المزدوجات الالكترونية الموجودة في غلاف التكافؤ في تحديد الاشكال الهندسية بدرجة عالية من الدقة .

هنالك اربع قواعد رئيسية تتبع في تحديد اشكال الجزيئات حسب نظرية (VSEPR)

1- تتباعد المزدوجات الالكترونية اللاتأصرية في منطقة التكافؤ للذرة المركزية بقدر الامكان وكأنها تتنافر فيما بينها .

2- الحيز الذي تشغله المزدوجات الالكترونية اللاتأصرية يكون اكبر من الحيز الذي تشغله المزدوجات الالكترونية التأصرية .

3- يقل حجم الحيز الذي يشغله المزدوج الالكتروني التأصري بزيادة كهروسالبية العنصر الذي يتصل بالذرة المركزية كما يقل حجم الحيز الذي يشغله المزدوج الالكتروني التأصري كذلك كلما قلت الكهروسالبية للذرة المركزية .

4- الاواصر من نوع σ او π مزدوجة كانت او ثلاثية تشغل حيز اكبر من اواصر سكما لوحدها .

Azal Shaker

سؤال / ما الافتراض الاساسي في نظرية تنافر المزدوجات الالكترونية ؟

ان الشكل الهندسي (ترتيب الذرات حول الذرة المركزية) يؤدي الى اقل تنافر بين المزدوجات الالكترونية الموجودة في غلاف التكافؤ للذرة المركزية .

مثلا عند وجود زوجين من الالكترونات في الذرة المركزية فأنهما يتنافران ويبتعدان عن بعضهما لتصبح الزاوية بينهما 180^0 وفي هذه الحالة يوصف الجزيء بانه خطي اما في حال وجود ثلاث مزدوجات الالكترونية فأنها تتنافر لتصبح الزاوية بينها 120^0 ليتخذ الجزيء شكل مثلث مستوي وهكذا .

الالكترونات المزدوجة يحدث بها ثلاثة انواع من التنافرات وهي :

1- تنافر بين ازواج رابطة وازواج رابطة .

2- تنافر بين ازواج رابطة وازواج غير رابطة .

3- تنافر بين ازواج غير رابطة وازواج غير رابطة .

ويمكن ترتيب قوى التنافر بين الازواج الالكترونية كما يلي :

(غير رابط – غير رابط > غير رابط – رابط > رابط – رابط)

ملاحظة ان عدد الازواج الالكترونية الرابطة والغير الرابطة المرتبطة بالذرة المركزية هي التي تحدد الشكل الهندسي للجزيء او الايون ولذلك يجب رسم تركيب لويس للتعرف على عدد الازواج الالكترونية الرابطة وغير الرابطة .

كيفية تحديد الشكل الهندسي المناسب للجزيء او الايون :

1- يجب اولا رسم تركيب لويس . 2- يتم تحديد الشكل الهندسي حسب عدد الازواج الالكترونية حول الذرة المركزية .

3- تعامل الرابطة الثنائية والثلاثية معاملة الرابطة الاحادية .

Example // Draw the geometry or geometric shape and write or find the type of hybridization of the following molecular according to the VSEPR ?

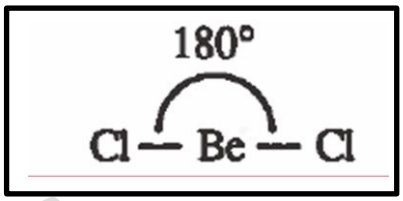
1- $BeCl_2$ $_4Be$ $1s^2$ $2s^2$

Hybridization = sp Be = 2e

no of σ bonds = 2 2Cl = 2e

non-bonding pairs of electron = zero 4e /2 = 2 pair

geometry shape : linear عدد اواصر سكما تساوي 2



مثال اخر

اما اذا كان حول الذرة المركزية ثلاثة مجموعات من الازواج الالكترونية هنالك احتمالين لهذا الترتيب مهما

1- مثلث مستوي Trigonal planner

هذه المركبات يرمز لها ب XA_3 وفي هذه الحالة ترتبط الذرة المركزية بثلاثة ازواج رابطة او ثلاثة مجموعات من الازواج الرابطة . والزاوية بين كل رابطتين تساوي 120^0 .

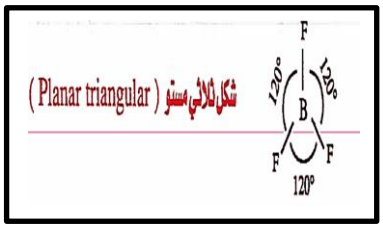
Example // BF_3 $_5B$ 1s2 $2s^2$ $2p^1$

Hybridization = sp^2 B = 3e

no of σ bonds = 3 3F = 3e

non-bonding pairs of electron = zero 6e /2 = 3 pair

geometry shape : Trigonal planner عدد اواصر سكما تساوي 3



نلاحظ حول الذرة المركزية

ثلاثة ازواج الكترونية رابطة وبذلك تتوزع هذه الالكترونات بحيث تكون ابعد ما يمكن عن بعضها البعض.

2- زاوي (منحني) او يسمى غير خطي .

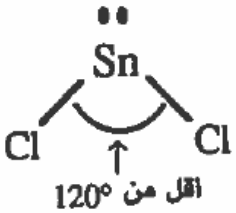
هذه المركبات **يرمز لها ب XA_2E وفي هذه الحالة ترتبط الذرة المركزية بزوجين رابطين او مجموعتين من الازواج الرابطة . والزاوية في هذه الحالة تكون اقل من 120^0 .**

Azal Shaker

■ مثال : كلوريد القصدير $SnCl_2$: ∴ تركيب لويس هو :

نلاحظ ان حول الذرة المركزية زوجين رابطين وزوج حر ، وبذلك تتوزع هذه الإلكترونات بحيث تكون ابعد ما يمكن عن بعضها بحيث تقلل من اثر التنافر بينها لتتوزع في اركان مثلث مستو . وحيث انّ الشكل الهندسي للجزيء يحدده اماكن الذرات وليس اماكن الازواج الإلكترونية ، لذا فإن الشكل الهندسي الصحيح للجزيء هو شكل زاوي (منحني) (غير خطي) (شكل V) .

شكل غير خطي (زاوي) (منحني) V - Shape

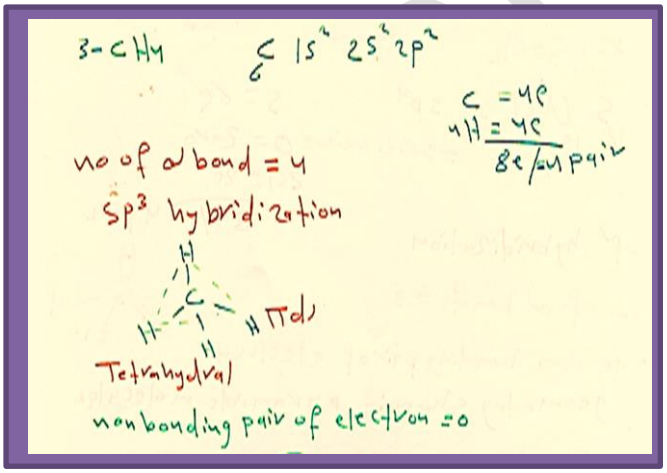


في حين اذا كان حول الذرة المركزية اربعة مجموعات من الازواج الالكترونية هنالك ثلاث احتمالات وهي كما يلي :

1- هرم رباعي الأوجه المنتظم (هرم رباعي السطوح)

■ مثال : الميثان CH_4 ، ∴ تركيب لويس هو :

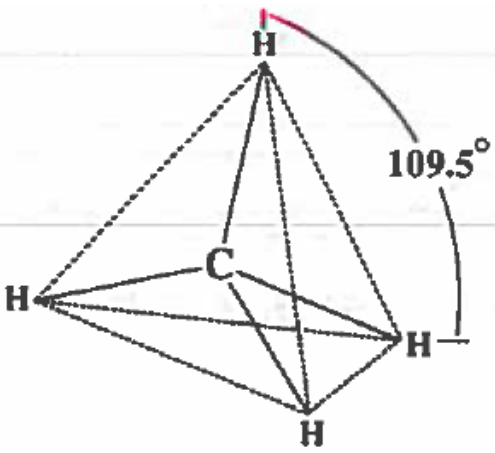
نلاحظ ان حول الذرة المركزية (C) اربعة ازواج من الإلكترونات الرابطة ، وبذلك تتوزع هذه الإلكترونات بحيث تكون أبعد ما يمكن عن بعضها بحيث تقلل من اثر التنافر بينها ، لتصبح في اركان شكل هرمي رباعي السطوح مركزه ذرة الكربون ، وتكون الزاوية ($\widehat{HCH}$) تساوي 109.5° .



شكل هرم رباعي السطوح منتظم

Tetrahedral

يتبين أن الهرم رباعي السطوح هو مكون من أربعة أوجه وكل وجه يمثل مثلث متساوي الأضلاع حيث تتركز ذرة الكربون المركزية في مركز الهرم



2- هرم ثلاثي القاعدة Trigonal Pyramid

هذه المركبات **يرمز لها ب XA_3E وفي هذه الحالة ترتبط الذرة المركزية بثلاث ذرات ازواج رابطة وزج حر واحد .**

NH_3 $_7N$ $1s^2$ $2s^2$ $2p^3$

Hybridization = sp^3 N = 5e

no of σ bonds = 3 3H = 3e

8e /2 = 4 pair

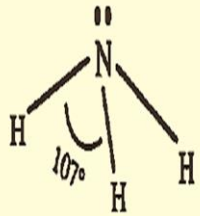
one nonbonding of σ bonds

Trigonal Pyramid

■ مثال : النشادر (الامونيا) NH_3 ، تركيب لويس هو :

نلاحظ أن حول الذرة المركزية (N) ثلاثة أزواج رابطة وزوج حر واحد ، وبذلك تتوزع هذه الإلكترونات بحيث تكون أبعد ما يمكن عن بعضها ، بحيث تقلل من اثر التنافر بينها ، لتصبح في أركان شكل هرمي رباعي السطوح مركزه ذرة النيتروجين .

شكل هرم ثلاثي Trigonal Pyramid



حيث تقع ذرة النيتروجين في قمة هذا الهرم ، وتتركز ذرات الهيدروجين في زوايا قاعدة الهرم المثلثة الشكل . وتكون الزاوية بين (HNH) تساوي 107° .

2- زاوي (منحني) او يسمى غير خطي Angular or V- Shape

هذه المركبات يرمز لها ب AX_2E_2 وفي هذه الحالة ترتبط الذرة المركزية بزوجين رابطين وزوجين غير رابطين.

H_2O $_8O$ $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$

Hybridization = sp^3 O = 6e

no of σ bonds = 2 2H = 2e

Two nonbonding of σ bonds 8e /2 = 4 pair

اذا كان حول الذرة المركزية خمسة مجموعات من الازواج الالكترونية ستكون هنالك اربعة احتمالات :

1- هرم ثلاثي مزدوج Trigonal bipyramid

هذه المركبات يرمز لها ب AX_5 وفي هذه الحالة ترتبط الذرة المركزية بخمس ازواج رابطة فقط .

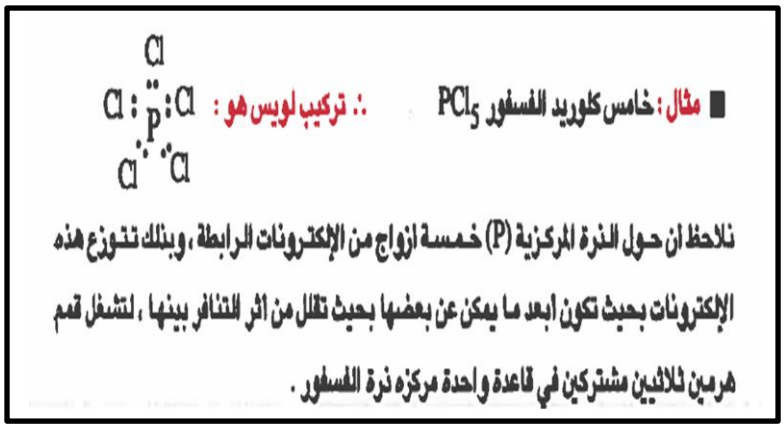
PCl_5 $_{15}P$ $_{10}[Ne]$ $3s^2\ 3p^3$

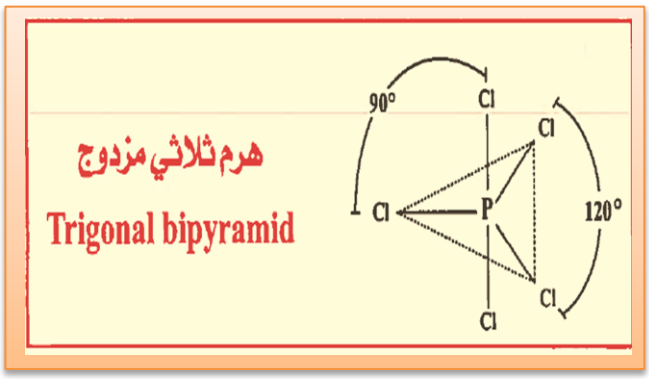
Hybridization = sp^3d P = 5e

no of σ bonds = 5 5Cl = 5e

10e /2 = 5 pair

nonbonding of bonds = zero



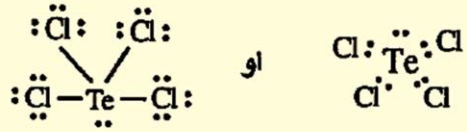


2- هرم رباعي مشوه (رباعي السطوح مشوه) Irregular Tetrahedron

هذه المركبات يرمز لها ب AX_4E وفي هذه الحالة ترتبط الذرة المركزية بأربعة ازواج الالكترونية رابطة وزوج غير رابط .

مثال : كلوريد التيليريوم $TeCl_4$:

∴ تركيب لويس هو :

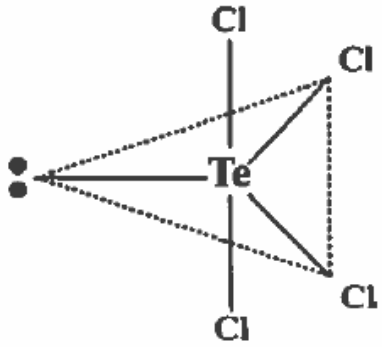


او

نلاحظ ان حول الذرة المركزية (Te) اربعة ازواج من الإلكترونات الرابطة وزوج غير رابط ، وبذلك تتوزع هذه الإلكترونات بحيث تكون ابعد ما يمكن عن بعضها بحيث تقلل من اثر التنافر بينها ، لتشغل قمم هرمين ثلاثيين مشتركين في قاعدة واحدة مركزه نرة (Te) . وحيث ان الشكل الهندسي للجزيء يحدده اماكن الذرات وليس اماكن الأزواج الإلكترونية ، لذا فإن الشكل الهندسي للجزيء ($TeCl_4$) هو هرم رباعي مشوه لان الزوايا ليست 109.5° .

هرم رباعي مشوه

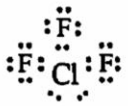
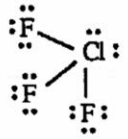
Irregular Tetrahedron



3- شكل T T – epahS

هذه المركبات يرمز لها ب AX_3E_2 وفي هذه الحالة ترتبط الذرة المركزية بثلاثة ازواج الالكترونية رابطة وزوجين غير رابطين .

■ مثال : ثالث فلوريد الكلور ClF_3 :

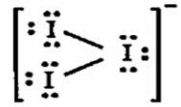
∴ تركيب لويس هو :  او 

نلاحظ ان حول الذرة المركزية (Cl) ثلاثة ازواج من الإلكترونات الرابطة وزوجين غير رابطين ، وبذلك تتوزع هذه الإلكترونات بحيث تكون ابعد ما يمكن عن بعضها بحيث تقلل من اثر التنافر بينها ، لتشغل قمم هرمين ثلاثيين مشتركين في قاعدة واحدة مركزه ذرة الكلور (Cl) وحيث ان الشكل الهندسي للجزيء يحدده اماكن الذرات وليس اماكن الازواج الإلكترونية ، لذا فإن الشكل الهندسي للجزيء (ClF_3) هو حرف T .

4- خطي Linear

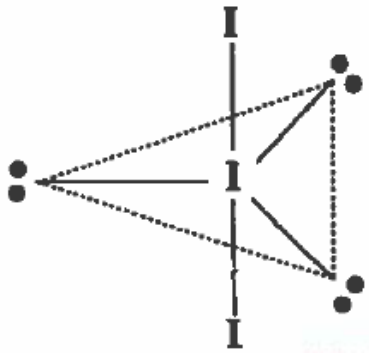
هذه المركبات يرمز
لها ب AX_2E_3 وفي هذه الحالة ترتبط الذرة المركزية بزوجين رابطين وثلاثة ازواج غير رابطة .

■ مثال : I_3^- :

∴ تركيب لويس هو : او 

نلاحظ ان حول الذرة المركزية (I) زوجين رابطين وثلاثة ازواج غير رابطة ، وبذلك تتوزع هذه الإلكترونات بحيث تكون ابعد ما يمكن عن بعضها بحيث تقلل من اثر التنافر بينها ، لتشغل قمم هرمين ثلاثيين مشتركين في قاعدة واحدة مركزه ذرة اليود (I) .
وحيث ان الشكل الهندسي للجزيء يحدده اماكن الذرات وليس اماكن الازواج الإلكترونية ، لذا فإن الشكل الشكل الهندسي للجزيء (I_3^-) هو خطي .

Linear **الشكل خطي**



تركيب الجزيء أو الأيون	الشكل الهندسي للجزيء أو الأيون
AX_2	خطي
AX_3	مثلث مستو
AX_2E	شكل V (زاوي)
AX_4	هرم رباعي منتظم
AX_3E	هرم ثلاثي
AX_2E_2	شكل V (زاوي)
AX_5	هرم ثلاثي مزدوج
AX_4E	هرم رباعي مشوه
AX_3E_2	حرف T
AX_2E_3	خطي

أمثلة للتوضيح
$BeCl_2$ & CO_2 & BeH_2
BF_3 & GaI_3 & SO_3
SO_2 & $SnCl_2$ & $PbCl_2$
CH_4 & SnF_4 & NH_4^+
NH_3 & AsH_3 & PF_3
H_2O & Cl_2O & ClF_2^+
PCl_5 & $SbCl_5$ & AsF_5
$SeCl_4$ & $TeCl_4$ & SF_4
ClF_3 & ICl_3 & XeF_3^+
I_3^- & ClF_2^- & ICl_2^-