

نظرية تنافر الأزواج الإلكترونية في طبقه التكافؤ
 Valence shell Electron Pair Repulsion theory (VSEPR)

تفسر هذه النظرية التآثر الكاهل في الجزيئات بالأعتماد على التآثر الكاهل بين الأزواج الإلكترونية في طبقه التكافؤ للأزواج الإلكترونية المزدوجة والأيونات الرابطة مع الذرات الأخرى في الذرة المركزية. وهذا التآثر من الأزواج الإلكترونية يوزع بشكلًا معينًا للجزيئات في الفضاء.

عدد الأزواج الإلكترونية	الشكل الهندسي	الجزيء	زاوية الأبره	مثال للشكل الفعالي
2	linear	BeCl ₂	180°	Cl-Be-Cl
3	Trigonal	BH ₃	120°	
4	Tetrahedral	CH ₄	109.5°	
5	Trigonal bi-pyramidal	PCl ₅	120, 90°	
6	octahedral	SF ₆	90°	
7	pentagonal bi-pyramidal	IF ₇	72, 90°	
8	Sqvar anti-Prism	TaF ₈ ³⁻	70.5, 99.6, 109.5°	

$Ta^{3-} [Xe]_{54} 4f^{14} 5d^0 6s^0 6p^0$

 $d^4 s^3 p^1$

تتطابق نظرية VSEPR بصورة صحيحة وحيدة على جزيئات العناصر
 المشكلة داخل تلك تناظر مزدوجا - الأندروجا على طبقه التكافؤ،
 وتنقسم المزدوجا الأندرونية على طبقه التكافؤ الى نوعين ① المزدوج
 الأندروني الرابطة بين المزدوجين المكونين للأندرو ② المزدوج الأندروني الحر
 والذي يغير bond angle غير رابطة ولكنه يشارك في الشكل الفضائي
 للجزيئة.

تتأخر نظرية VSEPR بالقواعد الآتية :-

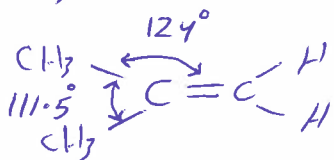
القاعدة الأولى : الترتيب المفضل بين المزدوجا الأندرونية الرابطة أو الحر
 هو ذلك الترتيب الذي يباعى بين هذه المزدوجا التي أكبر صافيته
 ونتيجة هذا التباعى والتناظر يتكون الشكل الهندسي للجزيئة

القاعدة الثانية : يشغل المزدوج الأندروني المنزوح حيناً في الفراغ أكبر من الجزيئ
 الذي يشغله المزدوج الأندروني الرابطة ويؤثر ذلك على الزاوية بين
 الأندرو ويمكن ملاحظه ذلك عند المقارنة بين زوايا الأندرو لكل من
 الجزيئات CH_4 , NH_3 و H_2O حيث وجد ان زوايا الأندرو تكونت 109.5°
 106° و 104° على التوالي . كلما تزداد المزدوجا المنزوحه اكبر تقل زاوية
 الأندرو.

القاعدة الثالثة : يقل حجم الجزيئ الفراغي الذي يشغله المزدوج الأندروني الرابطة
 فزيادة السالبية الكهربية للمنتزح المتحدح الذرة المترتبة

الزاوية	الجزيئة
$X-P-X$	
98°	PF_3
100°	PCl_3
101°	PBr_3
102°	PI_3

القاعدة الرابعة : يشغل المزدوجين الأندرونيين على طرف مزدوج واحد ثلاثة
 حيناً أكبر من ذلك الجزيئ الذي يشغله المزدوج الأندروني الذي له احد طرفيه



85

* عند استخراج نوع التهجين في جزيئات العناصر الممثلة يكون اعطاء
 الأسترونا بالشكل الآتي؛ حيث تقطي الذرة المترتبة كد الأسترونا
 برقم زسرتها أما الذرات المترتبة تقطي الأسترونا واحد
 وزيت كمال بالنسبة كما السخنا السالبة الكلية على الأيون تقطي
 بمقدار عدد السخنا. اديطرح الأسترونا بعد السخنا
 المفقودة وما تجد الأسترونا اليه فهو انه اذا كانت
 الذرات المترتبة بالذرة المترتبة S, O, N يكون
 اعطائها من الأسترونا

امثلة اوجد نوع التهجين والشكل الهندسي لمثل من الجزيئات الآتية:-
 --- $SO_3, IO_3^-, NH_4^+, NO_3^-, H_2O, BeCl_2$

① $BeCl_2$ $Be = 2e$
 $2Cl = 2e$
 $\frac{4e}{2} \Rightarrow 2 \text{ pair} \Rightarrow sp \Rightarrow \text{linear}$

② H_2O $O = 6e$
 $2H = 2e$
 $\frac{8e}{2} \Rightarrow 4 \text{ pair} \Rightarrow sp^3 \Rightarrow \text{V-shape}$

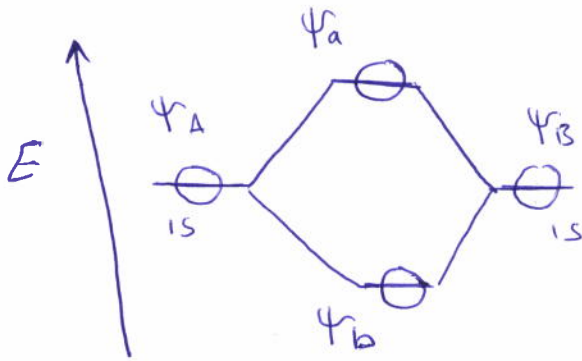
③ NO_3^- $N = 5e^-$
 $3O = 6e$
 $(-) = 1e$
 $\frac{6e}{2} = 3 \text{ pair} \Rightarrow sp^2 \Rightarrow \text{Trigonal}$

④ NH_4^+ $N = 5e^-$
 $4H = 4e^-$
 $(+) = -e$
 $\frac{8e}{2} = 4 \text{ pair} \Rightarrow sp^3 \Rightarrow \text{Tetrahedral}$

⑤ IO_3^- $I = 7e^-$
 $3O = 6e$
 $(-) = 1e$
 $\frac{8e}{2} = 4 \text{ pair} \Rightarrow sp^3 \Rightarrow \text{Trigonal Pyramide}$

Molecular Orbital Theory الجزيئية المدارية (M.O.T)

تفسر هذه النظرية التآثر الحاصل بين الجزيئات بالأعداد كما يلي. جميع الإلكترونات للذرات المتحددة لتكون الجزيئية وتنفرد كما أسلوب الجمع الخطي للذرات ليعطى الجزيئية للمحول كما أوربتال من جزيئية يسمى هنا linear combination of atomic orbital (LCAO) ومن خلال هذا الجمع الخطي يتولد أوربتالين جزيئيتين أحدهما ذرطاقة أقل يسمى الأوربتال الجزيئية الرابطة bonding molecular orbital والاخر ذو طاقة أعلى يسمى الأوربتال الجزيئية المضادة للتآثر antibonding M.O. ويمكن تمثيل مستويات الطاقة للأوربتالين الجزيئيتين في جزيئية ثنائية اقتران AB :-



التداخل وعدم التداخل بين الأوربتالات

يحدث للتداخل الكامل بين الأوربتالين جزيئتين (S) ويمكن حسابه رياضياً من المعادلة

$$S = \int \psi_A \psi_B d\tau$$

فإذا كان مقدار التداخل (S) قيمة موجبة (+) يعني ذلك تقوية الألكترونات بين النواتين وبالتالي تكون له قوة.

أما إذا كان مقدار التداخل (S) قيمة سالبة (-) يعني ذلك تقوية في المكان الألكتروني بين النواتين وبالتالي يمنع من أن تكون له قوة.

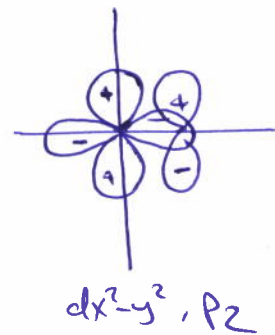
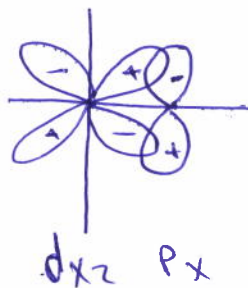
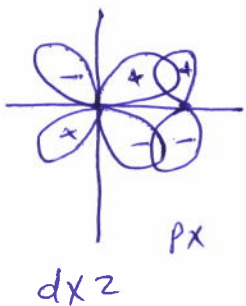
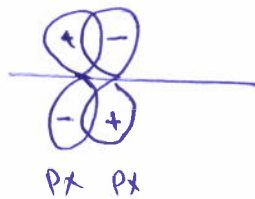
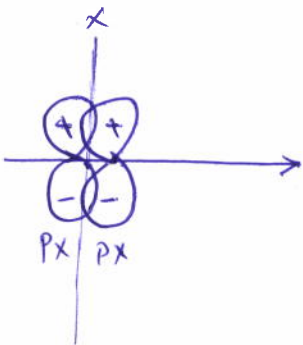
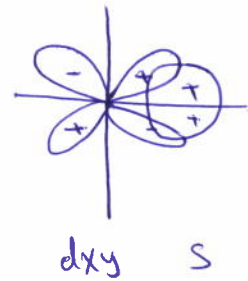
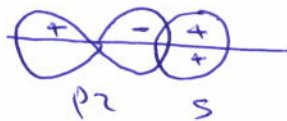
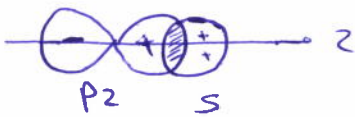
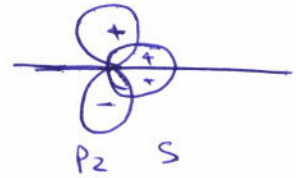
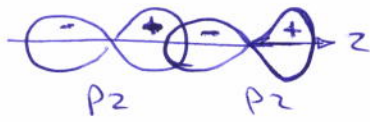
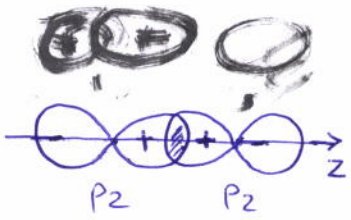
أما إذا كانت المقدار (S) قيمة (صفر) يعني عدم وجود أي قوة بين الذرتين (تجاهل أو متنافر).

وَيَمَيَّن تَمَثِيلِ أَنْوَاعِ التَّوَاخُلَاتِ بَيْنَ الْأُورْبِيَّتَاتِ بِالْأَشْكَالِ الْآتِيَةِ:

S = (+)

S = (+)

S = 0

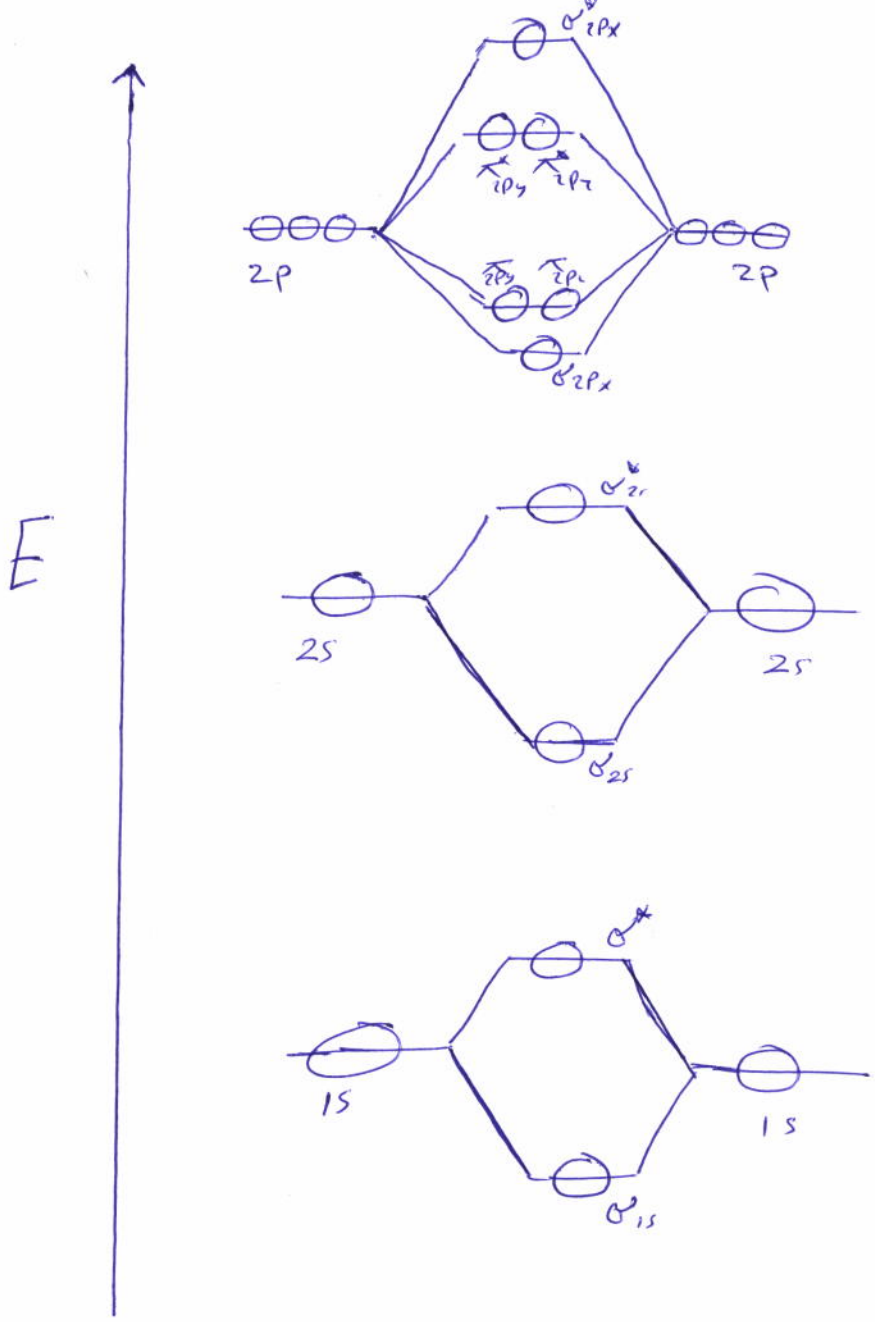


هذه الآصرة تصف عدد عدد التداخل والذي يصغر يدور، ه عدد للسافة بين السويتين وعلى حجم الأوربيتالين المتداخلين ولما كانت الأوربيتالين كروية لذا فهو يتداخل مع جميع الأوربيتالين بنفس الدرجة، وفي جميع الاتجاهات إلا أن الأوربيتالين p الذي يتكون من فئتين مختلفتين في الإشارة، وذلك في اتجاهات ذراعيه محدد، وعليه فإن عدد الأوربيتالين المتداخلين بالارتباط، الذراعين مع الأوربيتالين الأخرى.

الماديات الجزيئية من الجزيئات المتناظرة الذرة

- ومن أمثلة هذه الجزيئات H_2, O_2, Cl_2 --- وعند تكوين المدارات الجزيئية المستقرة يجب توفر شرطين أساسيين هما:
- 1- يجب أن يكون مقدار التداخل ذرياً موجبة (+)
 - 2- يجب أن تكون طاقات المدارات الذرية المتداخلة متساوية في الطاقة.

* يمكن تمثيل مستويات الطاقة للماديات الجزيئية من الجزيئات المتناظرة للعناصر العشرة الأولى في الجدول الدوري من H_2 إلى Ne_2 بالمخطط التالي:



الترتيب الأستقرى :-

$$\sigma_{1s}, \sigma_{1s}^*, \sigma_{2s}, \sigma_{2s}^*, \sigma_{2p}, \pi_{2p}, \pi_{2p}^*, \sigma_{2p}^*, \pi_{2p}, \pi_{2p}^*, \sigma_{2p}^*$$

89

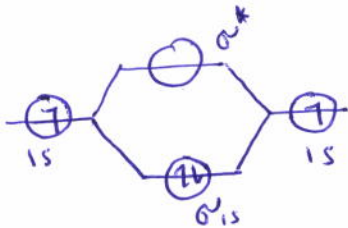
مفہم ایگزٹا سے الصترہ الاونکی فی اجدول الوردی تتیح الترتیب الاستری
السايف ماعدا جزية البورد وجزية الكربون هي ان خلاف
او اورينا ل $\pi_{2p_{y,z}}$ تفناؤ جيل اوريناك σ_{2p_x} .

* يتعارف من نظريه $M.O.T$ في تفسير التآثر الكامل في ايجزيتا
بيصح انواعها وسرفه حول التآثر من اوجده ما فلول
صبا ب رتبه الآ مره (Bond order)

رتبه الآ مره = عدد الالكترونا في التآثره - عدد الالكترونا في الحفاره للتآثر
2

امثاله :- فسر كل من ايجزيتا الالتيه حسب نظريه $M.O.T$ موهما رتبه
المره والترتيب الاستري :- H_2, He_2, C_2, N_2, O_2

H $1s^1$

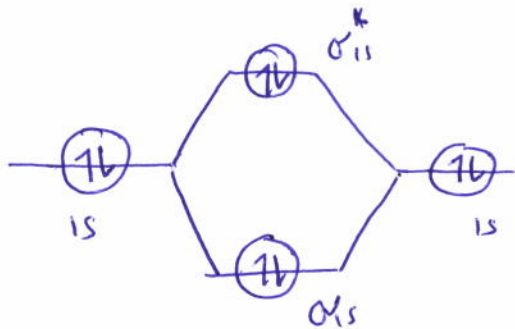


$B.O = \frac{2-0}{2} = 1$

H₂ (1)

Electronic configuration is $(\sigma_{1s})^2$

He $1s^2$



$\therefore B.O = \frac{2-2}{2} = 0$

$E-C = (\sigma_{1s})^2 \cdot (\sigma_{1s}^*)^2$

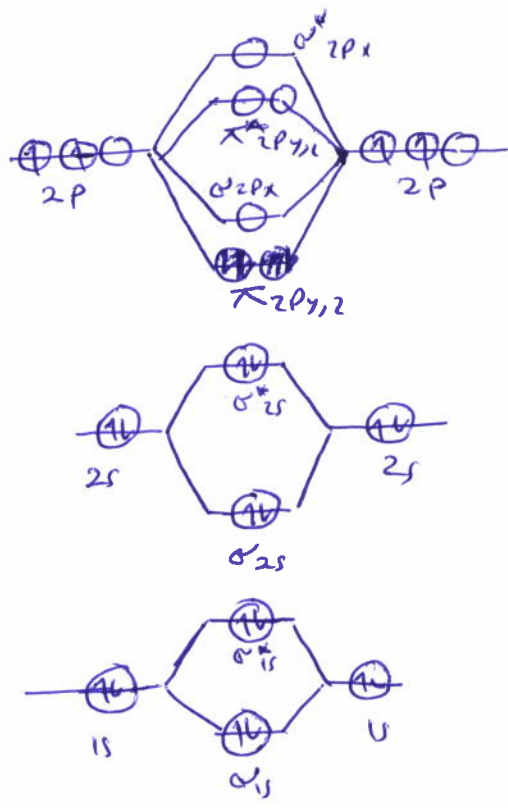
He₂ (2)

90

$6C \ 1s^2 \ 2s^2 \ 2p^2$

C_2 (3)

E



$\therefore B.O = \frac{8-4}{2} = 2$

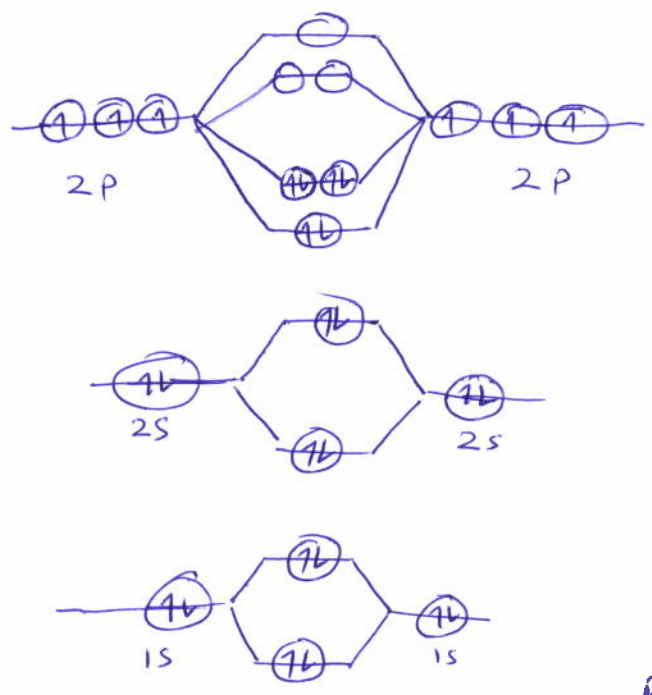
E.C is $(\sigma_{1s})^2, (\sigma^*_{1s})^2, (\sigma_{2s})^2, (\sigma^*_{2s})^2, (\pi_{2p_x, y})^2$

حفاظت از این ترتیب و این معنی میدهد

$7N \ 1s^2 \ 2s^2 \ 2p^3$

N_2 (4)

E



$B.O = \frac{6-0}{2} = 3$

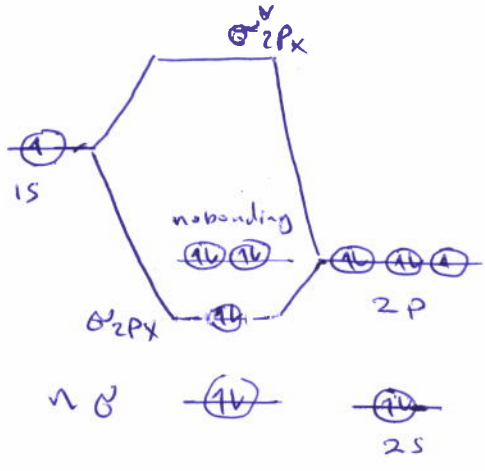
E.C is $(\sigma_{1s})^2, (\sigma^*_{1s})^2, (\sigma_{2s})^2, (\sigma^*_{2s})^2, (\sigma_{2p})^2, (\pi_{2p_x, y})^2$

تفسير نظرية MO-T للبريتات الغير متجانسة

لا تختلف طريقة تكوين الاوربتالات في ايزومر غير متجانس عن طريقة تكوينها في ايزومر المتجانس الا ان هناك اختلاف واحد هو ان الاوربتالات في ايزومر الغير متجانس ليست في مستوى طاقت واحد (اي ان الاوربتالات الذرية المهيمنة تكونت هنا ليست في مستوى لذريتين المكونتين للآزوت. حيث ان الذرة ذات السالبية الكهربية صغارتها في الاوربتالات ايزومر المتجانس اعلى، وان الاوربتالات ذات السالبية اعلى قل تكون صغارتها في الاوربتالات المقارن للآزوت اعلى.

امثلة: خسر الكبريتات HF, CO, NO هي نظرية MO-T

H 1s
F 1s² 2s² 2p⁵

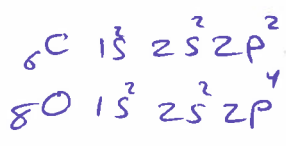
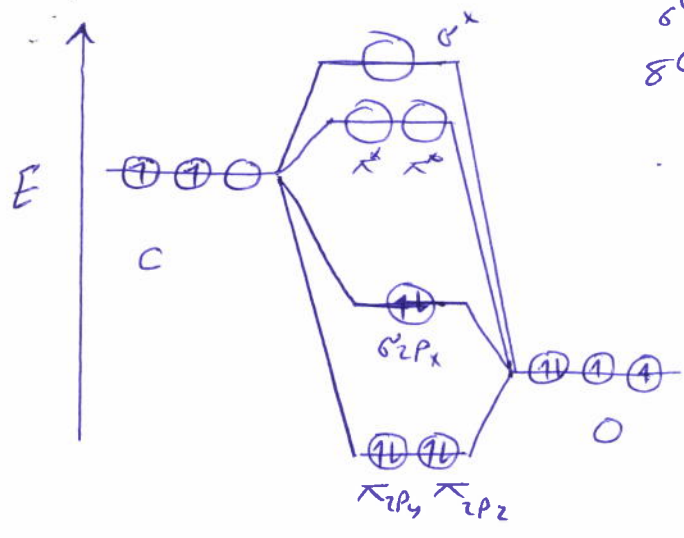


HF ①

في ايزومر HF يمتلك H الكترون واحد في 1s والذي يتداخل مع 2px من ذرة الفلور لذات (s=t) وهذا التداخل هو المسؤول عن تكوين الرابطة بين H-F اما عملية التداخل (s=0) في حالة تداخل الاوربتالات 2py, 2pz لذات جميع هذه الاوربتالات غير متساوية non bonding وهذا الاوربتال لا يتداخل في صياغة الرابطة الاخرى. وكذلك الحال بالنسبة للاوربتالات 2s من ذرة الفلور.

$$\therefore B.O = \frac{2-0}{2} = 1$$

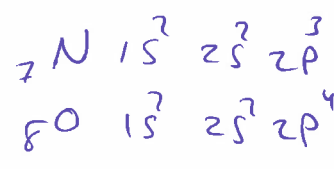
92



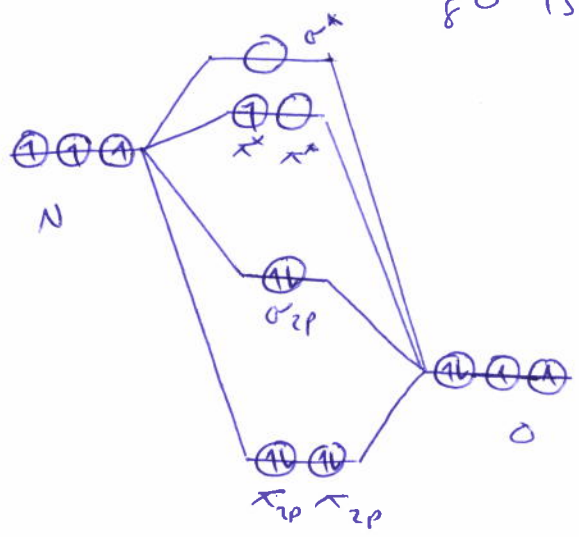
② جزئیہ CO

$B.O = \frac{6 - 0}{2} = 3 \quad C \equiv O$

B-C is $(\pi_{2py, 2pz})^4, (\sigma_{2px})^2$



③ جزئیہ NO



$B.O = \frac{6 - 1}{2} = 2.5$

جزئیہ NO المتعادله غیر مستقره و نصل اکی حاله اکی مستقره

حاله فقدان الکترون ما الا و ابتدا ل π_{2p}^* و تتحول اکی ایون سوپین NO^+ جزئیہ
 اکره ثلاثیة و تتكون حی جند اکی له صلابه جزئیہ CO حی الصفاة
 لتقریباً