

ترکیب‌های کووالانسی



اگرچه درک ساختار الکترونی اتم از اهمیت بسیاری برخوردار است، با این حال بیشتر شیمی‌دان‌ها علاقه زیادی به یک اتم تنها ندارند. آنها به مطالعه گروه‌های دوتایی یا چندتایی از اتم‌ها و نیروهایی علاقه‌مند هستند که آنها را کنار هم نگاه می‌دارد. نوعی از این نیروها که پیوند کووالانسی نامیده می‌شود، نیرویی است که اتم‌ها را به یکدیگر محکم متصل کرده، مولکول‌ها را به وجود می‌آورد. مطالعه ویژگی‌های این نوع پیوندها درک ساختار و رفتار بسیاری از مواد شیمیایی را آسان می‌کند و پرده از دنیای شگفت‌انگیز مولکول‌ها برمی‌دارد.

به داده‌های جدول ۱ با دقت نگاه کنید. همان‌طور که در این جدول مشاهده می‌شود میان خواص فیزیکی سدیم کلرید و ید تفاوت‌های چشم‌گیری وجود دارد. این تفاوت‌ها که در میان بسیاری از اجسام دیگر نیز دیده می‌شود، از وجود تفاوتی چشم‌گیر در ساختار ذره‌های سازنده آنها حکایت می‌کند. یون‌های سدیم و یون‌های کلرید ذره‌های سازنده نمک خوراکی هستند، اما مولکول‌های دو اتمی ید (I_2) را به وجود آورده‌اند. بنابراین آشنایی با ویژگی‌ها و چگونگی تشکیل مولکول‌ها می‌تواند ما را در درک خواص این دسته از ترکیب‌ها یاری دهد.

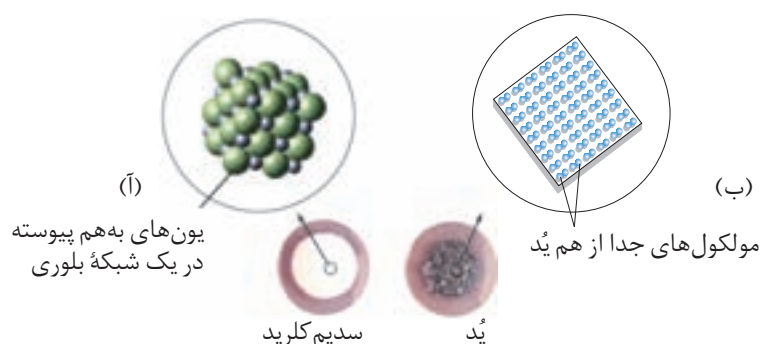
جدول ۱ مقایسه برخی از خواص فیزیکی نمک خوراکی و ید

جسم	حالت فیزیکی (در دمای اتاق)	نقطه ذوب ($^{\circ}C$)	نقطه جوش ($^{\circ}C$)	رسانایی الکتریکی
NaCl	جامد	زیاد (۸۰۱)	زیاد (۱۴۱۳)	زیاد (به صورت مذاب یا محلول در آب)
I_2	جامد	کم (۱۱۳/۵)	کم (۱۸۴/۳)	نارسانا

همان‌طور که گفته شد برای توضیح خواص ترکیب‌هایی مانند ید به الگوی تازه‌ای برای تشکیل پیوند نیاز داریم. در این الگو برخلاف تشکیل پیوند یونی، اتم‌ها برای رسیدن به آرایش گاز نجیب (آرایش هشتایی) به جای ازدست دادن یا پذیرفتن الکترون، آنها را میان خود به اشتراک می‌گذارند. در این حالت میان دو اتم پیوندی به وجود می‌آید که **پیوند کووالانسی** گفته می‌شود.

پیوند کووالانسی هنگامی تشکیل می‌شود که اتم‌ها به تعداد برابر الکترون به اشتراک بگذارند.

نیرویی که دو اتم را در یک پیوند کووالانسی به هم متصل نگه می‌دارد، ممکن است از نیروی موجود میان یک جفت کاتیون و آنیون قوی‌تر باشد. اما، در مولکولی مانند مولکول ید، تنها دو اتم ید با پیوند کووالانسی به یک‌دیگر متصل شده‌اند و با دیگر اتم‌های ید پیوندی ندارند. اگر به ساختار سدیم کلرید و ید به دقت نگاه کنید، شکل ۱، خواهید دید که اگر چه

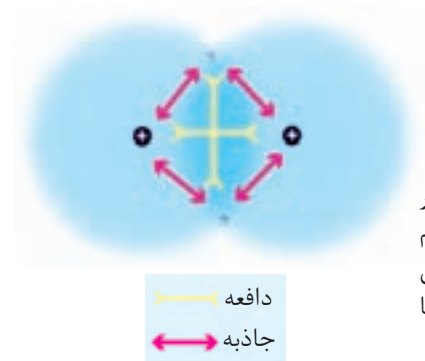


شکل ۱ (آ) در بلور سدیم کلرید ($NaCl$)، هر یون دست کم به شش یون با بار ناهم‌نام متصل است و در مجموع شبکه به هم پیوسته‌ای از یون‌ها ایجاد شده است. (ب) در ید (I_2)، ذره‌های سازنده بلور، مولکول‌های بدون بار و مستقل I_2 هستند.

یُد و نمک خوراکی هر دو جامدند اما، یُد از گردهم‌آیی مولکول‌های دو اتمی و جدا از هم I_2 تشکیل شده است، درحالی‌که $NaCl$ از تجمع تعداد برابری از یون‌های سدیم و کلرید ساخته شده است. از آن‌جا که ترکیب‌هایی مانند یُد اغلب از مولکول‌های جدا از هم تشکیل شده‌اند، آنها را **ترکیب‌های مولکولی** می‌نامند.

تشکیل پیوند کووالانسی

اما چرا اتم‌ها با پیوند کووالانسی به یکدیگر متصل می‌شوند و مولکول‌ها را ایجاد می‌کنند؟ برای پاسخ دادن به این پرسش، تشکیل پیوند کووالانسی ساده بین دو اتم هیدروژن را در نظر بگیرید. با نزدیک شدن اتم‌های هیدروژن به یک دیگر میان الکترون یک اتم هیدروژن و هستهٔ اتم هیدروژن دیگر، یک نیروی جاذبه‌ای قوی ایجاد می‌شود. از طرف دیگر، بین الکترون‌ها و همچنین بین هسته‌های آنها نیز یک نیروی دافعه‌ای قدرتمند به‌وجود می‌آید. در ابتدا ممکن است تصوّر کنید که این نیروهای جاذبه‌ای و دافعه‌ای یکدیگر را خنثی می‌کنند و موجب می‌شوند که این دو اتم همچنان جدا از هم باقی بمانند. اما می‌دانیم که هیدروژن از مولکول‌های دو اتمی H_2 تشکیل شده است.

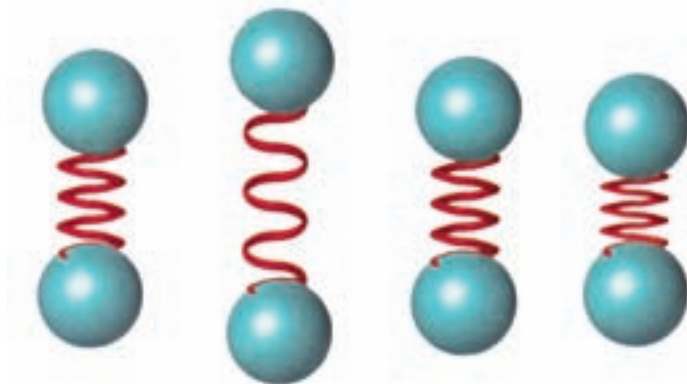


شکل ۲ وقتی دو اتم هیدروژن در تماس با یکدیگر قرار می‌گیرند، بین ذره‌های موجود در یک اتم و ذره‌های اتم دیگر اثرهای جاذبه‌ای و دافعه‌ای به‌وجود می‌آید. تشکیل پیوند نتیجهٔ تأثیر این نیروها بر یکدیگر است.

در هنگام تشکیل پیوند کووالانسی، اثر نیروهای جاذبه‌ای بسیار بیشتر از مجموع نیروهای دافعه‌ای میان دو هسته و بین دو الکترون است. این نیروی جاذبهٔ اضافی دو اتم هیدروژن را به سوی یکدیگر می‌کشد و اساس تشکیل پیوند کووالانسی بین آنها به‌شمار می‌آید. اگرچه پس از تشکیل پیوند کووالانسی نیروهای دافعه و جاذبه برابر می‌شوند و اتم‌ها در فاصله‌ای تعادلی نسبت به هم قرار می‌گیرند.

پیوند کووالانسی را می‌توان به‌صورت یک فنر در نظر گرفت، شکل ۳. هنگامی که دو اتم هیدروژن از یکدیگر دور می‌شوند، نیروهای جاذبه‌ای موجود بین الکترون‌ها و هسته‌ها، این اتم‌ها را به حالت اول باز می‌گردانند. از سوی دیگر، در اثر نزدیک شدن اتم‌ها به یکدیگر، با افزایش نیروهای دافعه میان هسته‌ها و همچنین الکترون‌ها، اتم‌های هیدروژن از یک

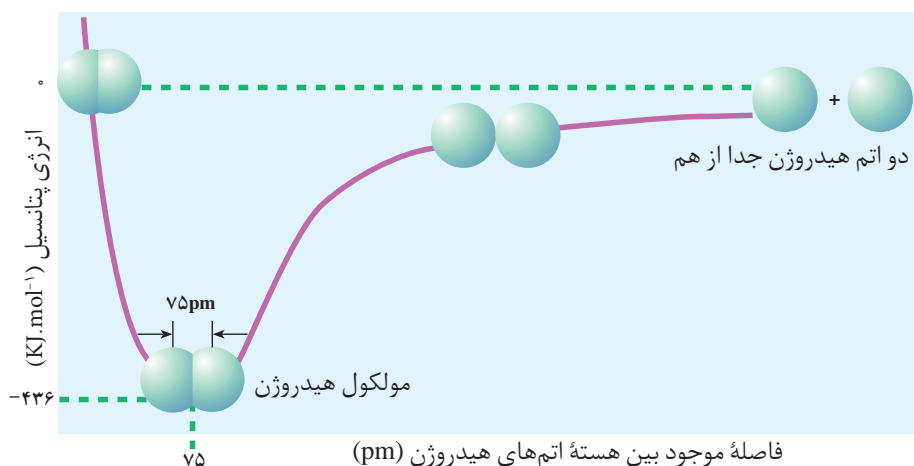
دیگر دور می‌شوند. در واقع، اتم‌های هیدروژن در امتداد محور پیوند نوسان می‌کنند، اما نوسان آنها به گونه‌ای است که همواره هسته‌های آنها در یک فاصله تعادلی از یکدیگر قرار می‌گیرند. به فاصله تعادلی میان هسته‌های دو اتم درگیر در پیوند **طول پیوند** می‌گویند.



شکل ۳ طول پیوند کووالانسی بین دو اتم حول فاصله تعادلی کم و زیاد می‌شود.

طول پیوند با انرژی نسبت عکس دارد

راه دیگری برای مطالعه پیوند کووالانسی، بررسی سطح انرژی دو اتم هیدروژن پیش و پس از تشکیل پیوند است. با دقت به شکل ۴ نگاه کنید. در کدام نقطه روی منحنی این دو اتم در کنار هم کمترین انرژی را دارند؟ این نقطه نمایان‌گر پایین‌ترین سطح انرژی است و فاصله بین هسته دو اتم هیدروژن را، پس از تشکیل پیوند کووالانسی نشان می‌دهد. این فاصله همان **فاصله تعادلی** یا **طول پیوند** است. اتم‌های هیدروژن در فاصله‌ای دورتر از فاصله تعادلی – به علت نیروهای جاذبه – تمایل دارند به یکدیگر نزدیک شوند. اما، در



طول پیوند نشان دهنده جایگاه اتم‌ها در پایین‌ترین سطح انرژی یا پایدارترین حالت است.

شکل ۴ وقتی اتم‌ها در فاصله معینی از یک دیگر قرار می‌گیرند، بین آنها پیوند تشکیل می‌شود. در این فاصله، اتم‌ها در مولکول در پایین‌ترین سطح انرژی قرار دارند. اگر اتم‌ها از این فاصله به یکدیگر نزدیک‌تر یا دورتر شوند، در وضعیتی ناپایدار قرار خواهند گرفت.

فاصله‌ای کمتر از فاصله تعادلی - به علت قوی‌تر شدن نیروهای دافعه - تمایل دارند از هم دور شوند و به وضع تعادلی برگردند.

دو اتم متصل به یکدیگر به‌طور دائم نوسان می‌کنند، اما تا زمانی که انرژی آنها در پایین‌ترین سطح خود قرار دارد، با پیوند کووالانسی به یکدیگر متصل باقی خواهند ماند. از این مشاهدات می‌توان نتیجه گرفت که اتم‌های هیدروژن متصل به یکدیگر پایدارتر از اتم‌های هیدروژن جدا از هم هستند. به عبارت دیگر سطح انرژی مولکول‌های هیدروژن پایین‌تر از سطح انرژی اتم‌های جدا از هم هیدروژن است. بنابراین هنگامی که بین آنها پیوندی به وجود می‌آید، انرژی آزاد می‌شود. جدول ۲ طول و انرژی برخی از پیوندهای کووالانسی را نشان می‌دهد. توجه کنید که با افزایش طول پیوند از انرژی پیوندها کاسته می‌شود. در واقع انرژی پیوند انرژی لازم برای شکستن پیوند کووالانسی و تولید اتم‌های جدا از هم است و همان‌طوری که ملاحظه شد با طول پیوند رابطه‌ای وارونه دارد.



جدول ۲ طول و انرژی برخی پیوندهای کووالانسی

پیوند	طول پیوند (pm)	انرژی پیوند ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)
H - H	۷۵	۴۳۶
H - C	۱۰۹	۴۱۲
H - Cl	۱۲۷	۴۳۲
H - Br	۱۴۲	۳۶۶
C - O	۱۴۳	۳۶۰
C - C	۱۵۴	۳۴۸
H - I	۱۶۱	۲۹۸
C - Cl	۱۷۷	۳۳۸
C - Br	۱۹۴	۲۷۶
Cl - Cl	۱۹۹	۲۴۳
Br - Br	۲۲۹	۱۹۳
I - I	۲۶۶	۱۵۱

پیوندهای کووالانسی قطبی و ناقطبی

اگر چه رسانایی الکتریکی آب خالص بسیار کم است، اما شباهت برخی از خواص آن، با ترکیب‌های یونی بیشتر از ترکیب‌های مولکولی مانند متان، CH_4 ، است، جدول ۳.

جدول ۳ مقایسه خواص آب و متان

ماده	مدل فضا پُر کن	فرمول مولکولی	نقطه ذوب (°C)	نقطه جوش (°C)	رفتار در میدان الکتریکی
آب		H ₂ O	۰/۰	۱۰۰/۰	جهت گیری می کند
متان		CH ₄	-۱۸۲/۶	-۱۶۱/۴	جهت گیری نمی کند

آب مانند جسمی که دارای ذره‌های باردار است، در میدان الکتریکی عکس العمل نشان می‌دهد و برخلاف ترکیب‌های مولکولی با جرم مولی مشابه مانند متان که دارای نقطه ذوب و جوش پایینی است، در گستره دمایی بزرگی همچنان به حالت مایع باقی می‌ماند، جدول ۳. این خواص را می‌توان در ادامه همین بخش با گسترش الگوی پیوند کووالانسی توضیح داد.

مولکول H₂ را در نظر بگیرید. در مولکول هیدروژن هر دو اتم درگیر پیوند یکسانند، از این رو به یک اندازه تمایل دارند که جفت الکترون به اشتراک گذاشته شده را به سوی خود بکشند. بنابراین، این دو الکترون به طور یکنواخت روی دو اتم هیدروژن و در واقع روی مولکول هیدروژن پخش شده‌اند. چنین پیوندی را **پیوند کووالانسی ناقطبی** می‌گویند. زیرا با توزیع یکنواخت الکترون‌ها روی کل مولکول در هیچ جا تراکم یا کمبود الکترون مشاهده نمی‌شود و به این ترتیب دو قطب مثبت و منفی روی مولکول به وجود نمی‌آید. همواره پیوند میان دو اتم یکسان، کووالانسی ناقطبی خواهد بود.

تعداد کمی از ترکیب‌های شیمیایی هستند که پیوندهای کاملاً **یونی** یا کاملاً کووالانسی ناقطبی مانند آنچه اشاره شد، دارند. این دو ویژگی در واقع دو انتهای یک گستره از انواع پیوند به شمار می‌آیند. پیوندهای موجود در بسیاری از ترکیب‌ها، مانند آب، تا حدودی ویژگی‌هایی از هر دو نوع پیوند را دربردارند. برای مثال، اگرچه در مولکول آب الکترون‌ها بین اتم‌های اکسیژن و هیدروژن به اشتراک گذاشته شده‌اند، اما مشاهده‌ها نشان می‌دهد که توزیع آنها بین این دو اتم یکسان نیست. در هر یک از این پیوندها، اتم اکسیژن خیلی بیشتر از اتم هیدروژن جفت الکترون پیوندی را به سوی خود جذب می‌کند. به این دلیل انتظار می‌رود که اتم اکسیژن دارای مقدار اندکی بار منفی و اتم هیدروژن نیز دارای مقدار اندکی بار مثبت باشد. چون در این جا یک اتم به قطب منفی و اتم دیگر به قطب مثبت تبدیل می‌شود، پیوند میان آن دو را **پیوند کووالانسی قطبی** می‌گویند.

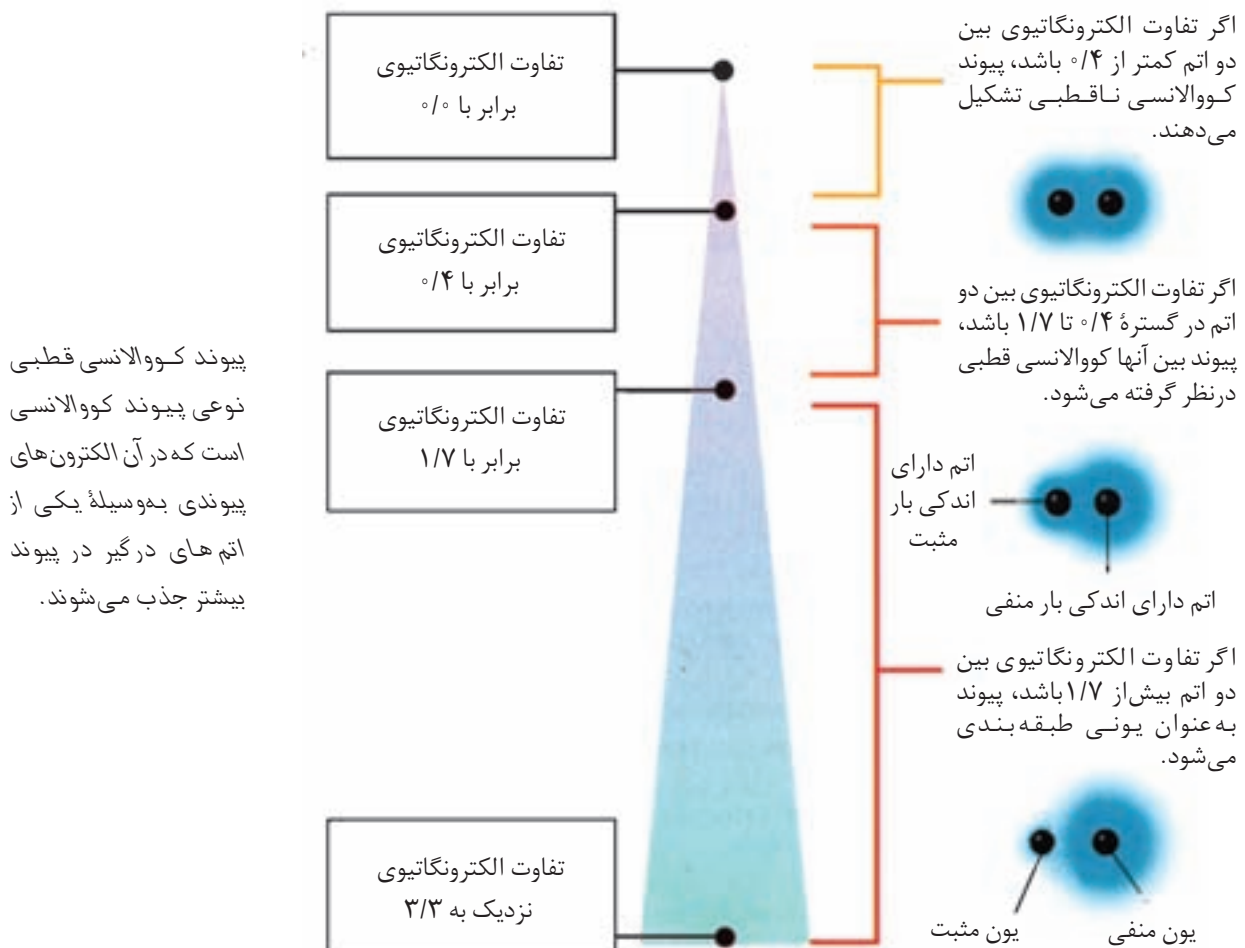
میزان قطبی بودن یک پیوند به توانایی نسبی اتم‌ها در کشیدن جفت الکترون اشتراکی به سوی خود بستگی دارد. پیش از این آموختید که به این ویژگی **الکترون‌گاتیوی** می‌گویند. با اتصال دو اتم با الکترون‌گاتیوی متفاوت، یک پیوند کووالانسی قطبی به وجود می‌آید. به طوری که قطب منفی این پیوند را اتم الکترون‌گاتیوتر تشکیل می‌دهد.

به جفت الکترون به اشتراک گذاشته شده در یک پیوند کووالانسی جفت الکترون پیوندی می‌گویند.

میزان قطبی بودن یک پیوند کووالانسی قطبی را تفاوت الکترونگاتیوی اتم‌های درگیر در آن پیوند تعیین می‌کند.

همان گونه که به یاد دارید اتم‌هایی مانند فلئوئور، نیتروژن و اکسیژن بسیار الکترونگاتیو هستند، به عبارت دیگر جفت الکترون پیوندی را بیش از اتم‌هایی مانند سدیم، منیزیم و لیتیم به سوی خود جذب می‌کنند. هر اندازه تفاوت الکترونگاتیوی بین دو اتم بیشتر باشد، میزان قطبی بودن پیوند یا به عبارت دیگر خصلت یونی پیوندی که تشکیل می‌دهند نیز بیشتر خواهد بود.

برای مثال، سزیم فلئوئورید، CsF ، را در نظر بگیرید. الکترونگاتیوی سزیم، 0.7 و الکترونگاتیوی فلئوئور، 4.0 است، شکل ۹ از بخش ۲. تفاوت الکترونگاتیوی در این مورد 3.3 است. شکل ۵ نشان می‌دهد که شباهت خواص این پیوند به خواص پیوندهای یونی بسیار بیشتر از خواص پیوندهای کووالانسی ناقطبی است. به طور کلی وقتی تفاوت الکترونگاتیوی دو اتم در یک پیوند بزرگ‌تر از 1.7 باشد، اغلب آن را در گروه پیوندهای یونی دسته‌بندی می‌کنند.



پیوند کووالانسی قطبی نوعی پیوند کووالانسی است که در آن الکترون‌های پیوندی به وسیله یکی از اتم‌های درگیر در پیوند بیشتر جذب می‌شوند.

شکل ۵ برای پیش‌بینی خواص پیوند، می‌توان از تفاوت الکترونگاتیوی اتم‌ها استفاده کرد. به طور کلی، هر اندازه تفاوت الکترونگاتیوی بیشتر باشد، خصلت یونی پیوند نیز بیشتر خواهد بود.

حال پیوندی را که بین سیلیسیم و اکسیژن به وجود می‌آید، در نظر بگیرید. در این مورد، الکترونگاتیوی اکسیژن $3/5$ و الکترونگاتیوی سیلیسیم $1/8$ و تفاوت آنها $1/7$ است. این تفاوت، پیوند سیلیسیم با اکسیژن را در آستانه پیوندهای یونی قرار می‌دهد. هنگامی که یک پیوند کووالانسی بین دو اتم با الکترونگاتیوی یکسان به وجود می‌آید، پیوند بین آنها را پیوند کووالانسی ناقطبی می‌گویند. گفتنی است که گاهی پیوند با اختلاف الکترونگاتیوی برابر $1/4$ نیز پیوند ناقطبی در نظر گرفته می‌شود. برای نمونه اغلب از قطبی بودن پیوند $C - H$ که پیوند مهمی در مطالعه ترکیب‌های آلی به شمار می‌آید، چشم‌پوشی می‌شود.

پیوند کووالانسی ناقطبی نوعی پیوند کووالانسی است که در آن الکترون‌های پیوندی به طور یکسان بین دو اتم متصل به هم توزیع شده است.

مولکول‌ها را چگونه نمایش می‌دهند؟

می‌دانید که از اتصال اتم‌ها به یکدیگر مولکول‌ها به وجود می‌آیند. برای نشان دادن چگونگی اتصال اتم‌ها به یکدیگر و نمایش مولکول حاصل، می‌توان الکترون‌های ظرفیتی شرکت کننده در تشکیل پیوند را با استفاده از نقطه نشان داد. هر اتم هیدروژن با آرایش الکترونی $1s^1$ ، تنها یک الکترون دارد. الکترون ظرفیت اتم هیدروژن را به وسیله یک نقطه نشان می‌دهند، شکل ۶.

H .



شکل ۶ اتم هیدروژن و تنها الکترون ظرفیت آن را می‌توان با حرف H و یک نقطه در کنار آن نمایش داد.



لینوس پاولینگ

(۱۹۰۱-۱۹۹۴)

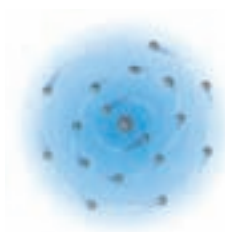
معرفی مقیاسی نسبی برای اندازه‌گیری الکترونگاتیوی عناصرها از جمله مهم‌ترین کارهای او بود.

اگر برای نمایش جفت الکترون مشترک بین دو اتم از دو نقطه استفاده کنیم، مولکول هیدروژن به شکل زیر نشان داده می‌شود.

H : H

این دو نقطه را بین دو اتم هیدروژن قرار می‌دهند تا معلوم باشد که این الکترون‌ها بین دو اتم به اشتراک گذاشته شده‌اند. هیدروژن نمی‌تواند بیش از دو الکترون مشترک داشته باشد.

اکنون به اتم کلر با آرایش الکترونی $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ توجه کنید. اتم کلر ۱۷ الکترون دارد. دو الکترون در لایه اول، ۸ الکترون در لایه دوم و ۷ الکترون موجود در بیرونی‌ترین لایه (لایه سوم) که الکترون‌های ظرفیت هستند. بنابراین، ساختار الکترونی اتم کلر را می‌توان به صورت نمایش داده شده در شکل ۷ نشان داد.



شکل ۷ یک اتم کلر ۱۷ الکترون دارد. ۷ الکترون آن الکترون‌های ظرفیت هستند. هسته اتم کلر و ۱۰ الکترون درونی آن را می‌توان با نشانه Cl نمایش داد. ۷ الکترون ظرفیت را می‌توان با قراردادن هفت نقطه پیرامون نشانه Cl مشخص کرد.



اگر دو اتم کلر داشته باشید، هر اتم کلر برای تبعیت از قاعده هشتایی تنها به یک الکترون دیگر نیاز دارد. هیچ یک از اتم‌های کلر نمی‌تواند از دیگری الکترون بگیرد. بنابراین، برای دستیابی به آرایش هشتایی حاضرند الکترون تکی خود را به اشتراک بگذارند. این اتم‌ها، آن‌طور که نشان داده شده است، با به اشتراک گذاشتن یک جفت الکترون و تشکیل یک پیوند کووالانسی تا حدود زیادی پایدار می‌شوند.

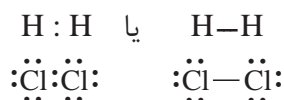


افزون بر این هر اتم کلر الکترون‌هایی دارد که در تشکیل پیوند شرکت نکرده‌اند. این جفت الکترون‌ها را **جفت الکترون‌های ناپیوندی** می‌نامند. در مولکول Cl_2 هر اتم کلر چند جفت الکترون ناپیوندی دارد؟

کاربرد این جفت نقطه‌ها برای نشان دادن جفت الکترون‌های پیوندی و ناپیوندی، تشخیص آرایش هشتایی پایدار را برای هر اتم، آسان می‌کند. اگر سمت چپ، بالا، سمت راست و پایین نشانه هر اتم به وسیله یک جفت الکترون پیوندی یا ناپیوندی احاطه شده باشد، اتم مورد نظر (به استثنای هیدروژن) دارای آرایش هشتایی پایدار است.

هنگام رسم ساختارهای الکترون - نقطه ای می‌توان جفت نقطه‌ای را که نمایان‌گر جفت الکترون پیوندی یا پیوند کووالانسی است با یک خط کوتاه نشان داد. این خط کوتاه نمایان‌گر یک پیوند ساده (یگانه) است.

پیوند ساده (یگانه)
نتیجه به اشتراک گذاشتن
یک جفت الکترون بین دو
اتم است.



به این شیوه نمایش **مدل الکترون - نقطه** یا **ساختار لوویس** می‌گویند. همان‌گونه که گفته شد در ساختارهای لوویس هسته و الکترون‌های لایه‌های درونی به وسیله نماد شیمیایی عنصر و پیوندهای کووالانسی به وسیله جفت نقطه‌ها یا خط‌های کوتاه نشان داده می‌شوند. جفت الکترون‌های ناپیوندی را به وسیله جفت نقطه‌هایی در کنار نشانه شیمیایی عنصر نمایش می‌دهند.

برای رسم ساختارهای لوویس باید:

۱- تعداد کل الکترون‌های ظرفیت را بشمارید. برای این کار الکترون‌های ظرفیت

اتم‌ها را با هم جمع کنید.



برای مثال، HCl را در نظر بگیرید. هیدروژن تنها یک الکترون ظرفیت دارد. کلر دارای ۷ الکترون ظرفیت است.

$$\text{تعداد کل الکترون های ظرفیت: } 1 + 7 = 8$$

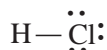
۲- نشانه شیمیایی اتم ها را به ترتیبی بنویسید که نشان دهد چگونه به یک دیگر متصل شده اند. الکترون های ظرفیت را با نقطه نشان دهید. جفت نقطه ها را به گونه ای توزیع کنید که از قاعده هشتایی تبعیت شده باشد، مگر در مورد هیدروژن که می تواند حداکثر دو الکترون داشته باشد.



۳- تعداد الکترون های به کار رفته در ساختار لوویس را با تعداد الکترون های موجود در مرحله ۱ مقایسه کنید.

$$\text{تعداد کل الکترون های نشان داده شده: } 2 + 6 = 8$$

۴- هر جفت نقطه ای را که نمایان گر یک پیوند هستند با یک خط کوتاه عوض کنید.



۵- اطمینان حاصل کنید که بجز هیدروژن در رسم آرایش الکترونی تمام اتم های مولکول یاد شده از قاعده هشتایی تبعیت شده است.

ساختارهای لوویس برای مولکول های چند اتمی

وقتی ساختار لوویس مولکولی را رسم می کنیم که بیش از دو اتم دارد، ابتدا باید درباره چگونگی آرایش اتم های آن تصمیم بگیریم. برای این کار همواره راهنمایی های زیر را در نظر داشته باشید:

- اتم های هیدروژن و هالوژن تنها با یک اتم دیگر پیوند می دهند و معمولاً در پیرامون اتم مرکزی قرار می گیرند.
- معمولاً اتمی که الکترون گاتیوی آن از همه کمتر است **اتم مرکزی** در نظر گرفته می شود.
- وقتی در مولکولی از یک عنصر بیش از یک اتم وجود داشته باشد، این اتم ها اغلب در اطراف اتم مرکزی قرار می گیرند.

نمونه حل شده

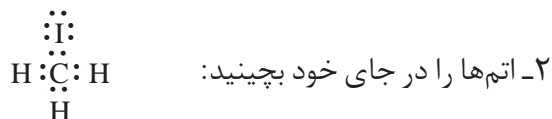
ساختار لوویس یدومتان، CH_3I ، را رسم کنید.

۱- تعداد کل الکترون های ظرفیت را حساب کنید.

$$1 \text{ اتم C با } 4 \text{ الکترون} \quad 1 \times 4 = 4$$

$$3 \text{ اتم H با } 1 \text{ الکترون} \quad 3 \times 1 = 3$$

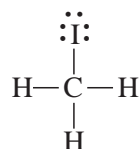
۱ اتم I با ۷ الکترون $1 \times 7 = 7$
در مجموع: ۱۴ الکترون ظرفیت



۳- تعداد الکترون‌های به کار رفته را با تعداد الکترون‌های ظرفیت مقایسه کنید.
هر ۱۴ الکترون ظرفیت به کار رفته است.

$$7 \times 2 = 14 \text{ الکترون}$$

۴- هر دو نقطه مشترک بین دو اتم را با خطی کوتاه نمایش دهید.



۵- مطمئن شوید که بجز برای هیدروژن برای اتم‌های دیگر قاعده هشتایی رعایت شده است.



خود را بیازمایید

ساختار لوویس هیدروژن برمید، HBr؛ دی کلرومتان، CH_2Cl_2 ؛ و متانول، CH_3OH ، را رسم کنید.

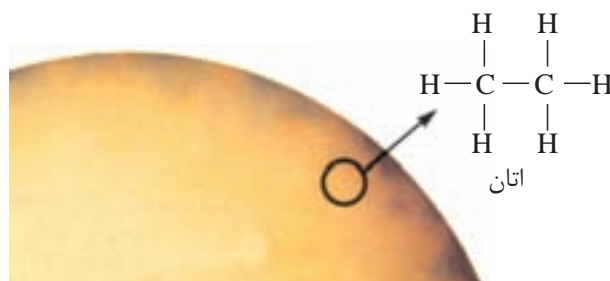


دو اتم می‌توانند بیش از یک جفت الکترون به اشتراک بگذارند

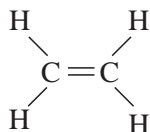
از آن‌جا که کربن در بیرونی‌ترین لایه الکترونی خود چهار الکترون ظرفیت دارد، با رعایت قاعده هشتایی، حداکثر می‌تواند با چهار اتم پیوند تشکیل دهد. در مولکول اتان، C_2H_6 ، هر اتم کربن به یک اتم کربن دیگر و سه اتم هیدروژن متصل است، شکل ۸. بین هر اتم هیدروژن و کربن و همچنین بین دو اتم کربن یک جفت الکترون مشترک وجود دارد.

پیوند دو گانه پیوند کووالانسی تشکیل شده از به اشتراک گذاشتن دو جفت الکترون بین دو اتم است.

شکل ۸ ستاره شناسان گمان می‌کنند که سطح بزرگ‌ترین ماه سیاره کیوان (زحل) از اتان مایع، C_2H_6 ، پوشیده شده است.

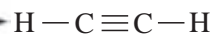


اتم‌های کربن، نیتروژن، اکسیژن و گاهی گوگرد می‌توانند با خود یا اتم‌های دیگر، با رعایت قاعدهٔ هشتایی، بیش از یک جفت الکترون به اشتراک بگذارند. برای مثال، اگر دو اتم کربن بین خود به‌جای یک جفت الکترون دو جفت الکترون (در کل چهار الکترون) به اشتراک بگذارند، یک پیوند کووالانسی دوگانه یا **پیوند دوگانه** تشکیل می‌شود. مولکول اِتن شامل دو اتم کربن و چهار اتم هیدروژن است. در این مولکول دو اتم کربن با پیوند دوگانه به یکدیگر متصل شده‌اند، شکل ۹.



شکل ۹ ساختار لوویس مولکول اتن

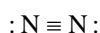
دو اتم کربن همچنین می‌توانند سه جفت الکترون به اشتراک بگذارند. مولکولی که از دو اتم کربن با پیوند سه‌گانه و دو اتم هیدروژن تشکیل شده است، **اِتن** نامیده می‌شود. شکل ۱۰.



پیوند سه‌گانه پیوند کووالانسی تشکیل شده از به اشتراک گذاشتن سه جفت الکترون بین دو اتم است.

شکل ۱۰ غار شناس‌ها اغلب از چراغ‌های کاربردی استفاده می‌کنند. در این چراغ‌ها کلسیم کاربید، CaC_2 ، با آب واکنش می‌دهد و گاز اِتن (استیلن) تولید می‌کند.

اگر چه نام‌های اتان، اِتن و اِتن چندان متفاوت به‌نظر نمی‌رسد، ولی ساختار لوویس، خواص و کاربردهای آنها متفاوت است. نیتروژن نیز می‌تواند پیوند سه‌گانه تشکیل دهد. در مولکول‌های دو اتمی سازندهٔ گاز نیتروژن، N_2 ، میان دو اتم نیتروژن پیوند سه‌گانه وجود دارد.



در هنگام رسم ساختارهای لوویس اگر متصل کردن اتم‌ها به یکدیگر با پیوندهای یگانه، ساختار لوویس مناسبی به دست ندهد، مولکول باید پیوندهای چندگانه داشته باشد.

نمونه حل شده

ساختار لوویس فرمالدهید، CH_2O ، را رسم کنید.

۱- تعداد کل الکترون‌های ظرفیت را حساب کنید:

۲ اتم H با ۱ الکترون = ۲

۱ اتم C با ۴ الکترون = ۴

۱ اتم O با ۶ الکترون = ۶

در مجموع: ۱۲ الکترون ظرفیت

۲- اتم‌ها را کنار هم قرار دهید. برای این کار از روشی استفاده کنید که پیش از این

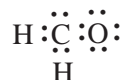
برای تعیین اتم مرکزی داده شده است.

کربن در میانه ساختار قرار می‌گیرد. اتم‌های دیگر را در اطراف اتم کربن قرار دهید.

به نظر می‌رسد که قراردادن الکترون‌های پیوندی و ناپیوندی کار ساده‌ای باشد. زیرا در این

ساختار لوویس، برای هریک از دو اتم O و C قاعده هشتایی رعایت شده است. اما لازم است

که درستی این ساختار را بررسی کنیم.



۳- تعداد الکترون‌های به کار رفته را با تعداد الکترون‌های ظرفیت مقایسه کنید.

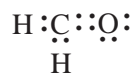
الکترون‌های به کار رفته: ۱۴ الکترون‌های ظرفیت: ۱۲

۴- حال بدون آن که قاعده هشتایی نقض شود، باید دو الکترون را حذف کنیم. برای

این کار، با حذف دو الکترون ناپیوندی از کربن و اکسیژن و با تشکیل یک پیوند کووالانسی

دوگانه بین کربن و اکسیژن، مشکل حل خواهد شد. در این ساختار ضمن رعایت قاعده

هشتایی، تعداد الکترون‌های به کار رفته با تعداد الکترون‌های ظرفیت برابر است.



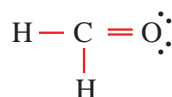
• الکترون‌های به کار رفته: ۱۲

• الکترون‌های ظرفیت: ۱۲

• کربن دو پیوند ساده و یک پیوند دوگانه و در مجموع چهار پیوند کووالانسی تشکیل

می‌دهد.

۵- به جای هر جفت الکترون موجود میان دو اتم یک خط کوتاه قرار دهید.



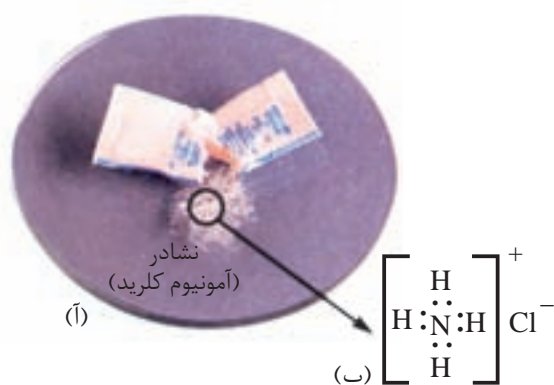
در این جا، پیوند دوگانه نمایان گر چهار الکترون مشترک بین کربن و اکسیژن است.

Y A

در ابتدا، شیمی‌دان‌ها تصور می‌کردند که این نوع مولکول مانند سیم گیتار به جلو و عقب می‌رود و بین ساختارهای گوناگون نوسان می‌کند. اما اکنون به این مولکول به گونه‌ای می‌نگرند که گویی مولکول، ساختاری میانگین این دو ساختار رزونانسی دارد. اندازه‌گیری‌های انجام شده نیز نشان می‌دهد که در مولکول O_3 ، طول پیوندهای O-O یکسان و میانگین طول پیوندهای یگانه و دوگانه اکسیژن - اکسیژن است. در ضمن سطح انرژی مولکول واقعی همواره پایین‌تر از ساختارهای لوویس جداگانه‌ای است که برای آن رسم می‌شود.

پیوند داتیو نوع خاصی از پیوند کووالانسی است

کاتیون آمونیوم که یون چند اتمی سازنده آمونیوم کلرید (نشاردر) است، شکل ۱۱، از اتصال یک مولکول آمونیاک و یک یون هیدروژن به وجود می‌آید. در این مورد، بین یون هیدروژن و جفت الکترون ناپیوندی اتم نیتروژن در مولکول آمونیاک یک پیوند کووالانسی تشکیل شده است.



شکل ۱۱ آ. وقتی یون هیدروژن با یک مولکول آمونیاک ترکیب می‌شود، کاتیون آمونیوم به وجود می‌آید. ب. گروه‌های موجود در اطراف ساختار لوویس یک یون چند اتمی، مانند یون آمونیوم، نشان می‌دهد که بار مثبت به اتم خاصی تعلق ندارد بلکه به کل اتم‌ها متعلق است.

برخلاف پیوندهای یگانه دیگری که در آنها هر اتم یک الکترون به اشتراک می‌گذارد، در این جا اتم نیتروژن هر دو الکترون پیوندی را خود به اشتراک می‌گذارد. این نوع خاص از پیوند را **پیوند کووالانسی کوئوردینانسی** یا **پیوند داتیو** می‌نامند. با وجود آن که برای تشکیل این پیوند هر دو الکترون مشترک به نیتروژن تعلق دارد، وقتی پیوند کووالانسی کوئوردینانسی تشکیل شد، این نوع پیوند از پیوندهای کووالانسی دیگر در کاتیون آمونیوم قابل تشخیص نیست.

پیوند داتیو هنگامی به وجود می‌آید که یکی از دو اتم تشکیل دهنده پیوند دست کم یک جفت الکترون ناپیوندی و دیگری دست کم یک اوربیتال خالی داشته باشد.

نام‌گذاری ترکیب‌های مولکولی

اگر چه برای نوشتن ساختارهای لوویس ترکیب‌های مولکولی چندین مرحله وجود دارد، اما نام‌گذاری یک ترکیب مولکولی به‌ویژه در مورد ترکیب‌هایی که تنها از دو عنصر ساخته شده‌اند به نسبت ساده است. این ترکیب‌ها را می‌توان به یکی از دو روش زیر نام‌گذاری کرد. این دو روش شبیه روش‌هایی هستند که در مورد نام‌گذاری ترکیب‌های یونی در بخش ۳ شرح داده شد.

جدول ۴ پیشوندهای رایج در نام‌گذاری ترکیب‌های شیمیایی

پیشوند	تعداد اتم‌ها
مونو	۱
دی	۲
تری	۳
تترا	۴
پنتا	۵
هگزا	۶
هپتا	۷
اوکتا	۸
نونا	۹
دکا	۱۰

نام‌گذاری با استفاده از پیشوند، ریشه نام عنصر و پسوند

شیمی‌دان‌ها اغلب ترکیب‌های مولکولی را به کمک پیشوندهای معرفی شده در جدول ۴ نام‌گذاری می‌کنند. پیشوند و پسوند معمولاً به ریشه نام عنصرهای موجود در ترکیب افزوده می‌شود. به نام ترکیب زیر دقت کنید:



دی‌نیتروژن تترا اکسید

حال سعی کنید با رعایت این الگو نام ترکیب‌های SO_2 و CO_2 ، NO_2 ، SiCl_4 ، N_2O_3 را حدس بزنید. در این روش معمولاً نخست نام عنصری گفته می‌شود که الکترونگاتیوی آن کمتر است. اگر فرمول مولکول موردنظر تنها یک اتم از عنصر اول داشته باشد، از به کار بردن پیشوند مونو پیش از نام این عنصر چشم‌پوشی می‌شود. درحالی که برای اکسیژن به ریشه اوکسی پسوند «ید» افزوده و برای نشان دادن تعداد اتم‌های اکسیژن، از پیشوندهای معرفی شده در جدول ۴ استفاده شده است.

نام‌گذاری با استفاده از عدد اکسایش

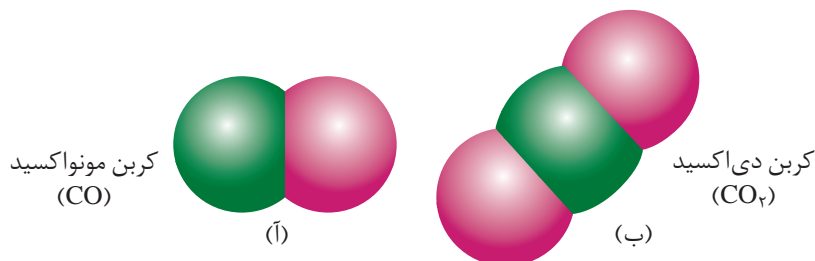
دو اتمی که با پیوند کووالانسی قطبی به یکدیگر متصل شده‌اند، مانند یون‌ها بار کامل مثبت یا منفی ندارند، ولی اغلب توزیع الکترون‌ها بین آن دو اتم یکسان نیست. اتمی که الکترونگاتیوتر است، الکترون‌های مشترک را بیشتر به‌سوی خود جذب می‌کند و حامل مقدار جزئی بار منفی می‌شود. در مقابل اتمی که الکترونگاتیوی آن کمتر است، مقدار جزئی بار مثبت پیدا می‌کند. در این موارد می‌توان فرض کرد که بار الکتریکی به‌طور کامل روی اتم‌ها منتقل شده است. در این صورت به این بار الکتریکی ظاهری نسبت داده شده به هر اتم عدد اکسایش آن اتم می‌گویند. از عدد اکسایش می‌توان در نام‌گذاری ترکیب‌های مولکولی استفاده کرد.

تعیین عددهای اکسایش از روی فرمول شیمیایی

وقتی بیشتر اتم‌ها با اکسیژن پیوند برقرار می‌کنند، اتم اکسیژن نسبت به اتم‌های دیگر

جفت الکترون پیوندی را با شدت بیشتری به سمت خود جذب می کند. به این ترتیب، این دو الکترون همراه با بار منفی خود، بیشتر وقت خود را در نزدیکی اتم اکسیژن می گذرانند. در نتیجه، به اکسیژن معمولاً عدد اکسایش ۲- نسبت داده می شود. از طرف دیگر، الکترونگاتیوی اتم هیدروژن زیاد نیست. از این رو، الکترونی که این اتم به هنگام تشکیل پیوند در اختیار می گذارد، معمولاً بیشتر وقت خود را در اطراف اتم الکترونگاتیوتر می گذراند. بنابراین، به هیدروژن معمولاً عدد اکسایش ۱+ نسبت داده می شود. برای هالوژن ها نیز که بسیار الکترونگاتیو هستند معمولاً عدد اکسایش ۱- در نظر گرفته می شود. اتم های دیگر نیز تمایل دارند عددهای اکسایشی داشته باشند که با نوع و میزان بار آنها در ترکیب های یونی شباهت داشته باشد. این اتم ها معمولاً برای رسیدن به آرایش هشتایی کامل، اغلب به گرفتن یا از دست دادن همین تعداد الکترون نیاز دارند. عنصری که الکترونگاتیوی آن بیشتر است، دارای عدد اکسایش منفی خواهد بود. برای مثال، در آمونیاک، NH_3 ، عدد اکسایش N، ۳- و عدد اکسایش H، ۱+ است.

پیش از آن که عددهای رومی را در نام گذاری یک ترکیب مولکولی به کار گیرید، باید عدد اکسایش هر اتم را تعیین کنید. این کار ممکن است کمی دشوار باشد، زیرا برخی عناصر، بسته به دیگر اتم های موجود در ترکیب، می توانند بیش از یک عدد اکسایش داشته باشند. جمع جبری عددهای اکسایش در یک ترکیب خنثی باید برابر صفر باشد. در مورد یک یون چند اتمی، جمع عددهای اکسایش باید برابر بار یون باشد. با استفاده از این اطلاعات و قواعد تقریبی موجود در مورد عددهای اکسایش هیدروژن، اکسیژن و هالوژن ها، می توانید عددهای اکسایش بیشتر اتم ها را در یک ترکیب یا یک یون چند اتمی پیش بینی کنید. به عنوان مثال، مولکول های CO و CO_2 ، نشان داده شده در شکل ۱۲ را در نظر بگیرید. با استفاده از عددهای رومی برای نمایش عددهای اکسایش، CO را باید کربن (II) اکسید و CO_2 را کربن (IV) اکسید نامید. اما مانند بسیاری از ترکیب های کووالانسی متداول، CO و CO_2 را معمولاً کربن مونواکسید و کربن دی اکسید می نامند.



شکل ۱۲ آ. در کربن مونواکسید اگر عدد اکسایش اتم اکسیژن ۲- در نظر گرفته شود، عدد اکسایش اتم کربن باید ۲+ باشد.
ب. در کربن دی اکسید عدد اکسایش اکسیژن ۲- است. اما، چون در هر مولکول دو اتم اکسیژن وجود دارد، اتم کربن باید دارای عدد اکسایش ۴+ باشد.

۱- با استفاده از پیشوندهای مناسب، ترکیب‌های مولکولی زیر را نام‌گذاری کنید.



۲- عدد اکسایش اتم مرکزی ترکیب‌های زیر را مشخص کنید:

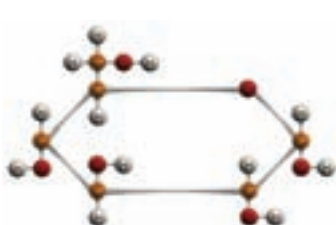


۳- فرمول شیمیایی ترکیب‌های زیر را بنویسید:

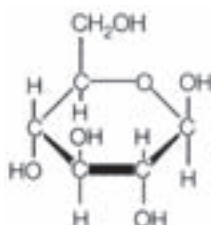
(آ) دی نیتروژن تترااکسید (ب) گوگرد هگزا فلوئورید (پ) فسفر پنتابرمید

چگونه فرمول‌های شیمیایی را نمایش می‌دهند؟

تاکنون با ساختار لوویس و فرمول شیمیایی برای نمایش یک مولکول آشنا شدید. در واقع، شیمی‌دان‌ها می‌توانند فرمول یک ترکیب معین را به شیوه‌های گوناگونی نشان دهند. ساده‌ترین فرمول که شامل نماد شیمیایی عنصرها همراه با زیروندهایی است که کوچک‌ترین نسبت صحیح اتم‌ها را مشخص می‌کند **فرمول تجربی** نامیده می‌شود. در شکل ۱۳ مولکول گلوکوز به چند شیوه متفاوت نشان داده شده است. به‌طوری که در این شکل ملاحظه می‌کنید فرمول تجربی گلوکوز CH_۲O و فرمول مولکولی آن C_۶H_{۱۲}O_۶ است.



مدل گلوله و میله



فرمول ساختاری گسترده

فرمول مولکولی C_۶H_{۱۲}O_۶

فرمول تجربی CH_۲O

فرمول مولکولی نوع و تعداد واقعی اتم‌ها را در مولکول‌های سازنده یک ترکیب مولکولی به دست می‌دهد.

شکل ۱۳ گلوکوز را می‌توان به چند شیوه متفاوت نمایش داد.

فرمول مولکولی

فرمول تجربی افزون بر نوع و تعداد عنصرهای سازنده مولکول، ساده‌ترین نسبت اتم‌های موجود در آن را مشخص می‌کند اما اطلاعاتی دربارهٔ تعداد اتم‌های موجود از هر عنصر در اختیار ما نمی‌گذارد. برای به دست آوردن این اطلاعات به فرمول مولکولی نیاز دارید. فرمول مولکولی، با توجه به نوع اتم‌ها و تعداد آنها، تصویر بهتری از مولکول به دست می‌دهد.




برای بعضی از ترکیب‌ها، فرمول تجربی و فرمول مولکولی یکسان است. آب، H_2O از این جمله است. اما، در مورد بسیاری از ترکیب‌ها، فرمول تجربی و فرمول مولکولی تفاوت دارند. سه ترکیب مولکولی نشان داده شده در جدول ۵ را در نظر بگیرید. ترکیب اول سمی و سرطان‌زا است. ترکیب دوم عامل ترش بودن سرکه است. ترکیب سوم نوعی قند ساده است. هر سه ترکیب دارای فرمول تجربی یکسان، CH_2O ، هستند، اما به علت متفاوت بودن فرمول مولکولی آنها، هر یک خواص بسیار متفاوتی از خود نشان می‌دهند. توجه کنید که در جدول ۵ فرمول مولکولی در هر مورد مضربی از فرمول تجربی است.

(فرمول تجربی) \times = فرمول مولکولی

\times در این رابطه یک عدد صحیح است. \times برای فرمالدهید، برابر ۱، برای استیک اسید، برابر ۲ و برای گلوکوز برابر ۶ است. اگر جرم فرمول تجربی و جرم فرمول مولکولی یک ترکیب را بدانید، تعیین عددی که باید در فرمول تجربی ضرب شود تا فرمول مولکولی آن به دست آید، آسان خواهد بود.

$$\frac{\text{جرم فرمول مولکولی}}{\text{جرم فرمول تجربی}} = \times$$

جدول ۵ مقایسه فرمول تجربی و فرمول مولکولی

ترکیب	فرمول تجربی	فرمول مولکولی	جرم مولی $g \cdot mol^{-1}$	طرز نمایش
فرمالدهید	CH_2O	CH_2O (یک برابر فرمول تجربی)	۳۰/۰۳	
استیک اسید	CH_2O	$C_2H_4O_2$ (دو برابر فرمول تجربی)	۶۰/۰۶	
گلوکوز	CH_2O	$C_6H_{12}O_6$ (شش برابر فرمول تجربی)	۱۸۰/۱۸	

فرمول ساختاری

از روی فرمول مولکولی به این نکته پی می‌برید که در یک ترکیب چه نوع اتم‌هایی وجود دارند و تعداد هر یک از آنها چه قدر است. اما، برای آن که بدانید این اتم‌ها چگونه به یکدیگر متصل شده‌اند، به **فرمول ساختاری** نیاز دارید. فرمول ساختاری اطلاعات زیادی درباره موقعیت اتم‌ها در مولکول در اختیار می‌گذارد. با فرمول ساختاری در شیمی ۱ نیز آشنا شده‌اید.

فرمول ساختاری افزون بر نوع، تعداد عناصر و تعداد اتم‌های هر عنصر، شیوه اتصال اتم‌ها به یکدیگر را در مولکول نشان می‌دهد.

فرمول‌های تجربی، مولکولی و ساختاری دو مولکول نشان داده شده در جدول ۶ را با یکدیگر مقایسه کنید. نوع و تعداد اتم‌ها در هر دو ترکیب یکسان است. تنها تفاوت در چگونگی آرایش آنهاست. همین تفاوت کوچک ساختاری موجب می‌شود که خواص شیمیایی آنها بسیار متفاوت باشد. دی‌متیل اتر گازی است به‌عنوان پیش‌رانه در افشانه‌ها و گاز یخچال به کار می‌رود، در حالی که اتانول مایعی است که به‌عنوان حلال و ماده اولیه در صنایع شیمیایی کاربرد فراوان دارد. فرمول ساختاری مانند ساختار لوویس است، با این تفاوت که جفت الکترون‌های ناپیوندی در آن نشان داده نمی‌شود. در این فرمول خط کوتاه نمایان گر یک پیوند ساده (یگانه) بین دو اتم است.

جدول ۶ مقایسه اتانول و دی‌متیل اتر

ترکیب	فرمول تجربی	فرمول مولکولی	فرمول ساختاری	نقطه جوش (°C)	چگالی (g.cm ⁻³)
اتانول	C ₂ H ₆ O	C ₂ H ₆ O	$\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$	۷۸/۰	۰/۸۱۶
دی‌متیل اتر	C ₂ H ₆ O	C ₂ H ₆ O	$\begin{array}{c} \text{H} & & \text{H} \\ & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{C}-\text{H} \\ & & \\ \text{H} & & \text{H} \end{array}$	-۲۴/۵	۰/۶۶۱

به ترکیب‌هایی که فرمول مولکولی یکسانی دارند اما فرمول ساختاری آنها با یکدیگر تفاوت می‌کند **ایزومر** یا **هم‌پار** می‌گویند. اتانول و دی‌متیل اتر ایزومر یکدیگرند.

چگونه می‌توان شکل هندسی مولکول‌ها را پیش‌بینی کرد؟

اگرچه تاکنون مطالب زیادی درباره ساختار مولکول‌ها آموخته‌اید، اما، جهت‌گیری سه بعدی یا آرایش هندسی مولکول‌ها را مطالعه نکرده‌اید. شکل هندسی مولکول عامل بسیار مهمی در تعیین خواص شیمیایی آن است.

مولکول‌هایی که فرمول مولکولی به نسبت ساده‌ای دارند، شکل هندسی آنها هم ساده است. در مورد مولکول‌های دو اتمی مانند مولکول هیدروژن تنها یک شکل امکان‌پذیر است، شکل ۱۴. اما، در مورد مولکول‌هایی که بیش از دو اتم دارند، شکل هندسی مولکول پیچیده‌تر است. در چنین مواردی به اطلاعاتی بیش از فرمول مولکولی نیاز است.



شکل ۱۴ مولکول‌های دو اتمی مانند H₂ تنها یک شکل دارند.

معمولاً بین فرمول مولکولی یک ترکیب و شکل هندسی آن رابطه روشنی وجود ندارد. برای مثال، دو مولکول کربن دی‌اکسید، CO₂، و گوگرد دی‌اکسید، SO₂، را در نظر بگیرید.

در هر دو ترکیب سه اتم وجود دارد که دو اتم آن اکسیژن است. اما، همان طور که در شکل ۱۵ نشان داده شده است، این دو ترکیب شکل های هندسی متفاوتی دارند. چرا با وجود تشابه از نظر تعداد اتم ها، مولکول CO_2 خطی و مولکول SO_2 خمیده است؟ پاسخ را باید در آرایش الکترون های ظرفیت آنها، به ویژه جفت الکترون های ناپیوندی جست و جو کرد.



شکل ۱۵ اگرچه تعداد اتم ها در کربن دی اکسید و گوگرد دی اکسید یکسان است، اما شکل های متفاوتی دارند.

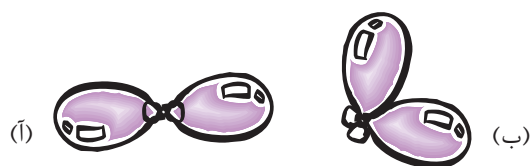
VSEPR که کوتاه شده عبارت زیر است:
Valence Shell Electron Pairs Repulsion
مدلی برای پیش بینی شکل مولکول است، با این فرض که قلمروهای الکترونی پیرامون اتم مرکزی، تمایل دارند تا آن جا که ممکن است از یکدیگر دور شوند.

یکی از نظریه هایی که برای پیش بینی شکل هندسی مولکول ها ارایه شده است، نظریه نیروی دافعه جفت الکترون های لایه ظرفیت (VSEPR) است. مطابق با این نظریه، نیروهای دافعه الکتروستاتیک موجود بین جفت الکترون های پیوندی یا ناپیوندی موجود در یک مولکول، موجب می شود که این جفت الکترون ها تا آن جا که امکان داشته باشد، از یکدیگر فاصله بگیرند. این جهت گیری جفت الکترون ها به گونه ای است که پایدارترین آرایش هندسی را برای مولکول فراهم می کند. آرایش ویژه ای از اتم ها که سبب می شود میان جفت الکترون های پیوندی و ناپیوندی مولکول کمترین دافعه وجود داشته باشد. در این روش برای سادگی به جای جفت الکترون های پیوندی و ناپیوندی از واژه **قلمرو الکترونی** استفاده می شود. قلمرو الکترونی مفهومی کلی تر است و به ناحیه ای در اطراف اتم مرکزی گفته می شود که الکترون ها - صرف نظر از تعداد - در آن جا حضور دارند. در این تعریف پیوندهای یگانه، دو گانه یا سه گانه، یک قلمرو به شمار می آید.

آزمایش کنید

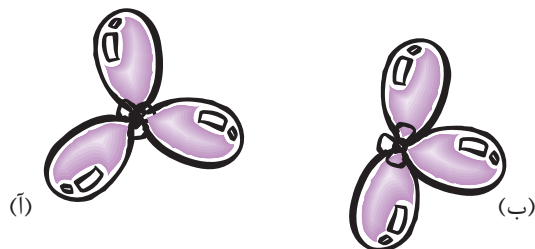
برای نشان دادن شکل هندسی مولکول ها می توان از بادکنک های باد شده استفاده کرد. چند بادکنک تهیه کنید و آزمایش های زیر را انجام دهید.

۱- ابتدا دو بادکنک کوچک را به یک اندازه باد کنید. سپس با استفاده از نخ سربادکنک ها را به یکدیگر ببندید به طوری که تا حد امکان آزاد اما به هم نزدیک باشند. بادکنک ها را روی پارچه پشمی بکشید تا بار الکتریکی پیدا کنند. سپس آنها را روی میز رها کنید تا آرایش ثابتی به خود بگیرند. بادکنک ها کدام یک از دو آرایش صفحه بعد را به خود خواهند گرفت؟



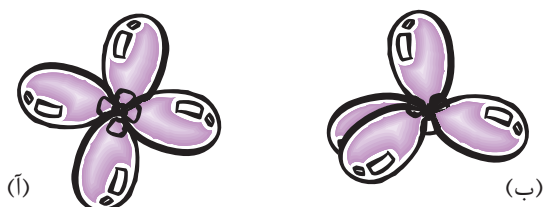
۲- اگر در آزمایش بالا از سه بادکنک استفاده کنید، کدام آرایش هندسی زیر برای آنها

مناسبتر است؟



۳- اگر چهار بادکنک را به یکدیگر گره بزنید، بادکنک‌ها کدامیک از آرایش‌های زیر

را اختیار می‌کنند؟



چگونه شکل هندسی مولکول‌ها از روی ساختارهای لوویس آنها تعیین می‌شود؟

برای این کار به شیوه زیر عمل می‌شود.

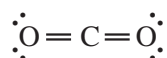
۱- ساختار لوویس مولکول را رسم کنید.

۲- تعداد قلمروهای الکترونی در اطراف اتم مرکزی را معین کنید.

۳- آرایش هندسی مناسب را براساس تعداد قلمروهای الکترونی نتیجه بگیرید.

▲ دو قلمرو الکترونی: ساختار خطی

مولکول CO_2 را که دارای ساختار لوویس زیر است، در نظر بگیرید:



دو قلمرو الکترونی در اطراف اتم مرکزی (C) وجود دارد.

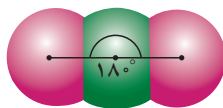
تنها جهت‌گیری ممکن که می‌تواند دو قلمرو الکترونی اطراف اتم کربن را تا حد

ممکن دور از یکدیگر قرار دهد، آرایش خطی است، شکل ۱۶.

به زاویه‌ای که سه اتم متصل به هم با یکدیگر می‌سازند، زاویه پیوند می‌گویند. این زاویه حداکثر 180° است.



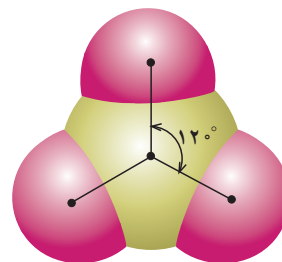
آیا خالق آفرینش نظم
چینش ذره‌های بزرگ را
همانند ذره‌های ریز قرار
داده است؟



شکل ۱۶ مطابق نظریه VSEPR، مولکولی که دارای دو قلمرو الکترونی در اطراف اتم مرکزی است، آن گونه که برای کربن دی‌اکسید نشان داده شده است، آرایش خطی به خود می‌گیرد. آرایشی که در آن زاویه پیوند 180° است.

▲ سه قلمرو الکترونی: ساختار سه ضلعی مسطح
اکنون ساختار لوویس گوگرد تری‌اکسید، SO_3 ، را در نظر بگیرید. $\text{:}\ddot{\text{O}}=\text{S}-\ddot{\text{O}}\text{:}$

در SO_3 ، سه قلمرو الکترونی در اطراف اتم مرکزی (S) وجود دارد. آرایش هندسی این مولکول در شکل ۱۷ نشان داده شده است. این شکل را آرایش سه ضلعی مسطح می‌نامند.



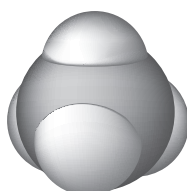
شکل ۱۷ در مولکولی مانند SO_3 ، وقتی اتم مرکزی به وسیله سه اتم دیگر احاطه شده باشد و همه جفت الکترون‌ها از نوع پیوندی باشند، آرایش هندسی مولکول به صورت سه ضلعی مسطح است. زاویه پیوند در این آرایش 120° است.

▲ چهار قلمرو الکترونی: ساختار چهاروجهی

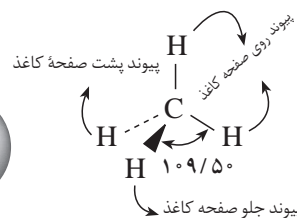
وضعیت مولکول‌هایی که مانند متان، CH_4 ، چهار قلمرو الکترونی دارند، قدری پیچیده‌تر است، زیرا به جای یک شکل مسطح که بتوان آن را روی صفحه کاغذ نمایش داد، دارای یک شکل سه بعدی موسوم به **چهاروجهی** است. چند شیوه نمایش متفاوت مولکول متان در شکل ۱۸ نشان داده شده است. این شکل را می‌توان به صورت سه پایه‌ای در نظر گرفت که پایه چهارمی به سمت بالا بر آن سوار شده است. در این نوع آرایش، جفت‌های الکترونی با یکدیگر زاویه‌ای برابر 109.5° دارند.



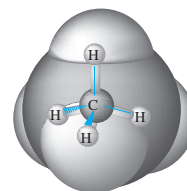
(آ)



(ب)



(پ)



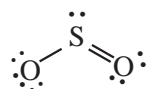
(ت)

شکل ۱۸

(آ) مدل گلوله (نمادی برای نمایش اتم) و میله (نمادی برای نمایش پیوند کووالانسی)
(ب) مدل فضا پرکن
(پ) مدل خط چین (نمادی برای نمایش جهت گیری اتم - دور از بیننده) و گوه (نمادی برای نمایش جهت گیری اتم - نزدیک از بیننده)
(ت) نمایش مولکول متان با ادغام هر سه مدل



۴- در صورت وجود جفت الکترون‌های ناپیوندی زوایای پیوند را طوری تنظیم کنید تا برای قلمروهای الکترونی مربوط به جفت‌های ناپیوندی فضای بزرگ‌تری باز شود. اتم گوگرد در مولکول SO_2 ، را در نظر بگیرید.



حول این اتم سه قلمرو الکترونی وجود دارد. از این رو ساختار آن در گروه سه ضلعی مسطح قرار می‌گیرد. در این ساختار قلمروهای الکترونی باهم زاویه 120° دارند. اما، یک جفت الکترون ناپیوندی در مقایسه با یک جفت الکترون پیوندی، فضای بیشتری را اشغال می‌کند، زیرا جفت الکترون ناپیوندی تنها تحت تأثیر یک هسته است، حال آن‌که جفت الکترون پیوندی تحت تأثیر دو هسته قرار دارد. در نتیجه، نیروی دافعه بین جفت‌های ناپیوندی - پیوندی اندکی بیشتر از نیروی دافعه بین جفت الکترون‌های پیوندی - پیوندی است. بر اثر این دافعه بیشتر، جفت الکترون‌های پیوندی کمی به سوی یکدیگر رانده می‌شوند. از این رو، زاویه پیوند در مورد SO_2 به جای 120° ، برابر $119/5^\circ$ است. در مورد پیوندهای دوگانه و سه‌گانه نیز یک چنین اثری مشاهده می‌شود، زیرا قلمروهای الکترونی آنها، نسبت به قلمرو الکترونی پیوند یگانه (ساده) به فضای بیشتری نیاز دارند.

نمونه حل شده

شکل هندسی مولکول‌های آمونیاک (NH_3) و آب (H_2O) را پیش‌بینی کنید.

۱- ساختارهای لوویس آنها را رسم می‌کنیم.



۲- در هر مورد تعداد قلمروهای الکترونی در اطراف اتم مرکزی را می‌شماریم.

● اتم N در NH_3 سه پیوند با اتم‌های H و یک جفت الکترون ناپیوندی دارد. در مجموع چهار قلمرو الکترونی.

● اتم O در H_2O دو پیوند با اتم‌های H و دو جفت الکترون ناپیوندی دارد. در مجموع چهار قلمرو الکترونی.

۳- آرایش هندسی مناسب را براساس نظریه VSEPR تعیین می‌کنیم.

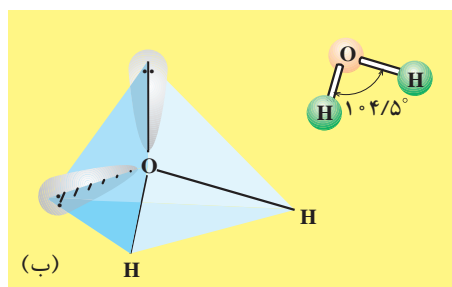
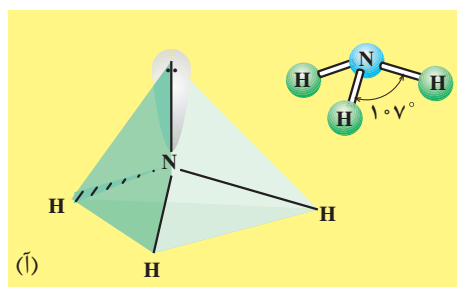
● قلمروهای الکترونی در هر دو اتم دارای آرایش چهار وجهی خواهند بود. در این ساختار زاویه پیوند حدود $109/5^\circ$ است.

۴- وضعیت جفت الکترون‌های ناپیوندی را مشخص می‌کنیم.

● در مورد آمونیاک، چهاروجهی را مانند سه پایه ای در نظر بگیرید که پایه چهارمی به سمت بالا بر آن سوار شده است. اگر جفت الکترون ناپیوندی را پایه چهارم در نظر بگیریم، شکل هندسی به دست آمده یک هرم با قاعده سه ضلعی است، شکل آ.

● در مورد آب، شکل مولکول خمیده است، شکل ب. این شکل، بدون توجه به این که جفت الکترون های ناپیوندی کدام دو پایه چهاروجهی را اشغال کنند، با واقعیت سازگاری دارد.

● به علت دافعه میان جفت الکترون های ناپیوندی - ناپیوندی، ناپیوندی - پیوندی و پیوندی - پیوندی که به ترتیب مقدار نیروی دافعه ای میان آنها کاسته می شود، زاویه پیوند در آمونیاک و آب هر دو اندکی کوچک تر از $109/5^\circ$ شده است. (زاویه پیوند در آمونیاک 107° و در آب $104/5^\circ$ است.) این نیروهای دافعه ای را روی هر دو شکل زیر نشان دهید.



خود را بیازمایید

شکل هندسی مولکول های زیر را پیش بینی کنید.



چه نیرویی مولکول ها را کنار یکدیگر نگاه می دارد؟

پیش از این آموختید که به هنگام تشکیل پیوند کووالانسی، نیروی جاذبه ای قوی میان هسته یک اتم و الکترون های اتم دیگر عامل اصلی نزدیک شدن اتم ها به یکدیگر است. از آن جا که در مولکول ها یعنی مجموعه ای از اتم های متصل به هم نیز همواره چنین نیرویی میان هسته اتم های یک مولکول و الکترون های مولکول دیگر قابل تصور است، انتظار می رود که مولکول ها نیز یکدیگر را بر بایند. وجود این نیروها سبب می شود که مولکول ها بتوانند در کنار هم قرار بگیرند. از آن جا که خواص فیزیکی یک ماده به قدرت نیروهای

برهم کنش های جاذبه ای از نوع مولکول - مولکول را به افتخار یک فیزیک دان هلندی نیروهای وان در والس نامیده اند.



جاذبه‌ای میان ذره‌های سازنده آن - در این جا مولکول‌ها - بستگی دارد، داشتن درکی از عوامل مؤثر بر افزایش نیروهای بین مولکولی امکان توجیه تفاوت مشاهده شده در خواص فیزیکی مواد گوناگون را میسر می‌سازد.

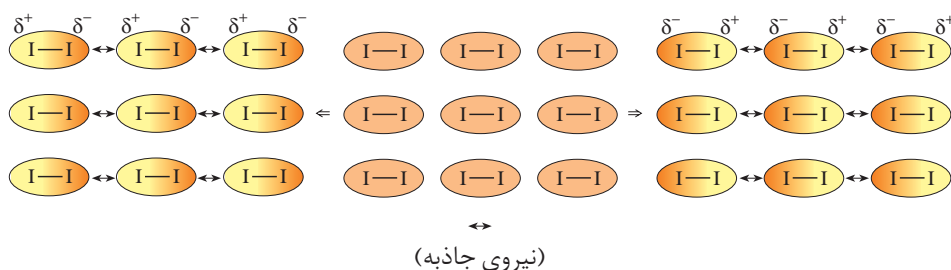
توزیع ناهمگن الکترون‌ها روی مولکول، نیروهای بین مولکول را افزایش می‌دهد.

پیش از این با مفهوم پیوند قطبی و پیوند ناقطبی آشنا شدید. می‌دانید که در پیوندهای قطبی برخلاف پیوندهای ناقطبی الکترون‌ها به‌طور یکنواخت روی مولکول دو اتمی توزیع نمی‌شوند و وقت بیشتری را در اطراف اتم الکترونگاتیوتر سپری می‌کنند. این توزیع ناهمگن الکترون‌ها می‌تواند یک مولکول دو اتمی را به یک **دوقطبی** تبدیل کند. به چنین مولکولی **قطبی** می‌گویند.

وجود دو قطب مثبت و منفی دائمی در مولکول‌های قطبی بر نیروهای جاذبه‌ای موجود میان مولکول‌ها، نیروی جاذبه‌ای قوی‌تری را اضافه می‌کند. این درحالی است که مولکول‌های دو اتمی جور هسته مانند I_2 که از جمله **مولکول‌های ناقطبی** به‌شمار می‌آیند، به همان نیروهای ضعیف وان دروالسی اکتفا می‌کنند.

فکر کنید

۱- شکل زیر نیروهای ضعیف موجود میان مولکول‌های I_2 به حالت جامد را نشان می‌دهد. ایجاد این نیروهای ضعیف جاذبه‌ای را که به نیروی جاذبه‌ای نشری لوندون معروف است، چگونه توجیه می‌کنید؟



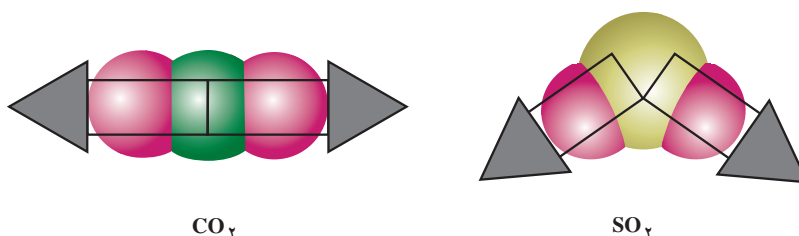
نیروهای وان دروالس
با افزایش جرم مولکول‌ها
افزایش می‌یابد. چرا؟

۲- از میان جفت گازهای (N_2 ، CO) و (Cl_2 ، O_2) کدام یک آسان‌تر به مایع تبدیل می‌شود؟ چرا؟

مولکول‌های چنداتمی نیز بسته به میزان قطبی بودن پیوندها و جهت‌گیری اتم‌ها در فضا (آرایش هندسی مولکول) می‌توانند قطبی یا ناقطبی باشند.

پیش‌بینی کنید

مولکول‌های CO_2 و SO_2 را در نظر بگیرید. اگر جهت توزیع الکترون‌ها در هر پیوند قطبی را با یک پیکان نشان دهیم، توزیع الکترون‌ها روی مولکول‌های یادشده به صورت زیر خواهد بود.



- ۱- فرض کنید که هر پیکان جهت نیرویی را نشان می‌دهد که قصد داریم به کمک آن اتم مرکزی را از جای خود تکان دهیم، به نظر شما در کدام حالت اتم مرکزی تحت تأثیر هم‌زمان این نیروها جابه‌جا می‌شود؟ چرا؟
- ۲- اگر حرکت کردن اتم مرکزی در این مقایسه فرضی را به معنای توزیع غیر یکنواخت الکترون‌ها روی مولکول در نظر بگیریم، در این صورت کدام مولکول یک دوقطبی خواهد بود؟ قطب‌های مثبت و منفی این دو قطبی را مشخص کنید.
- ۳- با کمک روش بالا مولکول‌های زیر را در دو گروه قطبی و ناقطبی دسته‌بندی کنید.

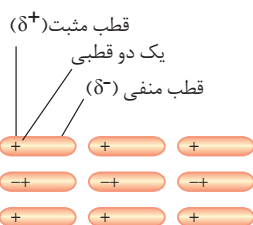


پیوندهای هیدروژنی از جمله نیروهای بین مولکولی قوی به‌شمار می‌آیند.

آب خواص منحصر به فرد زیادی دارد که اجسام مشابه آن، مانند هیدروژن سولفید، H_2S ، از این خواص بی‌بهره‌اند، جدول ۷. نقطه‌های ذوب و جوش بسیار بالاتر آب نشان می‌دهد که نیروهای جاذبه دوقطبی - دوقطبی در مولکول‌های آب باید، خیلی قوی‌تر از نیروهای جاذبه‌ای مشابه بین مولکول‌های H_2S باشد.

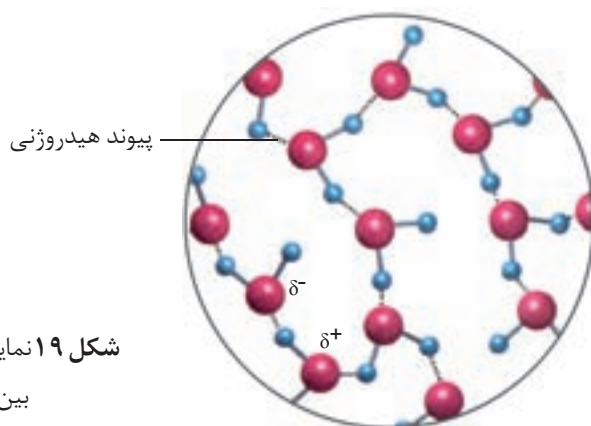
جدول ۷ ویژگی‌های آب و هیدروژن سولفید

ماده	مدل فضا پرکن	فرمول مولکولی	نقطه ذوب (°C)	نقطه جوش (°C)
آب		H_2O	°/۰	۱۰۰/۰
هیدروژن سولفید		H_2S	-۸۵/۵	-۶۰/۳



به نیروهای جاذبه‌ای میان مولکول‌های قطبی نیروهای دوقطبی - دوقطبی می‌گویند.
 پیوند هیدروژنی نوعی نیروی جاذبه دوقطبی - دوقطبی است.

هنگامی که هیدروژن، یعنی کوچک‌ترین اتم شناخته شده، به فلوئور، اکسیژن یا نیتروژن (کوچک‌ترین و الکترونگاتیوترین اتم‌ها) متصل شود پیوندی بسیار قطبی به وجود می‌آید که مقدار بارهای جزئی دو اتم درگیر در این پیوند به‌ویژه اتم کوچک هیدروژن بسیار چشمگیر خواهد بود. همان‌طور که می‌دانید هر اندازه مقدار بارهای الکتریکی ناهم‌نام بیشتر باشد، نیروی جاذبه بین آنها نیز قوی‌تر خواهد بود. از این‌رو یک جاذبه دوقطبی - دوقطبی بسیار قوی میان مولکول‌های دارای این گونه پیوندها به وجود می‌آید که به خاطر استحکام بیش از اندازه آن پیوند هیدروژنی نامیده می‌شود.



δ نمادی برای نمایش مقدار بار الکتریکی جزئی است. باری کمتر از واحد بار الکتریکی.

شکل ۱۹ نمایش پیوند هیدروژنی موجود بین مولکول‌های آب

واژه پیوند هیدروژنی گمراه‌کننده است، زیرا این نوع نیروی جاذبه، مانند دیگر نیروهای جاذبه بین مولکولی، بسیار ضعیف‌تر از پیوندهای کووالانسی بین اتم‌هاست.

فکر کنید

با دقت به شکل زیر نگاه کنید. روند تغییر نقطه جوش ترکیب‌های هیدروژن‌دار نشان داده شده را چگونه توجیه می‌کنید؟

