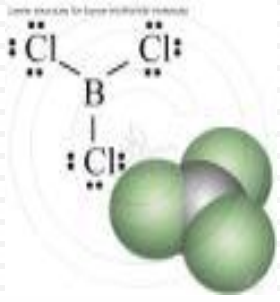
قاعدة الثمانيات
The Octet Rule

ذرات العناصر عند دخولها في تفاعلات كيميائية لتكوّن مركبات تسعى لأن تحيط نفسها بثماني الكترونات لتحصل بذلك على التركيب الثابت المماثل للتركيب الإلكتروني لأقرب غاز خامل لها.

و يقال في حالة احتواء مدار التكافؤ الأخير لذرة ما أقل أو أكثر من ثمانية إلكترونات في مركب ما أن هذا المركب يحيد عن قاعدة الثمانيات.

الحيود عن القاعدة الثمانية

تنطبق القاعدة الثمانية على معظم الجزيئات التساهمية إلا أن هناك شذوذاً عن هذه القاعدة إما بأكثر من ثمانية الكترونات كما هو الحال في خامس كلوريد الفسفور (يوجد عشرة الكترونات حول ذرة الفسفور المركزية)

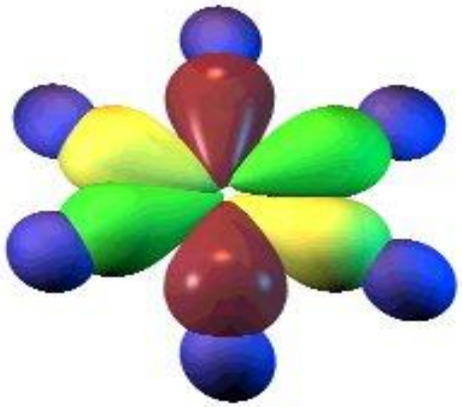


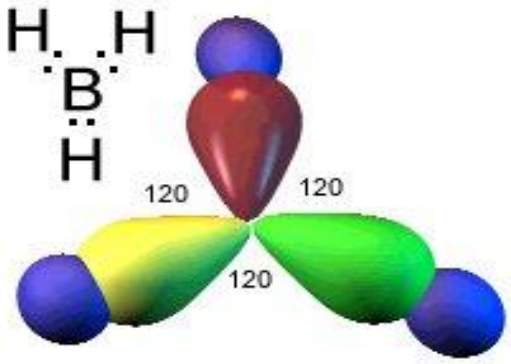
أقل من ثمانية كما هو الحال في كلوريد البورون (ستة الكترونات حول ذرة البورون المركزية).

جزيء ثالث فلوريد الفسفور يتبع القاعدة **الثمانية**

جزيء خامس فلوريد الفسفور يشذ عن القاعدة **الثمانية**

أشكال الحيود عن القاعدة الثمانية





- جزيئات تحتوي على أكثر من ثمان الكترونات للمدار الخارجي للذرة المركزية.
- جزيئات تحتوي على أقل من ثمان الكترونات للمدار الخارجي للذرة المركزية.

أي المركبات التالية لا يتبع القاعدة الثمانية:

CCl_4 , BCl_3

- ١-نرسم تركيب لويس
- ٢- ننظر للذرة المركزية فإذا كان عدد الإلكترونات حول الذرة المركزية أقل أو أكثر من ٨ إكترونات فإنها لاتتبع القاعدة الثمانية

نظرية المدارات الجزيئية

تعمل هذه النظرية على وصف الروابط التساهمية في المدارات الجزيئية، و التي تنتج من تداخل المدارات الذرية للذرات الرابطة المرتبطة بكل جزيء.

المدارات الجزيئية الرابطة و غير الرابطة

إن تداخل مداري 1S لذرتي هيدروجين يؤدي الى تكوين مدارين جزيئيين: أحدهما مدار جزيئي رابط و الآخر مدار جزيئي غير رابط.

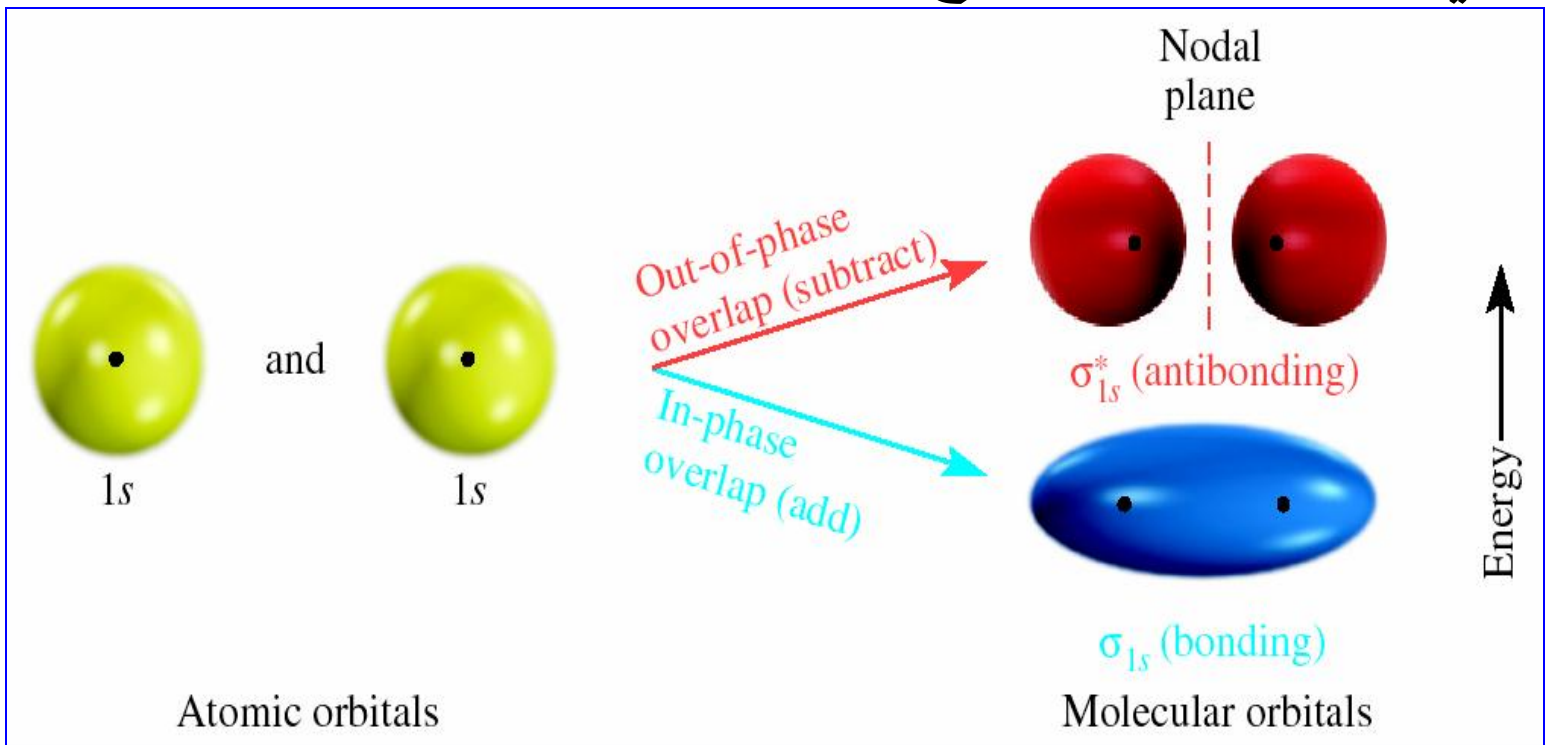
المدار الجزيئي الرابط لديه أقل طاقة و أعلى استقرار من المدارات الذرية المتكونة منها، المدار الجزيئي غير الرابط يمتلك طاقة عالية و أقل استقرار من المدارات الذرية المتكونة منها،

لذلك فإن المدارات الجزيئية الرابطة تكون رابطة تساهمية مستقرة

تكون الكثافة الإلكترونية في المدارات الجزيئية الرابطة هي الأعلى بين أنوية الذرات الرابطة، بينما تكون الكثافة الإلكترونية تتناقص إلى الصفر بين الأنوية في المدارت الجزيئية غير الرابطة

H-H bond

إن التداخل بين مدارات 1S في جزيء الهيدروجين يؤدي إلى تشكل مدار جزيئي رابط من نوع سجما σ1S و مدار جزيئي غير رابط من نوع سيجما* σ*1S .



بالرغم من أننا استخدمنا جزيء الهيدروجين لتوضيح تشكيل المدارات الجزيئية إلا أن هذا المفهوم يطبق على حد سواء على جميع الجزيئات الأخرى.

في جزيء الهيدروجين إعتبرنا التداخل فقط بين مدارات 1S و لكن مع الجزيئات الأكثر تعقيدا نحتاج إلى الأخذ في الإعتبار مدارات ذرية إضافية.

بالنسبة لمدارات p فإن العملية أكثر تعقيدا بسبب أنها ممكن أن تتداخل مع بعضها بطريقتين مختلفتين.

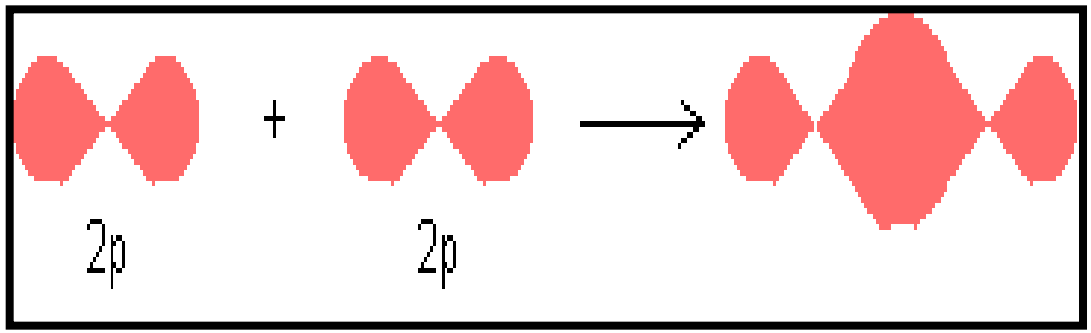
أ- أثنان من مدارات p ممكن أن تقترب من بعضها البعض و تتداخل بشكل رأسي لتنتج مدار جزيئي رابط من نوع سيجما و مدار جزيئي غير رابط من نوع سيجما*.

ب- أثنان من مدارات p ممكن أن تتداخل جانبيا لتعطي مدار جزيئي رابط من نوع باي π و مدار جزيئي غير رابط من نوع باي* π *

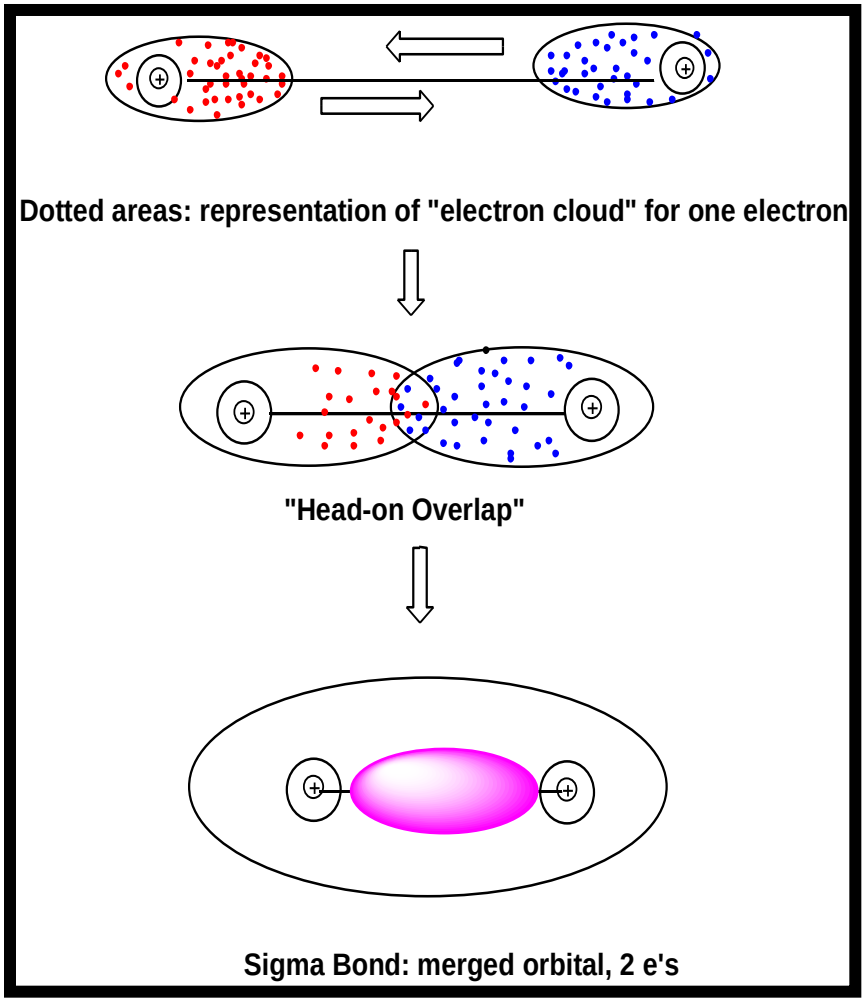
- في المدار الجزيئي باي (رابط أو غير رابط) كثافة الإلكترون تكون مركزة في أعلى و أسفل خط تخيلي يربط بين النواتين للذرات المرتبطة، الإلكترونين في المدار الجزيئي باي يكونان الرابطة باي، الرابطة الثنائية هي غالبا تتكون من رابطة سيجما و رابطة باي، و الرابطة الثلاثية هي دائما مكونة من رابطة سيجما و رابطتين باي

σ Bond

- رابطة ناتجة عن تداخل الأفلاك بالرأس، و تتوزع الكثافة الالكترونية بشكل متماثل على طول المحور الواصل بين الذرتين.

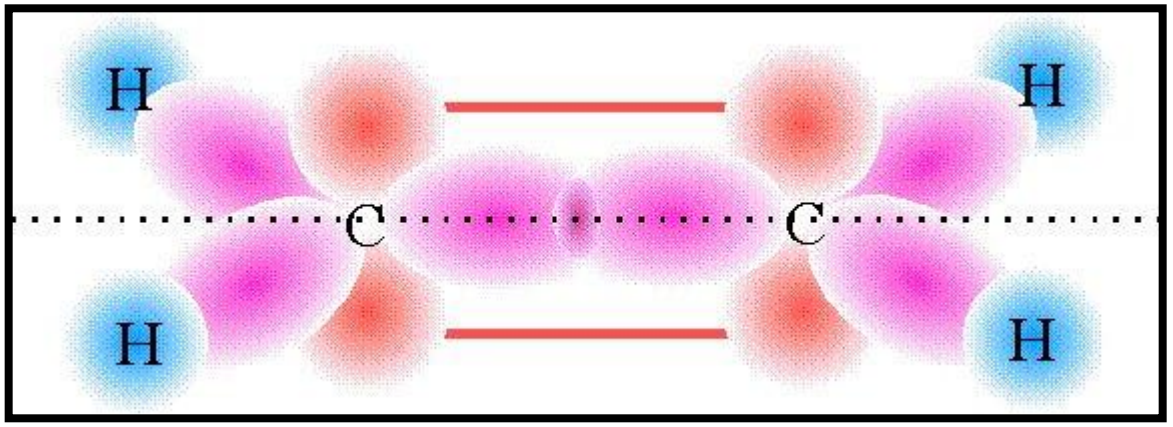


σ Bond


Dotted areas: representation of "electron cloud" for one electron
"Head-on Overlap"
Sigma Bond: merged orbital, 2 e's

π Bond

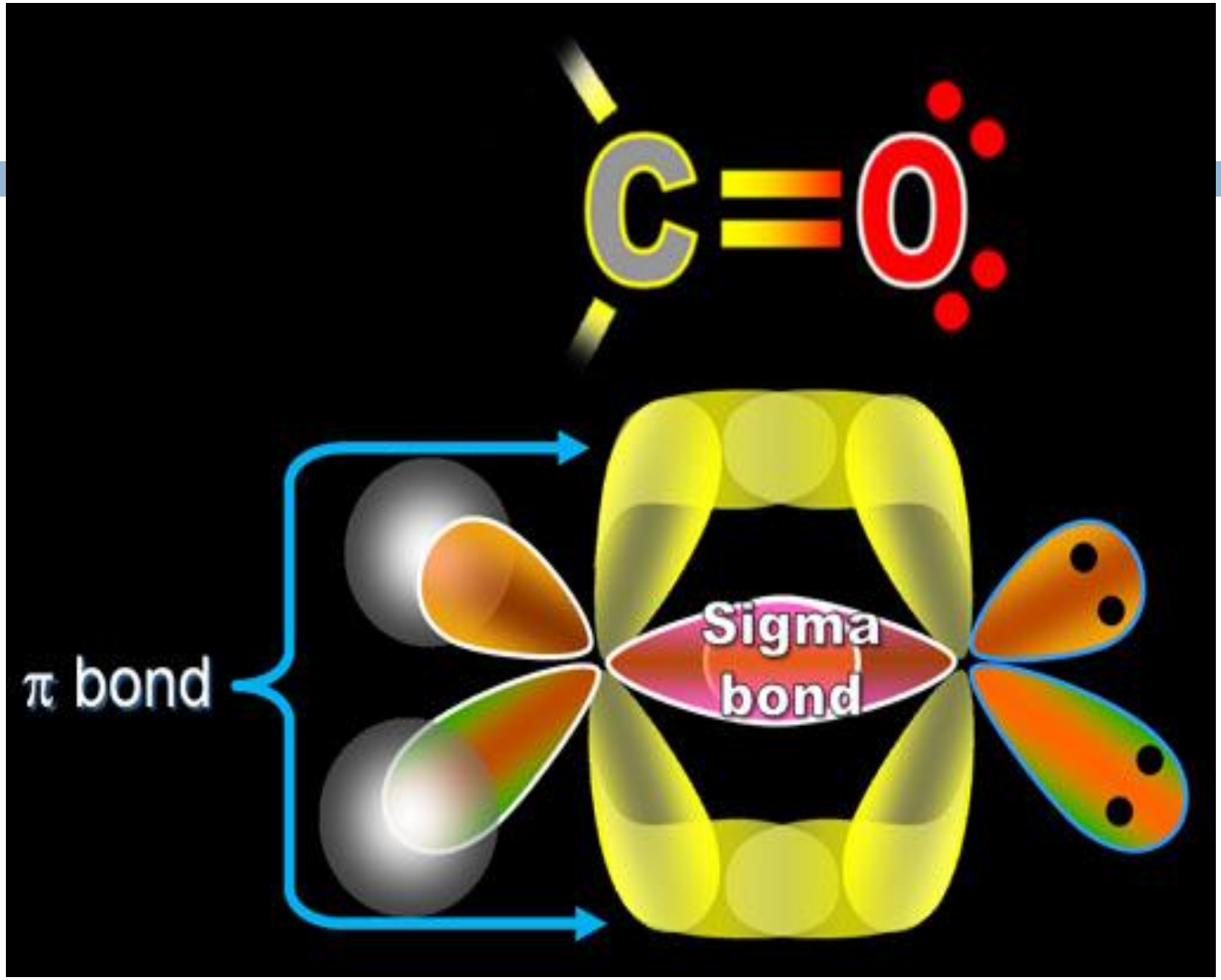
- رابطة ناتجة عن تداخل الأفلاك بشكل جانبي، و تتوزع الكثافة الالكترونية في منطقتين على جانبي المحور الواصل بين الذرتين.



الرابطة σ أقوى من الرابطة π

- في الرابطة σ تتوزع الكثافة الالكترونية بشكل متماثل على طول المحور الواصل بين نواتي الذرتين.

- في الرابطة π الكثافة الالكترونية تكون أعلى و أسفل الخط الوهمي الواصل بين نواتي الذرتين.


C=O
π bond
Sigma bond

القواعد التي تتحكم في الإستقرار و الترتيب البنائي للإلكترون في الجزيء

- عدد المدارات الجزيئية المكونة هو دائما مساوي لعدد المدارات الذرية المتحدة
- يتم ملء المدارات الجزيئية الأقل طاقة إلى الأعلى طاقه
- المدار الجزيئي الواحد لايشغل أكثر من إلكترونين و هذا يتفق مع مبدأ باولي
- إذا كان هناك أكثر من مدار جزيئي متساوية في الطاقه فإن الإلكترونات تتوزع فيه بالتساوي حسب قاعدة هوند و هذا يؤدي إلى وجود إلكترونات مفردة في بعض الجزيئات.

تهجين المدارات الذرية
hybridization of atomic orbitals

هي عملية يحدث بها دمج مدارين ذريين أو أكثر في الذرة المركزية لينتج مدارات مهجنة متساوية في الشكل و الطاقة.

خواص المدارات المهجنة

١. تنتمي المدارات المهجنة لذرة واحدة فقط.
٢. التهجين يحدث للمدارات المتقاربة في الطاقة أي الموجودة في مستوى رئيسي واحد.
٣. عدد المدارات المهجنة = عدد المدارات الداخلة في عملية التهجين.
٤. يفقد المدار الذري الداخل في عملية التهجين هويته (تختلف المدارات المهجنة عن المدارات الناتجة عن عملية التهجين).
٥. شكل المدار المهجن يجمع بين صفات المدارات المكونة له.
٦. تتشابه المدارات المهجنة في (الشكل، القوة، الطاقة) و تختلف في الاتجاه الفراغي.
٧. تتوزع المدارات المهجنة حول الذرة المركزية بشكل يجعل التنافر أقل ما يمكن، لتصل للشكل الفراغي الأكثر استقراراً.
٨. يتكون المدار المهجن من فصين متعاكسين في الاتجاه صغير و كبير، و نتيجة لكبر حجم الفص الكبير في المدار المهجن فإن هذا يجعل المدار المهجن أقدر على التداخل.

أنواع التهجين

Types of hybridization

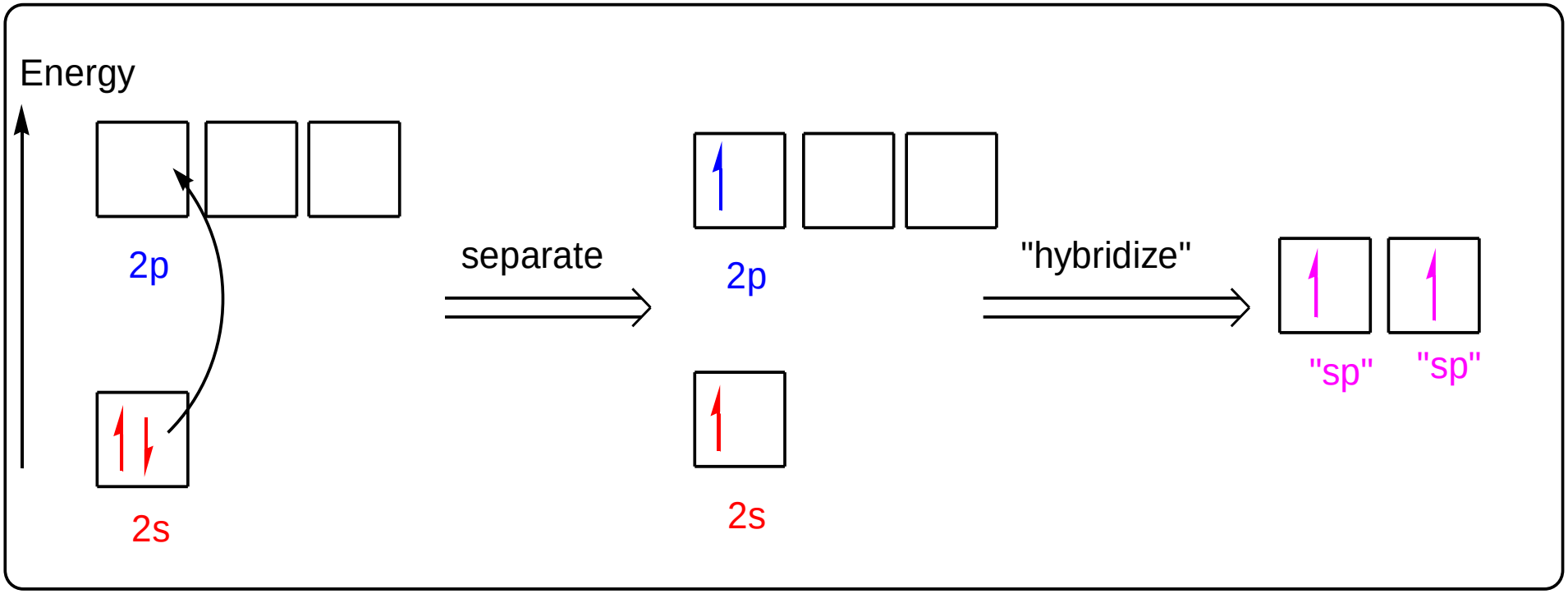
الأفلاك المهجنة SP -
(SP- hybrid Orbitals)

Hybridization of Be in $BeCl_2$

Valence e's

Atomic Be: $1s^2$ $2s^2$

Hybrid sp orbitals:
1 part s, 1 part p



٢ـ الأفلاك المهجنة SP^2

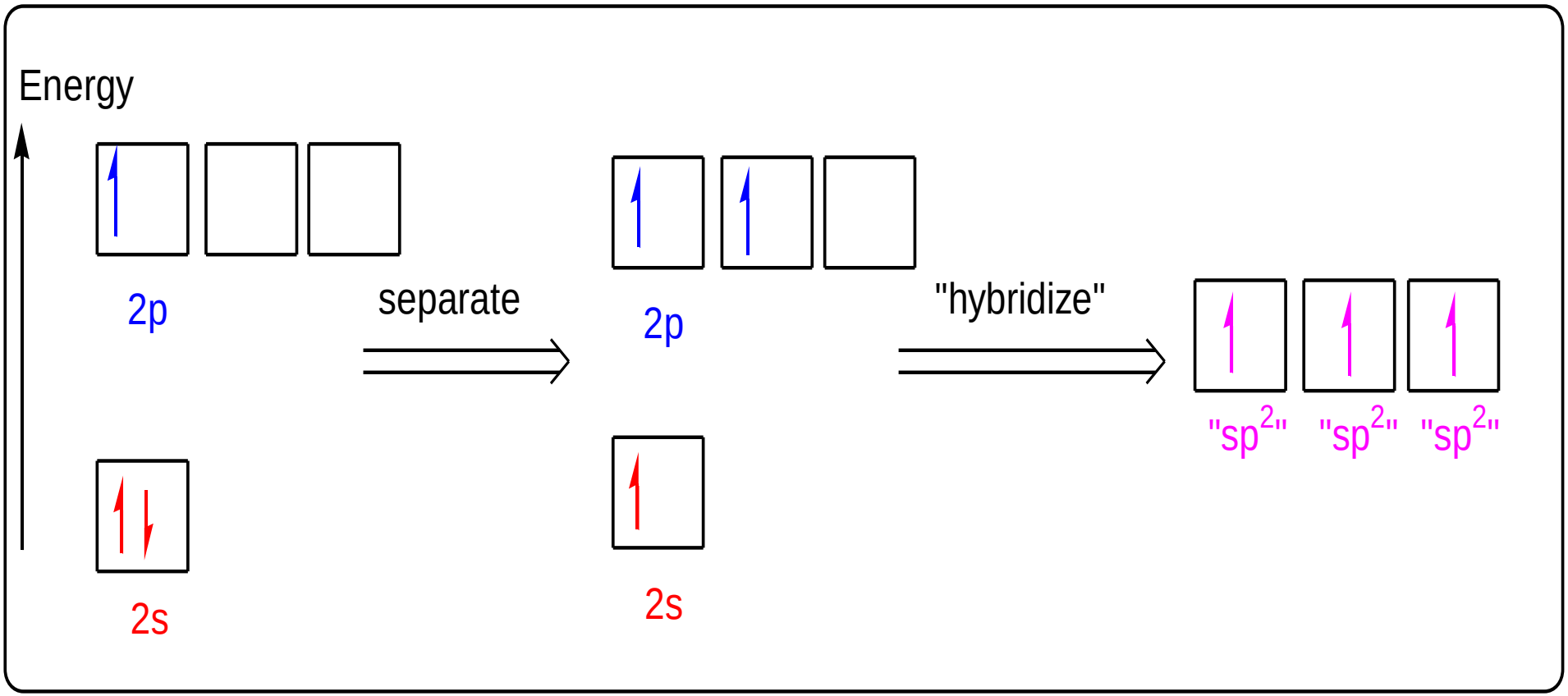
(SP^2- hybrid Orbitals)

Hybridization of B in BF_3

Valence e's

Hybrid sp^2 orbitals:
1 part s, 2 parts p

Atomic B : $1s^2\ 2s^2\ 2p^1$



١ـ الأفلاك المهجنة SP^3

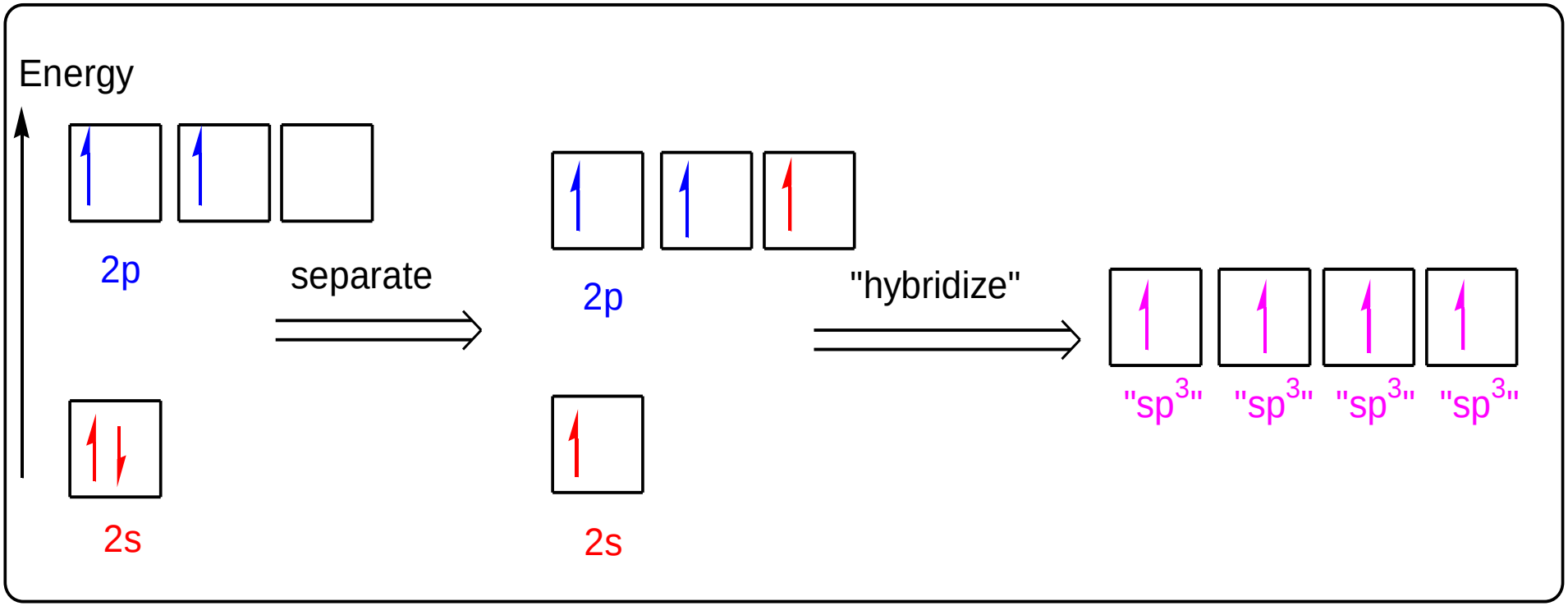
(SP^3- hybrid orbitals)

Hybridization of C in CH_4

Valence e's

Hybrid sp^3 orbitals:
1 part s, 3 parts p

Atomic C : $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$



تهجين من نوع sp^3d

PBr_5

تهجين من نوع sp^3d^2

SF_6

تهجين من نوع dsp^2

$PtCl_4^{-2}$

حدد نوع التهجين للجزيئات و الأيونات التالية:

١- نرسم تركيب لويس للجزيئات
٢- نحدد عدد الأزواج الإلكترونية حول الذرة المركزية
٣- نتبع الجدول التالي

عدد الأزواج الإلكترونية	نوع التهجين
2	sp
3	sp^2
4	sp^3
5	sp^3d
6	sp^3d^2
8	dsp^2

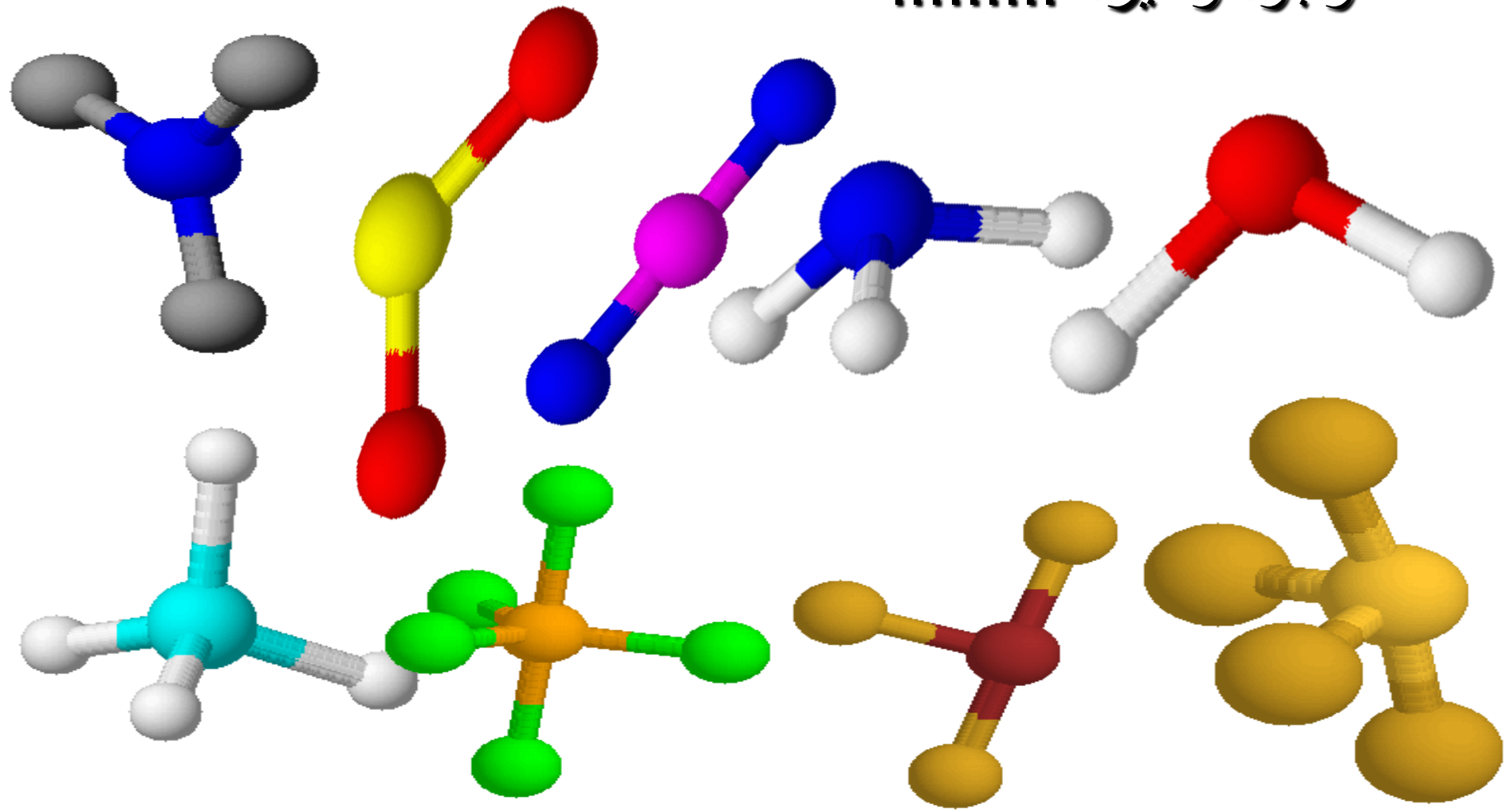
أشكال الجزيئات
و
نظرية تنافر أزواج الكترونات التكافؤ

نظرية التنافر بين أزواج الالكترونات في مستوى التكافؤ

- " أزواج الالكترونات الرابطة و غير الرابطة تتوزع في الفراغ حول الذرة المركزية للمركب بحيث يكون التنافر بينها أقل ما يمكن لينتج الشكل الاكثر ثباتا للجزيء"

حسب هذه النظرية فان الشكل الناتج هو الذي يمثل الحد الأدنى من التنافر بين مجاميع الالكترونات حول الذرة المركزية.

و تختلف هذه الاشكال ما بين الخط المستقيم، والمثلث المنحني، رباعي الوجه، الهرم الثلاثي و ثنائي الهرم المثلثي و ثماني الوجوه وغيرها.....



كيف يمكن تحديد الشكل الهندسي المناسب للجزيء أو الأيون؟

- رسم تركيب لويس للجزيء أو الأيون.
- تحديد و تخطيط الشكل حسب عدد الأزواج الالكترونية حول الذرة المركزية الرابطة و غير الرابطة.
- تعامل الرابطة الثنائية و الثلاثية معاملة الرابطة الأحادية.

الأشكال التي يمكن أن تتخذها الجزيئات حسب نظرية تنافرأزواج الالكترونات في غلاف التكافؤ

١- الجزيئات ثنائية الذرة:

- يمكن تحديد الشكل الهندسي لجزيء ثنائي الذرة مثل (HCl, Cl_2) مستقيم يربط بين الذرتين كما يلي:

(H - Cl) - (Cl - Cl)

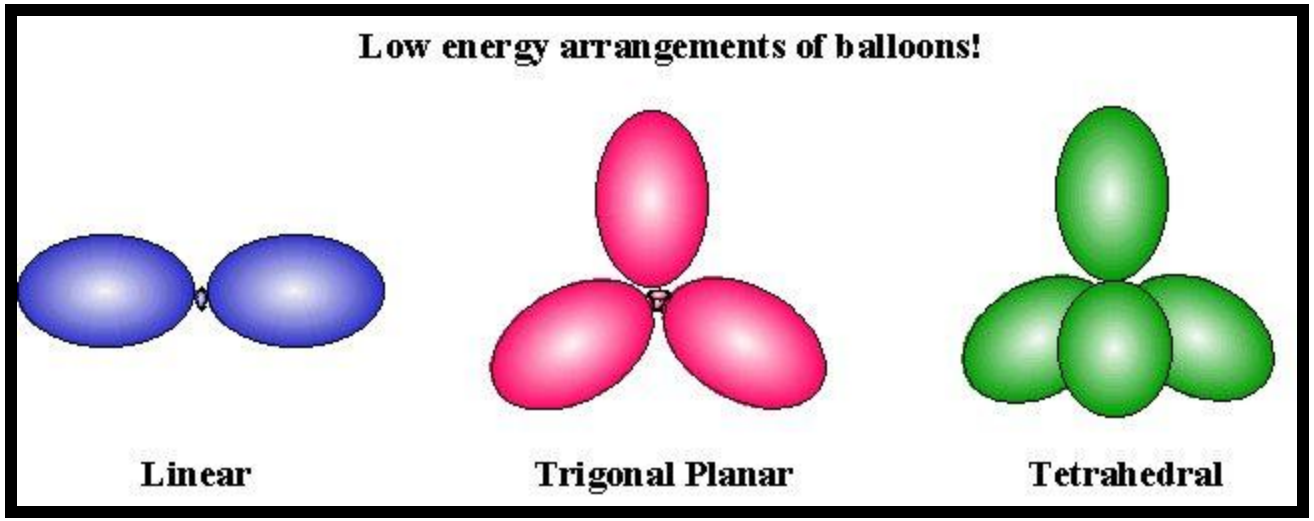
٢- الجزيئات عديدة الذرات:

- في هذه الجزيئات يجب تحديد الزوايا التي تفصل هذه الذرات و تسمى بزاوية الربط و تشمل الاشكال الهندسية لجزيئات بها ٢ أو أكثر من أزواج الالكترونات.

- :

VESPR con't.

- AB_mE_n
- نرسم شكل لويس ثم نحدد نوع الجزيء و منه يتم تحديد الشكل الهندسي
  - A الذرة المركزية
  - B عدد الأزواج الإلكترونية المرتبطة
  - E عدد الأزواج الحرة غير الرابطة

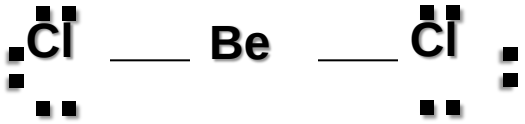


- **مجموعتان من أزواج الالكترونات حول الذرة المركزية:**
  الصيغة العامة (AX_2)

$BeCl_2$

valence e^- = 2 + (2 x 7) = $16e^-$

fewer than $8e^-$

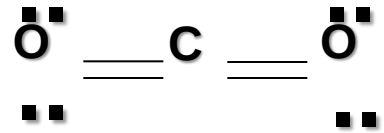


linear molecule

linear **180°**

CO_2

valence e^- = 4 + (2 x 6) = $16e^-$



single and double bonds same

molecular geometry

molecular shape linear

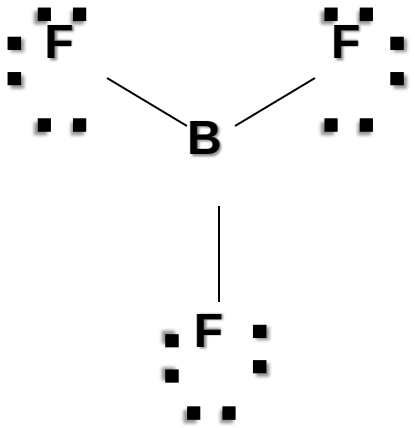
linear

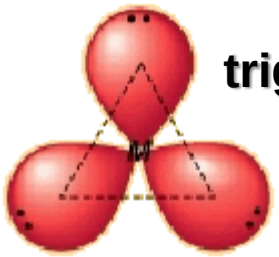
180^o

ثلاث مجموعات من أزواج الالكترونات حول الذرة المركزية الصيغة العامة (AX_3)

BF_3

valence e^- = 3+ (3 x 7) = $24e^-$





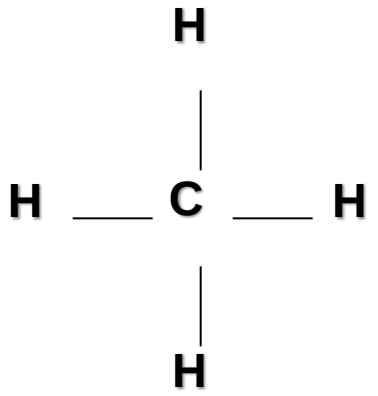
trigonal planar 120°

أربع مجموعات من أزواج الالكترونات حول الذرة المركزية الصيغة العامة (AX_4)

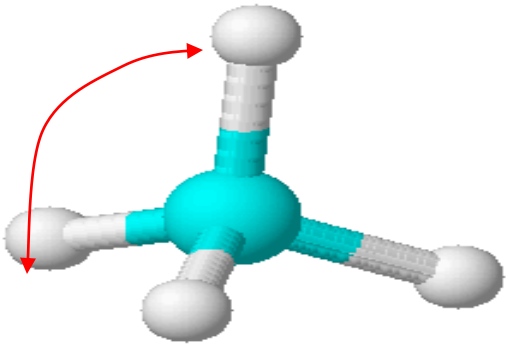
CH_4

valence e^- = 4+ (4 x 1) = $8e^-$

four valence pairs on C

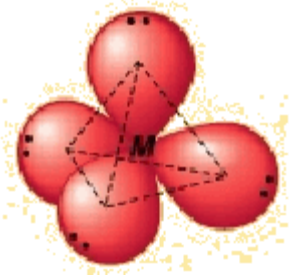


109.5°



molecular geometry

molecular shape tetrahedral



tetrahedral 109.5°

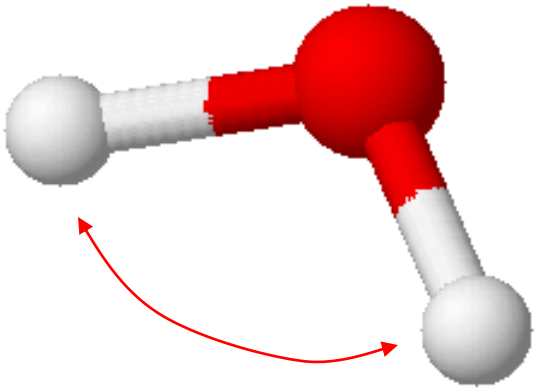
H_2O

valence e^- = 6+ (2 x 1) = $8e^-$

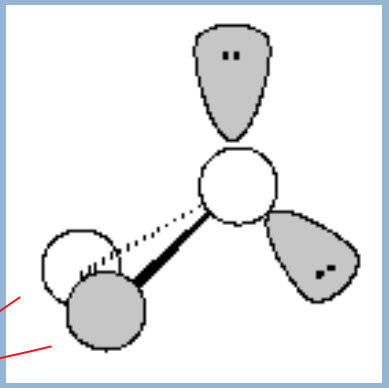
four valence pairs on O

two bonding pairs

two lone pair



< 109.5°



<

109.5°

(104.5°)

H_2O AX_2E_2 angular

$(AX_2\ E_2)$

molecular geometry

molecular shape tetrahedral

Angular or V-shaped 104.5°

في أمان الله
انعش عقلك بالتفكر
في آيات الله المنظورة والمقروءة
وانعش قلبك بالتأمل
في نعمه المنهمرة عليك صباح مساء
وانعش روحك باللجوء بذكره
والثناء عليه والتضرع بين يديه
ليلك ونهارك على السواء
ثم انظر أي خير سيفيض على قلبك ..!