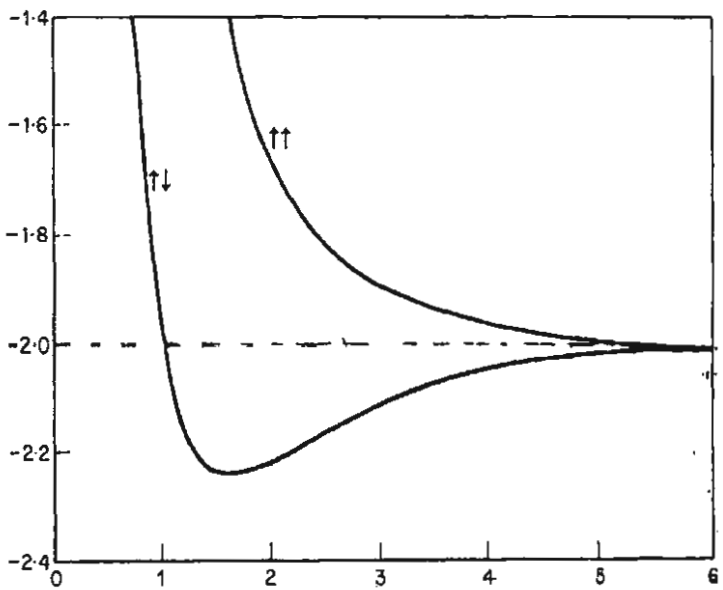
$$\psi_A = (\psi_\alpha(r_1)\psi_\beta(r_2) - \psi_\alpha(r_2)\psi_\beta(r_1)) \qquad \text{أو}$$

وتكون الدالة متماثلة عندما يكون الزخمان الاسبينيان للإلكترونين متعاكسين (↓↑) وغير متماثلة عندما يكون الزخمان متوازيين (↑↑). والحالة الأولى هي الحالة المستقرة التي تكون الطاقة الكلية فيها سالبة وأقل من $2E_0$ (انظر الشكل 3–1)

ويتضح مما سبق أن جزيء الهيدروجين لا يتكون في الحالة غير المتماثلة بسبب ما تؤدي إليه هذه الحالة من زيادة في طاقة النظام. وبناء على ذلك فإن الإلكترونين في الرابطة التشاركية يتزاوجان في حالة يكون فيها الزخم المغزلي لأحدهما معاكساً للزخم المغزلي للآخر حتى تكون الرابطة قوية ومستقرة.

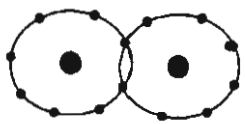


الشكل (1.3): الطاقة على المحور الرأسي هي مقدار الزيادة أو النقصان عن $2E_0$.

ومن خصائص هذه الرابطة أن الذرة الواحدة تتحد مع عدد محدود من جاراتها. فذرة الهيدروجين تتحد مع ذرة واحدة فقط من جاراتها، أما ذرة الكربون فتتحد مع أربع ذرات أخرى مكونة أربع روابط مع جاراتها حتى يمتلئ المستوى 2p فيها

$$H : H \qquad \begin{matrix} & & C & & \\ & & \vdots & & \\ C & : & C & : & C \\ & & \vdots & & \\ C & : & C & : & C \\ & & \vdots & & \\ & & C & & \end{matrix}$$

وكذلك فإن ذرة الكلور تتحد مع ذرة أخرى بحيث يمتلئ المستوى 3p لكل منها



وليس من الضروري دائماً أن تكون الذرات المتشاركة في هذا النوع من الرابطة متشابهه، إذ يمكن أن تتشارك ذرات الكلور مع الهيدروجين

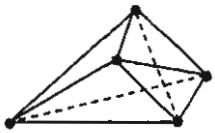
$$H:H + Cl:Cl = 2\ H:Cl$$

أو ذرات الكربون مع الهيدروجين

$$\begin{matrix} & H & \\ & \vdots & \\ H & : C : & H \\ & \vdots & \\ & H & \end{matrix} \longrightarrow CH_4$$

أي أن هذه الرابطة تجعل المستوى الأخير للذرات المتشاركة مملوءاً بالإلكترونات بعد أن كان ناقصاً والذرة منفردة.

كما تتميز هذه الرابطة التشاركية بأن لها اتجاهاً محدداً في الفضاء، وأفضل مثال على ذلك الرابطة بين ذرات الكربون حيث تكون الذرة الواحدة في مركز (tetrahedron) ومرتبطة مع أربع ذرات موجودة في رؤوس هذا الهرم الرباعي (أنظر الشكل 4–1)



(الشكل 4–1)

وإليك قيمة طاقة الرابطة التشاركية لبعض المواد الصلبة:

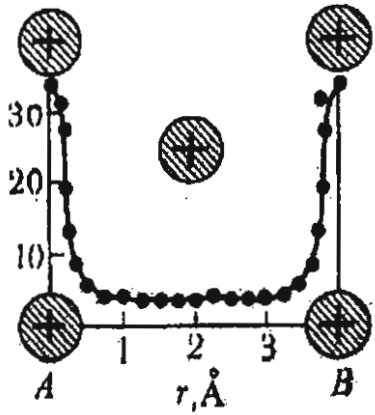
المادة	الطاقة
N_2	9.8 eV/molecule
H_2	4.5
Diamond	7
Ge	3.63
Si	4.5

4–1–1 الرابطة الفلزية (*Metallic Bond*)

ترتبط ذرات هذه المواد الفلزية برابطة تختلف عن الرابطة التشاركية أو الأيونية. ومن الأمثلة على هذه المواد فلز الصوديوم (Na) وفلز النحاس (Cu) وفلز الفضة (Ag). وعدد الكترونات التكافؤ في هذه المواد قليل (إما إلكترون واحد أو أثنين) وهي بعيدة عن النواة (3s, 4s, 5s) وضعيفة الارتباط بها. لذا فإن الذرة الواحدة

لا يمكن لها أن تقيم رابطة تشاركية إلا مع ذرة واحدة فقط، ولكن عدد الذرات المجاورة لذرة واحدة من النحاس في البلورة النحاسية مثلاً يساوي اثني عشرة ذرة.

وبناءاً على ما سبق فإن الرابطة الفلزية تنشأ عن انفصال إلكترون التكافؤ عن الذرة التي هو فيها وانسيابه بحرية داخل الجسم الصلب غير مرتبط بأي ذرة معينة. أي أن صورة المادة الفلزية هي عدد كبير من الأيونات الموجبة (Na^+ أو Cu^+) المرتبة بانتظام والمغمورة في "بحر" من الإلكترونات الحرة التي انفصلت من المستوى 3s في ذرات الصوديوم أو من المستوى 4s في ذرات النحاس. وتكون كثافة توزيع الشحنات منتظمة فوق معظم المسافة بين الذرتين، ولا ترتفع هذه الكثافة إلا قريباً جداً من الذرة بسبب الإلكترونات في المستويات الداخلية في الذرة (أنظر الشكل 1.5).



الشكل (1.5): توزيع الكثافة الإلكترونية لفلز الألمنيوم.

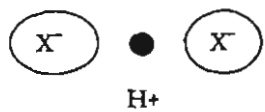
وفي ضوء هذه الصورة فإن الرابطة الفلزية تنشأ عن التفاعل بين الأيونات الموجبة والغاز الإلكتروني المحيط بها. ونتيجة لهذا التفاعل تنخفض الطاقة الحركية لهذه الإلكترونات الحرة عن طاقتها الحركية وهي في المستوى 3s، وذلك لأن حركة الإلكترونات بين الأيونات الموجبة تسبب قوى جذب تجعل الأيونات تقترب

من بعضها إلى أن تصبح قوى التنافر بينها مساوية لقوى الجذب التي أحدثتها الإلكترونات.

إن الرابطة الفلزية هي رابطة جماعية تشارك فيها جميع الذرات بتحرير إلكتروناتها التي تساهم بمجموعها في صنع الرابطة الفلزية. أي أن قوى الربط هنا ليست ثنائية (بين جسمين) أو مركزية أو ذات مدى قصير. والمعالجة الكمية للتفاعلات المختلفة الموجودة في هذه الرابطة ليست سهلة وتعطي نتائج تقريبية. وتتراوح قيمة طاقة الربط في الفلزات ما بين (1–4 eV/atom).

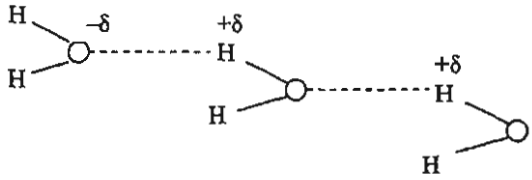
5–1–1 الرابطة الهيدروجينية (*Hydrogen Bond*)

وهي رابطة تنشأ بين ذرة من الهيدروجين وذرة أخرى ذات كهربائية سالبة شديدة (electronegative) مثل ذرة الأكسجين أو الفلورين أو الكلورين. فإذا وقعت ذرة الهيدروجين بين ذرتين من هذا النوع ذي الكهربائية السالبة فإن هاتين الذرتين تقتربان من بعضهما بسبب الشحنة الموجبة على ذرة الهيدروجين.



ويساعد الحجم الصغير لذرة الهيدروجين على اقترابها من الذرة الأخرى ذات الكهربائية السالبة التي تجذب الإلكترون نحوها بشدة فتكتسب بالتأثير شحنة سالبة صغيرة ($\delta-$) بينما تكتسب ذرة الهيدروجين شحنة موجبة صغيرة ($\delta+$)، وبذلك تتولد هذه الرابطة نتيجة قوة الجذب الكهربائية بين هاتين الشحنتين.

وأحسن مثال على هذه الرابطة ما يحصل لجزيئات الماء عندما تتحول إلى جليد، إذ يحصل الارتباط (O–H) بين ذرة أكسجين من جزيء ما وذرة الهيدروجين من جزيء آخر من جزيئات الماء (أنظر الشكل 1.6)



الشكل (1.6)

والرابطة الهيدروجينية هي تلك المشار إليها بالخط المنقط في الشكل، وطاقة الربط الكهربائية هذه صغيرة نسبياً وهي تتراوح ما بين 0.1–0.5 eV/atom فهي أقل من طاقة الربط التشاركية بحوالي عشر مرات. وتبقى بعض هذه الروابط الهيدروجينية قائمة بين جزيئات الماء عندما يذوب الجليد، وهي التي تجعل درجة غليان الماء عالية وطاقة التبخر عالية كذلك.

وبالإضافة إلى دور هذه الرابطة في تشكيل الخصائص الفيزيائية لجزيئات الماء، فإن لها دوراً رئيسياً في تكوين المبلمرات لبعض المركبات مثل HF, NH_4F, HCN؛ كما تساعد أيضاً في فهم خصائص الكثير من المواد العضوية، والكثير من المواد البيولوجية (البروتينات والأحماض النووية).

وفي ضوء ما تقدم من وصف للأنواع المختلفة من الروابط بين الذرات أو الجزيئات نرى بأن رابطة فان درفال هي أضعفها ولكنها أوسعها انتشاراً حيث أنها تعمل على الربط بين الجزيئات أو الذرات التي اكتمل فيها عدد الإلكترونات في مداراتها الداخلية. وهذه الرابطة هي المسؤولة عن وجود الغازات الخاملة والهيدروجين والأكسجين والنيتروجين والكثير من المواد العضوية وغير العضوية في حالة السيولة وفي حالة الصلابة. ونظراً لضعف هذه الرابطة فإن المواد الصلبة القائمة عليها تكون في العادة غير مستقرة وسريعة التبخر ودرجة ذوبانها منخفضة.

أما الرابطة الأيونية فهي أقوى بكثير من رابطة فان درفال، وهي رابطة كيميائية مثالية موجودة في كثير من مركبات العناصر (أكاسيد، كبريتيدات، نيترات، وهالوجينات الفلزات). وبسبب قوة هذه الرابطة تكون المواد القائمة عليها صلبة ودرجة ذوبانها عالية.

والرابطة التشاركية أيضاً قوية وموجودة في كثير من المواد العضوية وغير العضوية والمركبات الفلزية. كما أن الرابطة الفلزية تقارب الرابطة التشاركية في قوتها ولكن طبيعة كل منهما تختلف عن الأخرى.

أما الرابطة الهيدروجينية فهي رابطة ضعيفة ولكنها تلعب دوراً هاماً في كثير من المواد والجزيئات الكبيرة جداً الموجودة في الأنظمة العضوية والبيولوجية.

2-1 البناء البلوري (*Crystal Structure*)

عندما تقترب الذرات أو الجزيئات من بعضها تنشأ بينها قوى الجذب والتنافر إلى أن تصبح المسافة بين الجسيمات المتجاورة تساوي r_o = r وهي المسافة التي تكون طاقة الربط عندها قد وصلت حدها الأدنى بين الجسيمات، وعندئذ فإن هذه الجسيمات تصل إلى حالة من الاتزان المستقر، وتكون قد انتظمت في ترتيب دقيق على مسافة r_o من بعضها البعض في الفضاء ذي الأبعاد الثلاثة وضمن بناء داخلي منظم مكونة (البلورة crystal). ويبقى هذا البناء البلوري مستقراً ما دامت طاقة الربط الداخلية أكبر من طاقة الحركة الحرارية (thermal motion) للجسيمات، وتبقى هذه الجسيمات التي تتألف منها البلورة ثابتة في أماكنها ولا تستطيع مغادرتها. والحركة الوحيدة الممكنة لهذه الجسيمات (عند التسخين) هي أن تتحرك حركة اهتزازية حول مواضع سكونها (استقرارها).

وحتى نتمكن من وصف البناء الداخلي للبلورة (كيفية ترتيب الذرات في الفضاء الثلاثي) علينا أولاً أن نستخدم ونعرّف مفهوم الشبيكة (Lattice).