الفصل الرابع

الأواصر التساهمية Covalent Bond

مقدمة:-

في الفصل السابق تطرقنا إلى المركبات الايونية التي تمتاز بكون الآصرة الرابطة من النوع الايوني ناتجة عن انتقال كلي لالكترون واحد أو أكثر من ذرة إلى ذرة اخرى مولدة أيونات موجبة وسالبة. ولكن في حالة جزيئة مؤلفة من ذرتين متشابهتين كما في جزيئة الهيدروجين (H_2) ماهي القوة التي تربط بين ذرتي الهيدروجين في جزيئة الهيدروجين؟ ففي هذه الحالة لا يمكن أن يحدث انتقال كلي للالكترونات من ذرة إلى ذرة أخرى كون الذرتين متساويتين بالألفة الالكترونية وجهد التأين. فالقوة الرابطة بين الذرتين في هذه الحالة ليست قوة الكتروستاتيكية والآصرة المتكونة في جزيئة الهيدروجين ليست آصرة أيونية ويطلق على هذا النوع من الأواصر أسم الآصرة التساهمية.

يعتبر كل من لوي ولانكمور أول من حاول إعطاء وصف للآصرة التساهمية حيث فسرا الآصرة التساهمية وفقاً لنظرية لويس البسيطة بأنها **(اشتراك للألكترونات بين الذرات)** إلا إن نظريتهما لم توضح سبب أو كيفية هذا الاشتراك في الالكترونات بل استندت في تفسيرها إلى بعض القواعد البسيطة لوصف الآصرة مثل قاعدة احتواء الذرة في الجزيئة على ثمانية الكترونات في طبقة التكافؤ (Octate) ولا تزال صيغة لويس المبنية على هذه القاعدة تكتب للجزيئات التساهمية وتلقى بعض الاهتمام في الكتب والشروحات المبسطة.

حالياً توجد نظريتان لتفسير الآصرة التساهمية وتكونها الأولى تدعى نظرية آصرة التكافؤ (Valence Bond Theory) ويرمز لها بالرمز (VBT) والثانية تدعى نظرية الأوربيتال الجزيئي (Molecular Orbital Theory) ويرمز لها بالرمز (MOT) .

نظرية آصرة التكافؤ:-

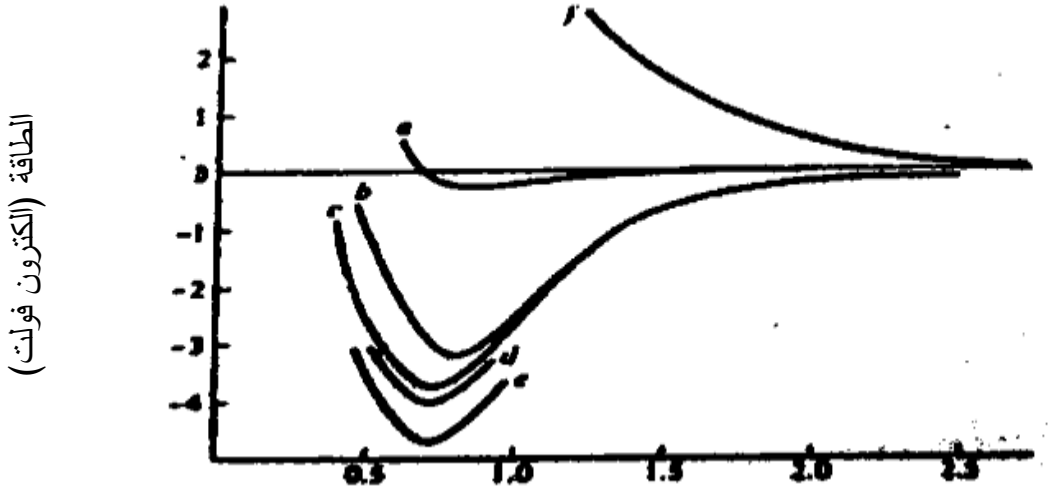
استندت هذه النظرية على فكرة تكوّن الآصرة بواسطة ازدواج برمي الكترونين التي وضع أسسها لويس وغيره. ففي عام (1927) وضع كل من هايتلر ولندن وصفاً للآصرة في جزيئة الهيدروجين مبنياً على أسس ميكانيكا الكم (Quantum Mechanics) وعرف هذا الوصف فيما بعد بأسم نظرية آصرة التكافؤ والتي تم تطويرها من قبل بولنك وسلاتر. ولغرض توضيح هذه النظرية سوف نستعين بجزيئة الهيدروجين وبحسب الخطوات التالية:-

(1) نفترض ان ذرتي الهيدروجين معزولتين عن المحيط الخارجي فعندئذٍ يمكن وصفهما بحسب ميكانيك الكم بدالتي الموجتين (ψ_A) و (ψ_B) اللتان تصفان الاوربيتال $(1s)$ في كل من الذرتين (A) و (B) . إن دالة الموجة (ψ) للمنظومة المؤلفة من هاتين الذرتين المعزولتين يمكن تمثيلها بالعلاقة التالية:-

$$\psi = \psi_A(1) \ . \ \psi_B(2).....(1)$$

حيث يمثل الرقمان (1) و (2) الالكترونين من الذرة الأولى (A) والذرة الثانية (B) .

في البداية نعتبر ان السمافة بين الذرتين مالانهاية وعند اقتراب الذرتين من بعضهما البعض تقترب نواتا ذرتي الهيدروجين من اللانهاية وسوف تلاقي قوة التجاذب الضعيفة بين نواتي الذرتين مقاومة متزايدة من قبل قوى التنافر القوية بين الكتروني الذرتين. وتتداخل دالتا الموجة للألكترونين اللذين أما أن يكونا متوازيين في البرم أو أن يكونان متعاكسين في البرم ، فاذا كانا متوازيين في البرم فان طاقة المنظومة سوف تستمر في التزايد كلما اقتربت الذرتان (الخط f في الشكل البياني التالي) ولا تتكون في هذه الحالة آصرة بين الذرتين. أما إذا كان برم الالكترونين متعاكس فان الخط البياني للطاقة سوف يمر بقيمة دنيا تمثل تكون جزيئة مستقرة. ولغرض حساب قيمة الطاقة الدنيا هذه نستطيع اعتماد المعادلة رقم (1) لدالة الموجة للجزيئة كطريقة تقريبية أولى وعند حل هذه المعادلة سوف نحصل على الخط (a) في الشكل البياني حيث يعطي قيمة دنيا للطاقة تساوي (0.25) الكترون فولت والمسافة بين نواتي ذرتي الهيدروجين تساوي (0.9) أنكستروم.



المسافة بين النواتين (أنكستروم)

وبمقارنة القيمة المستحصل عليها لطاقة الآصرة في جزيئة الهيدروجين (0.25) الكترون فولت وبين القيمة العملية لطاقة الآصرة في جزية الهيدروجين وهي (4.72) ألكترون فولت والمسافة بين نواتي الذرتين هي (0.74) أنكستروم نستدل على أن وصف الجزيئة بالمعادلة رقم(1) لم يعطي نتائج متوافقة.

(2) والصف الأكثر منطقياً أن الالكترونين يكونان غير متمركزين ، أي عدم تمركز الالكترون (1) عند الذرة (A) وعدم تمركز الالكترون (2) عند الذرة (B) ، وعند تطبيق مبدأ عدم تحديد مواقع الالكترونات نحصل على العلاقة التالية:-

$$\psi = \psi_A(1) \ . \ \psi_B(2) \ + \ \psi_A(2) \ . \ \psi_B(1).....(2)$$

وعند حل هذه المعادلة نحصل على الخط (b) في الشكل البياني وفي هذه الحالة تكون قيمة الطاقة الدنيا لجزيئة الهيدروجين مساوية إلى (3.14) ألكترون فولت والمسافة بين نواتي ذرتي الهيدروجين مساوية إلى (0.869) أنكستروم وهذه القيم أقرب إلى القيمة التجريبية مما يؤيد صحة مبدأ عدم تمركز الالكترونات.

(3) كما يمكن تصحيح آخر للمعادلة رقم (2) وذلك بادخال تأثير الحجب الألكتروني الذي يحدثه أحد الالكترونات للألكترون الآخر. وعند ادخال تأثير الحجب نحصل على الخط (c) في الشكل البياني وفي هذه الحالة تكون قيمة الطاقة الدنيا لجزيئة الهيدروجين مساوية إلى (3.78) ألكترون فولت والمسافة بين نواتي ذرتي الهيدروجين مساوية إلى (0.743) أنكستروم.

(1) كما يمكن ادخال تطوير آخر بافتراض وجود حالات يكون فيها الألكترونين متمركزين عند الذرة (A) تارة وتارةً أخرى يكون الألكترونان متمركزين عند الذرة (B) وهذه الفرضية تعني أفتراض وجود صيغ أيونية لجزيئة الهيدروجين ψ_{ion} ويمكن وصف الدالة الايونية بالمعادلة التالية:-

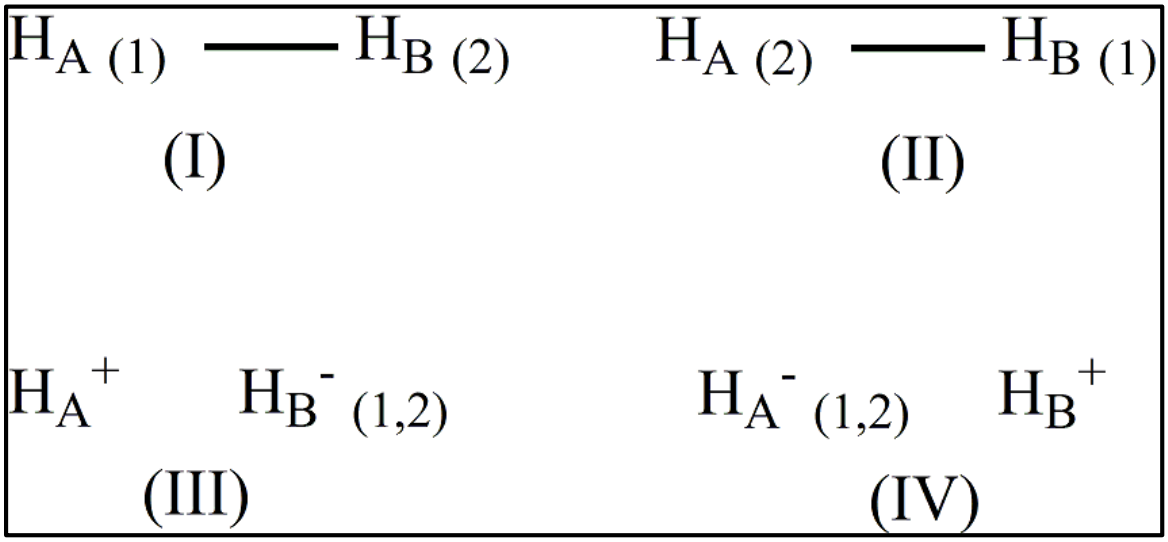
$$\psi_{ion} = \psi_A(1) \;.\; \psi_A(2) \;+\; \psi_B(1) \;.\; \psi_B(2) \ldots\ldots\ldots(3)$$

وبهذا الافتراض الأخير نكون قد ادخلنا فكرة وجود أكثر من صيغة واحدة تصف الجزيئة ويطلق عليها اسم الرنين (الرزونانس) (Resonance) حيث يقال ان للجزيئة عدة صيغ رنينية تشارك جميعها في البنية الفعلية للجزيئة التي تكون طاقتها أقل من طاقة أي صيغة من الصيغ المقترحة لتمثيل الجزيئة ، حيث يمكن رسم أربع صيغ رنينية لجزيئة الهيدروجين وهي:-

$$H_{A\,(1)} — H_{B\,(2)} \quad \text{(I)} \qquad\qquad H_{A\,(2)} — H_{B\,(1)} \quad \text{(II)}$$

$$H_A^{+} \quad H_B^{-}\,(1,2) \quad \text{(III)} \qquad\qquad H_A^{-}\,(1,2) \quad H_B^{+} \quad \text{(IV)}$$

الصيغة الرنينية الأولى تمثل أرتباط الذرتين بآصرة تساهمية يكون الألكترون رقم (1) أكثر ارتباطاً بنواة الذرة (A) و يكون الألكترون رقم (2) أكثر ارتباطاً بنواة الذرة (B) والصيغة الرنينية الثانية تمثل



أرتباط الذرتين بآصرة تساهمية يكون الألكترون رقم (2) أكثر ارتباطاً بنواة الذرة (A) و يكون الألكترون رقم (1) أكثر ارتباطاً بنواة الذرة (B) والصيغة الرنينية الثالثة فتمثل صيغة أيونية يتمركز فيها الألكترونين عند نواة الذرة (B) والصيغة الرنينية الرابعة أيضاً تمثل صيغة أيونية وفيها يتمركز الألكترونين عند نواة الذرة (A) . واستناداً لما تقدم تكون دالة جزيئة الهيدروجين هي مجموع كل من دالة الحالة التساهمية والأيونية:-

$$\psi = \psi_{\text{cov}} + \psi_{ion} \ldots\ldots\ldots (4)$$

$$\psi = \psi_A(1)\ .\ \psi_B(2) + \psi_A(2)\ .\ \psi_B(1) + \lambda\psi_A(1)\ .\ \psi_A(2) + \lambda\psi_B(1)\ .\ \psi_B(2) \ldots\ldots (5)$$

حيث أن (λ) يمثل معامل الاختلاط ويدل على مدى اختلاط الصفة الأيونية بالصفة التساهمية. وعند حل المعادلة رقم (5) نحصل على الخط (d) في الشكل البياني وفي هذه الحالة تكون قيمة الطاقة الدنيا مساوية إلى (4.02) ألكترون فولت والمسافة بين نواتي ذرتي الهيدروجين هي (0.749) أنكستروم ، ويعطي هذا الحل قيماً أقرب إلى القيمة التجريبية المتمثلة بالخط (e) في الرسم البياني.