

## الفصل السادس : الرابطة الكيميائية و البنية الجزيئية

### مقدمة

الروابط الكيميائية هي قوى تُبقي الذرات متماسكة معًا داخل الجزيء أو المركب. يمكن للذرات أن تُكوّن روابط كيميائية من أجل الوصول إلى تركيب إلكتروني مستقر، أي حالة تكون فيها جميع إلكترونات التكافؤ موزعة بشكل أمثل بين الذرات المختلفة.

توجد عدة أنواع من الروابط الكيميائية، من بينها الروابط الأيونية والتساهمية والمعدنية. تتكوّن الروابط الأيونية بين الأيونات الموجبة والسالبة، بينما تتكوّن الروابط التساهمية عندما تتشارك الذرات في الإلكترونات. أمّا الروابط المعدنية فتتكوّن بين الذرات المعدنية التي تتشارك إلكترونات التكافؤ.

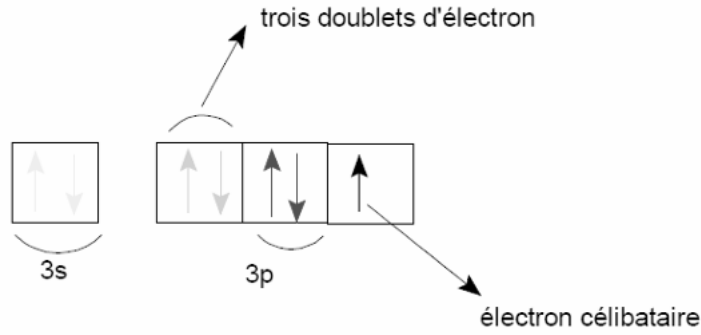
### VI. التصوّر الكلاسيكي للرابطة الذرية

يعتمد التصوّر الكلاسيكي للرابطة الذرية على نظرية الأوكيت، التي تنصّ على أن الذرات تميل إلى تكوين روابط كيميائية من أجل إكمال طبقتها الخارجية بالإلكترونات والوصول إلى تركيب إلكتروني مستقر  $ns^2np^6$ ، أي وجود ثمانية إلكترونات خارجية. وقد طُرحت هذه النظرية من قبل لويس وكوسل في بداية القرن العشرين.

#### 1.VI. طبقة التكافؤ

طبقة التكافؤ هي الطبقة الإلكترونية الخارجية المشغولة بالإلكترونات في الذرة، أي الطبقة التي تمتلك أكبر عدد كمي رئيسي  $(n)$  وتُسمّى الإلكترونات الموجودة فيها بالإلكترونات التكافؤ، وهي المسؤولة عن الخصائص الكيميائية للعنصر وتشارك في تكوين الروابط الكيميائية بين الذرات

مثال  $17\text{Cl} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$  في هذه الحالة العدد الكمي الرئيسي  $(n)$  الأكبر هو 3



نلاحظ أن طبقة التكافؤ تحتوي على ثلاثة أزواج من الإلكترونات وإلكترون منفرد واحد

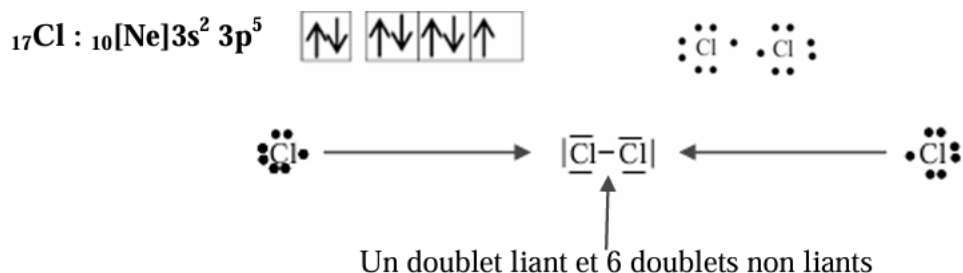
## 2.VI. قاعدة الاوكتت Octet

تنص قاعدة الثمانية أو الاوكتت على أن معظم الذرات تسعى إلى تحقيق الاستقرار من خلال امتلاك ثمانية إلكترونات في طبقة التكافؤ (الطبقة الخارجية). ويُعدّ هذا التركيب مستقرًا لأنه يشبه تركيب الغازات النبيلة.  $ns^2np^6$

• الاستثناءات:

- ذرتا الهيدروجين والهيلوم تكونان مستقرتين بوجود إلكترونين فقط.
- بعض عناصر الدورة الثالثة وما بعدها مثل الفوسفور والكبريت والكلور يمكنها أن تمتلك أكثر من ثمانية إلكترونات في طبقة التكافؤ.

### مثال



زوج رابط و6 أزواج غير رابطة

كل ذرة من الكلور تكون محاطة بـ 8 إلكترونات (4 أزواج إلكترونية)، وبالتالي فإن قاعدة الثمانية محترمة.

## 3.VI. تمثيل لويس

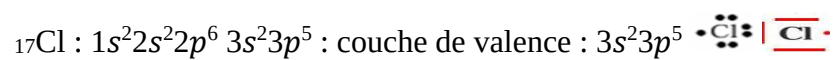
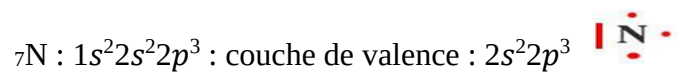
تمثيل لويس هو مخطط يوضّح إلكترونات التكافؤ للذرة والطريقة التي يتم بها مشاركتها أو انتقالها عند تكوين الروابط الكيميائية.

في هذا النموذج، يُوضّع رمز العنصر في الوسط:

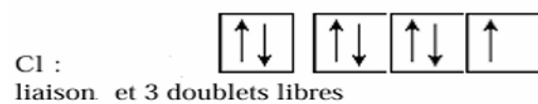
- تُمثّل الإلكترونات المنفردة بنقاط.
- تُمثّل أزواج الإلكترونات (الرابطية وغير الرابطية) إمّا بنقطتين متجاورتين أو بخط (—) عندما تشارك في رابطة كيميائية.

# مثال

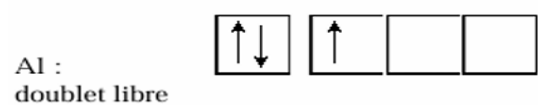
❖ الذرات



❖ الجزيئات



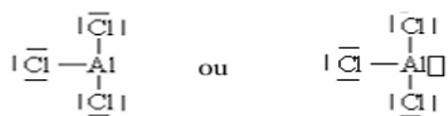
1 liaison possible



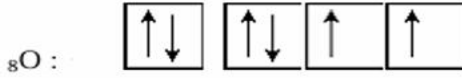
1 liaison possible



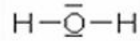
3 liaisons possibles et 0 doublet



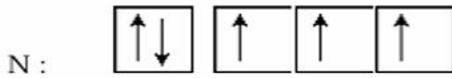
H<sub>2</sub>O :



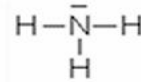
2 liaisons possibles



NH<sub>3</sub>



3 liaisons possibles



#### 4.VI. أنواع الروابط الكيميائية

##### I. الروابط القوية

لكسر الروابط القوية، يجب توفير طاقات تفكيك تتراوح بين 200 و 500 كيلوجول لكل مول من الرابطة ثنائية الذرات (أي حوالي 50 إلى 100 كيلو كالوري لكل مول، أو حوالي 2 إلى 5 إلكترون فولت لكل رابطة).

يمكن تمييز أربعة أنواع رئيسية للروابط القوية:

أ. الرابطة التساهمية – تمثيل لويس

ب. الرابطة الأيونية

ت. الرابطة المستقطبة – العزم ثنائي القطب الكهربائي

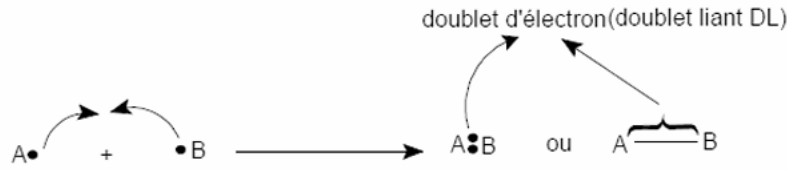
ث. الرابطة المعدنية

##### أ- الرابطة التساهمية

تتكوّن الروابط التساهمية بين ذرات متعادلة ذات كهروسالبية متقاربة.

- عندما تقترب ذرتان، يقوم كل منهما بتقديم إلكترون منفرد من طبقة التكافؤ (إلكترون وحيد في مداره).

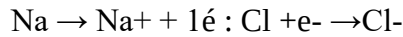
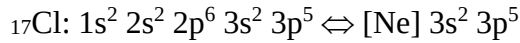
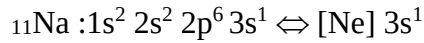
- تتشارك الإلكترونات المنفردة لتشكيل زوج إلكتروني مشترك، وهو ما يُكوّن الرابطة التساهمية بين الذرتين A و B.
- إلكترونات التكافؤ (أي إلكترونات الطبقات الخارجية) تُوضع في أزواج مشتركة لتكوين رابطة واحدة أو أكثر.
- الرابطة الأحادية: زوج إلكتروني واحد مشترك → دائماً رابطة قوية. تسمى  $\sigma$
- الرابطة المزدوجة (مثل  $O_2$  أو الرابطة الثلاثية مثل:  $N_2$ )
  - تحتوي على رابطة أو رابطتين  $\pi$  إضافيتين إلى جانب الرابطة  $\sigma$  الرئيسية.
  - الروابط  $\pi$  أضعف من الروابط  $\sigma$  ، لكنها تظل ضمن فئة الروابط القوية.

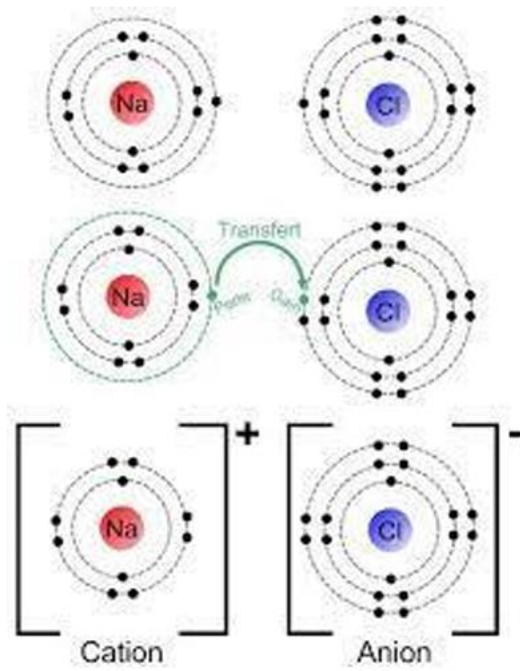


#### ب- الرابطة الأيونية

تُعتبر الرابطة الأيونية نوعاً من الروابط الكيميائية التي تتكوّن بين أيونات موجبة (كاتيونات) وأيونات سالبة (أنيونات).

- تنشأ هذه الرابطة نتيجة الجذب الكهروستاتيكي بين الشحنات المعاكسة، مما يؤدي إلى تكوين مركب أيوني.
- المثال الكلاسيكي: كلوريد الصوديوم ( $NaCl$ ) ، المكوّن من أيونات الصوديوم الموجبة ( $Na^+$ ) وأيونات الكلور السالبة ( $Cl^-$ ).
- في  $NaCl$ : يقوم كل ذرة صوديوم بتخلي عن إلكترون التكافؤ لذرة كلور، مكونة بذلك رابطة أيونية.
- عندما يفقد الصوديوم إلكترون  $3s^1$ ، فإنه يحصل على التركيب الإلكتروني المستقر للنيون ( $Ne$ )





الرابطية الأيونية لكلوريد الصوديوم (NaCl)

#### ت- الرابطية المستقطبة – العزم ثنائي القطب الكهربائي

الرابطية الكيميائية بين ذرتين تُسمى رابطية مستقطبة عندما تختلف كهروسالبيةتهما. في هذه الحالة تتجذب إلكترونات الرابطية نحو الذرة الأعلى كهروسالبية، فتكتسب شحنة جزئية سالبة ( $\delta^-$ )، بينما تكتسب الذرة الأقل كهروسالبية شحنة جزئية موجبة ( $\delta^+$ ).

تُعدّ الرابطية التساهمية البحتة والرابطية الأيونية البحتة حالتين حدّيتين، وبينهما توجد روابط أيونية-تساهمية (مستقطبة) ذات طابع مختلط. لذلك فإن أي رابطية بين ذرتين مختلفتين تكون، بدرجة ما، جزئياً أيونية. مثال ذلك جزيء  $H_2O$ ، حيث تؤدي كهروسالبية الأكسجين العالية إلى استقطاب روابط O-H وظهور شحنة صغيرة  $\delta^-$  على الأكسجين وشحنة صغيرة  $\delta^+$  على الهيدروجين.

#### • العزم ثنائي القطب الكهربائي

لنعتبر جزيئاً ثنائي الذرة A-B، حيث تكون الذرة A أكثر كهروسالبية من الذرة B. في هذه الحالة تتجذب زوجة إلكترونات الرابطية نحو الذرة A، مما يؤدي إلى استقطاب الرابطية A-B. فتكتسب الذرة A شحنة جزئية سالبة ( $\delta^-$ )، بينما تكتسب الذرة B شحنة جزئية موجبة ( $\delta^+$ ).

تتراوح قيمة الشحنة الجزئية  $\delta$  بين 0 (رابطة غير مستقطبة، حيث تتقاسم الذرتان الإلكترونات بالتساوي) و 1 (رابطة أيونية، حيث تكون الذرتان متأينتين كليًا  $A^-$  و  $B^+$ )

يتميز ثنائي القطب الكهربائي بعزمه ثنائي القطب  $\mu$  ، و الذي يعطى بالعلاقة

$$\mu = q \times d_{A-B}$$

حيث:

- $d$  هي المسافة الفاصلة بين الشحنتين، أي طول الرابطة  $A-B$  ، وتقاس بالمتري (m) ،
- $q$  هي الشحنة الجزئية الفعالة، وتقاس بالكولوم (C).

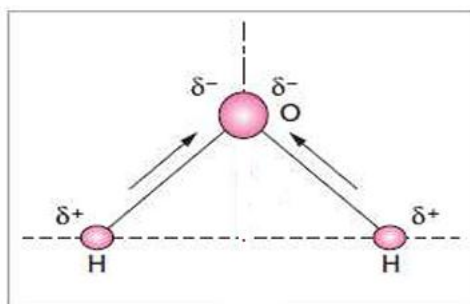
و

$$q = \pm \delta \cdot e$$

$$\mu = |\delta| \cdot e \times d_{A-B} \text{ (C.m)}$$

وحدة العزم ثنائي القطب في النظام الدولي للوحدات هي كولوم.متري (C.m) غير أنه في الكيمياء يُستعمل غالبًا الديبي (D) Debye.

$$1D \text{ (Debye)} = 3,336 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$$



جزيء  $H_2O$  السهمان الممتدان على طول الرابطتين يمثلان مركبتي العزم ثنائي القطب الكهربائي.

## • الطابع الأيوني الجزئي للرابطة

يُعبّر عن مدى قرب الرابطة الكيميائية من أن تكون أيونية أو تساهمية. نسبة الطابع الأيوني  $i\%$  في الرابطة بين الذرتين A و B ترتبط بقيمة الشحنة الجزئية  $\delta$ :

1. إذا كانت  $\delta=0$  تكون الرابطة تساهمية بنسبة  $100\%$ ، إذن  $i\%=0\%$ .

2. إذا كانت  $\delta=1$  تكون الرابطة أيونية بنسبة  $100\%$ ، إذن  $i\%=100\%$ .

$$\% \text{ionique (A-B)} = \delta \cdot 100 = \frac{\mu_{\text{réel}}}{\mu_{\text{ionique}}} \cdot 100$$

حيث :

$$\mu_{\text{ionique}} = e \cdot d_{A-B} \text{ و } \delta = \frac{\mu_{\text{réel}}}{\mu_{\text{ionique}}}$$

مثال

H-F

$$\mu_{\text{réel}} = 1,98 \text{ D}$$

$$d_{A-B} = 0,92 \text{ \AA} = 0,92 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$\mu_i = e \cdot d_{A-B} = 1,6 \cdot 10^{-19} \times 0,92 \cdot 10^{-10} = 4,42 \text{ D}$$

$$i\% = 0,45 \Rightarrow = 45\% \text{ بالتالي}$$

## ث- الرابطة المعدنية

الرابطة المعدنية هي نوع من الروابط الكيميائية التي تتكوّن بين ذرات المعادن. في هذه الرابطة، لا تبقى إلكترونات الغلاف الخارجي مرتبطة بذرة واحدة فقط، بل تتحرك بحرية بين جميع ذرات المعدن، ما يُسمى بـ "بحر الإلكترونات". هذا البحر من الإلكترونات يسمح للذرات المعدنية بالتماسك معاً. ومن خلال هذه الرابطة، تتميز المعادن بخصائص مثل التوصيل الكهربائي، والليونة، واللمعان.

## II الروابط الضعيفة

تتميز الروابط الضعيفة بطاقة تفكك تتراوح تقريباً بين 1 و 40 كيلوجول·مول<sup>-1</sup>. تنشأ هذه الروابط نتيجة قوى تماسك تؤثر بين ذرات غير قادرة على تكوين روابط تكافؤية، أو بين جزيئات تكون فيها الروابط القوية قد تشبعت بالفعل. يوجد نوعان رئيسيان من الروابط الضعيفة:



ا- الرابطة الهيدروجينية،

ب- روابط فان دير فال Van der Waals .

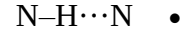
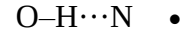
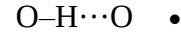
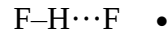
ا- الرابطة الهيدروجينية

تتكوّن الرابطة الهيدروجينية بين ذرة هيدروجين مرتبطة تساهميًا بذرة عالية الكهروسالبية، وذرة أخرى عالية الكهروسالبية تنتمي إلى جزيء مجاور وتملك زوجًا إلكترونيًا حرًا.

عمليًا، أكثر الذرات مشاركة في تكوين الروابط الهيدروجينية هي الفلور (F) ، الأكسجين (O) والنترجين (N)

يميل الهيدروجين في هذه الحالة إلى أن يكون مشتركًا جزئيًا بين الذرتين الإلكترونيتين، مما يؤدي إلى تكوّن رابطة هيدروجينية تُسمّى أيضًا جسرًا هيدروجينيًا.

أمثلة:



ب- روابط او تفاعلات Van der Waals

روابط فان دير فال هي تفاعلات ضعيفة تنشأ بين الذرات أو الجزيئات نتيجة التجاذب بين شحنات جزئية. وهي تمثل مجموعة من التفاعلات بين الجزيئية الضعيفة.

داخل الجزيء، تكون الإلكترونات في حركة مستمرة، مما يؤدي إلى تدبذبات في توزيع الشحنة الكهربائية. هذه التدبذبات تُنشئ ثنائيات قطب مؤقتة يمكنها أن تُحدث ثنائيات قطب مستحثة في الجزيئات المجاورة. وينتج عن هذا التفاعل قوى تشتت لندن، وهي أحد أنواع قوى فان دير فال.

### III. هندسة الجزيئات: نظرية جيليسبي (VSEPR) (Valence Shell Electron Pair Repulsion) تدافع الأزواج الإلكترونية لطبقة التكافؤ

1. **نظرية جيليسبي (VSEPR)** هي نموذج بسيط وفعل يسمح بالتنبؤ النوعي بهندسة الجزيئات التساهمية الصغيرة. ويعتمد هذا النموذج على مبدأ تنافر أزواج الإلكترونات في طبقة التكافؤ للذرة المركزية وسعيها إلى اتخاذ وضعية فراغية تقلل هذا التنافر أي بحيث تكون المسافات بينها أكبر ما يمكن.

يُمثل الجزيء أو الأيون بالصيغة  $AX_nE_p$  حيث:

- **A** الذرة المركزية
- **X** الذرات المرتبطة بالذرة المركزية
- **n** عدد الأزواج الإلكترونية الرابطة
- **E** الأزواج الإلكترونية غير الرابطة
- **P** عدد الأزواج غير الرابطة

#### 2. قواعد جيليسبي (VSEPR)

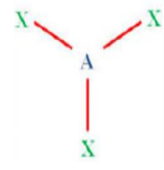
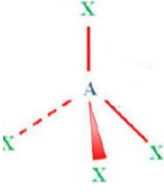
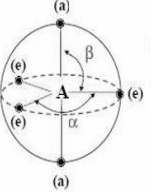
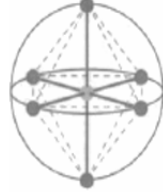
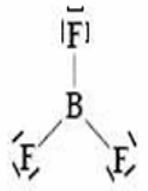
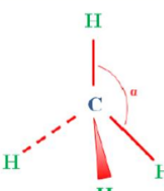
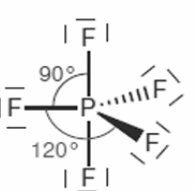
- تُعتبر جميع أزواج الإلكترونات في غلاف التكافؤ للذرة المركزية A (سواء كانت رابطة أو غير رابطة) موزعة حول الذرة المركزية، ويمكن تمثيلها على سطح كرة مركزها نواة الذرة.
  - تنتظم أزواج الإلكترونات في الفراغ بطريقة تؤدي إلى تقليل التنافر الإلكتروني فيما بينها، أي بحيث تكون أبعد ما يمكن بعضها عن بعض.
- تعتمد هندسة الجزيء على العدد الكلي للأزواج الإلكترونية المحيطة بالذرة المركزية أي  $(n + p)$ ، حيث تتوزع هذه الأزواج في الفراغ بطريقة تقلل التنافر فيما بينها، مما يحدد الشكل الهندسي للجزيء.

| عدد الأزواج $(n + p)$ | الشكل الهندسي                                | الزوايا                  |
|-----------------------|----------------------------------------------|--------------------------|
| 2                     | خطي Linéaire                                 | $180^\circ$              |
| 3                     | مثلثي مستو Trigonale plane                   | $120^\circ$              |
| 4                     | رباعي السطوح Tétraédrique                    | $109.5^\circ$            |
| 5                     | ثنائي هرم ثلاثي القاعدة Bipyramide trigonale | $90^\circ$ و $120^\circ$ |
| 6                     | ثمانى السطوح Octaédrique                     | $90^\circ$ و $180^\circ$ |

### 3. الجزيئات من النوع $AX_n$ ذات الروابط البسيطة

الجزيئات من النوع  $AX_n$  ذات الروابط البسيطة هي جزيئات تتكون من ذرة مركزية A مرتبطة بـ n ذرات طرفية X بواسطة روابط تساهمية بسيطة.

- يتم أولاً رسم صيغة لويس للجزيء أو الأيون.
- يتم تحديد عدد أزواج الإلكترونات المحيطة بالذرة المركزية (الأزواج الرابطة في هذه الحالة)
- ومن ثم يتم استنتاج الهندسة الإلكترونية، ثم الهندسة الجزيئية للجزيء أو الأيون.

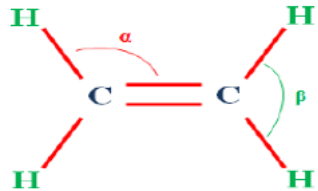
| نوع الجزيئات                    | $AX_2$                        | $AX_3$                                                                               | $AX_4$                                                                              | $AX_5$                                                                              | $AX_6$                                                                              |
|---------------------------------|-------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| عدد الأزواج الإلكترونية الرابطة | 2                             | 3                                                                                    | 4                                                                                   | 5                                                                                   | 6                                                                                   |
| هندسة الجزيئ                    | $X-A-X$                       |  |  |  |  |
| امثلة                           | $H-Be-H$                      |  |  |  |  |
|                                 | خطي<br>( $\alpha=180^\circ$ ) | مثلثي مستو<br>( $\alpha=120^\circ$ )                                                 | رباعي السطوح<br>( $\alpha=109.5^\circ$ )                                            | ثنائي هرم ثلاثي<br>القاعدة ( $\alpha=120^\circ$ )<br>$\beta=90^\circ$               | ثمانى السطوح<br>( $\alpha=90^\circ$ )                                               |

#### 4. الجزيئات من النوع $AX_n$ ذات الروابط المتعددة

- نعد عدد الروابط حول الذرة المركزية، مع اعتبار كل رابطة متعددة كأنها رابطة واحدة فقط.
- نستنتج هندسة الجزيء أو الأيون بناءً على تقليل التنافر بين الإلكترونات.

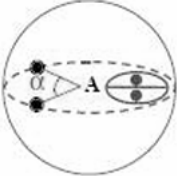
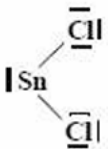
##### ملاحظات مهمة:

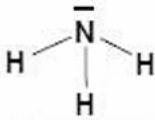
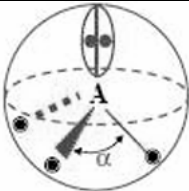
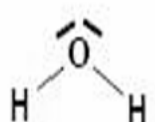
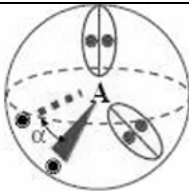
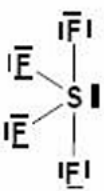
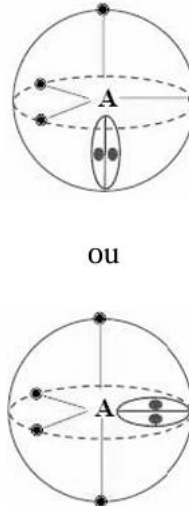
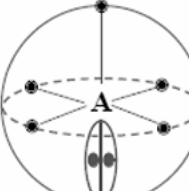
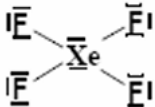
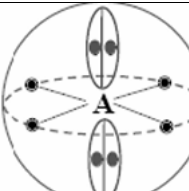
- الرابطة المتعددة تسبب تنافراً أكبر من الرابطة البسيطة.
- الرابطة الثلاثية تسبب تنافراً أكبر من الرابطة الثنائية.
- الزوايا بين الروابط التي تحتوي على روابط ثنائية تكون عادةً أكبر من تلك التي تحتوي على روابط بسيطة.

| نوع الجزيئات | $AX_2$                                                                             | $AX_3$                                                                            |
|--------------|------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|
| هندسة الجزيء |  |  |
|              | خطي ( $\alpha=180^\circ$ )                                                         | $\alpha = 117,4^\circ, \beta = 121,3^\circ$<br>مثلثي مستوي                        |

#### 5. الجزيئات من النوع $AX_nE_p$

- نعد العدد الكلي لأزواج الإلكترونات (الرابطة وغير الرابطة) حول الذرة المركزية، دون التمييز بينها في البداية.
- نستنتج هندسة الجزيء أو الأيون بناءً على تقليل التنافر بين هذه الأزواج الإلكترونية.
- الأزواج غير الرابطة تسبب تنافراً أكبر من الأزواج الرابطة.
- الزاوية بين زوجين من الأزواج غير الرابطة تكون أكبر من الزاوية بين زوجين من الأزواج الرابطة.

| نوع الجزيئات | هندسة الجزيء                                                                         | مثال                                                                                |
|--------------|--------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| $AX_2E$      |  |  |

|                                                                                     |                                                                                               |           |
|-------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
|    |             | $AX_3E$   |
|    |             | $AX_2E_2$ |
|    |  <p>ou</p> | $AX_4E$   |
|  |           | $AX_5E$   |
|  |           | $AX_4E_2$ |

#### IV. المدارات او الأفلاك الجزيئية الرابطة و غير الرابطة

##### ❖ الأفلاك الجزيئية الرابطة

هي أفلاك جزيئية تتكون نتيجة التراكب او التداخل البناء للمدارات الذرية بين ذرتين مرتبطتين. تتميز هذه الأفلاك بطاقة أقل من مدارات الذرات الأصلية، مما يؤدي إلى استقرار الجزيء. تعمل الإلكترونات الموجودة في هذه الأفلاك على تعزيز تكوين الرابطة الكيميائية بزيادة كثافة الإلكترونات بين نواتي الذرتين.

##### ❖ الأفلاك الجزيئية المضادة للرابطة

هي أفلاك جزيئية تتكون نتيجة التراكب او التداخل الهدام للمدارات الذرية. تمتلك هذه الأفلاك طاقة أعلى من مدارات الذرات الأصلية، مما يؤدي إلى عدم استقرار الجزيء. الإلكترونات الموجودة في هذه الأفلاك تقلل من كثافة الإلكترونات بين النواتين، وبالتالي تضعف أو تمنع تكون الرابطة الكيميائية.

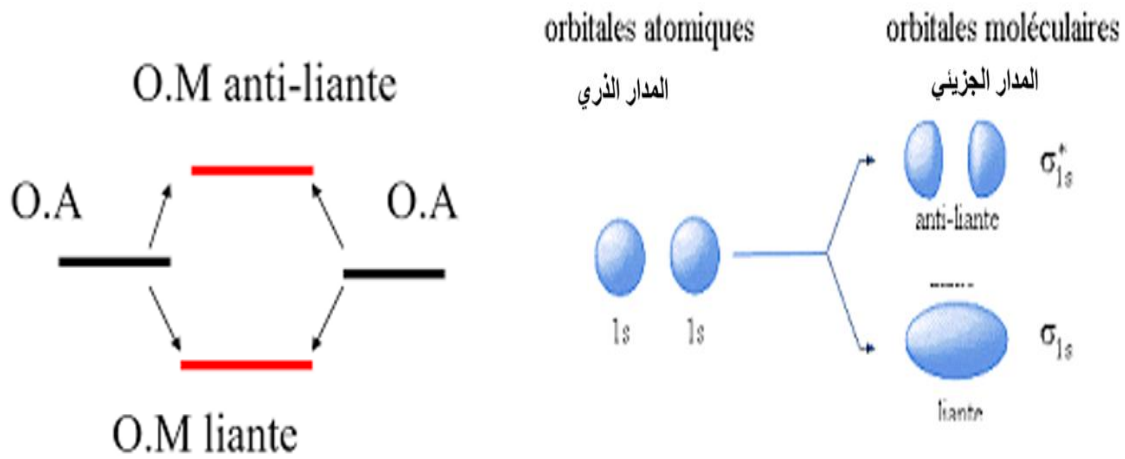
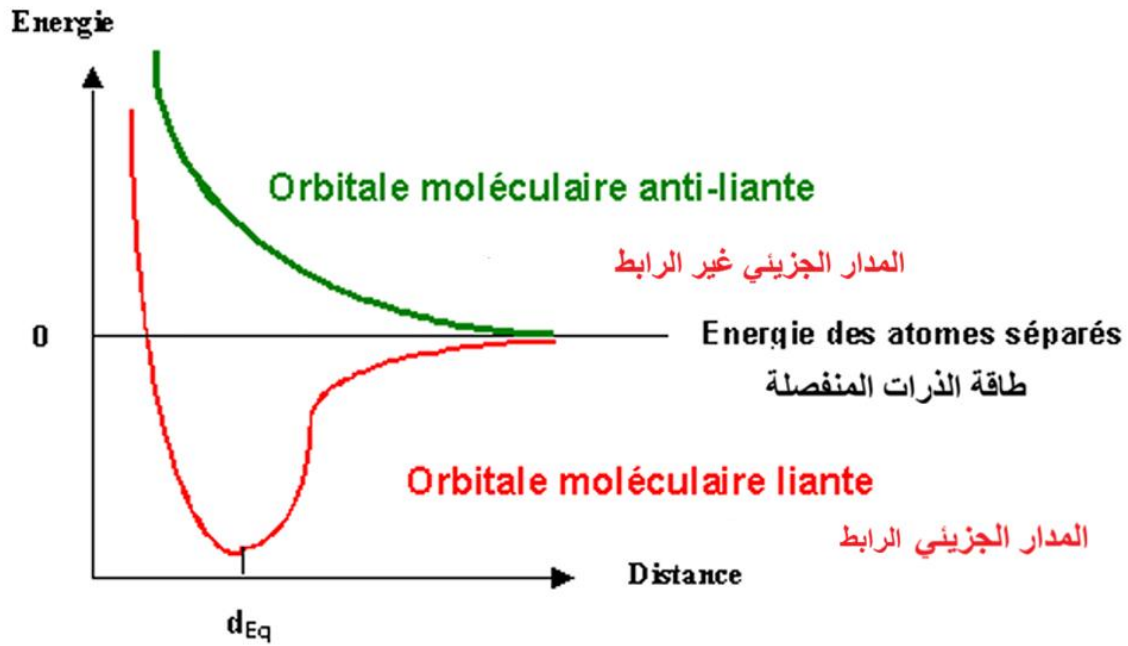
#### V . تداخل المدارات الذرية - نظرية المدارات الجزيئية (T.O.M) – طريقة LCAO

##### 1-مبدأ النظرية

نظرية المدارات الجزيئية هي طريقة في الكيمياء الكمية تُستخدم لوصف البنية الإلكترونية للجزيئات. تعتبر نظرية المدارات الجزيئية أن الذرات المرتبطة تفقد فرديتها، ويُنظر إلى الجزيء كوحدة متكاملة. تُساهم جميع الإلكترونات في تكوين الروابط الجزيئية، ويُعد الجزيء مجموعة من النوى محاطة بسحابة إلكترونية ناتجة عن جميع إلكترونات الذرات المرتبطة. يمثل كل مدار جزيئي منطقة احتمال وجود إلكترون في الجزيء، وكما هو الحال في المدار الذري، لا يمكن للمدار الجزيئي أن يحتوي على أكثر من إلكترونين بسبينين متعاكسين. تُستخدم نظرية المدارات الجزيئية للتنبؤ بالخواص الإلكترونية للجزيئات مثل الطاقة، الاستقرار، الهندسة الجزيئية، والروابط الكيميائية الناتجة عنها.

##### 2- الجانب الطاقى

يؤدي حل معادلة شرودنغر إلى تحديد طاقات المدارين الجزيئيين. نلاحظ أن طاقة المدار الجزيئي الرابط أقل من طاقة الذرات المنفصلة، مما يدل على استقرار الجزيء. وعلى العكس من ذلك، فإن المدار الجزيئي المضاد للرابطة يمتلك طاقة أعلى، وهو ما يؤدي إلى عدم استقرار الجزيء.



## 2- قواعد تحديد بناء المدارات الجزيئية

يُفسّر تداخل المدارات الذرية كيفية ارتباط الذرات لتكوين الجزيئات. عندما يتداخل أو يتحد مداران ذريان، يمكن أن تتكوّن رابطة كيميائية.

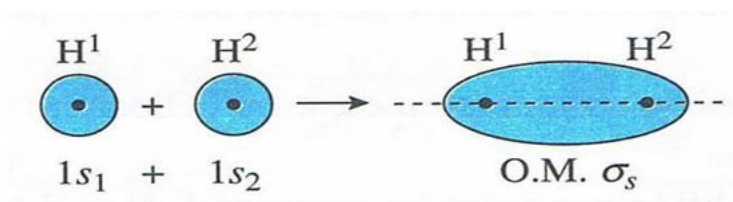
يوجد نوعان رئيسيان من التداخل:

- **التداخل المحوري** الذي يؤدي إلى تكوين رابطة سيغما ( $\sigma$ ) ، وهي رابطة قوية.
  - **التداخل الجانبي** الذي يؤدي إلى تكوين رابطة بي ( $\pi$ ) ، وهي أضعف من رابطة سيغما.
- تتكوّن المدارات الجزيئية من تداخل المدارات الذرية. ويلعب تداخل المدارات دورًا مهمًا في تحديد شكل الجزيئات وخواصها الكيميائية.

#### ❖ قاعدة عامة:

- ❖ من أجل تركيب المدارات الذرية تركيبًا خطيًا، يجب أن تتحقق الشروط الثلاثة التالية:
- ❖ يجب أن تكون طاقات المدارات الذرية المترابطة متقاربة.
- ❖ بين فصوص المدارات الذرية يجب أن تتداخل أو تتحد بشكل أقصى.
- ❖ يجب أن تمتلك المدارات الذرية المتداخلة نفس التماثل بالنسبة لمحور الرابطة (محور الجزيء).

مثال :  $H_2: 1s(1) + 1s(2) = \sigma$



### 3. رتبة الرابطة

ترتيب الرابطة هو مقياس لقوة الرابطة الكيميائية بين ذرتين في جزيء. يُحسب ترتيب الرابطة بالعلاقة التالية :

$$\text{رتبة الرابطة} = \frac{\text{عدد الإلكترونات الرابطة} - \text{عدد الإلكترونات المضادة للرابطة}}{2}$$

- الرابطة الأحادية لها ترتيب رابطة يساوي 1 ،
  - الرابطة الثنائية لها ترتيب 2 ،
  - الرابطة الثلاثية لها ترتيب 3 .
- يمكن أن تكون القيمة أيضًا كسرية في بعض الحالات، مثل الروابط العطرية.
- كلما زاد ترتيب الرابطة، كانت الرابطة أقوى وأقصر، مما يجعل الجزيء أكثر استقرارًا.
  - إذا كان ترتيب الرابطة صفرًا، فإن الرابطة غير موجودة ولا يمكن للجزيء أن يتواجد.



#### 4. الخواص المغناطيسية

يتم تحديد التوزيع الإلكتروني الأساسي للجزيء عن طريق ملء المدارات الجزيئية ذات الطاقة الأقل بالإلكترونات التكافؤية، وذلك وفقاً لمبدأ باولي وقاعدة هوند.

- إذا كان الجزيء يحتوي على إلكترون واحد على الأقل غير مزدوج في التوزيع الإلكتروني، فإنه يُعتبر (بارامغناطيسياً).
- أما إذا لم يحتوي على إلكترونات فردية، فإنه يُعتبر (ديامغناطيسياً).