





مدخل إلى الكيمياء الهندسية

آلاء حسام السركل _ نتالي بشيش _ جورج حنا خلوق الأخرس _ تبودور الزيات _ عمر ظيطاني

الإهداء

" إلى أمي وأبي"

يا من منحتماني الحياة حبًا، ورسمتما خطواتي عطاء، وأحطتماني برعاية لا تعرف الحدود إليكما أهدي ثمرة جهدي هذه، اعترافًا بفضلكما العظيم، ووفاءً لتضحيات نقشت في روحي دروس الصبر والإصرار، وجعلت منى ما أنا عليه اليوم

وإلى أختي ومدربتي العظيمة قدوتي الأولى في حياتي النور الذي أضاء دربى في كل خطوة خطيتها في هذا

المجال

الكوتش مريم حسام السركل

مدخل إلى الكيمياء الهندسية

تعد هندسة الجزيء من الركائز الأساسية في فهم الكيمياء الحديثة إذ أنها تكشف عن الترتيب الفراغي للذرات داخل الجزئيات كما أنها تفسر كيف يؤثر هذا الترتيب على خواص المادة الفيزيائية والكيميائية فالشكل الهندسي ليس مجرد مظهر بصري بل هو انعكاس مباشر لتوزيع الالكترونات وقوى التنافر فيما بينها

مفاتيح الفصل:

- الشحن الموضعية
 - تمثیل لویس
- نظرية تنافر أزواج الإلكترونات في غلاف التكافؤ VSEPR
 - العلاقة بين شكل الجزيء وقطبيته

4-1 الشحن الموضعية (Formal Charges):

هي أداة حسابية نستخدمها لتحديد التوزيع الالكتروني الأكثر استقراراً وواقعية في جزيء تساهمي (خصوصا عندما يكون لهذا الجزي أكثر من تركيب لويس ممكن)

أو بمعنى آخر تساعدنا على اختيار الشكل الأكثر احتمالاً للجزيء من بين عدة أشكال.

لماذا تستخدمها... أو ما الهدف الأساسي من تطبيقه؟ الهدف هو اختيار تمثيل لويس الأكثر استقراراً للجزيء

#قاعدة هامة

تمثيل لويس الأكثر استقرارا هو الذي:

- تكون الشحنات الموضعية قريبة من الصفر
- لا يوجد شحنات موضعية كبيرة مثل +2 أو 2
- تكون الشحنة الموضعية السالبة على الذرة الأكثر كهرسلبية

(يكون لديها القدرة على جذب الالكترونات)

. كيف يمكننا حساب الشحنة الموضعية لأي ذرة في جزيء؟

من خلال العلاقة الآتية:

الشحنة الموضعية = عدد إلكترونات التكافؤ في الذرة الحرة - (عدد الإلكترنات غير الرابطة + نصف عدد الإلكترونات الرابطة)

 $FC = V - (L + 1 \setminus 2B)$

ح طفعًا

مثال محلول:

اختار تمثیل لویس الصحیح لجزيء CO2

الحل:

$$FC = V - (L - 1 \setminus 2B)$$

$$a # FC(carbon) = 4 - 4 = 0$$

$$FC(right oxygen) = 6 - 5 = +1$$

FC (lift oxygen)=
$$6-7=-1$$

$$b \# FC (carbon) = 4 - 4 = 0$$

$$FC (oxygen) = 6 - 6 = 0$$

:CI: CH₃

<u>الحل المناسب هو b لأن إذا كانت الشحنة الموضعية للذرة صفر كان تمثًّ</u> لويس أكثر استقرار

تطبيقات تدريبية:

1# احسب الشحنة الموضعية لذارت الفلور والأكسجين والبور في المركب الأنى؟

2 # أي هذه الذرات المشار إليها بسهم في المركبات التالية تكون فيها الشحنة الموضعية

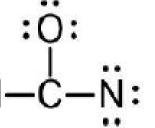
للذرة تساوي +1؟

3 # ما هي السَّحَن الموضعية لذرات الكريون والأوكسجين في المركب الآئي:

4 # فيما يلى 3 صيغ لويس لأيونات السيانات NCO cyanate أيَّها هي الصيغة الصححة؟

$$[\ddot{N}=C=\ddot{O}]^{-}\cdot\underline{B}$$
 $[:N\equiv C-\ddot{O}:]^{-}\cdot\underline{A}$

5 # ما هي السّحَن الموضعية لذرات الكريون والأوكسجين والنتروجين في المركب الآتي ؟



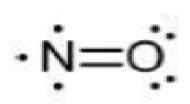
N:-2

*استثناءات قاعدة الثمانية الإلكترونية *

1 # الجزيئات ذات عدد فردي من الإلكترونات (الجذور الحرة):

هذه الجزيئات لا يمكن أن تحقق الثمانية أبدا لأن عدد الإلكترونات فردي أحدها سيبقى غير مزدوج (الكترون وحيد).

ومن أشهرها:



* أكسيد النيتريك (NO): يحتوي النيتروجين على 7 إلكترونات و الأكسجين على 7 إلكترونات في غائف التكافؤ. الإلكترونات الإجمالية هي 11 (عدد فردي) في البنية الأكثر استقرارا يحظى النيتروجين بـ 7 إلكترونات والأكسجين بـ 8.

ىلاف 7 _ O=N-Ö: ثاني أكسيد النيتروجين (NO₂): يحتوي على 17 إلكترونا التكافؤ عدد فردي ذرة النيتروجين محاطة الكترونات فقط.

2 # الجزيئات التي لا تكمل الثمانية الإلكترونية:

هذه الجزيئات تحتوي في طبقتها السطحية على أقل من ثماني إلكترونات.

ومن أشهرها:

: Ë—B—Ë : : E :

*ثلاثي فلوريد البورون (BF_3): يحتوي على 24 الكترونا في غلاف التكافؤ ، وذرة البور 8 الكترونات فقط .

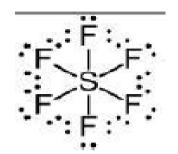
∞ H−Be−H

هيدريد البيريليوم (BeH₂): يحتوي على 4 إلكترونات في غلاف التكافؤ ،وذرة البيريليوم محاطة بإلكترونين فقط .

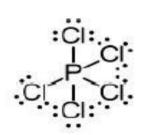
3 # الجزيئات التي تتجاوز قاعدة الثمانية الإلكترونية:

هي الجزيئات التي تحتوي على أكثر من 8 إلكترونات حول الذرة المركزية.

ومن أشهرها:



* سداسي فلوريد الكبريت (SF₆): حيث ان الذرة المركزية (الكبريت) محاطة ب12 إلكترونا



* خماسي كلوريد الفسفور (PCI₅): حيث أن ذرة الفوسفور محاطة ب 10 إلكترونات

2- 4 تمثیل لویس (lewis structure):

- * هو طريقة لتمثيل الذرات والجزيئات بحيث تبين:
- إلكترونات التكافؤ (الإلكترونات في الغلاف الخارجي للذرة.)
- كيفية ارتباط الذرات مع بعضها بروابط تساهمية (مشاركة إلكترونات).
 - الأزواج المنفردة من الإلكترونات (التي لا تشارك في الرابطة).
 - * خطوات رسم تمثيل لويس
 - 1 # احسب عدد إلكترونات التكافؤ الكلية لكل الذرات في الجزيء.
 - 2 # حدد الذرة المركزية (عادة الذرة الأقل كهرسلبية ما عدا H).
- 3 # وزع الإلكترونات كروابط أولية: ضع رابطة واحدة (خط) بين الذرة المركزية وكل ذرة محيطة (الرابطة = 2 الكترونات) .

مفعة (

4 #وزع الإلكترونات المتبقية كأزواج منفردة حول الذرات لإكمال "قاعدة الثمانية (8) الكترونات حول كل ذرة غير H، والهيدروجين يكتفي بـ2 الكترون).

5 # تحقق من الخطوات السابقة، بالإضافة إلى التحقق من الشحنة الموضعية لكل ذرة.

اذن: تمثيل لويس يقتصر على معرفة الإلكترونات والروابط والأزواج المنفردة بدون الاهتمام بشكل الجزيء أو الزوايا

مثال محلول:

ارسم تمثيل لويس المناسب لجزيء الماء:

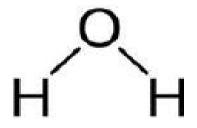
1 # H=1x2=2 electron

O = 6 electron

المجموع الكلي = 8 إلكترونات تكافؤ للجزيء

2 # نضع ذرة الأكسجين في المنتصف

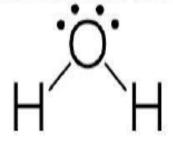
#3



4 # الأكسجين لديه الآن 2 روابط= 4 الكترونات باقي من المجموع (الكترونات 4 = 4 – 8)نضعها كأزواج منفردة على o

5 # الشكل النهائي:

Lewis Structure for H2O



تطبيقات تدريبية:

 $^{\circ}$ NH₃ المركب المناسب المركب $^{\circ}$ 8

7 # ما هي صيغة لويس المثلى للمركب OF_2 ؟

 H_2SO_4 المركب H_2SO_4 المركب H_2SO_4

9 # ارسم تمثيل لويس لأيون السيانيد " CN"

10 # ارسم تمثيل لويس لحمض النمل HCOOH

11 # اختار تمثيل لويس المناسب لأيون النترات " "NO3"

4-3 نظرية تنافر الإلكترونات (VSEPR):

تعد هذه النظرية من أهم الأساسيات في الكيمياء الهندسية (الهندسة الجزيئية).

* فكرتها الأساسية بسيطة جدًا *

- إن أزواج الإلكترونات (سواء كانت روابط أو أزواج حرة) في غلاف التكافؤ للذرة المركزية تتنافر فيما بينها. ولتقليل هذا التنافر، تترتب هذه الأزواج الإلكترونية في الفراغ بأبعد مسافة ممكنة بينها. هذا الترتيب الفراغي هو ما يحدد الشكل الهندسي (الهيئة) الجزيئي للجزيء.

أنواع الأزواج:

1. أزواج رابطة (Bonding pairs): الإلكترونات المشاركة في تكوين رابطة. 2 زواج غير رابطة (Lone pairs) تبقى على الذرة المركزية وتؤثر بقوة على الشكل.

مثال	الزاوية التقريبية	الشكل الهندسي للجزيء	فعالية غير رابطة	فعالية رابطة	هندسة الفعاليات الإلكترونية	عدد الفعاليات الإلكترونية
CO ₂	180°	خطي	0	2	خط <i>ي</i> Linear	2
BF ₃	120°	مثلث مستوي	0	3	مثلث مستو <i>ي</i> Trigonal	3
[NO ₃] ⁻	119º	محن <i>ي</i> (مقوس) bent	1	2	planer	3
CH ₄	.1095°	هرم رياعي الوجوه	0	4		
NH ₃	107°	هرم مثلث <i>ي</i> Trigonal Pyramidal	1	3	هرم رباع <i>ي</i> الوجوه Tetrahedra ا	4
H ₂ O	1045°	محن <i>ي</i> (مقوس)	2	2		
PCI ₅	120° & 90°	هرم مثلث <i>ي</i> مضاعف	0	5		
SF ₄	120° & 90°	متأرجح seesaw	1	4	هر م مثلثی	
CIF ₃	90 °	شکل حرف T Shaped T	2	3	هرم مثلث <i>ي</i> مضاع <i>ف</i> Trigonal bipyramad	5
XeF ₂	180°	خطي	3	2		

صفحة 13

مفحة
4
\vdash

مثال	الزاوية التقريبية	الشكل الهندسي للجزيء	فعالية غير رابطة	فعالية رابطة	هندسة الفعاليات الإلكترونية	الفعاليات الإلكترونية
SF ₆	90°	هرم ثماني الوجوه	0	6		
BrF ₅	90°	هرم مربع <i>ي</i> Square pyramidal	1	5	هرم ثمان <i>ي</i> الوجوه octahedral	6
XeF ₄	90°	مربع مست <i>وي</i> Square planar	2	4		

*الأشكال الهندسية للجزىء *

التمثيل	الشكل الهندسي	المثال
	LINEAR	CO₂
	Trigonal planer	\mathbf{BF}_3

التمثيل	الشكل الهندسي	المثال
	Bent	[NO ₂]
	Tetrahedral	CH4
	Trigonal pyramidal	NH ₃
	Bent	H ₂ O
3	Trigonal bipyramidal	PCI ₅

Seesaw	SF4
T_ Shaped	CIF ₃
Linear	XeF ₂
Octahedral	SF ₆
Square_ pyramidal	BrF ₅
Square_planar	XeF4

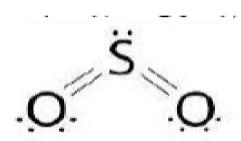
تأثير الإلكترونات غير الرابطة والروابط المضاعفة على زوايا الربط

يمكننا إضافة بعض التحسينات الى نظرية لتفسير بعض الانحرافات عن التوضعات الهندسية المثالية الموجودة في الجدول السابق ، فالماء والميتان والنشادر يملكون هندسة فعاليات إلكترونية بشكل هرم ولكن زوايا الربط تختلف فيما بينهم قليلا رباعي الوجوه

مثال محلول

حدد الشكل الهندسي لثنائي أكسيد الكبريت:

1 # Lewis structure:



تحديد عدد مناطق الإلكترونات حول الذرة المركزية يوجد حول الذرة المركزية فعاليتين رابطتين (الأكسجين) وفعالية غير رابطة (زوج الكتروني حر)

تحديد الهندسة الجزيئية (الحقيقية) من المعطيات السابقة نستنتج ان الشكل محني (مقوس) ملاحظة هامة:

إذا كان هناك رابطة أحادية أو ثنائية أو ثلاثية تعتبر فعالية رابطة واحدة والزوج الإلكتروني يعتبر فعالية غير رابطة واحدة

تطبیقات تدریبیة:

13 الشكل الهندسي لأيونات النترات 13

<u>B</u> # شكل حرف T

<u>A</u> # مثلث مستوي

هرم رباعي الوجوه

C # هرم مربعی

14 # ما هو الشكل الهندسي لفلوريد الاكسجين OF₂ :

B # محني (مقوس)

A # خطی

D # جميعها خاطئة

C # هرم مثلتي

18 مفعة 18

15 # ما هو الشكل الهندسي لمركب يوديد الفلور IF₅ ؟

<u>A</u> # هرم مثلثي مضاعف <u>B</u> # مربع مستوي

<u>D</u> # خطي <u>D</u> # هرم مربعي

16 # اختار الحل المناسب لكل مما يلي:

PCl ₃	PF ₅	XeO ₄	
متأت مستوي	متأرجح	هرم رياعي الوجوه	A
هرم مثلتي	شکل حرف T	مزيح مستَوي	В
هرم مثلتي	هرم مثلتي مضاعف	هرم رياعي الوجوه	С
	جميعها خاطئة		D

4 - 4 العلاقة بين شكل الجزيء وقطبيته:

"تتحدد قطبية الجزيء ليس فقط باختلاف الكهرسلبية بين الذرات بل أيضاً بشكل الجزيء؛ فإذا كان الشكل متماثلاً ألغت العزوم الثنائية بعضها وأصبح الجزيء غير قطبي، أما إذا كان غير متماثل تراكمت العزوم في اتجاه واحد فأصبح الجزيء قطبي."

* ما معنى قطبية الجزيء؟

الجزيء يكون قطبي إذا كان فيه فرق في الكهرسلبية بين الذرات (يعني الإلكترونات موزعة بشكل غير متساوي)، فينشأ شحنات جزئية طرف فيه + شحنة جزئية موجبة وطرف فيه -- شحنة جزئية سالبة). أما إذا توزعت الإلكترونات بشكل متماثل، فالجزيء يكون غير قطبي.

* دور شكل الجزىء:

الشكل الفراغي للجزيء يحدد إذا تتوزع الشحنات بشكل متماثل

(فتلغى بعضها بـ غير قطبى أو بشكل غير متماثل فتظهر قطبية).

مفحة	
6	
$\overline{}$	

		الجزيئات		
	عديدة الذرات		الذرة	ثنائية
نوجد أزواج غير	ج غير رابطة	لا نُوجِد أزوا	الذر نين مختلفتين	النرتين متشابهتين
توب ارواج میر رابطهٔ			HCl	Cl ₂
NH ₃	الذرات المحيطة غير منشابهة CH3Cl	الذرات المحيطة متشابهة CH4	قطبى	غير قطبي
قطبي	قطبى	غير قطبي		

مثال محلول:

"قطبية جزيء الماء " H2O"

الروابط - قطبية الشكل منحن (V-shape)

تنائي الأقطاب ما يلغي بسبب وجود فعالية غير رابطة بل يتجمع بنفس الاتجاه ، ومنه فإن جزيء الماء قطبي.

تطبیقات تدریبیة:

17- أي من المركبات المذكورة هو مركب قطبي :

O₂ #<u>B</u>

BeCl₂ # <u>A</u>

CCl₄ # D

NH₃ #<u>C</u>

18 - أي من المركبات المذكورة هو مركب غير قطبي

PCl₃ # <u>B</u>

PF₃ #<u>A</u>

XeF₂ # <u>D</u>

SF₄ # <u>C</u>

19 - إن جزيء تنائي أكسيد الكريون:

<u>B</u> # غير قطبي

<u>A</u> # فطبي

20 - أي من المركبات المذكورة هو مركب غير قطبي

BeCl₂ # B

 $H_2O # A$

<u>D</u> # جميع الإجابات خاطئة

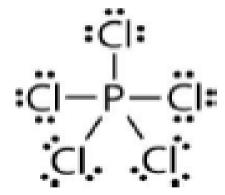
CH2Cl2 # C

حلول التطبيقات التدريبية

9

12

#10



c #1

A # 2

B#3

A#4

A # 5

B#6

D#7

B#8

A # 11

A #13

B # 14

D # 15

C#16

C#17

A # 18

B#19

D#20

Š	

2 A 2 A 13 14 15 16 17 He e point 4 Be point 4 A 5 6 7 8 9 10 11 12 AI 15 16 17 He epoint 9 point 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 AI 15 16 17 He epoint 10 point 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 AI 15 16 17 4 4003 4 point 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 AI 15 16 17 4 4003 4 point 4 5 6 7 8 9 10 11 12 AI 15 16 17 18 4 point 4 4 25 2 2 2 <th>(223)</th> <th>Fr</th> <th>87</th> <th>132.9</th> <th>င္သ</th> <th>55</th> <th>85.47</th> <th>Rb</th> <th>37</th> <th>39.10</th> <th>K</th> <th>19</th> <th>22.99</th> <th>Na</th> <th>Ξ</th> <th>6.941</th> <th>Li</th> <th>သ</th> <th>1.008</th> <th>Н</th> <th>1</th> <th>1A</th>	(223)	Fr	87	132.9	င္သ	55	85.47	Rb	37	39.10	K	19	22.99	Na	Ξ	6.941	Li	သ	1.008	Н	1	1A
13	(226)	Ra	88	137.3	Ba	56	87.62	Sr	38	40.08	Ca	20	24.31	$_{ m g}$	12	9.012	Be	4	2A	2		
13	(227)	Ac	89	138.9	La	57	88.91	Υ	39	44.96	Sc	21	3B	3								
13 14 15 16 17 17 17 18 9 10 11 12 18 19 10 11 12 18 19 10 11 12 18 19 10 11 12 18 19 10 11 12 13 14 15 16 17 17 17 17 18 18 18 18	(261)	Rſ	104	178.5	Hf	72	91.22	\mathbf{Zr}	40	47.88	Ti	22	4B	4								
13	(262)	Db	105	180.9	Ta	73	92.91	Nb	41	50.94	V	23	5B	Ŋ								
13	(263)	Sg	106	183.8	W	74	95.95	M_0	42	52.00	Cr	24	6B	6								
13 14 15 16 17 3A 4A 5A 6A 7A 4B 5 6 7 8 9 108 11 112 113 114 115 116 117 110 111 112 113 114 115 116 117 111 112 113 114 115 116 117 111 112 113 114 115 116 117 111 112 113 114 115 116 117 111 112 113 114 115 116 117 111 112 128 1289 (289) (289) (294) 128 129 (289) (289) (294) 128 128 128 128 128 13 14 115 116 117 14 15 16 17 15 16 17 17 18 18 18 18 18 18 18	(262)	Bh	107	186.2	Re	75	(98)	Tc	43	54.94	Mn	25	7B	7								
13	(265)	H_{S}	108	190.2	Os	76	101.1	Ru	44	55.85	Fe	26	8B	8								
13 14 15 16 17 3A 4A 5A 6A 7A 7A 4A 5A 6A 7A 7A 7A 7A 7A 7A 7	(266)	Mt	109	192.2	Ir	77	102.9	Rh	45	58.93	C_0	27	8B	9								
13 14 15 16 17 3A 4A 5A 6A 7A B C N O F 10.81 12.01 14.01 16.00 19.00 112 Al Si P S Cl 2B 26.98 28.09 30.97 32.07 35.45 30 31 32 33 34 35 Zn Ga Ge As Se Br 65.39 69.72 72.61 74.92 78.97 79.90 48 49 50 51 52 53 Cd In Sn Sb Te I 112.4 114.8 118.7 121.8 127.6 126.9 80 81 82 83 84 85 Hg Ti Pb Bi Po At 200.6 204.4 207.2 209.0 (209) (210) 1112 113 114 115 116 <	(281)	Ds	110	195.1	Pt	78	106.4	Pd	46	58.69	Z	28	8B	10								
13 14 15 16 17 3A 4A 5A 6A 7A 5 6 7 8 9 B C N O F 10.81 12.01 14.01 16.00 19.00 13 14 15 16 17 Al Si P S Cl Al Si P S Cl 26.98 28.09 30.97 32.07 35.45 31 32 33 34 35 Ga Ge As Se Br 69.72 72.61 74.92 78.97 79.90 49 50 51 52 53 In Sn Sb Te I 114.8 118.7 121.8 127.6 126.9 81 82 83 84 85 TI Pb Bi Po At 204.4 207.2 209.0 (209) (210)	(272)	$\mathbf{R}\mathbf{g}$	111	197.0	Au	79	107.9	Ag	47	63.55	Cu	29	1B	=								
14 15 16 17 4A 5A 6A 7A 6 7 8 9 C N O F 12.01 14.01 16.00 19.00 14 15 16 17 Si P S Cl 28.09 30.97 32.07 35.45 32 33 34 35 Ge As Se Br 72.61 74.92 78.97 79.90 50 51 52 53 Sn Sb Te I 118.7 121.8 127.6 126.9 Pb Bi Po At 207.2 209.0 (209) (210) 114 115 116 117 289 (289) (299) (294)	(285)	Cn	112	200.6	$_{ m Hg}$	80	112.4	Cd	48	65.39	Zn	30	2B	12					_			
15 16 17 5A 6A 7A 7 8 9 N O F 14.01 16.00 19.00 15 16 17 P S Cl 30.97 32.07 35.45 As Se Br 74.92 78.97 79.90 51 52 53 Sb Te I 121.8 127.6 126.9 83 84 85 Bi Po At 209.0 (209) (210) 115 116 117 Mc Lv Ts (289) (293) (294)	(286)	Nh	113	204.4	TI	81	114.8	In	49	69.72	Ga	31	26.98	\mathbf{AI}	13	10.81	В	5	3A	13		
16 17 6A 7A 8 9 O F 16.00 19.00 16 17 S Cl 32.07 35.45 34 35 Se Br 78.97 79.90 52 53 Te I 127.6 126.9 84 85 Po At (209) (210) 116 117 Lv Ts (293) (294)	(289)	F	114	207.2	Pb	82	118.7	Sn	50	72.61	Ge	32	28.09	Si	14	12.01	С	6	4A	14		
17 7A 9 9 19.00 17 Cl 35.45 35 Br 79.90 53 1 126.9 85 At (210) 117 Ts (294)	(289)	Mc	115	209.0	Bi	83	121.8	Sb	51	74.92	As	33	30.97	P	15	14.01	Z	7	5A	15		
	(293)	$\mathbf{L}_{\mathbf{V}}$	116	(209)	P_0	84	127.6	Te	52	78.97	Se	34	32.07	S	16	16.00	0	∞	6A	16		
2 He 4.003 10 Ne 20.18 18 39.95 39.95 83.80 Kr 83 K	(294)	T_{S}	117	(210)	At	85	126.9	1	53	79.90	Br	35	35.45	Ω	17	19.00	F	9	7A	17		_
	(294)	$_{\mathrm{g}}$	118	(222)	Rn	86	131.3	Xe	54	83.80	Kr	36	39.95	Ar	18	20.18	Ne	10	4.003	He	2	8A

	(259)	(258)	(257)	(252)	(251)	(247)	(247)	(243)	(244)	(237)	238.0	231.0	232.0
Lr	N _o	Md	Fm	Es	Cf	Bk	Cm	Am	Pu	Νp	U	Pa	Th
103	102	101	100	99	98	97	96	95	94	93	92	91	90
_	173.0	168.9	167.3	164.9	162.5	158.9	157.3	152.0	150.4	(145)	144.2	140.9	140.1
	Υb	Tm	Er	H_0	Dy	ТЪ	G	Eu	Sm	Pm	N	Pr	Ce
71	70	69	68	67	66	65	64	63	62	61	60	59	58

