شیمی ۲ – فصل چهارم– ترکیبات کووالانسی– ساختار لوویس

ساختار لوویس

ساختار لوویس یک فرمول ساختاری است که در آن هسته و الکترون‌های لایه‌های درونی را به وسیله نماد اتمی عنصر و پیوندهای کووالانسی را به وسیله جفت نقطه‌هایی در کنار نماد شیمیایی عنصر نمایش می‌دهند. به طور خلاصه ساختار لوویس نموداری است که آرایش الکترون‌های ظرفیت را پیرامون اتم‌های یک مولکول نشان می‌دهد.

بار قراردادی و ساختار لوویس

تعداد الکترون‌های لایه ظرفیت یک اتم در حالت آزاد ممکن است با مجموع تعداد الکترون‌های مشترک(پیوندی) و غیر مشترک اتم در ساختار لوویس آن نشان داده شود. اگر تعداد الکترون‌های اطراف اتم در ساختار لوویس کمتر از تعداد الکترون‌های ظرفیت اتم باشد، به تعداد کمبود الکترون به اتم ، بار مثبت نسبت داده می‌شود در حالیکه اگر تعداد الکترون‌ها در پیرامون اتم بیشتر از الکترون‌های ظرفیت باشد به تعداد الکترون‌های اضافی به اتم بار منفی نسبت داده می‌شود. بدیهی است که اگر این دو تعداد مساوی باشند، اتم عنصرموردنظر در ساختار لوویس مورد بحث بار قراردادی صفر خواهد داشت.

محاسبه بار قراردادی اتم: برای محاسبه بار قراردادی هر اتم در یک ساختار لوویس معین می‌توان از معادله زیر استفاده کرد.

$$\text{بارقراردادی اتم} = \text{(الکترون‌های لایه ظرفیت اتم در حالت آزاد)} - \text{(الکترون‌های غیرمشترک)} - \frac{1}{2}\text{(الکترون‌های مشترک)}$$

تذکر : در یک ترکیب خنثی جمع (جبری) بارهای قراردادی اتم‌ها برابر صفر است و در یک یون، جمع جبری بارهای قراردادی اتم‌ها با بار الکتریکی آن یون برابر است.

نکات مهم در رسم ساختار لوویس یک ترکیب

۱ـ ساختار لوویسی که در آن بار قراردادی وجود ندارد بهتر از ساختاری است که بار قراردادی دارد.

۲ ـ ساختار لوویسی که بارهای قراردادی آن بزرگ است، نادرست‌تر از ساختار لوویسی می‌باشد که بارهای قراردادی کوچکتری دارد.

۳ـ اتم‌هایی که در یک مولکول یا یون به هم پیوند داده شده‌اند. نباید بار قراردادی همنام داشته باشند.

۴ـ توزیع بار قراردادی مثبت و منفی باید با الکترونگاتیوی اتم‌ها هماهنگی داشته باشد. اتم دارای الکترونگاتیوی بیشتر نباید حامل بار قراردادی مثبت باشد.یعنی بار قراردادی مثبت از آن اتم با الکترونگاتیوی کمتر و بار قراردادی منفی از آن اتم با الکترونگاتیوی بیشتر باشد.

مراحل رسم ساختار لوویس یک ترکیب

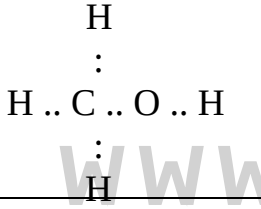
مراحل رسم ساختار لوویس یک ترکیب طی مراحل زیر صورت می گیرد.برای درک بهتر این مراحل ازمثال CH_3OH نیز استفاده می کنیم.

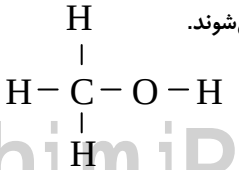
مرحله اول: تعداد الکترونهای لایه ظرفیت هریک از اتمهای عناصر موجود در ساختار ترکیب مورد نظر را مشخص می کنیم. الکترونهای لایه ظرفیت هریک از اتمهابرابر شماره گروه آن اتم است.همچنین اگر ترکیب دارای بار مثبت باشد به تعداد بارهای مثبت از کل الکترونهای لایه ظرفیت اتمهای ترکیب کم می کنیم ودر صورت منفی بودن بار ترکیب به تعداد بارهای منفی به الکترونهای لایه ظرفیت اضافه می کنیم.دراین مثال الکترونهای لایه ظرفیت ترکیب که حاصل الکترونهای لایه ظرفیت چهار اتم هیدروژن، یک اتم اکسیژن و یک اتم کربن است، برابر ۱۴ الکترون می باشد.

$$\text{تعداد الکترونهای لایه ظرفیت} = C + 4H + O = 4e + (4\times 1e) + 6e = 14e$$

مرحله دوم: از روی فرمول ترکیب اتم مرکزی را مشخص می کنیم.اتم مرکزی اتمی است که تعداد آن از بقیه کمتر (اتم با اندیس کمتر) و ظرفیت آن(عدد اکسایش آن) از بقیه بیشتر باشد. در صورتیکه دو اتم با تعداد کمتر ومساوی وجود داشته باشند هر کدام از آنها الکترونگاتیوی کمتری داشته باشد، اتم مرکزی محسوب می‌شود. باید توجه کرد که هیدروژن نمی‌تواند اتم مرکزی باشد به خاطر اینکه فقط می‌تواند یک پیوند کووالانسی با اتم‌های دیگرتشکیل دهد.به طور مثال در مولکول CH_3OH تعداد اتم‌های کربن و اکسیژن هر کدام برابر یک است اما چون الکترونگاتیوی کربن کمتر از اکسیژن است. بنابراین کربن اتم مرکزی محسوب می‌شود.پس از تعیین اتم مرکزی اتم‌های کناری موجود را در چهار جهت اصلی اتم مرکزی قرار می‌دهیم و بین هر یک از اتم‌های کناری و اتم مرکزی یک جفت الکترون به صورت نقطه قرار می‌دهیم که هر جفت الکترون به صورت یک خط کوتاه نشان داده می‌شود.

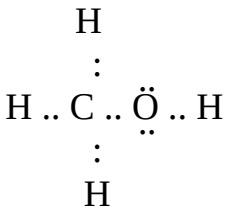
نکته: اتم هیدروژن نمی تواندبعنوان اتم مرکزی تعیین شود. درضمن هیدروژن متصل به اکسیژن (گروه هیدروکسید) وهیدروژنهای متصل به اتم نیتروژن به ترتیب از طریق اتم اکسیژن ونیتروژن به اتم مرکزی متصل می‌شوند.

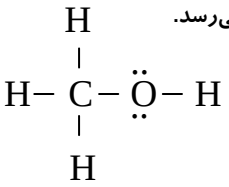




www.ShimiPedia.ir

مرحله سوم: با قرار دادن جف الکترون‌های آزاد در اطراف هر یک از اتم‌های ترکیب آنهارا به آرایش هشتایی پایدار می‌رسانیم به استثناء اتم هیدروژن که با تشکیل پیوند کووالانسی ساده با اتمهای دیگر به آرایش گاز هلیم می‌رسد.





مرحله چهارم: با استفاده از فرمول زیر بار قراردادی هر یک از اتم‌های ترکیب را تعیین می کنیم.

بارقراردادی اتم = (الکترون‌های لایه ظرفیت اتم در حالت آزاد) – (الکترون‌های غیرمشترک) – $\frac{۱}{۲}$ (الکترون‌های مشترک)

بار قراردادی اتم کربن $= ۴ - ۰ - \frac{۱}{۲} \times (۸) = ۰$

بار قراردادی اتم هیدروژن $= ۱ - ۰ - \frac{۱}{۲} \times (۲) = ۰$

بار قراردادی اتم اکسیژن $= ۶ - ۴ - \frac{۱}{۲} \times (۴) = ۰$

مرحله پنجم: جمع جبری بارهای قراردادی اتم‌ها در یک ترکیب خنثی بایستی برابر صفر و در یک یون جمع جبری بارهای قراردادی اتم‌ها بایستی برابر بار آن یون باشد.همچنین الکترونهای پیوندی وغیر پیوندی موجود در ساختار لوویس رسم شده بایستی با الکترونهای ظرفیت محاسبه شده در مرحله اول برابر باشد. چون در مثال ذکر شده این تساوی برقرار است بنابراین ساختار لوویس $CH_۳OH$ همان ساختار رسم شده در مرحله سوم است.

توضیح ۱ـ اگر تساوی ذکر شده در مرحله پنجم(برابر بودن بار کل ترکیب با جمع جبری بارهای قراردادی اتمهای موجود در ترکیب) برقرار نباشد از روی دو اتم مجاور هم که با هم پیوند دارند یک زوج الکترون حذف می‌کنیم و به جای آن یک خط بین دو اتم مورد نظر رسم می‌کنیم تا مرتبه پیوند بیشتر شود. سپس بارهای قراردادی را دوباره حساب می‌کنیم. این عمل را تا جایی ادامه می‌دهیم که تساوی مورد نظر برقرار شود.

توضیح ۲ـ اگر روی دو اتم تشکیل دهنده یک پیوند بار قراردادی مثبت و منفی قرار بگیرد پیوند از نوع داتیو است که اتم دارای بار قراردادی مثبت دهنده الکترون و اتم دارای بار قراردادی منفی گیرنده الکترون است.

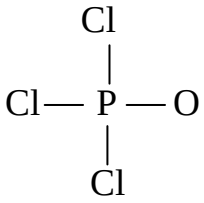
رسم ساختار لوویس چند ترکیب

مثال ۱- رسم ساختار لوویس $(POCl_۳)$

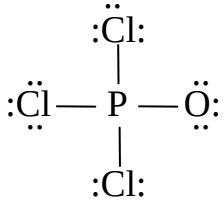
مرحله اول: در این ترکیب الکترون‌های لایه ظرفیت اتم فسفر و اکسیژن و سه اتم کلر را محاسبه می‌کنیم.

تعداد الکترونهای لایه ظرفیت $= P + O + ۳Cl = ۵e + ۶e + ۲۱e = ۳۲e$

مرحله دوم: اتم فسفر به عنوان اتم مرکزی بوده و اتم‌های کلر و اتم اکسیژن به عنوان اتم‌های کناری هستند.



مرحله سوم: با قرار دادن سه جفت الکترون غیر پیوندی هریک از این اتمها را به آرایش هشتایی می رسانیم.



مرحله چهارم: بار قراردادی هر یک ازاتم‌ها را تعیین می‌کنیم.

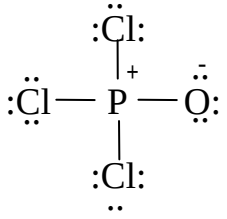
بار قراردادی اتم کلر $= ۷ - ۶ - \frac{۱}{۲} \times (۲) = ۰$

بار قراردادی اتم فسفر $= ۵ - ۰ - \frac{۱}{۲} \times (۸) = +۱$

بار قراردادی اتم اکسیژن $= ۶ - ۶ - \frac{۱}{۲} \times (۲) = -۱$

www.ShimiPedia.ir

مرحله پنجم: جمع جبری بارهای قراردادی برابر صفر بوده و از جمع ۳۲ الکترون لایه ظرفیت اتم‌ها، ۸ الکترون به عنوان الکترون‌های مشترک و ۲۴ الکترون به عنوان الکترون‌های غیر مشترک در اطراف اتم‌ها قرار گرفته‌اند تا اتم‌ها به آرایش هشتایی پایدار برسند. یک پیوند داتیو نیز بین فسفر و اکسیژن صورت گرفته است که فسفر دهنده‌ی الکترون و اکسیژن گیرنده‌ی الکترون است.

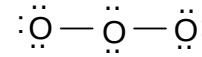


مثال ۲ ـ رسم ساختار لوویس اوزون(O_3)

مرحله اول: مجموع تعداد الکترونهای لایه ظرفیت سه اتم اکسیژن در این ترکیب برابر۱۸ است. $3O = 3\times(6e) = 18e$ = تعداد الکترونهای لایه ظرفیت

مرحله دوم: در این مولکول سه اتم اکسیژن وجود دارد که یکی از آنها را به عنوان اتم مرکزی و دو اتم دیگر را به عنوان اتمهای کناری در نظر می‌گیریم.

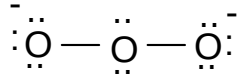
مرحله سوم: با قرار دادن جفت الکترون‌های غیر پیوندی در اطراف این سه اتم اکسیژن آنها را به هشتایی پایدار می‌رسانیم.



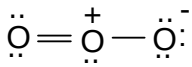
مرحله چهارم: بار قراردادی اتم‌های اکسیژن را حساب می‌کنیم. وضعیت دو اتم کناری با همدیگر یکسان بوده اما اتم اکسیژن مرکزی وضعیت متفاوتی دارد.

بار قراردادی اتم اکسیژن(اتم کناری) $= 6 - 6 - \frac{1}{2}\times(2) = -1$

بار قراردادی اتم اکسیژن(اتم مرکزی) $= 6 - 4 - \frac{1}{2}\times(4) = 0$



مرحله پنجم: در این مولکول یک جفت الکترون غیر پیوندی از یکی از اتم‌های کناری و یک جفت الکترون غیر پیوندی از اتم اکسیژن (اتم مرکزی) حذف کرده و بین آنها یک پیوند کووالانسی اضافه می‌کنیم. در این حالت بار قراردادی اتم اکسیژن (اتم مرکزی) بدلیل از دست دادن کامل یک الکترون برابر +۱ و جمع جبری بارهای قراردادی در این مولکول برابر صفر است.



باید دقت کردکه در این مولکول اتم اکسیژن با بار قراردادی مثبت الکترون‌های خود را در اختیار اتم اکسیژن کناری با بار قراردادی منفی قرار داده است و یک پیوند یک طرفه یا داتیو تشکیل شده است. در ضمن شکل مولکول اوزون به خاطر وجود یک جفت الکترون آزاد دز اطراف اتم مرکزی خمیده است. چون جفت الکترون اطراف اتم مرکزی بر پیوندهای موجود در بین اتم مرکزی و اتم‌های کناری نیروی دافعه وارد کرده و مولکول را از حالت خط راست خارج می‌کند.

ساختار(I) ساختار(II)

شکل هاي رزونانسي ⇔ هیبرید رزونانس

هر دو ساختار، ساختار لوویس مولکول اوزون را نشان می‌دهند و هر دو نیز از قاعده هشتایی تبعیت می‌کنند. با این تفاوت که در ساختارI پیوند دوگانه در سمت راست و در ساختارII پیوند دو گانه در سمت چپ قراردارد. احتمال هر دو ساختار با یکدیگر برابر است و هیچ کدام به تنهایی اعتبار ندارند.درضمن هر دو ساختار قابل تبدیل به یکدیگرندوهیچ‌یک ساختارهای رزونانسی شکل واقعی مولکول اوزون را نشان نمی‌دهند بلکه حالت واقعی مولکول به صورت یک هیبرید رزونانس نشان داده می‌شودکه میانگین دو شکل رزونانسی است.یعنی **هیبرید رزونانس** ترکیبی از شکلهای رزونانسی است که شکل واقعی مولکول را بخوبی نشان می دهد.

تذکر: ساختار لوویس SO_2 نیز مانند اوزون O_3 است با این تفاوت که در SO_2 اتم گوگرد اتم مرکزی است. مراحل رسم ساختار لوویس این ترکیب نیز مانند اوزون است در ضمن SO_2 نیز مانند اوزون دارای دو شکل روزنانس و هیبرید روزنانس است.

www.ShimiPedia.ir

استثناهایی در مورد قاعده هشتایی

۱- قاعده ذکر شده برای رسم ساختار لوویس ترکیبات، برای ترکیبات NO_2 و NO صدق نمی‌کند. اما برای NO_2^- صدق می‌کند. زیرا در NO_2 و NO مجموع الکترون‌های لایه ظرفیت اتم‌ها فرد است و به ترتیب برابر ۱۷ و ۱۱ الکترون می‌باشد. اتم نیتروژن در این دو ترکیب به جای ۸ الکترون دارای ۷ الکترون است. اما در مورد NO_2^- مجموع الکترون‌های ظرفیت در بین اتم‌ها و اطراف آنها برابر ۱۸ الکترون است.

۲- بیشتر ترکیب‌های بریلیم از قاعده هشتایی پیروی نمی‌کنند. زیرا این اتم در لایه ظرفیت خود ۲ الکترون داردو همیشه به جای ۴ جفت الکترون با دو جفت الکترون احاطه می‌شود. مانند مولکول BeF_2 که اتم‌های فلوئور به هشتایی رسیده‌اند. اما اتم بریلیم به هشتایی پایدار نرسیده است.

۳- ترکیب‌های بور نیز مانند ترکیب‌های بریلیم از قاعده هشتایی پیروی نمی‌کنند. چون در اطراف اتم بور در اغلب ترکیبات فقط سه جفت الکترون وجود دارد مانند مولکول BCl_3 که اتم‌های فلوئور به هشتایی پایدار رسیده‌اند. اما اتم بور به هشتایی پایدار نرسیده است.

۴- در برخی از مولکولها بیش از چهار جفت الکترون در اطراف اتم مرکزی وجود دارد. مانند PCl_5 که اتم فسفر در این مولکول پنج پیوند کووالانسی با پنج اتم کلر تشکیل داده است. اتم فسفر در اطراف خود پنج جفت الکترون (ده الکترون) داشته باشد. یعنی اتم فسفر ۲ الکترون بیشتر از هشتایی پایدار دارد.

۵- در برخی از مولکولها مانند SF_4 اتم گوگرد با چهار پیوند با چهار اتم فلوئور پیوند داده و در مولکول SF_6 اتم گوگرد شش پیوند با شش اتم فلوئور تشکیل داده است که در SF_4 در اطراف اتم گوگرد ۵ جفت الکترون (۴جفت پیوندی و ۱ جفت ناپیوندی) قرار داردو اتم گوگرد۲ الکترون بیشتر از هشتایی پایدار داردو در SF_6 اطراف اتم گوگرد شش جفت الکترون (۱۲ الکترون) قرار دارد. یعنی اتم گوگرد۴ الکترون بیشتر از هشتایی پایدار دارد.

۶- در XeF_4 در لایه ظرفیت زنون (Xe) ۱۲ الکترون وجود دارد و ساختار لوویس آن به این صورت می‌باشد.

۷- در $SnCl_2$ اتم قلع به آرایش شش تایی می‌رسد.

البته ترکیبات دیگری هم هستند که سعی کردیم ترکیبات شناخته شده را در این قسمت بیاوریم. بطور مثال ClF_3 را نیز جدی بگیرید.

موفق باشید– حسن عیسی زاده

www.ShimiPedia.ir