

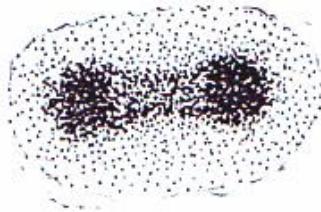
## چگونگی تشکیل پیوندهای کوالانسی

در واکنش بین فلزات و نافلزات، اتمهای فلزی به از دست دادن الکترون و اتمهای نافلزی به جذب الکترون گرایش دارند. در نتیجه، در این واکنشها، الکترونها از اتمی به اتم دیگر منتقل می‌شوند و ترکیبات یونی به وجود می‌آید.

وقتی اتمهای نافلزات بر هم اثر می‌کنند، انتقال الکترونی از اتمی به اتم دیگر رخ نمی‌دهد، زیرا توانایی جذب الکترون دو اتم، مشابه (و هرگاه هر دو اتم از یک عنصر باشند، یکسان) است. به این ترتیب به جای انتقال، الکترونها بین دو اتم قرار می‌گیرند و به اشتراک گذارده می‌شوند.

آنچه اتمهای یک مولکول را به هم نگه می‌دارد، پیوند کوالانسی است، که در آن دو اتم، در الکترونها پیوندی، شریکند. پیوند یگانه کوالانسی، متشکل از یک جفت الکترون (دارای اسپین مخالف) است، که اوربیتالی از هر دو اتم پیوند شده را اشغال می‌کند.

برای مثال، پیوندی را که بین دو اتم هیدروژن تشکیل می‌شود در نظر بگیرید. هر اتم تنها یک هیدروژن، تک الکترونی دارد که در یک اوربیتال  $1s$  به طور متقارن دور هسته آن توزیع شده است. وقتی دو اتم هیدروژن یک پیوند کوالانسی تشکیل می‌دهند، دو اوربیتال اتمی به نحوی همپوشانی می‌کنند که ابرهای الکترونی، در ناحیه بین دو هسته، یکدیگر را تقویت می‌کنند و احتمال یافتن الکترون در این ناحیه افزایش می‌یابد. طبق اصل طرد پائولی دو الکترون این پیوند باید اسپین مخالف داشته باشند. استحکام پیوند کوالانسی ناشی از جاذبه متقابل دو هسته مثبت و ابر منفی الکترونها پیوندی است.



نمایش توزیع الکترون در مولکول هیدروژن

مولکول هیدروژن را می‌توان با نماد  $H - H$  یا  $H$  نشان داد. در ساختار اول، جفت الکترون مشترک با دو نقطه و در ساختار دوم با یک خط کوتاه نشان داده شده است. این جفت الکترون پیوندی متعلق به کل مولکول هیدروژن است، ولی می‌توان تصور کرد که هر اتم هیدروژن، با دارا شدن دو الکترون (در تراز  $n = 1$ )، آرایش الکترونی پایدار گاز نجیب هلیم را پیدا کرده است. به عبارت دیگر، الکترونهای پیوندی دو بار به حساب می‌آیند، برای هر یک از اتمهای پیونددار شده یکبار.

فرمول هیدروژن،  $H_2$ ، نماینده یک واحد مستقل و مجزا موسوم به مولکول است و گاز هیدروژن متشکل از مجموعه‌ای از این مولکولهاست. در ترکیبات کاملاً یونی، مولکول وجود ندارد. فرمول سدیم کلرید، است که نشان‌دهنده ساده‌ترین نسبت کاتیونهای سدیم و آنیونهای کلرید در بلور سدیم کلرید است  $NaCl$  (نسبت ۱ به ۱). فرمولهایی از قبیل  $Na_3Cl_2$  یا  $Na_2Cl_3$ ، نادرستند، زیرا چنین واحدهای مستقل و مجازی (چنین مولکولهایی) در بلور سدیم کلرید وجود ندارند و این فرمولها ساده‌ترین نسبت یونی را نیز بیان نمی‌کنند. اما برای مواد کوالانسی فرمولهایی مثل  $H_2O_2$  می‌تواند درست باشد. این فرمول نشانه واحدی مستقل و مجزا (مولکول) است که دو اتم هیدروژن و دو اتم اکسیژن دارد.

ساختم مولکولها را، اغلب می‌توان با استفاده از نماد عناصر به همراه نقطه‌هایی که نماینده الکترون‌های والانس هستند، نشان داد. این فرمولهای الکترون - نقطه‌ای را ساختار والانس پیوندی یا ساختار لوئیس می‌نامند.



گیلبرت. ن. لوویس (1875-1946)

این نامگذاری به افتخار گیلبرت. ن. لوئیس، که این نظریه پیوند کوالانسی را در سال 1916 مطرح کرد انجام گرفته است. نظریه لوئیس تأکید می‌کند که اتمها برای رسیدن به آرایش الکترونی گازهای نجیب، پیوند کوالانسی تشکیل داده، مولکولها را بوجود می‌آورند. برای بیشتر اتمها معنی این گفته رسیدن به آرایش هشتایی است، ولی برای هیدروژن آرایش دو الکترونی هلیم پایدار است.

مولکول، هیدروژن دو اتمی است. برخی عناصر دیگر نیز به صورت مولکول دو اتمی وجود دارند. هر

اتم هالوژن (عنصر گروه VII A) هفت الکترون والانس دارد. با تشکیل یک پیوند ساده کوالانسی بین دو تا از

این اتمها، هر اتم به آرایش الکترونی هشتایی، که ویژه گازهای نجیب است، می‌رسد. مثلاً در مورد فلوئور،



تنها یک جفت الکترونی که بین دو اتم قرار گرفته است در دو اتم مشترک است و پیوند کوالانسی را

تشکیل می‌دهد. توجه کنید که در محاسبه هشتایی هر اتم، الکترونهای پیوندی دوبار به حساب می‌آیند،

برای هر اتم یکبار.

اغلب می‌توان تعداد پیوندهای جفت الکترونی را که یک اتم در یک مولکول بوجود می‌آورد از تعداد

الکترونهای مورد نیاز برای پر شدن پوسته والانس آن اتم، پیش‌بینی کرد. چون برای نافلرات، شماره گروه در

جدول با تعداد الکترونهای والانس برابر است، می‌توان پیش‌بینی کرد که عناصر گروه VII A مثل Cl (با هفت

الکترون والانس)، برای رسیدن به هشتایی پایدار یک پیوند کوالانسی؛ عناصر VI A مثل O و S (با شش

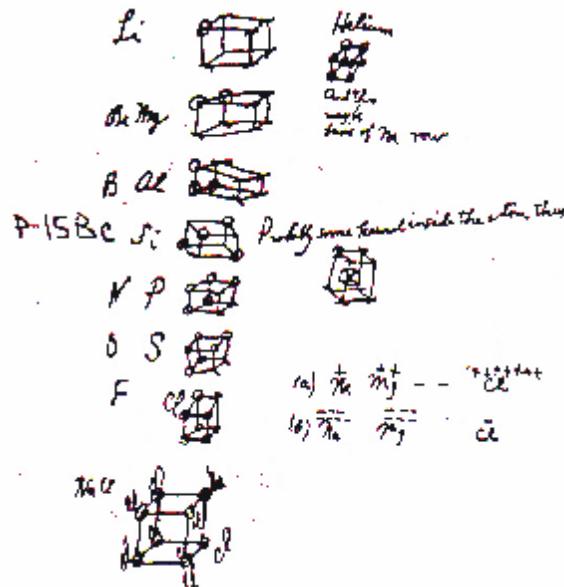
الکترون والانس) دو پیوند کوالانسی، عناصر VA مثل N و P (با پنج الکترون والانس) سه پیوند کوالانسی و

عناصر IVA مثل C (با چهار الکترون والانس) چهار پیوند کوالانسی بوجود خواهد آورد. ترکیبات

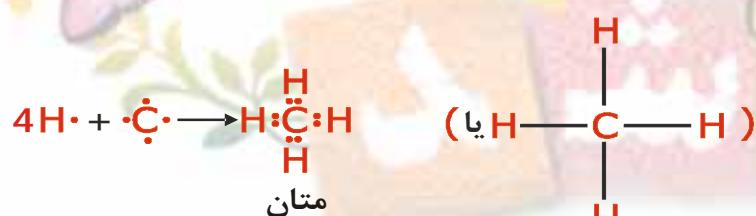
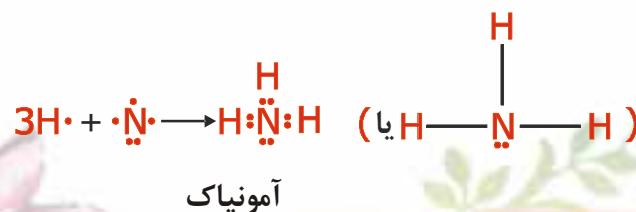
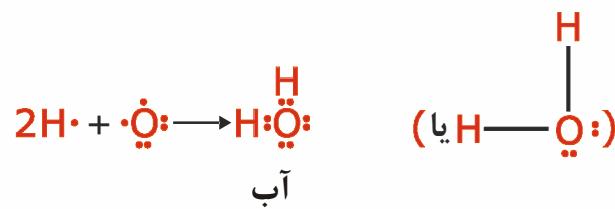
هیدروژن‌دار زیر را در نظر بگیرید:



هیدروژن کلرید



یادداشت‌های اصلی لوئیس درباره ساختار الکترونی اتمها. او از مکعب (که هشت گوشه دارد) استفاده کرد و هلیم (به اشتباه، مقصود او نبود) را با تمام گوشه‌های پرشده با الکترون (هشتایی) نشان داد. او می‌گوید: «این ممکن است پایه ردیف سدیم باشد» لوئیس با این آغاز، قاعده هشتایی برای تشکیل پیوند کوالانسی را تدوین کرد.



دقیق کنید که در این مولکولها، هر اتم هیدروژن را می‌توان دارای پوسته  $I = n$  کامل و بقیه اتمها را دارای ساختار هشتایی گاز نجیب دانست.

### بررسی پیوند کوالانسی از دیدگاه مکانیک موجی

بررسی جزئیات ماهیت پیوند کوالانسی اتم کار مشکلی است. از این رو، همواره توصیف ساده و مفیدی از آن مورد نظر می‌باشد. این توصیف ساده، از دیدگاه مکانیک موجی همان همپوشانی اوربیتالهای اتمی است که اساس تشکیل و معیار قدرت پیوند کوالانسی محسوب می‌شود. همپوشانی اوربیتالهای (در هم رفتن ابر الکترونی) دو اتم که ضمن نزدیک شدن آنها صورت می‌گیرد، موجب می‌شود تا دانسیته الکترونی در فضای بین هسته دو اتم افزایش یابد. این عمل میزان نیروهای جاذبه الکتریکی سیستم (نیروهای جاذبه بین هسته یک اتم و الکترونها اتم دیگر) را افزایش داده و آن را بر نیروهای دافعه الکتریکی سیستم (نیروهای دافعه بین هسته‌ها و نیروهای دافعه بین الکترونها لایه ظرفیت دو اتم) غلبه می‌دهد. در نتیجه، جاذبه‌ای بین دو اتم بوجود می‌آید که آنها را به یکدیگر اتصال می‌دهد. به بیانی دیگر، بین آنها پیوند کوالانسی برقرار می‌شود.

اولین نظریه در مورد بررسی چگونگی تشکیل پیوند کوالانسی بین دو اتم، براساس مدل موجی اتم، در سال 1927 توسط هایتلر و لاندن، در مورد پیوند در مولکول هیدروژن ارائه شد که به صورت زیربنای مفیدی برای بحث و بررسی در مورد پیوند در مولکولهای دیگر مورد استفاده قرار گرفت.

## نظریه پیوند ظرفیت (*V. B. T*)

این نظریه به منظور بسط و تعمیم نظریه هایتلر - لاندن و نیز توجیه خصلت جهت دار بودن پیوندهای کوالانسی، توسط پائولینگ و اسلیتر در سال 1931 ارائه شد و بر پایه دو فرض اساسی، یعنی، حالت والانس (حالت برانگیخته) اتم و هیبریداسیون اوربیتالهای لایه ظرفیت اتم مرکزی استوار است و اهمیت آن در پیشگویی شکل هندسی مولکولها و یونها است.

براساس این نظریه، ترکیبات پایدار، از پرشدن تمام اوربیتالهای پیوندی یا غیرپیوندی لایه ظرفیت اتمها حاصل می شوند و یک ترکیب موقعی بالاترین پایداری خود را بدست می آورد که اتم مرکزی آن به بالاترین عدد کوئور دیناسیون (بالاترین تعداد پیوند کوالانسی) خود برسد. شکل مولکول یا یون عمدتاً با توجه به خصلت جهت دار بودن اوربیتالهای اتمی قابل پیشگویی است. هر پیوند کوالانسی را بر اثر همپوشانی دو اوربیتال اتمی و تشکیل اوربیتال مولکولی پیوندی که دو الکترون پیوندی براساس اصل طرد پائولی با اسپینهای ناهمسو در آن قرار می گیرند (تا دافعه بین آنها به حداقل برسد)، بین دو اتم برقرار می شود. اوربیتالهای مولکولی، از نظر عدد کوانتمی، مفهوم فیزیکی تابع موج، احتمال و غیره، تفاوت اساسی با اوربیتالهای اتمی تشکیل دهنده خود ندارند و انرژی آنها برابر مجموع انرژی الکترونها پیوندی است. مهمترین تفاوت اوربیتالهای اتمی و مولکولی در این است که گسترش طولی اوربیتالهای مولکولی بیشتر است و الکترونها در آن تحت جاذبه هر دو هسته قرار دارد.