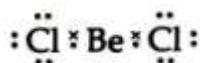


نظرية تنافر زوج إلكترونات غلاف التكافؤ**Valence Shell Electron –Pair Repulsion Theory (VSEPR)**

ان احد اهم الاهداف الاساسية للنظريات التي تفسر التاصر في الجزيئات الكيميائية هو التنبؤ بالتركيب الجزيئي والنظريات البسيطة للغاية في مفهومها والتي أحرزت نجاحا ملحوظا في مقدرتها على التنبؤ الصحيح بالهندسة الجزيئية هي النظرية المعروفة بنظرية تنافر زوج إلكترونات في غلاف التكافؤ (VSEPR) فعند تطبيق هذه النظرية ليس من الضروري استخدام فكرة الأفلاك الذرية اطلاقاً. وسترى أن بدلا من ذلك، اذا أمكن رسم تركيب نقاط الإلكترونات بجزيء يمكن التنبؤ بالشكل العام.

تقترح نظرية تنافر زوج إلكترونات غلاف التكافؤ أن الترتيب الهندسي للذرات ، أو مجموعات الذرات حول ذرة مركزية نستعمل لها الاصطلاح العام المتصلة أو المرتبطة Ligand حول ذرة مركزية ما انما يتعين فقط بالتنافرات بين أزواج الإلكترونات الموجودة في غلاف التكافؤ للذرة المركزية. مثلا في جزيئة $BeCl_2$ الذي يكون تركيب نقاط الإلكترونات لف كما يلي



حيث تدل العلامة (X) على إلكترونات البريليوم ، بينما تمثل النقاط (*) إلكترونات الكلور وكما هو واضح فإن هذا الجزيء يُخالف قاعدة الثمانية، وأنه يوجد زوجان فقط من الإلكترونات حول الذرة المركزية. يُرتَّب هذان الزوجان من الإلكترونات نفسيهما ليكون كل منهما أبعد ما يكون عن الزوج الآخر، بحيث يكون التنافر بينهما عند حدّ الأدنى. وعندما يوجد زوجان من الإلكترونات في غلاف التكافؤ يحدث الحد الأدنى من التنافر عندما تقع أزواج الإلكترونات على جانبيين متعاكسين من النواة ، وبذلك يكون لدينا التركيب .



في جزيئة $BeCl_2$ تتصل الليكاندات ligands (ذرتي الكلور) بذرة البريليوم بالمشاركة في هذين الزوجين من الإلكترونات. وهذا يعني أن الجزيء يجب أن يكون خطيا . وهذا ، في الواقع، هو شكل جزيء $BeCl_2$ في المظهر الغازي



نستطيع ان نطبق هذا المفهوم على الجزيئات التي تتضمن اصرة ثنائية او ثلاثية ، فمثلا جزيئة ثاني اوكسيد الكربون CO_2 تمتلك التركيب التالي



حيث توجد الاواصر مزدوجة بين كل من الكربون والأكسجين، فيجب أن يتحدد موقع كل من زوجي الإلكترونات في الاواصر المزدوجة في نفس المنطقة في غلاف تكافؤ الذرة، والا لن تكون هذه الاواصر مزدوجة. لذلك سيكون تأثير مجموعة من أربعة إلكترونات في اواصر مزدوجة على تحديد هندسة الجزيئات هو نفس تأثير مجموعة من الكترونيين في اواصر مفردة. وبذلك تكون لدينا في حالة ثاني أكسيد الكربون مجموعتان من أربعة إلكترونات في غلاف تكافؤ الكربون . وستضع هذه المجموعات من الإلكترونات نفسها على جانبيين متعاكسين من نواة ذرة الكربون بحيث تصل التنافرات بين تلك المجموعات من الإلكترونات الى الحد الأدنى.



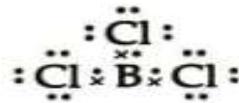
وكما سبق فإن الليكاندات (ذرتا الأكسجين في هذه الحالة) تتجذب نحو الذرة المركزية خلال أزواج الإلكترونات هذه، ومرة أخرى نحصل على تركيب خطي:



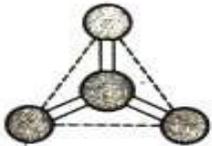
وعندما يوجد أكثر من زوجيين اثنين من الالكترونات (عدة ازواج) في غلاف التكافؤ فسوف نجد اشكالا هندسية اخرى كما موضح في الجدول التالي

عدد أزواج الإلكترونات		الترتيب الهندسي لأزواج الإلكترونات
2	خطي	
3	مستوى مثلثي	
4	رباعي السطوح	
5	ثنائي الهرمية المثلثي	
6	ثماني السطوح (ثمانية جوانب وسنة أركان)	

مثال اخر الجزيئات التي تحتوي على ثلاث أزواج من الإلكترونات في غلاف التكافؤ Three groups of electrons in the valence shell
 جزيئة ثلاثي كلوريد البورون BCl₃ يكون التركيب النقطي لها
 كما يلي



وبذلك توجد ثلاث أزواج من الإلكترونات حول ذرة البورون وبذلك فنننا نتوقع ان وجد ذرات الكلور الثلاثة حول ذرة البورون عند اركان مثلث متساوي الاضلاع مستوي وهو نفس التركيب الذي وجد عمليا لهذه الجزيئة وهناك امثلة اخرى على هذا النوع من الجزيئات مثلا جزيئة SO₂ وغيرها لذا يمكننا القول بشكل عام انه عند وجود ثلاث أزواج حول الذرة المركزية بغض النظر عن كونها أزواج تاصرية او غير تاصرية فانها تترتب في اركان مثلث فاذا كانت جميع الأزواج الالكترونية تاصرية يكون لدينا جزيئة يمكن ان نرمز لها AX₃ ، حيث A الذرة المركزية و X الذرات المتصلة (الليكاندات) اما اذا كان لدينا زوجان من الإلكترونات تاصرية وزوج واحد غير تاصري فيتكون لدينا جزيئة نرمز لها AX₂E حيث يمثل E الزوج الالكتروني الغير تاصري بحيث تكون الجزيئة غير خطية بسبب تاثير هذا الزوج غير التاصري ويمثل الجدول التالي الاشكال المقترحة للجزيئات التي تحتوي على ثلاث أزواج

التوصيف	الوصف	البنية أو التركيب	مثال	النوع
مستوى مثلثي			BCl_3 : $\overset{\cdot\cdot}{Cl}:$: $\overset{\cdot\cdot}{Cl}:$ B : $\overset{\cdot\cdot}{Cl}:$	AX_3
غير خطي أو زاوي أو منتهي			SO_2 : $\overset{\cdot\cdot}{O}:$ S : $\overset{\cdot\cdot}{O}:$	AX_2E

وبذلك يتضح تأثير عدد الأزواج الالكترونية (تاصرية وغير تاصرية) على شكل الجزيئة لذا مطلوب متابعة اشكال الجزيئات في حال وجود اربع وخمس وست ازواج الكترونية حول الذرة المركزية والجدول التالي يلخص هذه الاشكال

نوع الجزيء أو الأيون	الشكل
AX_2	خطي
AX_3	مثلث مستوي
AX_2E	غير خطي (زاوي أو منحن)
AX_4	رباعي السطوح
AX_3E	هرمي
AX_2E_2	غير خطي (زاوي أو منحن)
AX_5	ثنائي الهرم المثلثي
AX_4E	رباعي السطوح مشوه
AX_3E_2	على شكل حرف T
AX_2E_3	خطي
AX_6	ثمانى السطوح
AX_5E	مربع هرمي
AX_4E_2	مربع مستوي