هیبریدایزیشن او مالیکولي اوربیتالونه

لیکوال: نوراحمد احسان

لنډیز

په مخکینیو مقالوکې داتومو دولانسی الکترونو په اړه، چې کیمیاوي اړیکې یې منځ ته راوړلې بحث کیده، اوس دا مطلب کولای شو په بله بڼه تشریح او تحلیل کړو. ولانسي الکترونونه په ولانسی اوربیتالو کې موقیعیت لري، په واقع کې الکترونونه، نه، بلکه اوربیتالونه دي چې په مختلفو اندازو او طریقو سره یوځای کیږي او کیمیاوي اړیکې منځ ته راوړي. همدغه داوربیتالونو یوځای والی (تداخل یا امتزاج اویا همپوشانی) دهیبرید په نوم یادیږي. هرڅومره چې یوځای والی زیات وي اړیکه قوي ده. هرڅومره چې داوربیتالونو شباهت زیات وي د یوځای والي نوعیت هم زیات او هم داړیکو په نوعیت پورې اړه لري.

بنسټیز ویونه :اوربیتال، هیبریدکیدل، همپوشانی (یوځای والی)، هیبریدي اوربیتال، اتومي اوربیتال، مالیکولي اوربیتال.

سريزه

هرڅومره چې د ماليکول په پيژندنه کې ډير کاروشي غوره دی، ځکه د ماليکول ټولې ځانګيرنې د هغه تر جوړښت پورې اړه لري. ولانسي الکترونونه، کيمياوي اړيکې، رزونانس او د ماليکول هندسي جوړښت او هيبريدايزيشن دا ټول دماليکول ځانګيرنې تشريح کوي. په موجوده بحث کې ؛ اتومي اوربيتالونه ، ماليکولی اوربيتالونه او د هيبريد کيدلو موضوع څيړو، ځکه چې د دې موضوع ښه څيړل د ماليکول د خصوصياتو ښه څيړل دي او هم په ځانکړې توګه د کيمياوي اړيکو د پيژندلو لپاره مهمه ده.

په دې بحث کې، په دې غور کوو چې د اوربيتالونو کوم ډول يوځای والی، کوم ډول اړيکې منځ ته راوړي؟ کومه کيمياوي اړيکه زياته انرژي لري او ولې؟ کوم ډول ماليکولونه پايدارتر دي او ولې؟ کومه کيمياوي اړيکه سسته او کومه با ثباته (پايداره) ده؟ دا پوښتنې به د هغه چا لپاره چې غواړي د ماليکول په طبيعت او بلاخره په کيمياوي تعاملاتو ښه پوه شي ګټورې ثابتې شي.

هيبريد کيدل او هيبريدي اوربيتالونه

د کوانتومي ميکانيک د محاسباتو څخه معلومه شوې چې که د رياضي له مخې اوربيتالونه سره مخلوط کړو، نوي اتومي اوربيتالونه منځ ته راځي. د دې نويو اوربيتالونو فضايی جهت ګيري سبب کيږي چې محکمې اړيکې منځ ته راوړي. د دې اوربيتالونو امتزاج ته هيبريد کيدل وايی. او نوي اتومي اوربيتالونه د هيبريدي اوربيتالونو په نوم ياديږي. د هيبريدي اوربيتالو د ډولونو او تعداد په مورد دوې بنسټيزې نکتې عبارت دي له:

«د هيبريدی اوربيتالونو تعداد د مخلوط شويو اتومی اوربيتالونو د تعداد سره برابر دي.

د هيبريدي اوربيتالونو نوع د مخلوط شويو اتومي اوربيتالونو د تعدادسره تفاوت لري.

کيدای شي هيبريد کيدل د داسې يو محصول په څير تصور کړو چې اتومي اوربيتالونه سره مخلوط شوي او هيبريدي اوربيتالونه يې منځ ته راوړي وي او الکترونونه په مخالفو سپينو سره، دې اوربيتالو ته داخل شوي وي (د هوند قاعده). د دې اوربيتالونو د يوځاي والي (همپوشاني) څخه د نورو اتومو د اوربيتالونوسره قوی اړيکې منځ ته راځي. هره اړيکه د دوو الکترونو په جفت سره (سپين مخالف) منځ ته راځي. په واقع کې هيبريد کيدل د کوانتومي مکانيک څخه يوه

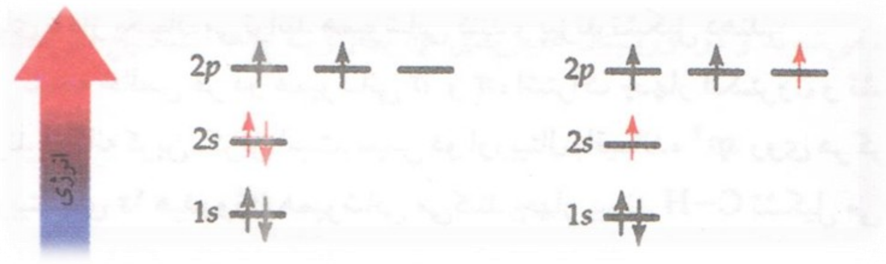
ریاضیکي لاسته راوړنه ده چې کولای شي د مشاهده شویو مالیکولونو شکلونه شرح کړي.» (سیلبربرګ؛۴۲۵: ۱۳۸۹)

د هیبریدي اوربیتالونو ډولونه

د SP^3 هیبریدایزیشن

د متان (CH_4) څلورمخیزه ساده مالیکول په نظر کې نیسو.

د غیر تحریک شوي کاربن الکتروني جوړښت $[He]2S^2 2P_x^1\ 2P_y^1$ دی. نو کاربن څلور ولانسي الکترونونه لري، چې د هغه له جملې څخه دوه الکترونونه په 2S اوربیتال کې جفت شوي او دوه الکترونونه د 2P په دوه مختلفو اوربیتالونو کې یو، یو قرار لري، چې د $2P_x$ او $2P_y$ په ډول یې ښیو. کاربن څه ډول کولای شي څلور اړیکې جوړې کړي په داسې حال کې چې دوه ولانسي الکترونونه یې لا مخکې جفت شویدي، د ګډون لپاره یوازې دوه نا جوړه شوي الکترونونه لري؟ ځواب دا دی چې د 2S د کم انرژۍ اوربیتال څخه د یو الکترون د $2P_z$ د زیات انرژۍ اوربیتال ته چې خالي دي منتقل شي. د تحریک شوي حالت الکتروني جوړښت یې چې په هر اوربیتال کې یو، یو طاقه الکترون لري په دا ډول دي: $[He]2S^1\ 2P^1_x\ 2P^1_y\ 2P^1_z$



د کاربن د غیر تحریک شوی حالت الکتروني جوړښت   د کاربن د تحریک شوی حالت الکتروني جوړښت

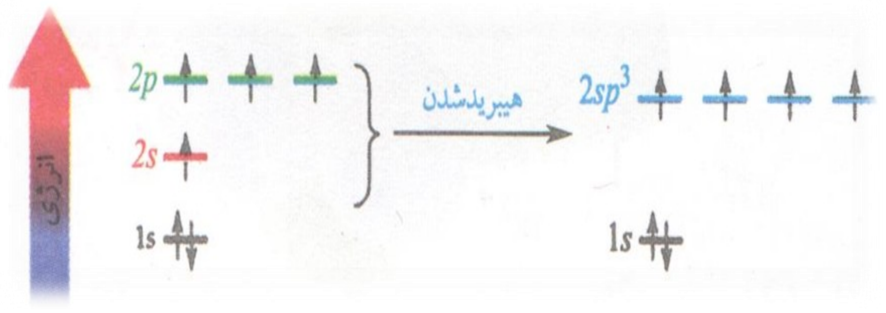
دوم سوال، څه ناڅه سخت دی: که چیرې د کاربن تحریک شوی حالت د دوه ډوله مختلفو اوربیتالونو 2S او 2P څخه استفاده وکړي، څنګه کولای شي څلور مساوي اړیکې جوړې کړي؟ د دې موضوع څخه پرته که چیرې د 2P درې اوربیتالونه یو د بل په نسبت 90^0 درجې زاویه ولري او که د 2S اوربیتال یو طرف ته میلان (جهت ګیري) ونه لري، څنګه کاربن کولای

شي د 109.5^0زاویو په اندازه اړیکې جوړې کړي، چې هغه هم څلورمخیزه منظم جوړښت منځ ته راوړی وي؟

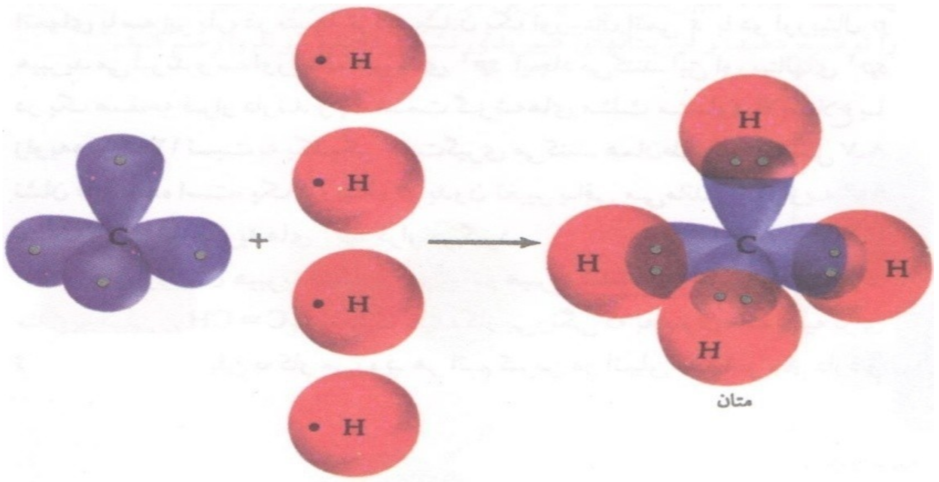
دې سوالونو ته په ۱۹۳۱ کې لینوس پاولنګ ځواب ووایه: پا ولنګ د هیبریدي اوربیتالونو نظریه وړاندې کړه.

پاولنګ وښوده چې که د S او P داتومي اوربیتالونو د کوانتومي میکانیک موج تابع ونیول شي د شرودینګر د موج معادله کولای شو د ریاضي له نظره ترکیب کړو، تر څو دهم قیمت موج د تابع، نوې مجموعه به د هیبریدي اتومي اوربیتالو په نوم، منځ ته راشي. کله چې یو د S اوربیتال ددریو P اوربیتالو سره ترکیب شي، په هغه ډول چې په کاربن کې تحریک شوی حالت منځ ته راځي، څلور مساوي اوربیتالونه د SP^3هیبریدي په نامه منځ ته راځي. (توجه ولری چې د P طاقت دابښی چې دP څو اتومي اوربیتالونه ترکیب شوي، چې هیبریدي اوربیتالونه یې منځ ته راوړي، نه دا چې څو الکترونه دهر اوربیتال مصروف شوي).

د SP^3 د څلورو هیبریدي دهم قیمت اوربیتالونو څخه هر یو لکه دPد اتومي اوربیتال دوې څنډې (لپه) په مختلفو سطحو سره واقع دي؛ مګر یوه څنډه (لپ) یې تر بله لویه ده. څلور لوي لپونه د څلور مخیزه څلورو کنجو په سمت میلان (جهت ګیري) کوي.



د SP^3هیبریدي جوړښت   دکاربن دتحریک شوی حالت الکتروني جوړښت



۷-۷شکل په میتان کې داړیکو جوړښت. دC-H د څلورو اړیکو څخه هره یوه اړیکه چې سیګما ده، دSP^3 کاربن د یوهیبریدي اوربیتال چې یو الکترون لري، دهایدروجن د 1S اوربیتال سره چې یو الکترون لري، منځ ته راځي.

په منځ ته راغلې کوولانسي اړیکه کې ، ګډ الکترونونه ، خپل ډېر وخت په جهت لرونکي هیبریدي اوربیتال کې د دوو متصلو هستو په منځ کې تیروي. په نتیجه کې، د SP^3 د هیبریدی اوربیتالونو څخه منځ ته راغلي کوولانسي اړیکي غالباً قوي وي. په حقیقت کې د میتان د C—H د څلورو قوی جوړه شوو اړیکو څخه آزاده شوې انرژي د کاربن د تحریک شوي حالت څخه زیاته ده.

SP^3هیبرید کیدل، د میتان د مالیکول د کاربن په څلورګونو اړیکو کې په کاروړو، نو د نایتروجن د هرمی امونیا په مالیکول، د اوبو د کاږه مالیکول د اکسیجن په اړیکو اوهم د بل هر اتوم لپاره چې د څلورو ولانسی الکترونو په لرلوسر، د VSEPR د نظریې مطابق، د څلورمخیزه جوړښت وړاندوییینه کوي، په کار وړلاي شو.(مک موري ;۱۳۸۶: ۱۷۳-۱۷۲)

خلاصه: د SP^3هیبرید کیدل د P له دریو اوربیتالو او د S له یو اوربیتال څخه پلاس راځي. د دې څلورو اتومي اوربیتالو د هیبرید څخه څلور SP^3 هیبرید اوربیتالونه منځ ته راځي، کوم چې یو د بل معادل دي او فضایي جهتونه یې څلور مخیزه منتظم دي. د دوو هیبریدي اوربیتالونو

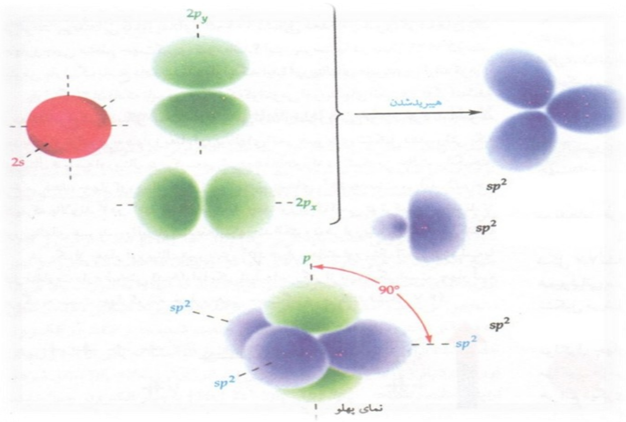
د محورونو تر منځ زاویه ۲۸َ، 109° ده. دا ډول هیبریدایزیشن د میتان په مالیکول کې چې د یو اتوم کاربن او څلورو اتومو هایدروجنو څخه تشکیل شوی دی مثال راوړلای شو.

د میتان په مالیکول کې د SP^3 د څلورو هیبریدي اوربیتالو څخه هر یو د یوه اتوم هایدروجن سره ساده کوولانسي اړیکه (سیګما اړیکه) جوړوي. (سلطاني؛۱۳۶۹: ۱۱۶)

د SP^2 هیبریدایزیشن

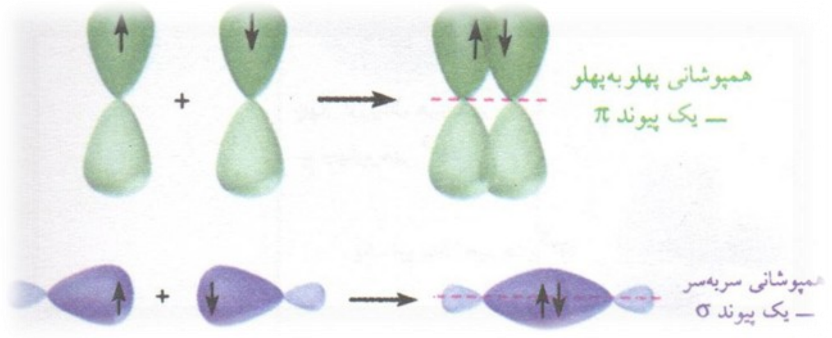
د S یو اتومي اوربیتال د P د دوه اوربیتالو سره هیبریدی کیږي دری SP^2 هیبرید اوربیتالونه منځ ته راوړي. د SP^2 دا اوربیتالونه په یوه صفحه قرار لري او د متساوی الاضلاع د مثلث د کنجونو طرف ته، نسبت یو بل ته په ۱۲۰ درجو زاویه سره اړخ لګوي؛ لکه څنګه چې په لاندی شکل کې لیدل کیږي، د P یو اوربیتال بدون له تغییر څخه باقي پاته کیږي او د SP^2 د هیبریدي صفحې په نسبت د ۹۰ درجو په اندازه زاویه جوړوي.

د P د ناهیبرید شوی اوربیتال موجودیت د SP^2 پر هیبرید شوی اتوم باندې په زړه پورې نتیجې لري؛ مثلاً : ایتلین $CH_2=CH_2$ ته توجه وکړی، چې یو بې رنګه ګاز دی کوم چې د پلی ایتلین د جوړیدو لپاره د لومړنی مادې په حیث په کار وړل کیږي. په ایتلین کې کاربن د SP^2 په شکل هیبرید شوي.



د SP^2 هیبریدی اوربیتالونو تشکیل د یو S اوربیتال او دوه P اوربیتالونو په واسطه . دری واړه هیبریدی د ۱۲۰ درجو زاویې په اندازه نسبت یو بل ته په یوه صفحه قرارلري. د p یو ناهیبرید شوی اوربیتال باقی پاته کیږي چې په ۹۰ درجو زاویه سره د SP^2 اوربیتالونو د صفحې په نسبت جهت ګیری کوي.

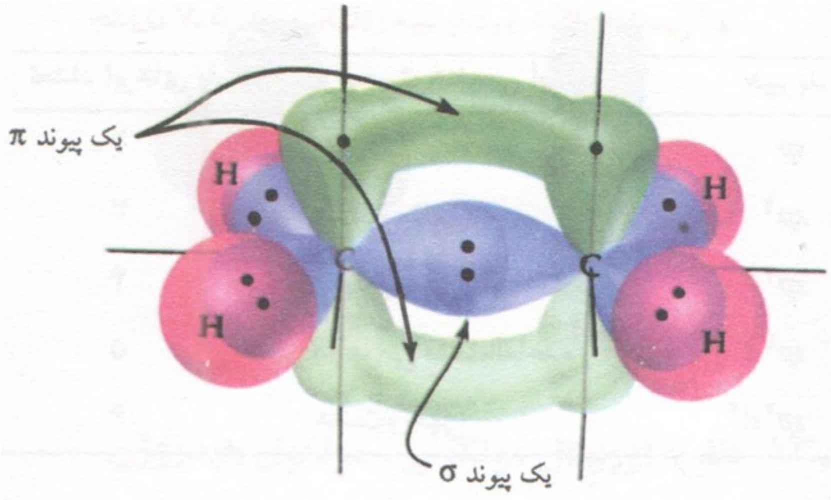
کله چې دوه اتومه کاربن د SP^2 په هیبرید سره یوځای شي نو د SP^2 اوربیتالونه یې د سیګما (σ) داړیکې د جوړېدو لپاره سر پهسر قرار نیسی او یو بل ته نژدې شي، د P ناهیبرید شوي اوربیتالونه د کاربنو پر مخ یو د بل سره موازي څنګ په څنګ (نه په مخامخ ډول) نژدې کیږي او اړیکه جوړوي. دې ډول څنګ په څنګ اړیکې ته چې په هغې کې مشترک الکترونونه د هستو د اتصال د خط لاندې او باندې برخې اشغالوي (نه د هستو ترمنځ برخه) د پاي π د اړیکې په نوم یادیږي.



متوجه اوسئ چې د π اړیکه په دوو ناحیو کې اوربیتالی همپوشانی لري- یو د هستو د محور برسیره او بل د هستو د محور د لاندې. دا دواړه ناحیې دیوې اړیکې برخې دي او دوه شریک الکترونونه په دواړو ناحیو کې موجود دي. همدارنګه، توجه وکړئ چې فقط څنډې (لپونه) کولای شي په یو ډول سطحه (فاز) سره یوځلي والی (همپوشاني) وکړي او اړیکه منځ ته راوړي.

دپای π او سیګما σ د دواړو د یوځای والی (همپوشاني)، خالصه نتیجه د څلورو الکترونو شرکت او د کاربن-کاربن تر منځو دوه ګونې اړیکه ده. وروسته بیا د هر کاربن SP^2 پاتې دوه اوربیتالونه، د هایدروجن د 1S د اوربیتالو سره یوځای کیږي د C—H څلور اړیکې

جوړوي او د $CH_2=CH_2$ جوړښت پوره کوي. ۹-۷شکل (مک موري؛۱۳۸۶ :۱۷۴ -۱۷۵)



۹-۷شکل د اتلین جوړښت. د کاربن-کاربن دوه ګونې اړیکه، د سیګما یوه اړیکه ده چې د SP^2 اوربیتالونو د سر په سر همپوشاني څخه منځ ته راغلې. او یوه د پاي اړیکه ده چې د P د اوربیتالونو د څنګ په څنګ همپوشاني څخه منځ ته راغلې ده. د H—C څلور سیګما اړیکې چې د کاربن د SP^2 اوربیتالونو او د هایدروجن د 1s د اوربیتالونو د همپوشاني څخه منځ ته راځي. د مالیکول شکل کاملاً مسطح دي او د C—C—H او H—C—H د اړیکو زاویې حدوداً ۱۲۰ درجې دي.

خلاصه: د SP^2 هیبریدایزیشن د p دوو اوربیتالو او د S دیو اوربیتال داختلاط په نتیجه کې منځ ته راځي. په نتیجه کې دري SP^2 هیبریدي اوربیتالونه منځ ته راځی او په یوه صفحه قرار لري او یو دبل سره د ۱۲ درجو په اندازه زاویه جوړوي. د BF_3 په مالیکول کې مرکزي اتوم بوران دي چې د SP^2 هیبریدایزیشن څخه یې استفاده کړې. د BF_3 د مالیکول جوړښت مسطح مثلثي دي او اړیکې یو د بل سره ۱۲۰ درجې زاویه لري. د $2P_x$ او $2P_y$ انتخاب اختیاري دی، د P د دریو اوربیتالو څخه چې هردوه اوربیتالونه انتخاب شي تفاوت نه لري.

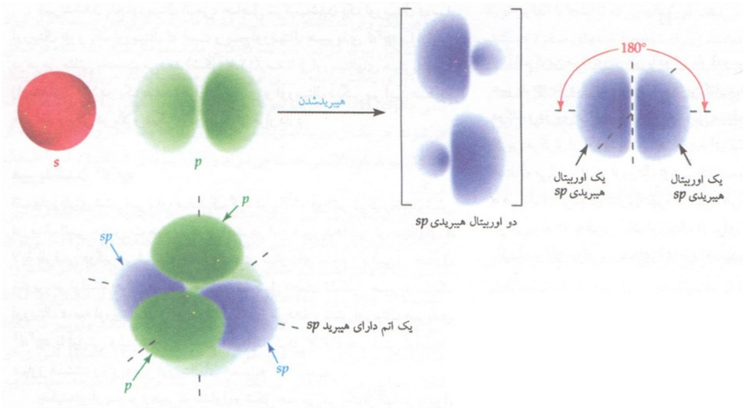
د BH_3 په مالیکول کې دبور اتوم د SP^2 هیبریدایزیشن څخه استفاده کوي او د دري اتومو هایدروجنو د 1s اوربیتالونو د SP^2 د دریو اوربیتالو سره یوځاي شوي. باید ذکر کړو چې د BH_3 مالیکول پایدار نه دي او د دای میر په څیر B_2H_6 (دای بوران) دي.

د BF_3، BH_3، SO_2، CO_3^-، NO_3^- او ۰۰۰ په مثالونو کې مرکزي اتومونه N, C, S, B

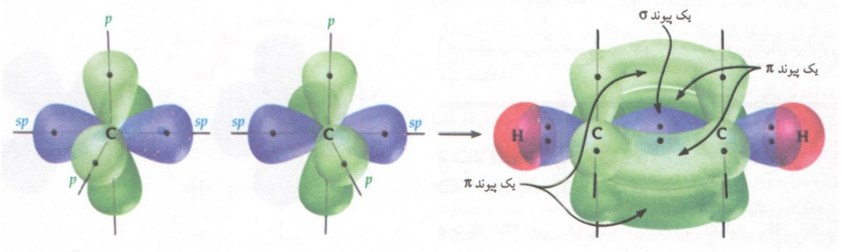
د SP^2 هیبریدایزیشن لري. د SO_2 په مالیکول کې یوه جوړه آزاد الکترونونه د هیبرید په یوه اوربیتال کې قرار لري. (سلطاني،۱۳۶۹: ۱۱۵)

د SP هیبریدایزیشن

اتومونه په دوه ابر بار (الکترونو) سره د s یو اتومي اوربیتال د P دیو اوربیتال سره د ترکیب په نتیجه کې هیبرید کیږي او دوه SP هیبریدي اوربیتالونه د ۱۸۰ درجو په زاویه سره جوړیږي.



۱۰–۷ شکل د s یو اوربیتال او د P یو اوربیتال د ترکیب کیدو په نتیجه کې د SP دوه هیبریدي اوربیتالونه چې دیواوبل په نسبت ۱۸۰ درجې زاویه جوړوي منځ ته راځي. د P دوه ناهیبرید شوي اوربیتالونه باقی پاته کیږي چې د ۹۰ درجو په زاویو سره د SP د هیبرید په نسبت جهت ګیری کوي.



۱۱–۷ شکل د sp د دوو هیبریدی اتومو ترمنځ د دري ګونې اړیکې جوړېدل.

د سیګما اړیکه د Sp د اوربیتالونو د سر په سر له یوځاي والي څخه منځ ته راځي. او د پای π دوې اړیکې عمودا د P د اوربیتالونو د څنګ په څنګ یوځاي والي څخه منځ ته راځي.

د sp په هیبرید کیدو کې فقط د P یو اوربیتال برخه اخلي د P دوه نور اوربیتالونه بې له تغییره پاته کیږي؛ لکه څنګه چې په شکل کې ښکاریږي د sp دهیبرید په نسبت د۹۰درجو په زاویه سره قرار نیسي.

د sp دهیبرید نمونه په استلین، H—C=C—H کې چې بې رنګه ګاز دي په جوش کاری کې ورڅخه استفاده کیږي، لیدل کیږي. د استلین په مالیکول کې دواړه اتومه کاربنه خطي هندسي شکل لري او د SP په شکل هیبرید شوی.

کله چې د SPدوه اتوم کاربنه د سیګما (σ) اړیکې د تشکیل لپاره د SPخپل اوربیتالونه په کاروړي، د دوو اتومو کاربنو څخه هریو د P ناهیبرید شوي اوربیتالونه د پاي د اړیکې د جوړېدو لپاره سره یوځاي کیږي. د pدواړه اوربیتالونه برسیره او لاندې موقیعت اختیاروي او دوه د p نور اوربیتالونه مخکې او وروسته موقیعت اختیاروی. نو ځکه د استلین په مالیکول کې د پای دوې اړیکې یوپر بل عمودې دي چې د pد اوربیتالونو د څنګ په څنګ یوځای والي حاصل دي. د سیګما یوه اړیکه چې د SP اوربیتالونو د سر په سر یوځاي والي څخه منځ ته راځي نو د دواړو کاربنو ترمنځ دری ګوني اړیکې منځ ته راغلې. د دې څخه علاوه د C—H دوه اړیکې د SPد دوو اوربیتالونو دهایدروجن د 1s د اوربیتالونو د یوځاي والي نتیجه ده.

خلاصه : SP هیبریدایزیشن د S د یواوربیتال او د P د یو اوربیتال د اختلاط څخه منځ ته راځي. بریلیم کلوراید دبخار په حالت کې (حدود۷۵۰سانتي ګرید) د خطي مالیکولونو (Cl—Be—Cl) لرونکی دي. په نوموړي مالیکول کې دواړه کوولانسي اړیکې د انرژي او اوږدوالي له مخې برابرې دي.

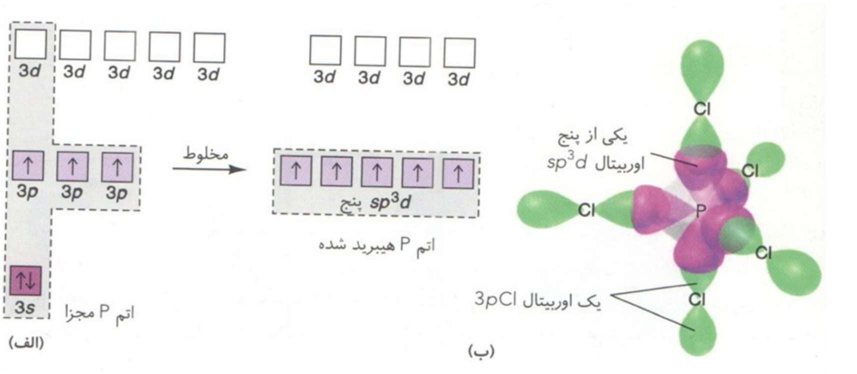
په عادي حالت کې د بریلیم الکترونی جوړښت $1S^2\ 2S^2$ دي. داسې وړاندوینه کیږي چې بریلیم په اصلي حالت کې نباید کوولانسي اړیکه جوړه کړي ځکه چې طاقه الکترون نه لري. په تحریک شوي حالت کې $1S^2\ 2S^1\ 2P^1$ د اړیکې د جوړېدو لپاره دوه طاقه الکترونونه په اختیار کې لري؛ مګر دا حالت هم د $BeCl_2$ په مالیکول کې د اړیکې د حالت مبین نه شي کیداي. ځکه د Be—Cl ددوو اړیکو څخه یوه اړیکه د بیریلیم د اتوم د 2s اوربیتال او د کلورین د اتوم دp د یوالکتروني اوربیتال سره یوځای والی کوي. او بله اړیکه د بیریلیم د اتوم د2p

داوربيټال د کلور د اتوم د p د اوربيټال سره د يوځای والی په نتيجه کې منځ ته راځي. دا دواړه اړيکې د انرژی له نظره يوشان نه شی کيدلای؛ ځکه چې د بريليم 2S او 2P اوربيټالونه متفاوتې انرژی لري. نو بايد قبول کړو چې د بريليم 2S يو اوربيټال او د 2P يو اوربيټال سره هيبريد شوي او د دې دوو اتومي اوربيټالو څخه د SP دوه هيبريدي اوربيټالونه حاصل شوي، چې يو دبل سره هم قيمت دي. دادواړه هيبريدي اوربيټالونه نسبت يوبل ته ۱۸۰ درجې زاويه جوړوي؛ يعني په امتداد د يوه خط کې قرارلري. د $HgCl_2$, $BeCl_2$ او BeH_2 په نمونو کې مرکزي اتومونه لکه(Be,Hg) sp هيبريدايزيشن لري.

د SP^3d هيبريدايزيشن

د پنځو ولانسی الکترونو لرونکي اتومونه لکه PCl_5 د پنځو اتومي اوربيټالونو د ترکيب په نتيجه کې هيبريد کيږي.

د پنځو اتومي اوربيټالونو هيبريد کيدل د S يو اوربيټال د P دری اوربيټالونه او د d يو اوربيټال د ترکيب کيدلو حاصل دي. او د SP^3d پنځه هيبريدي اوربيټالونه د دوه هرمی مثلث په شکل منځ ته راځي. دری هيبريدی اوربيټالونه د 1S ۱۲۰ درجو په زاويو په يوه صفحه باندې قرارلري او دوه نور اوربيټالونه په دې صفحه عمود دي يو د صفحې لاندې او بل د صفحې برسيره قرار لري. ددې هيبريدي اوربيټالونو فضايي حالت د دوه هرمي، متساوي الاضلاع مثلث په مشترکه قاعده سره منځ ته راځي. د PCl_5 , PF_5 , SF_4 , BrF_3 , XeF_2 , I_3^- په نمونو کې مرکزي اتوم د SP^3d هيبردايزيشن څخه استفاده کړې. په اوله او دوهمه نمونه کې آزاد جوړه الکترونونه موجود نه دي. په دريمه ،څلورمه او پنځمه نمونه کې په ترتيب سره يو، دوه او دري جوړې آزاد الکترونونه موجود دي. په ترای ايوداید ايون کې دری جوړې آزاد الکترونونه وجود لري. جوړه آزاد الکترونونه استوايي موقيعت اختياروي.

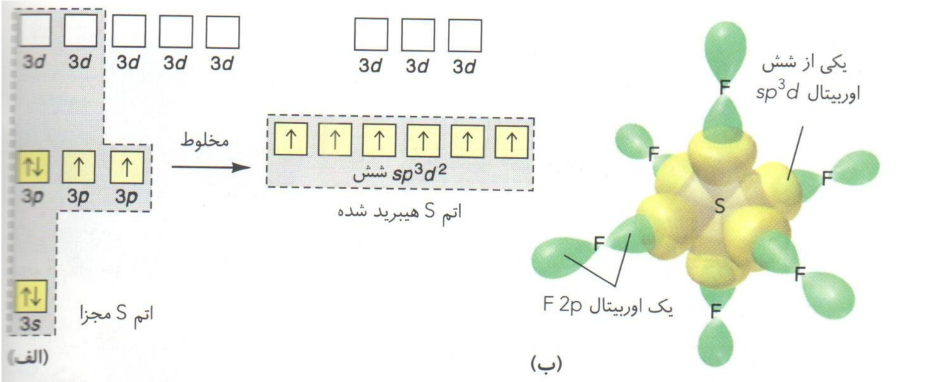


(مارتین؛۱۳۶۹ : ۴۲۹، ۱۱-۶شکل) په PCl_5 کی د SP^3d اوربیتالونو هیبرید.

د SP^3d^2 هیبریدایزیشن

اتومونه چې شپږابرابر(الکترونونه) لري لکه SF_6 دشپږو اتومي اوربیتالونودترکیب په صورت کې هیبرید کیږي. په دې نوع هیبرید کې د d سویې، ولانسي اوربیتالونه هم هیبرید کیږي. یوازې ددریمی دورې او ترهغه لاندې اتومونه کولای شي داسې هیبرید منځ ته راوړي. دا هیبرید د S یواوربیتال د P دری اوربیتالونه اود d دوه اوربیتالونه چې ټول شپږ هیبریدی اوربیتالونه کیږي د SP^3d^2 په شکل لیکل کیږي او اته مخیزه جوړښت منځ ته راوړي. شپږ واړه اوربیتالونه هم قیمت دی اودهمسایه اوربیتالونوترمنځ زاویې ۹۰ درجې دي. په SF_6 کې ټول هیبریدي اوربیتالونه یوالکتروني دي مګر په BrF_5 کې یوه جوړه آزاد الکترونونه اوپه XeF_4 کې دوه جوړه آزاد الکترونونه په هیبریدي اوربیتالوکې موجوددي. آزادې جوړې محوري موقیعتونه اختیاروي. همدارنګه په IF_5 کې هم د SP^3d^2 هیبریدایزیشن منځ ته راغلی.

علاوه دپنځو ډول هیبریدایزیشن څخه چې ذکر شول نورهیبریدایزیشن هم لکه dSP^2 , d^3S d^3 اونورموجود دي. (مک موری؛۱۳۸۶ : ۱۷۶) (ماهر؛۱۵۶)



(مارتین؛۱۳۶۹: ۴۳۰ ، ۱۱-۷شکل) په SF_6 کې د SP^3d^2 هیبریدي اوربیتالونه.

داوربیتالونو دیوځای والي (همپوشاني) قدرت یا داړیکې دانرژي قدرت

هرڅومره چې د یوځای والي (همپوشاني) اندازه زیاته وي داړیکې قدرت یا داړیکې انرژي زیاته وي. هیبریدي اوربیتالونه داتومي اوربیتالونو په پرتله په یوه خاص جهت زیات وسعت لري، نوځکه دنوروا تومودهیبریدي اوربیتالونوسره بهتره یوځای والی (همپوشانی) منځ ته راوړي. په نتیجه کې زیاته همپوشاني منځ ته راځي اواړیکه قوي راځي.

داړیکې په قدرت کې دهیبریدایزیشن د نوعې نقش

لکه مخکې چې وویل شول، هیبریدایزیشن موجب کیږي چې داوربیتالونو د یوځای والي قدرت زیات اوپه نتیجه کې اړیکه قوي اومنځ ته راغلی مالیکول پایدارتر شي.

که چیرې د Sداتومي اوربیتال د اوږدوالی وسعت واحد فرض شي، د Pداتومي اوربیتال داوږدوالی وسعت اود SP^2 , SPاو SP^3 هیبریدي اوربیتالونو داوږدوالي وسعت به په لاندي ترتیب سره وي:

S	< P	< SP	< SP^2	< SP^3
1	1,73	1,93	1,99	2

(دکترسلطاني؛۱۳۶۹: ۱۲۱-۱۲۰)

داتومي اوربیتالونو دیوځای والي شرایط

الف) دانرژۍ شرط

ترکیب کیدونکي اتومي اوربیتالونه باید کاملا اویا تقریبا دانرژۍ له مخې یوشان وي. ددې

اصل په نظر کې نیولوسره، په مشابه مالیکولونوکې لکه A_2 د $1S$ او $2S$ او یا S او P داوربیتالونو ترمنځ چې دانرژۍ اختلاف زیاد دي، یودبل سره ترکیب نه کوي. په غیر مشابه مالیکولونوکې لکه (AB) داړیکې دقطبیت په سبب ($A—B$) دترکیب کیدونکو اتومي اوربیتالونو ترمنځ دانرژۍ اختلاف وجودلري، باید دا اختلاف ډېر کم وي. په ایوني ترکیباتوکې چې دترکیب کیدونکو اتومي اوربیتالونوترمنځ دانرژۍ اختلاف زیات وي، په همدې دلیل، هیڅ ډول اړیکه نه جوړېږي.

ب) دحد اکثر یوځای والي داصل شرط

ددې اصل په نظر کې نیولو سره، هرڅومره چې ددوو اتومي اوربیتالونو ترمنځ د یوځای والي اندازه زیاته وي دهستو ترمنځ الکتروني کثافت زیاتیږي، نودمالیکولي اوربیتالونو دجوړېدو قدرت هم زیاتیږي. همدغه دلیل دي، چې دسیګما اړیکې دجوړېدو لپاره اتومي اوربیتالونه ډېرسره یوځای کیږي اود $\prod$ داړیکې په نسبت یې اړیکه قوی تره وي. همدارنګه دS ددوواتومي اوربیتالو دیوځای والي اندازه د P ددوو اتومي اوربیتنالو څخه کمه ده. نوپه دوهم حالت کې دمنځ ته راغلې اړیکې قدرت نسبت اول حالت ته ډېر دي.

ج) دتقارن شرط

ترکیب کیدونکي اتومي اربیتالونه باید دمالیکول داصلی محور په امتداد یوډول تقارن ولري. نوځکه، اتومي اوربیتالونه چې دمالیکول داصلي محور په نسبت (Z محور) یوډول تقارن ولري، په ښه شان یودبل سره یوځاي کیږي اومالیکولي رابطوي اوربیتالونه جوړوي. که چیرې اتومي اوربیتالونه دمالیکول په اصلي محور یوډول تقارن ونه لري نه شي کولای یودبل سره ترکیب شي. په دې دلیل هغوی ته غیررابطوي مالیکولي اوربیتالونه ویل کیږي. (بهشتي؛۲۵۴-۲۵۱ :۱۳۷۹)

دمالیکولي اوربیتال نظریه (Molecular Orbital)

داوربیتال مفهوم د کوانتومي میکانیک موج له معادلې څخه اخیستل شوي، چې په هغه (معادله) کې دموج دتابع دمربع پواسطه داتوم دفضا په مشخصه ناحیه کې دالکترون دپیداکولو احتمال په لاس راځي. هغه اوربیتالونه چې تراوسه موورسره سروکاردرلود، اتومي اوربیتالونه ؤ. دیوه اتوم اتومي اوربیتالونه کولاي شي سره ترکیب شي اوهیبرید تشکیل کړي.

دمختلفواتوموااتومی اوربیتالونه هم په خپل منځ کې سره یوځای کیږي او کوولانسي اړیکې منځ ته راوړي، مګر دا اوربیتالونه اودهغو الکترونونه په مشخصو اتومونوباندې مستقر پاته کیږي.

اتومی اوربیتالونه: دموج تابع چې دهغه مربع داتوم دفضا په مشخصه ناحیه کې دالکترون د پیداکولو احتمال راکوي داتومي اوربیتال په نوم یادیږي.

لکه څنګه چې اتومی اوربیتال په اتوم پورې مربوط دي همدارنګه مالیکولي اوربیتال په مالیکول پورې مربوط دي. (مک موري؛۱۳۸۶ : ۱۷۷)

مالیکولي اوربیتالونه

دشریدنګر دمعادلې دقیق حل دهغه مالیکولونولپاره چې د H_2^+ څخه مغلق تر وي ممکن نه دي. ځکه چې په مالیکول کې دموجي تابع دمحاسبې لپاره، دالکتروني کثافت دتوزیع په نتیجه کې، مختلف تقریبي میتودونه منځ ته راغلی دي.

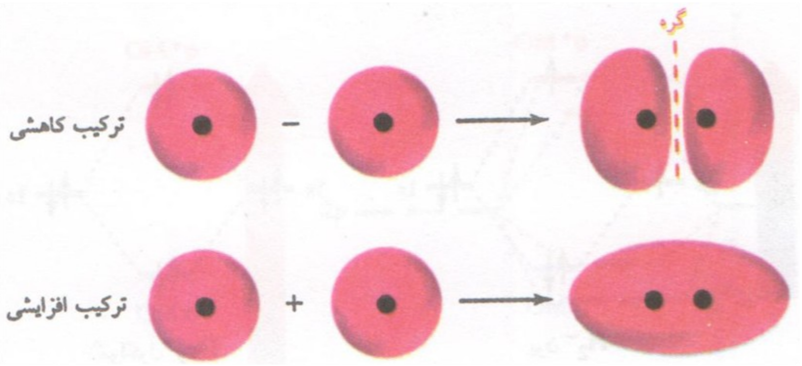
دپورتنیو میتودونو له جملې څخه دوه میتودونه یعني دولانسي اړیکو تیوري(VB) اود مالیکولي اوربیتالونو تیوري (MO) عمومیت لري. داولې تیوري په انکشاف کې اول هایتلر، لندن، سلیټراو پاولنګ، اود دوهمي تیوري په توسعه کې مالیکن اوهوند عمده رولونه لرلې دي. د مالیکولي اوربیتالونو دتیورۍ په اساس، مالیکول دهستو اوالکترونو دمجموعې په حیث، چې په هغه کې هرالکترون دنوروالکترونو په ساحه کې او ټولې هستې په حال دحرکت کې وي په نظر کې نیول شوي.

دمالیکولي اوربیتالونو دتیورۍ پرنسیپ ډېر ساده دي : دکوانت دمیخانیک دقانونمندي توسعه چې داتوم لپاره وضع شوې، دمغلق سیستم په حیث چې مالیکول بلل کیږي منځ ته راغلې. دمالیکول دجوړښت اوربیتالي تصورداده چې دمالیکول ټول الکترونونه (لکه اتوم) په مربوطه اوربیتالوکې تقسیم شوي، همدامطلب دمالیکولي اوربیتالونو دتیورۍ اساس دي. هراوربیتال دخپلو کوانتومي اعدادو پواسطه چې په ورکړشوي انرژیکي حالت کې دالکترون خواص ښي،مشخص کیږي. دمالیکولي حالت خصوصیت په دې کې دی چې په مالیکول کې څو هستې وي یعنې دیومرکزه اتومي اوربیتالونو په توپیرسره مالیکولي اوربیتالونه څومرکزه

(دوې يا ددووڅخه زياتې هستې لرونکې) وي. اتومي اوربيتالونه په f,d,p,s...اومالیکولي اوربیتالونه دیوناني حروفو پواسطه لکه: سیګما σ ، پاي π ، دلتا ∂ ، اومیګاه φ ، ... سره ښودل کیږي. (هادی،۶۸: ۱۳۶۷)

مالیکولي اوربیتال هم لکه اتومي اوربیتال دانرژۍ مشخصې سطحې اومعین شکل لري اواکثر ددووالکترونوپه مختلفو سپینو سره اشغالیږي. دمالیکولي اوربیتال انرژي اوشکل دمالیکول ترانداز ي اوپیچلتیا پورې تعلق لري، کیدای شي نسبتا پیچلی وي. اما داتومي اومالیکولي اوربیتالونوترمنځ اساسي شباهت باقي پاته کیږي.

د مالیکولي اوربیتال دنظریې (MO) ځینې کلي جنبې دH_2 په ساده مالیکول کې تربحث لاندې نیسو. تصور وکړی کله چې دوه اتومه جلا، جلا هایدروجن یوله بل سره نژدې شي او تعامل وکړي، څه به پیښ شي. د 1S اوربیتالونه یودبل سره په اختلاط شروع کوي، اوالکترونونه په دواړو اتوموتیتیږي.دمالیکولي اوربیتالونو نظریه وايي، داوربیتالی ترکیب لپاره دوې طریقې وجود لري– دډېریدوترکیبي طریقه(ترکیب افزایشي) اودلږیدوترکیبي طریقه(ترکیب کاهشي). دډېریدوترکیبی طریقه دمالیکولي اوربیتال دتشکیل سبب ګرزي چې تقریبا هګۍ ته ورته دي.



۷–

۱۴شکل د H_2په مالیکول کې دمالیکولي اوربیتالونو جوړښت. دډېرېدوپه ترکیبي طریقه د1s دوه اتومي اوربیتالونه مالیکولي رابطوي اوربیتال جوړوي کوم چې کمه انرژي لري. دلږېدو په ترکیبي طریقه مالیکولي ضد رابطوی اوربیتال چې زیات انرژي لري اودهستوترمنځ یوه غوټه(ګره) لري.

کله چې داوربیتالونو ترکیب دلږېدو په طریقه وشي، دهغه مالیکولي اوربیتال دتشکیل سبب کیږي چې داتومونو په منځ کې یې یوه غوټه(گره) وي. (۱۴-۷شکل)

دډیرېدو ترکیبي طریقه(ترکیب افزایشي) دسیگما (σ)په حرف سره ښودل کیږي، چې د 1S ددووجلا اوربیتالونوڅخه کمه انرژي لري، د مالیکولي رابطوی اوربیتال په نوم یادیږي. ځکه چې د رابطوي الکترونو ډیروخت ددوو هستو په منځ کې تیریږي. اتوموته یو دبل سره په اړیکه ورکولو کې کمک کوي.

دلږېدو ترکیبي طریقه(ترکیب کاهشي) دستاره سیگما(* σ) په حرف سره ښودل کیږي. د 1S ددووجلا اوربیتالو څخه زیاته انرژي لري. اودا ډول مالیکولي اوربیتال ته ضد رابطوي مالیکولي اوربیتال وایي، ځکه الکترون نه شي کولاي دهستو په مرکزي ناحیه کې قرارولري اوداړیکې په جوړښت کې برخه واخلي. (مک موری؛۱۳۸۶ : ۱۷۷)

داړیکودرجه Bond Order

په مالیکولي اوربیتالي تیوری کې دکوولانسي اړیکې ثبات، داړیکو تر درجې پورې مربوط دی، کومه چې په لاندې ډول تعریفیږي.

درابطوي الکترونو اوضدرابطوي الکترونو دتعداد نیمایی تفاوت ته دمالیکول داړیکودرجه وایی.

داړیکودرجه = $\frac{۱}{۲}$ [(درابطوي الکترونونو تعداد) -- (دضدرابطوي الکترونونو تعداد)]

پورتنی رابطه راښي چې داړیکودرجه درابطوی الکترونو اوضد رابطوی الکترونود تفاوت نیمایی ته ویل کیږي.

که چیرې داړیکو درجه دیوه (۱) څخه نماینده گي وکړي نوداد یوه گونی اړیکې په معني ده. اوکه ددوو (۲) څځه نماینده گي وکړي د دوه گونې اړیکې په معني ده، اوکه د دریو(۳) څخه نماینده گي وکړي د دری گونې اړیکې په معني راځي. دمالیکولي اوربیتالونو تیوري،

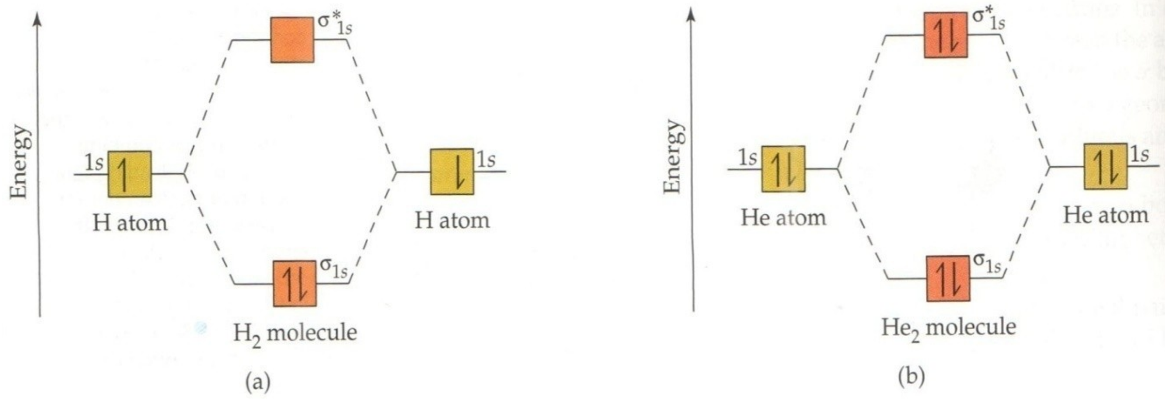
دمالیکولونو دطاق شمیر الکترونو څخه هم بحث کوي، نوځکه داړیکو د $\frac{۱}{۲}$ ، $\frac{۳}{۲}$ ، یا $\frac{۵}{۲}$ درجي هم ممکني دي.
هایدروجن دوه رابطوي الکترونه لري اوضد رابطوي الکترونه نه لري (۳۲-۹شکل-الف)

$$\frac{۱}{۲}(۲-۰)=۱$$

نوداړیکو درجه یې عبارت ده له: سره.
هیلیم دوه رابطوي او دوه ضد رابطوي الکترونونه لري(۳۲-۹ ب شکل) نوداړیکو درجه یې عبارت ده له:

$$\frac{۱}{۲}(۲-۲)=۰$$

سره. داړیکو دصفر ددرجې معنی داده چې هیڅ اړیکه موجوده نه ده .
یعني د He_2 مالیکول موجودیت نه لري. (Brown؛ ۲۰۰۰م: ۳۳۲- ۳۳۳)



(Brown؛ ۹-۳۲الف اوب شکلونه)

په مناسبو شرایطو کې دهایدروجن دمالیکول ایون H_2^+ اودهلیم دمالیکول دایون He_2^+ دموجودیت شواهد په لاس کې شته. دهایدروجن دمالیکول ایون د دووپروتونو لرونکی او په 1s سیګما اوربیتال کې یو الکترون لري. په نتیجه کې د H_2^+ داړیکې درجه مساوي د

$\frac{۱}{۲}(۱ - ۰) = \frac{۱}{۲}$

سره ده. دهليم دماليکول ايون، دوې دهليم هستې اودرى الکترونونه لري،

چې دوه الکترونه يې د1s سيګما(σ) په اوربيتال کې اودريم يې د 1s(* σ) سيګما ستاره

$\frac{۱}{۲}(۲ - ۱) = \frac{۱}{۲}$

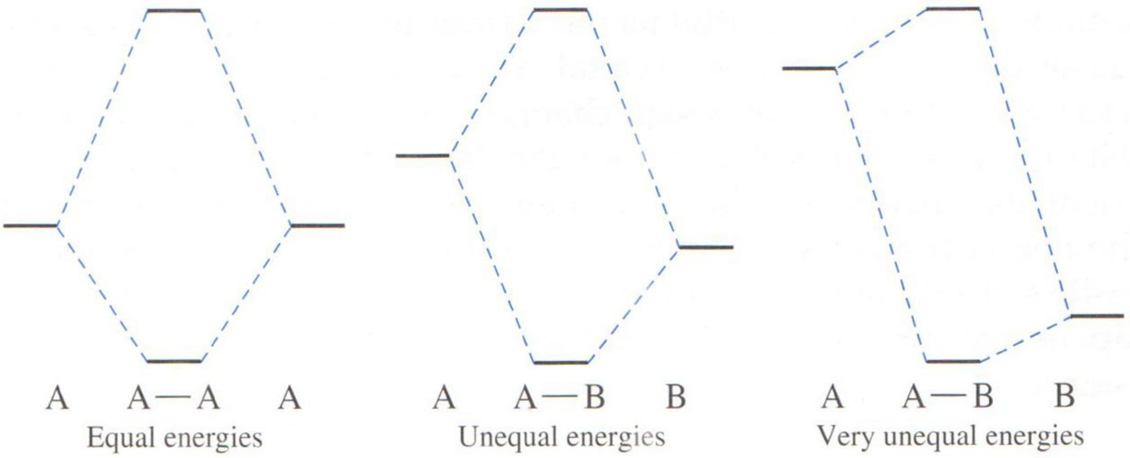
په اوربيتال کې قرارلري. نوداړيکو درجه يې سره برابره ده. (مورتيمر؛۱۳۸۹: ۱۳۰-۱۲۹)

غير رابطوى اوربيتالونه

غير رابطوي ماليکولي اوربيتالونه هم موجود دي چې انرژي يې اصلا داتومي اوربيتالونو اصلي انرژي ده. دا اوربيتالونه کيداى شى په لويو ماليکولونو کې منځ ته راشي. دمثال په توګه: که چيرې درى اتومى اوربيتالونه په عين تناسب اوعين انرژيواوموقيعت چې دردريو ماليکولي اوربيتالونو تشکيل لازم وى، منځ ته راتلاي شي. يوماليکولي اوربيتال به دکمې انرژۍ رابطوي اوربيتال وي، يوبه دلوړې انرژۍ ضدرابطوي اوربيتال اويو به دوسطي انرژۍ غيررابطوي اوربيتال وي. مثالونه يې په (۵-۴شکل) کې کتلاى شې.

علاوه له تناسب(تقارن) شخه دوهم لوي لامل چې بايد دماليکولي اوربيتالوپه تشکيل کې په نظر کې ونيول شي، داتومي اوربيتالونو اړوند انرژۍ ده. لکه څنګه چې په (۵-۴شکل) کې ښودل شوي، که چيرې يوپه بل عمل کوونکي اتومي اوربيتالونه يو شان انرژي ولري، نويوځاى والى به قوي وي، اونتيجتاماليکولي اوربيتالونه چې کومه انرژي لري هغه به داصلي اتومي اوربيتالونودرابطوى انرژي شخه کمه اوډ ضد رابطوي شخه به زياته وي. که چيرې دوه اتومي اوربيتالونه بالکل مختلفې انرژي ګانې ولري نويوځاى والى يې ضعيفه دى، دماليکولي اوربيتالونو انرژي ګانې اوشکلونه به داصلى اتومي اوربيتالونو ته نژدې وي. سره ددې چې دوي به يوشان تقارن(تناسب) لري. د1s اوربيتالونه دنورواتوموسره په دوه اتومي ماليکولونوکې لکه N_2 د2sداوربيتالونوسره په صحيح توګه نه شى يوځاى کيدلاي، ځکه چې ددوي انرژي ګاني سره ډيرفرق لري. نتيجه داده چې سره ورته انرژي ګانې قوي يوځاى والى (ترکيب)منځ ته

راوړي. (Miessler and Tarr؛ ۲۰۱۱م: ۱۳۲-۱۳۱)



(Miessler and Tarr ؛ ۵-۴شکل) دمالیکولي اوربیتالونو جوړښت په مختلفو انرژي ګانو سره.

پایله

دکوولانسي اړیکې (VB) دنظریې نیچوړ مختصرا په لاندې توګه بیانیږي:

*کوولانسي اړیکې داتومي اوربیتالونو دیوځای کی دو(ترکیب) څخه منځ ته راځي، چې هر اوربیتال په مخالف سپین سره یو الکترون لري.

* درابطوي اتوموڅخه هریو خپل اتومي اوربیتالونه ساتي، اما په ترکیب کیدونکې اوربیتالونو کې جفت الکترونونه ددوه اتومو په وسیله په اشتراک ایښودل کیږي.

* هرڅومره چې اوربیتالي ترکیب زیات وي، اړیکه قوي وي. داپیښه غیرد S داوربیتالونو څخه دنوروداوربیتالونو په یوځای والي کې، اړیکې ته جهت لرونکی خصلت ورکوي.

دمالیکولي اوربیتال دنظریې (MO) نیچوړ مختصرا په لاندې ډول دی:

* مالیکولي اوربیتالونه په مالیکول پورې مربوط دي، لکه اتومي اوربیتالونه چې په اتومو پورې مربوط دي. مالیکولي اوربیتال په مالیکول کې دفضا مشخصه ناحیه، کومه چې الکترونونه په هغه کې په زیات احتمال سره موجودوي، توصیفوي. دا اوربیتالونه دمشخصواندازو، شکل او انرژي لرونکي دي.

* مالیکولي اوربیتالونه دمربوطه مختلفو اتومونو داتومي اوربیتالونو دترکیب څخه منځ ته راځي. دتشکیل شویو مالیکولی اوربیتالونو تعداد دترکیب شویو اتومي اوربیتالونو دتعدادسره مساوي دي.

* مالیکولي اوربیتالونه چې داولیه اتومي اوربیتالونو په نسبت کمه انرژي لري رابطوي اوربیتالونه دي؛ مالیکولي اوربیتالونه چې داولیه اتومي اوربیتالونو په نسبت زیاته انرژي لري، ضد رابطوي اوربیتالونه بلل کیږي.

* الکترونونه لومړی دمالیکولي اوربیتالونو څخه هغه (اوربیتالونو) ته چې کمه انرژي ولري داخلیږي. فقط دوه الکترونه په جوړه شویو سپینو په مالیکولي اوربیتال کې قرارلري.

* داړیکو درجه کولای شو په ضد رابطوي مالیکولي اوربیتالونوکې دموجودوالکترونو دشمیر څخه درابطوي مالیکولي اوربیتالونو دالکترونودشمیر څخه دتفریق او پر(۲) دتقسیم په صورت کې محاسبه کړو.

ترکیب کیدونکي اتومي اوربیتالونه باید کاملا اویا تقریبا دانرژۍ له مخې یوشان وي. ددې اصل په نظر کې نیولوسره، په مشابه مالیکولونوکې 1S او2S او یا S او Pداوربیتالونو ترمنځ چې دانرژۍ اختلاف زیاد دي، یودبل سره ترکیب نه کوي.

هرڅومره چې ددوو اتومي اوربیتالونو ترمنځ دیوځای والي اندازه زیاته وي دهستو ترمنځ الکتروني کثافت زیاتیږي، نودمالیکولي اوربیتالونو دجوړېدو قدرت هم زیاتیږي. همدغه دلیل دي، چې دسیګما (σ) اړیکې دجوړېدو لپاره اتومي اوربیتالونه ډېرسره یوځای کیږي اود (π) داړیکې په نسبت یې اړیکه قوی وي. همدارنګه دS ددوواتومي اوربیتالو دیوځای والي اندازه د Pددوو اتومي اوربیتالو څخه کمه ده. نو په دوهم حالت کې دمنځ ته راغلې اړیکې قدرت نسبت اول حالت ته ډېر دي.

الکترون که پوزیترون که اوربیتال دی شپه او ورځ زما په دې کې قیل اوقال دی
هغه څوک دي چې یې ولولي په مینه؟ د(احسان) سره یې شریک مال اوملال دی
مال: نفع اوضرر. ملال: غم اودرد.

داچې لولې له زرګونو، نه لس ګون دی — که شي پاتې چيرې تکی لس، نګون دی
(احسان) سعې بنده ګي کړله تمامه — دلوستونکو توقع په ښه شګون دی
یا-داچې لولې، له فصلونو راټوليږي — خامخا به يوه دانه له لاسه لوېږي
د(احسان) سره هم سهوه هم نسيان شته — يوالله (ج) دی، نه نسيان نه سهوه کيږي

مآخذ فهرست

۱- Miessler and Tarr. (۲۰۱۱م). **Inorganic Chemistry**. ژباړه احسان نوراحمد. نيويارک: څلورم چاپ.

۲-رابرت سي فاي، جان مک موري. (۱۳۹۰ ه ش). **شيمي عمومي**. ژباړه ياوري، عيسی و اديب مهدي. تهران: لومړی چاپ. لومړی او دوهم ټوک. نشر علوم دانشگاهي.

۳-Brown اونور. (۲۰۰۰م). **Chemistry The Central Science**. ژباړه احسان نوراحمد. ايالات متحده امريکا: اتم چاپ.

۴-مورتيمر، چارلز. (۱۳۸۹ه ش). **شيمي عمومي**. ژباړه جوادي، علي او نور. تهران: شپږم چاپ. لومړی او دوهم ټوک. مرکز نشر دانشگاهي.

۵-سيلبربرګ، مارتين. (۱۳۸۹ه ش). **اصول شيمي عمومي**. ژباړه ميرمحمدصادقی مجيد او نور. تهران: دوهم چاپ. لومړی ټوک او.دوهم ټوک. نوپردازان.

۶-بهشتی عزيزالله. (۱۳۷۹ه ش). **شيمی معدنی**. اهواز: لومړی ټوک. انتشارات دانشگاه شهيد چمران.

۷-هادي، عبدالعلي او نور. (۱۳۶۷ه ش). **کيميای عمومي وغير عضوي**. کابل: لومړی ټوک. کابل پوهنتون.

۸-ماهر، سيامک. (ب ت). **شيمي معدني**. محل: انتشارات مرکزآموزش چهارم.