

الكيمياء العضوية الصيدلانية (1) Organic Pharmaceutical Chemistry(1)

Dr.Amna Aloush

المحاضرة الثالثة: التهجين

التهجين Hybridization

تعريف التهجين : هو عملية خلط أو اندماج أو اتحاد بين مدارين أو أكثر للإلكترونات من نفس الذرة .

- يكون المدارين متقاربين في الطاقة لنتج مدارات هجينة جديدة .
- تكون المدارات المهجنة متكافئة في الطول والشكل والطاقة .
- لكي يحدث التهجين يجب أن تكون:

التهجين يحصل ضمن مدارات الذرة الواحدة أي لا يحصل بين مدار تابع لذرة أولى ومدار تابع لذرة ثانية.
تراكب المدارات الهجينة يحدث بين ذرتين.

- ✓ الذرة مثارة.
- ✓ المدارات متقاربة في الطاقة.

- مثال: $2s$ مع $2p$
 $3s$ مع $3p$

تراكب المدارات Orbital Overlapping : هو عملية اندماج مدارات بين ذرتين، بحيث تصدر هذه المدارات طاقة عند اندماجها فنحصل على مركب أكثر ثباتاً من الذرات قبل الاندماج (طاقة المركب أقل من طاقة الذرات المنفصلة).

أنواع التهجين

تهجين Sp

- يعني تزاوج أو اتحاد ما بين مدار واحد من s مع مدار واحد من p .

تهجين Sp^2

- يعني تزاوج أو اتحاد ما بين مدار واحد من s مع مدارين من p .

تهجين Sp^3

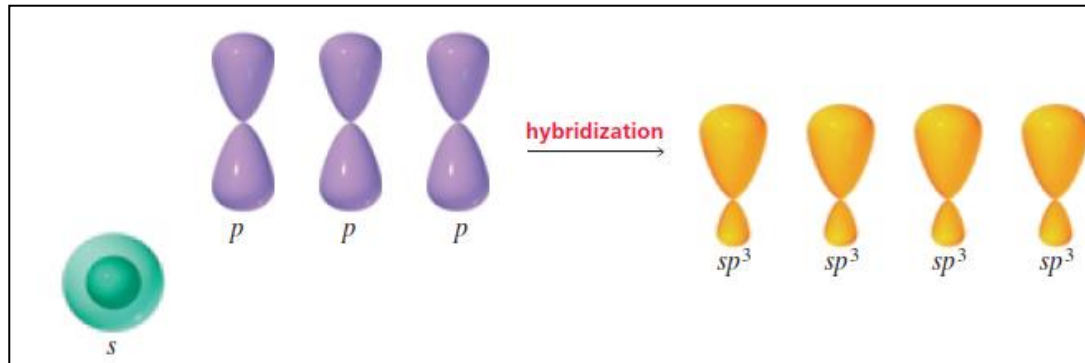
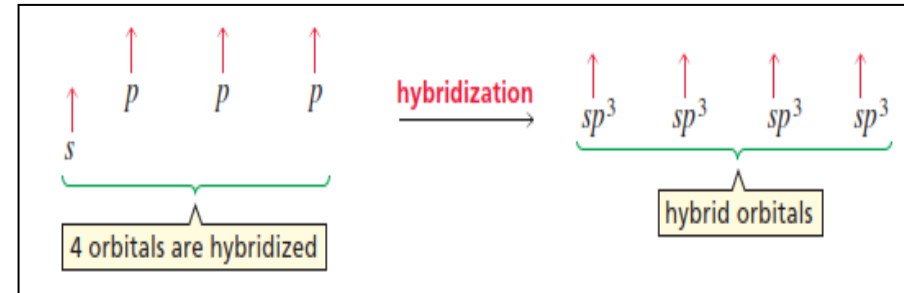
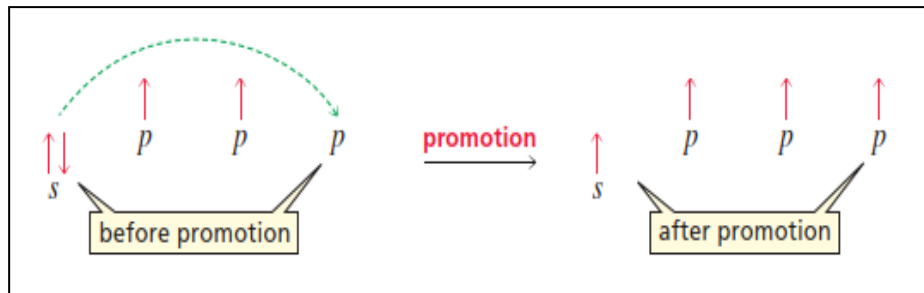
- يعني تزاوج أو اتحاد ما بين مدار واحد من s مع ثلاثة مدارات من p .

التهجين Sp^3 وبنية جزيء الميثان

يملك الكربون 4 إلكترونات تكافؤية $2s^2 2p^2$ وبالتالي سيشكل أربع روابط ولأن الكربون يستخدم نمطين من المدارات للارتباط $2s$ و $2p$ فإنه يتوجب علينا أن نتوقع نمطين من الروابط $C-H$.

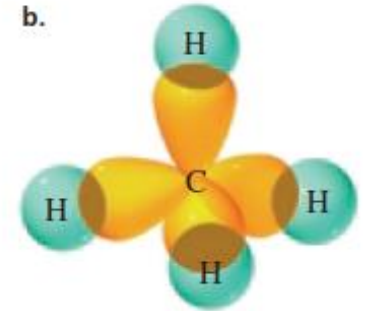
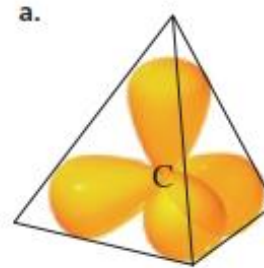
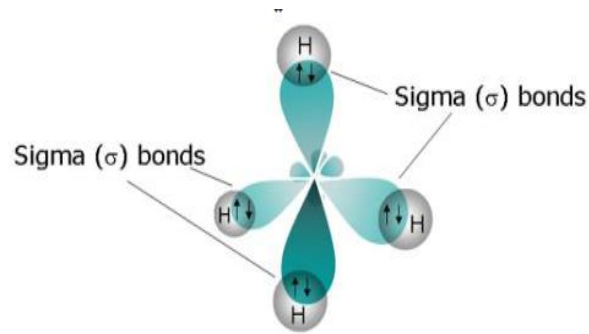
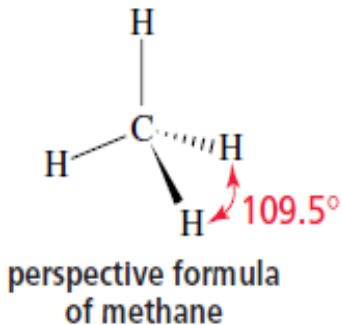
- بالواقع فإن جميع روابط $C-H$ في الميثان **متماثلة** وتأخذ اتجاهها محددًا نحو زوايا هرم رباعي الوجوه منتظم .
- **تفسير ذلك:** إن المدار $2s$ والمدارات الثلاثة $2p$ يمكن أن تتحد أو تتهجن لتشكل أربعة مدارات ذرية متكافئة Sp^3 ذات اتجاهات رباعي الوجوه في الفراغ كما في الشكل التالي :

التهجين Sp^3 وبنية جزيء الميثان



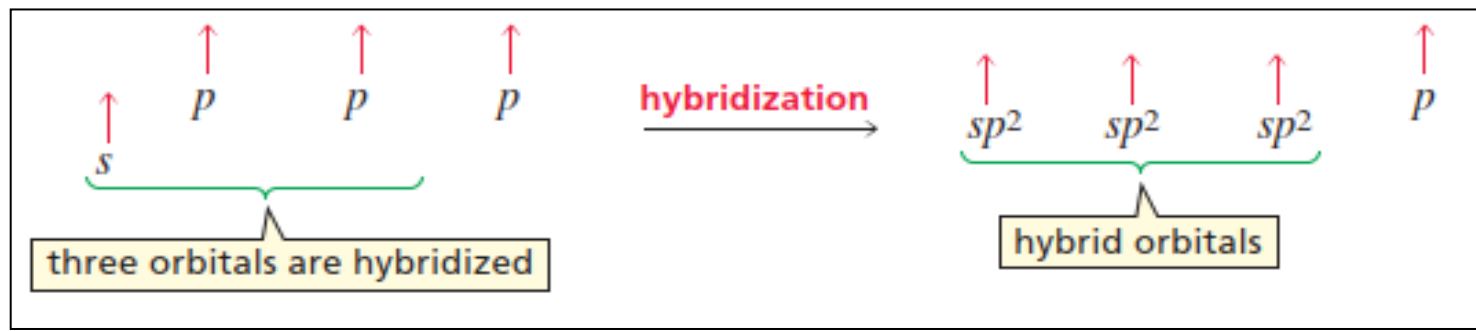
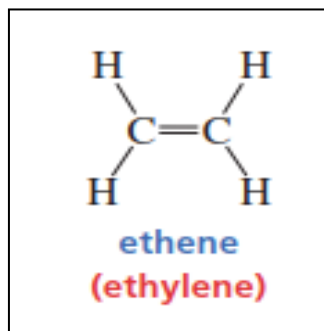
التهجين Sp^3 وبنية جزيء الميثان

- وبالتالي ينتج الميثان عن تداخل رأسي لكل مدار من مدارات sp^3 التابعة لذرة الكربون مع مدار s لذرة الهيدروجين ويكون الكربون واقعاً في مركز رباعي وجوه منتظم في حين تقع ذرات الهيدروجين الأربعة في رؤوسه وتكون الزوايا فيما بين الروابط جميعها 109.5°



التهجين Sp^2 وبنية جزيء الإيثيلين (الرابطة المضاعفة)

- يتم تهجين مدارين فقط ($2P_x$ ، $2P_y$) مع المدار $2s$
- فيتكون ثلاثة مدارات هجينة من النوع Sp^2 تقع محاور هذه المدارات في مستوى واحد
- يصنع كل مدار منها مع المدارات الأخرى زاوية 120°
- يتعامد محور المدار الثالث غير الهجين P مع مستوي المدارات الهجينة الثلاثة Sp^2



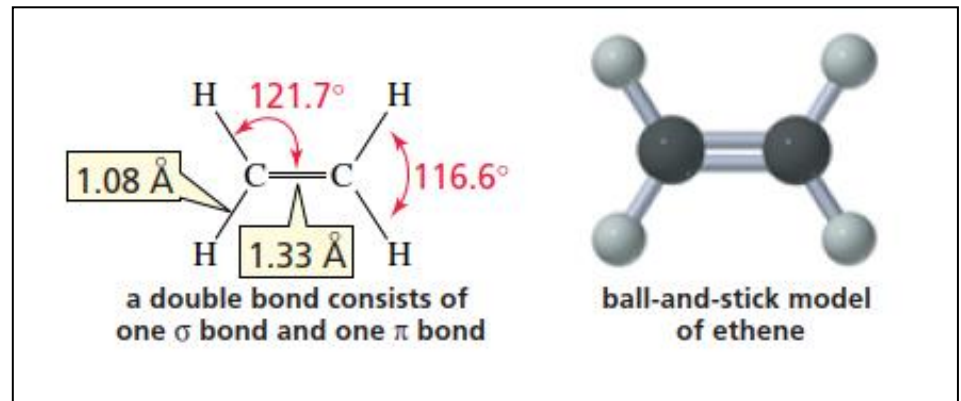
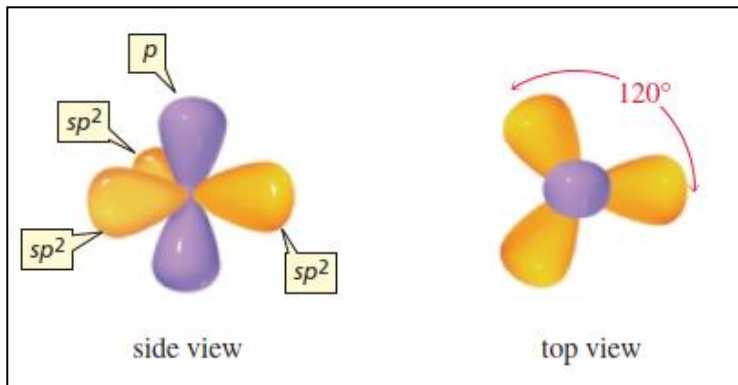
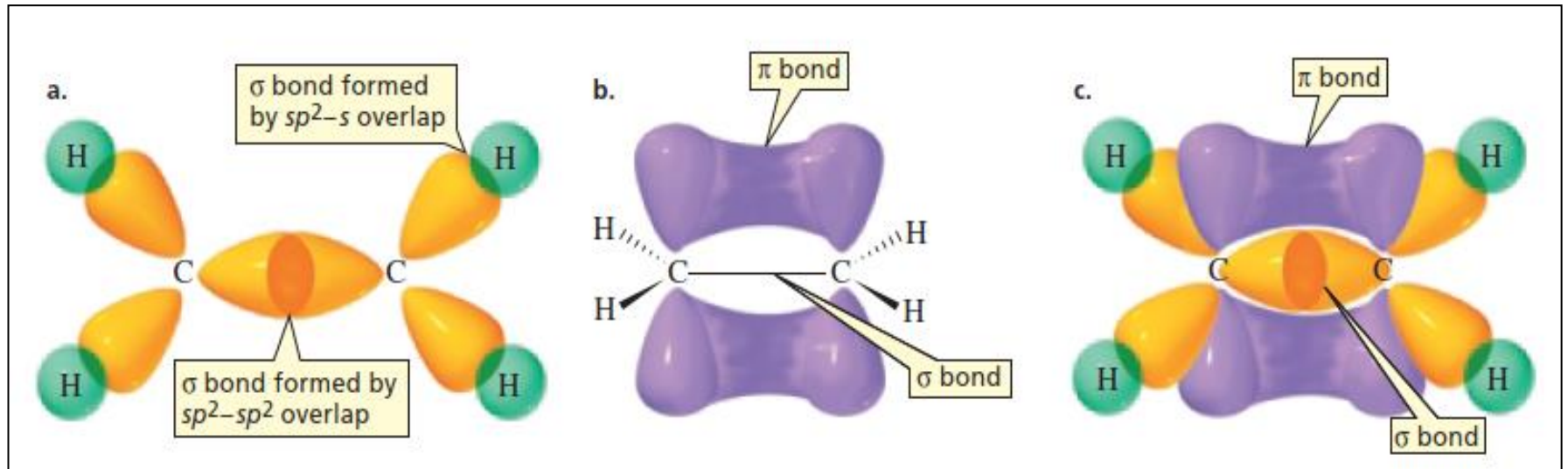
التهجين Sp^2 وبنية جزيء الإيثيلين

عندما تقترب ذرتي كربون ذات تهجين Sp^2 الواحدة من الأخرى فإنهما تشكلان رابطتين مختلفتين:

- 1) ينتج الرابطة الأولى من النوع (σ) من التداخل الرأسي للمدارين الهجينين- Sp^2 لكل منهما.
 - 2) بينما يتداخل المدارين الهجينين Sp^2 لكل ذرة كربون مع المدار S للهيدروجين وبذلك تتشكل الرابطة $C-H$.
- وينتج الرابطة الثاني $C-C$ من التداخل الجانبي side-to-side للمدارين p orbitals غير الهجينة من كلا الذرتين وهذا يؤدي إلى تشكيل ما ندعوه بالرابطة من النوع π (π)
- إن الرابطة (σ) مع الرابطة (π) يؤدي إلى تشارك أربعة الكترونات وتشكيل الرابطة المضاعف (كربون-كربون).

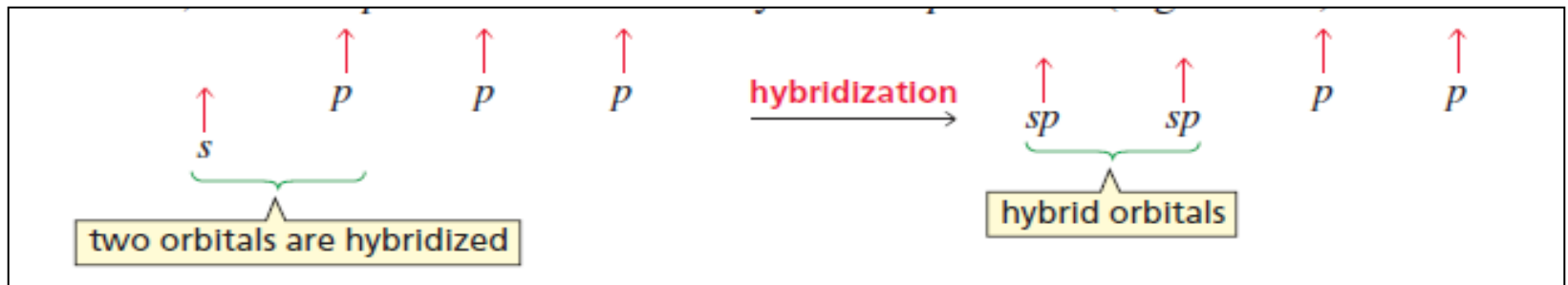
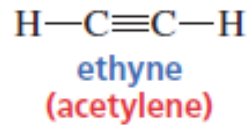
- تتكون الرابطة الثنائية من رابطة مشتركة σ ورابطة مشتركة π ، حيث تكون الكثافة الإلكترونية التي توافق الرابطة π فوق المستوي وتحتة، أي تكون الرابطة π مكشوفة بشكل ملحوظ، ويفسر ذلك الفعالية الكيميائية الكبيرة التي تتميز بها المركبات العضوية التي تحوي روابط ثنائية (مراكز غير مشبعة) وبذلك تدخل في تفاعلات الضم بسهولة.
- إن حرية الدوران النسبية المتاحة لذرات الكربون المرتبطة بروابط مشتركة أحادية تصبح غير متاحة في المركبات ثنائية الترابط كربون-كربون.
- دوران إحدى ذرتي الكربون بالنسبة للأخرى يتطلب في هذه الحالة كسر الرابطة π .
- لا يحدث ذلك في الشروط العادية، إلا أنه يمكن حدوثه بعد تزويد الجزيء بمقدار كاف من الطاقة.

الإيثيلين



التهجين Sp وبنية جزيء الإيتين (الأستيلين)

- ✓ يكون التهجين في هذا النوع بين مدار 2s ومدار 2px في ذرة الكربون
- ✓ يشكل الكربون **روابط ثلاثية** بواسطة هذا التهجين.
- ✓ في هذا التهجين يندمج المدارين 2px و 2s فيتكون لدينا مدارين من النوع sp
- ✓ يقع المداران الهجينان على خط مستقيم وتكون الزاوية بينهما **180°**.
- ✓ يتعامد المداران غير الهجينان p مع المداران الهجينان sp



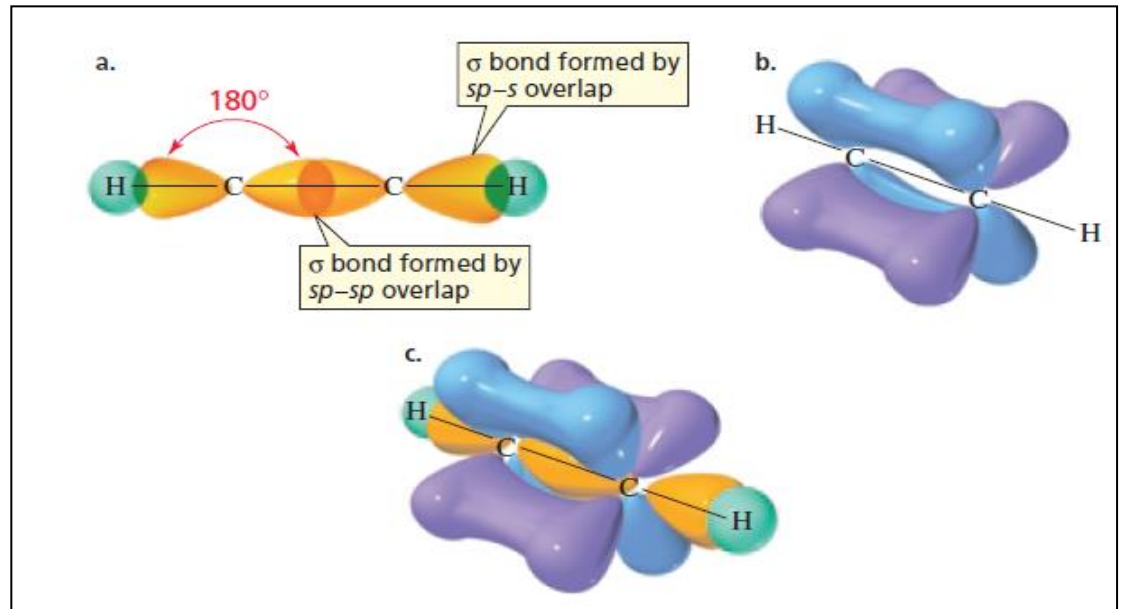
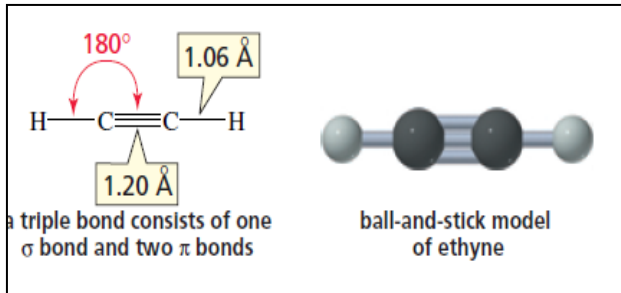
تتكون هذه الرابطة الثلاثية من:

الرابطة سيغما (σ) : ناتجة عن التراكب الرأسي $sp-sp$
رابطين باي (π):

✓ إحداهما ناتجة عن التراكب الجانبي $pY-pY$

✓ الأخرى ناتجة عن التراكب الجانبي $pZ-pZ$

المدار الهجين المتبقي من كل ذرة كربون في الإستيلين يتراكب مع مدار ذري s
لذرة الهيدروجين ويتشكل رابطتين C-H



أنواع تهجين ذرة الكربون

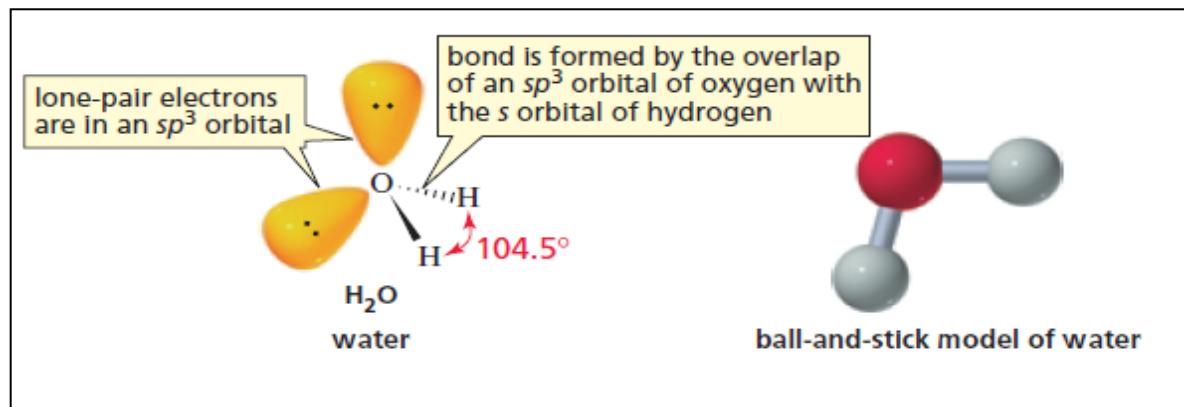
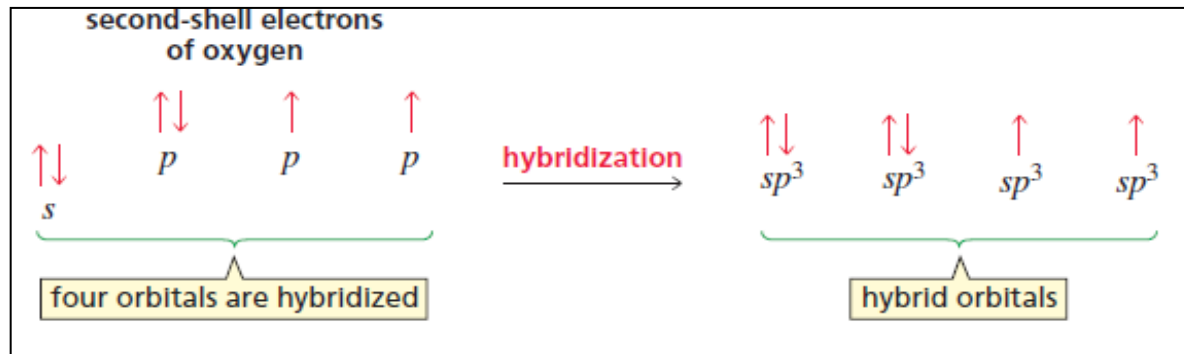
نوع التهجين	التهجين SP3	التهجين SP2	التهجين SP
عدد المدارات الهجينة	4	3	2
عدد الروابط باي (π)	0	1	2
عدد الروابط سيغما (σ)	4	3	2
شكل المركب المتكون	رباعي وجوه منتظم	مستوي ثلاثي	خطي
قياسات الزوايا المتشكلة	109.5°	120°	180°
نوع الرابطة المتشكلة	أحادية	ثنائية	ثلاثية
نسبة المدارات	25% من المدارات s 75% من المدارات p	33.3% من المدارات s 66.6% من المدارات p	50% من المدارات s 50% من المدارات p
مثال	الميتان، الإيتان	الإيتيلين	الأسيتيلين

الروابط في الماء

- تشكل ذرة الأوكسجين في جزيء الماء رابطتين تكافؤيتين وذلك لأن الأوكسجين يملك **زوج الكتروني** غير متزاوج في الطبقة السطحية.
- يحتوي الأوكسجين على إلكترونين تكافؤ.
- تتشكل أربعة مدارات هجينة Sp^3
- ✓ يشغل اثنين من المدارات الهجينة زوجين الكترونيين غير رابطتين.
- ✓ ويشغل المداران الهجينان المتبقيان إلكترون واحد.
- تتشكل الرابطة بين الأوكسجين والهيدروجين O-H من تداخل المدارين Sp^3 (الحاويان على إلكترون واحد) للأوكسجين مع المدارين s للهيدروجين
- يبقى زوجين من الإلكترونات غير رابطة
- **يتشكل جزيء الماء ويعتبر التهجين Sp^3**

الروابط في الماء

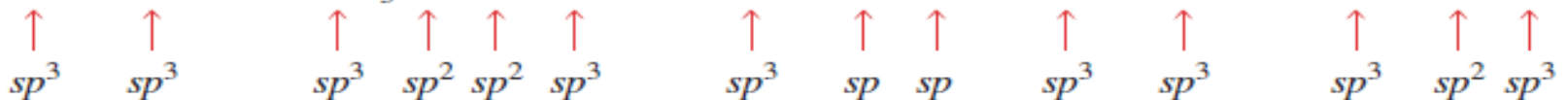
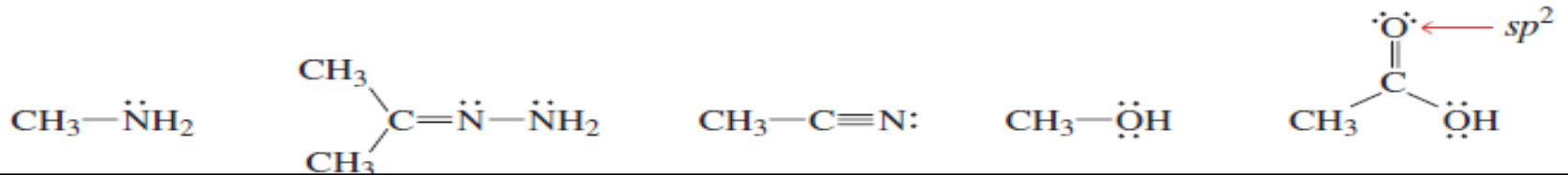
- نلاحظ أن الزوايا بين الروابط في الماء 104.5° وتختلف قيمة الزوايا عن 109.5° في رباعي الوجوه للميتان ويعود السبب في ذلك إلى وجود زوجين إلكترونين غير رابطين يشغلان حيزاً أكبر من الفراغ فيدفعان باقي المدارات عنه مما يجعل الزوايا بينها أقل



العلاقة بين عدد الروابط باي (π) ونوع التهجين

- جميع الروابط الأحادية من النوع سيغما σ
- جميع الروابط الثنائية تتألف من رابطتين أحدها سيغما σ والأخرى باي π
- جميع الروابط الثلاثية تتألف من رابطة سيغما σ ورابطتين باي π
- لمعرفة نوع تهجين الذرات (مثال: الكربون، الأوكسجين، النتروجين....) نلاحظ عدد الروابط باي π التي تشكلها الذرات:

- (1) إذا لم تشكل الذرة أية رابطة من النوع باي π يكون التهجين Sp^3
- (2) إذا شكلت الذرة رابطة واحدة من النوع باي π يكون التهجين من النوع Sp^2
- (3) إذا شكلت الذرة رابطتين من النوع باي π يكون التهجين sp



طول رابطة، قوة الرابطة، الزوايا بين الروابط

bond length, bond strength, bond angles

- كلما كانت نسبة المدار S المشارك في تشكيل الرابطة أكبر كلما كانت الرابطة أقصر وأقوى وكانت قيمة زاوية الرابطة أكبر

نوع التهجين	التهجين SP3	التهجين SP2	التهجين SP
نسبة المدارات	25% من المدارات s و75% من المدارات p	33.3% من المدارات s و66.6% من المدارات p	50% من المدارات s و50% من المدارات p

- ✓ الرابطة الثلاثية أقصر من الثنائية، والثنائية أقصر من الأحادية
- ✓ الرابطة الثلاثية أقوى من الثنائية، والثنائية أقوى من الأحادية
- ✓ زاوية الرابطة في الجزيئات ذات التهجين $sp^3 < sp^2 < sp$

الرابطة باي (π)	الرابطة سيغما (σ)
تداخل جانبي بين مدارين	تداخل رأسي بين مدارين
رابطة ضعيفة	رابطة قوية
تتشكل من تراكب جانبي للمدارات p-p	تتشكل من التراكب بين المدارات غير الهجينة: s-s ✓ s-p ✓ p-p ✓ أو من التراكب بين مدارين هجينين
لا تتشكل إلا بعد تشكل الرابطة سيغما	يمكن أن تتشكل إما لوحدها أو مع الرابطة باي

أنماط ذرة الكربون

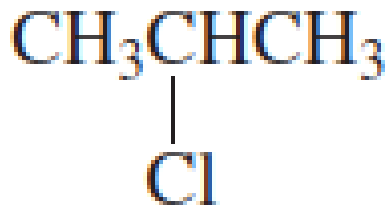
- ذرة الكربون الأولية (primary carbon): 10 حيث ترتبط ذرة الكربون بذرة كربون واحدة أخرى

a primary carbon



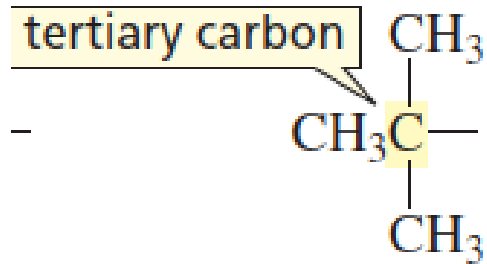
- ذرة الكربون الثانوية (secondary carbon): 20 حيث ترتبط ذرة الكربون بذرتي كربون أخريين

a secondary carbon

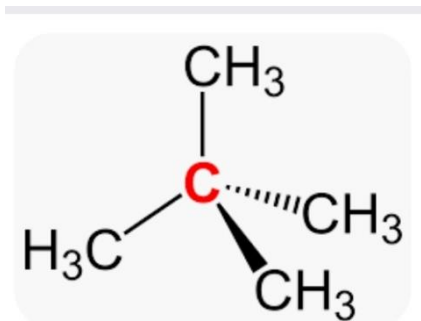


أنماط ذرة الكربون

- ذرة الكربون الثالثة (tertiary carbon): حيث ترتبط ذرة الكربون بثلاث ذرات كربون أخرى



- ذرة الكربون الرابعة (quaternary carbon): حيث ترتبط ذرة الكربون بأربعة ذرات كربون أخرى



أنماط ذرة الهيدروجين

- **الهيدروجين الأولي primary hydrogen**: الهيدروجين الذي يرتبط بذرة كربون أولية.
- **الهيدروجين الثانوي secondary hydrogen**: الهيدروجين الذي يرتبط بذرة كربون ثانوية.
- **الهيدروجين الثالثي tertiary hydrogen**: الهيدروجين الذي يرتبط بذرة كربون ثالثة.

