-2-

الـــتـــهـــجـــيـــن

2-1 تهجين الأفلاك الذرية Hybridization of Atomic Orbitals:

يعطي التهجين تفسيراً لطبيعة الأفلاك الذرية وكيفية اتحادها لتكوين الأفلاك الجزيئية وهو عبارة عن عملية تداخل بين أفلاك الذرة الواحدة المتقاربة في الطاقة مثل (s و p) لينتج عنها أفلاك جديدة متساوية في الشكل والطاقة. وتتم عملية التهجين بعد إثارة الذرة – نتيجة امتصاص طاقة – حيث ينتقل إلكترون من فلك فرعي أقل في الطاقة إلى فلك فرعي أعلى في الطاقة.

ولكي نحصل على الأفلاك المهجنة ينبغي أن نُلاحظ عدة نقاط منها:

1. تحتاج عملية التهجين لقدر معين من الطاقة والسبب في ذلك أن الجملة تحتاج إلى طاقة لتكوين الرابطة كما ذكرنا في البحث السابق.
2. عدد الأفلاك المهجنة الناتجة عن عملية التهجين يساوي عدد الأفلاك الذرية المشاركة في العملية.
3. تنشأ الروابط المشتركة من تداخل فلكين ذريين أو فلك ذري مع فلك هجين.
4. ينشأ عن التهجين تشكل جزيئات في وضع طاقي أقل (أكثر استقراراً) ولذا تبتعد الذرات عن بعضها لتقليل التنافر الكهراكدي.

مثال ذرة الكربون عددها الذري 6 يوجد فيها مدارين الأول هو المدار S و الآخر هو P بعد كتابة التوزع الالكتروني $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ ، بالنسبة لـ $1S^2$ نسميها إلكترونات داخلية لا تدخل في التهجين، وإنما يتم تهجين الإلكترونات الموجودة بالمدار الخارجي أو نسميه أيضاً مدار التكافؤ ($2s^2\ 2p^2$). حيث 2S و 2P كلاهما في العدد الكمي 2 فهم قريبين من بعض بالطاقة (تقريباً) وهذا مناسب ليحصل التهجين (لنتذكر أن المدار S وحيد أما المدار P هو ثلاثة هي p_x , p_y , p_z و جميعها نسميها مدارات ذرية نقية إذا لم تدخل بالتهجين).

كما ذكرنا سابقاً عدد الأفلاك الذرية الداخلة بالتهجين = عدد الأفلاك المهجنة الخارجة من التهجين . يعني لو دخل بالتهجين s و p فلكين ذريين يصبح عندك فلكين مهجنين sp و sp ، أما لو دخل بالتهجين s , p_x , p_y , p_z فيصبح التهجين $sp^3 , sp^3 , sp^3 , sp^3$ طبعاً الرقم 3 يقصد بها عدد أفلاك p الداخلة بالتهجين، وإذا التهجين sp^3 معناها يوجد عندي 4 روابط سيجما .

* **تذكر الأفلاك المهجنة دائما تكون الرابطة سيجما والرابطة النقية تكون الرابطة باي.**

قبل الخوض بأنماط التهجين يجب أن نتعرَّف على نظرية تنافر الزوج الإلكتروني لما له أهمية في أنماط التهجين .

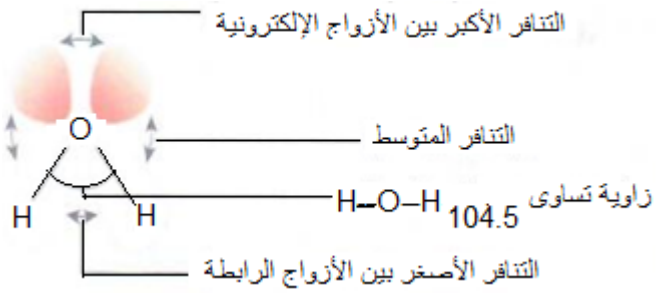
نظرية تنافر الزوج الالكتروني:

بما للإلكترونات ذات الشحنة السالبة نفسها. لذا فهي تتنافر فيما بينها عندما تتقارب . وهكذا يتنافر الزوج الإلكتروني في الروابط المحيطة بالذرة المركزية في جزيئة مع الأزواج الإلكترونية الأخرى. وبالتالي ترغم قوى التنافر هذه الأزواج الالكترونية على الابتعاد حتى تصبح قوى التنافر أصغرية . يعتمد شكل الجزيئة ذات الروابط المشتركة وزوايا الروابط على عدد أزواج الالكترونات فيها وهل هي روابط وحيدة أم أزواج رابطة؟ حيث تمتلك أزواج الالكترونات الوحيدة غمامة شحنة الكترونية أكثر تركيزاً من أزواج الالكترونات الرابطة . فغمامات الالكترونية شحنتها أكثر اتساعاً وأقرب بعض الشيء من نواة الذرة المركزية. الأمر الذي ينتج عنه مقدار مختلف من التنافر بين أزواج الالكترونات المختلفة . ويترتي التنافر كمايلي :

1- التنافر الأكبر : زوج وحيد – زوج وحيد

2- التنافر الأوسط : زوج وحيد – زوج رابط

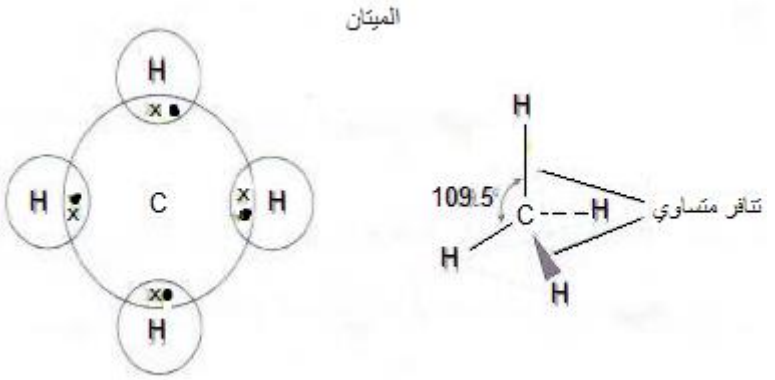
3- التنافر الأصغر : زوج رابط – زوج رابط



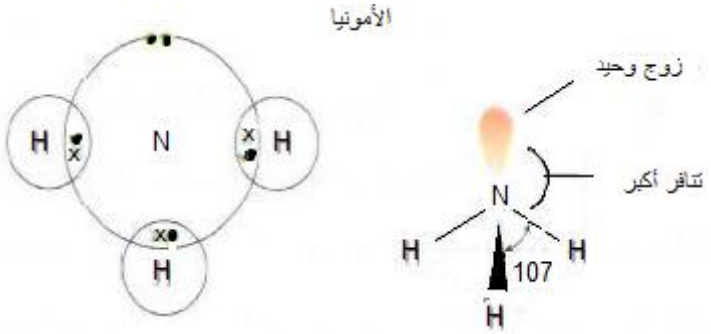
تُعَيِن الاختلافات في تنافر الزوج الالكتروني شكل الجزيئة وزوايا الروابط فيها :

مثال ذلك:

1- الميتان : يمتلك أربعة أزواج من الالكترونات الرابطة تحيط بذرة الكربون المركزية وينشأ عنقوى التنافر المتساوية .



2- الأمونيا : يمتلك ثلاثة أزواج إلكترونية رابطة وزوج وحيد . وبما أن تنافر زوج وحيد – زوج رابط أكبر منه في زوج رابط – زوج رابط فتدفع أزواج الالكترونات الرابطة لمزيد من الاقتراب بعضها مصغراً الزاوية بين H–N–H هي $107C^{o}$ من بعض وهذا يعطي جزيئة الأمونيا شكل هرمي مثلثي (رباعي وجوه)



الماء : يمتلك الماء زوجين من الالكترونات الرابطة وزوجين وحيدين . والتنافر الأعظمي للزوج من الالكترونات هو بين الزوجين الوحيدين . الأمر الذي ع يدفع بالروابط إلى المزيد من التقارب . وشكل جزيئة الماء راعي وجوه الزاوية بين H–O–H هي 104.5^{o}

2-1-1- بعض أنواع التهجين:

2-1-1-1 التهجين من النوع (sp) Hybridization of the Type sp:

ينتج عن اندماج فلك من نوع s مع فلك من نوع p في الذرة ذاتها وتشكيل فلكين هجينين متكافئين من النمط sp الزاوية بينهما 180^o.

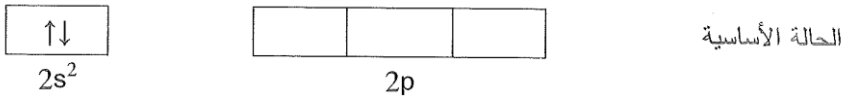
❖ مثال هيدريد البريليوم BeH_2:

Be عدده الذري 4 ، H عدده الذري 1 .

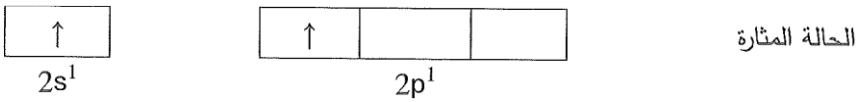
1. نكتب التوزع الإلكتروني لكل من البيريليوم والهدروجين

H $1S^1$ Be $1S^2$ $2S^2$

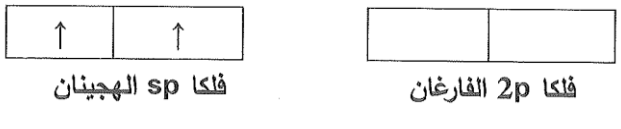
2. نكتب التشكيل الإلكتروني لإلكترونات طبقة التكافؤ بطريقة مخططات الفلك لذرة البيريليوم (Be):



3. من الواضح أن ذرة اليريليوم (Be) لن تشكل رابطة مشتركة مع الهيدروجين ما دامت في وضع الحالة الأساسية (Ground State) المتمثل بوجود الإلكترونين في المدار (الطبقة) $(2s)$ لذا ينقل أحد إلكترونات المدار $(2s)$ إلى المدار $(2p)$ ويصبح التشكيل الإلكتروني للذرة هو:

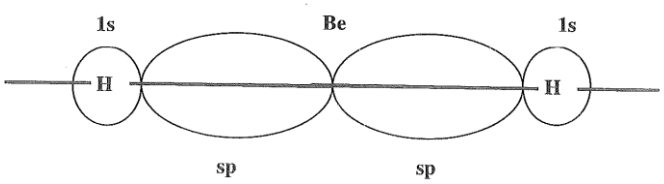


4. ينتقل أحد الإلكترونات من (s) إلى (p) يصبح هناك إلكترونا تكافؤ يشغلان الفلكين $(s$ و $p)$ ويتكون نتيجة لذلك تهجين لهذين الفلكين فيتكوّن فلكان هجينان هما (sp):



5. يمكن أن تنشأ الرابطة المشتركة بين ذرة البيريليوم وذرتي الهيدروجين من تداخل الفلكين الهجينين (sp) للبيريليوم والفلكان $(1s)$ لذرتي الهيدروجين وينبغي الإشارة إلى أن الرابطتين متماثلتان وليستا متكافئتين، لأنّ إلكتروني الربط في البيريليوم أتيا من فلكين مختلفين ومع هذا لا يمكن التمييز بين الرابطتين.

6. تساوي زاوية الربط في جزيء (BeH_2) 180^o وعليه يكون شكل الجزيء خطياً.



✍ فكر معنا : احسب فرق الكهرسلبية لمركب كلوريد البيريليوم $BeCl_2$ وحدد نوع الرابطة مستعيناً بالجدول الدوري الموجودة بالفصل السابق ؟؟؟؟؟؟؟؟

✍ فكر معنا : احسب فرق الكهرسلبية لمركب كلوريد الزئبق $HgCl_2$ وحدد نوع الرابطة ونمط التهجين مستعيناً بالجدول الدوري الموجودة بالفصل السابق ؟؟؟؟؟؟؟؟

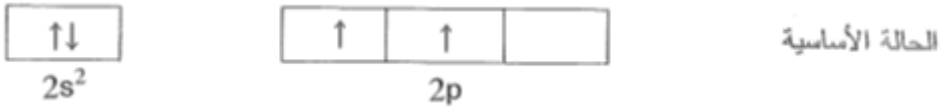
❖ مثال جزيء الأستيلين C_2H_2 : Ethyne **HC≡CH**

العدد الذري لذرة الكربون 6 ، أما الهيدروجين فعدده الذري 1 .

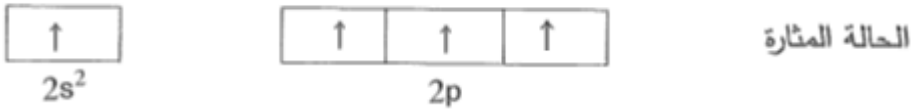
1. نكتب التوزع الإلكتروني لكل من الكربون والهيدروجين

H $1S^1$ C $1S^2\ 2S^2\ 2P^2$

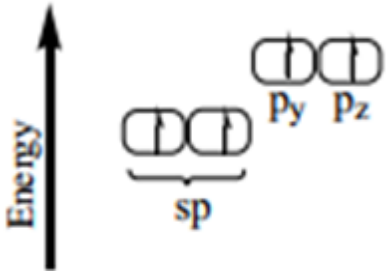
2. نكتب التشكيل الإلكتروني لإلكترونات طبقة التكافؤ بطريقة مخططات الفلك لذرة الكربون (C):



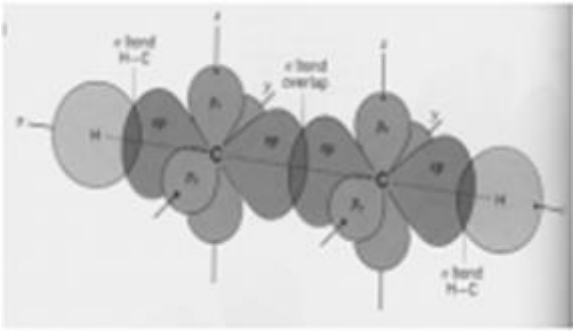
3. من الواضح أن ذرة الكربون لن تشكل رابطة مشتركة مع الهيدروجين ما دامت في وضع الحالة الأساسية (Ground State) المتمثل بوجود الإلكترونين في المدار (الطبقة) $(2s)$ لذا ينقل أحد إلكترونات المدار $(2s)$ إلى المدار $(2p)$ ويصبح التشكيل الإلكتروني للذرة هو:



4. يتم تهجين فلك $(2s)$ مع فلك $(2p)$ في ذرة الكربون المثارة فينتج فلكين متماثلين في الشكل والطاقة(s و p) ويتكوّن فلكان هجينان هما (sp) ويبقى فلكين p_y , p_z في وضعهما الأصلي قبل التهجين.



5. يتم تداخل أفلاك (sp) من كل ذرة كربون مع أفلاك 1S من كل ذرة هيدروجين وينتج عنه رابطة C–H من نوع σ. كما تداخل أفلاك (sp) من كل ذرة كربون ينتج عنه رابطة C–C من نوع σ .



6. يحدث تداخل جانبي بين فلكي p_y , p_z من كل ذرة كربون فتتكون رابطتين من النوع π .

❖ **مثال آخر $BeCl_2$**

عند تشكل جزيء $BeCl_2$ يتهيج البيريليوم لتصبح بنيته الإلكترونية حاوية على إلكترونين احدهما في المدار $2s$ والآخر في $2p$ وكل منها سيرتبط مع المدار الذري $2p$ العائد لذرة الكلور كما في الشكل:

$$Be : 1s^2\ 2s^2\ 2p^0$$

$$^*Be : 1s^2\ 2s^1\ 2p^1 \quad \text{مهيج}$$

$$Cl : [He]\ 3s^2\ 3p^5$$

بالنتيجة سينشأ مداران جزيئيان من نوع σ_P , σ_{SP} متناظران ويشكلان بينهما زاوية 180^0 كي يكون التنافر أصغرياً.

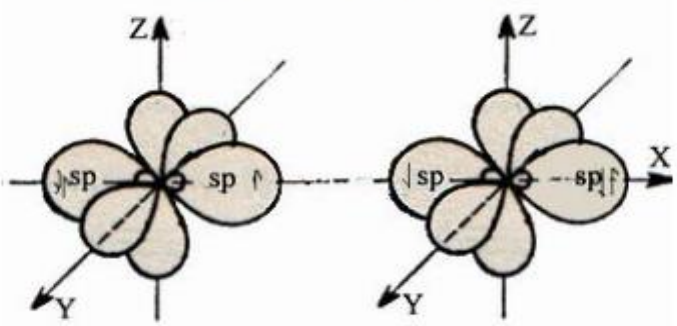
بينت التجربة أن الرابطتين بين البيريليوم والكلور متماثلتين تماماً في الطول والطاقة هذا يعني أن التمثيل الحالي للمدارات الجزيئية لا يمكن أن تُعطي تفسيراً لهذا التماثل وذلك لأن كل رابطة تشكلت من نوعين مختلفين من المدارات الذرية وهذا سيؤدي إلى أن تكون طاقة وطول هاتين الرابطتين مختلفة وهو ما تنفيه التجربة. لذلك فرض العالم سليتر وباولنغ نظرية المدارا ت الهجينة، والتي هي اندماج المدارات الذرية التكافؤية ببعضها البعض لنفس الذرة لتشكيل مدارات هجينة متماثلة وعددها يساوي تماماً عدد المدارات الذرية المهجنة. إن المدارات الهجينة المتشكلة متشابهة فيما بينها تماماً وتختلف عن بعضها البعض بتوجهها الفراغي.

❖ **جزيء النتروجين N_2:**

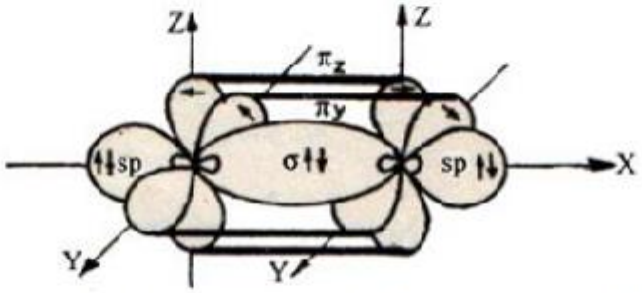
إن التوزيع الإلكتروني لذرة الآزوت:

$$_7N: 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$$

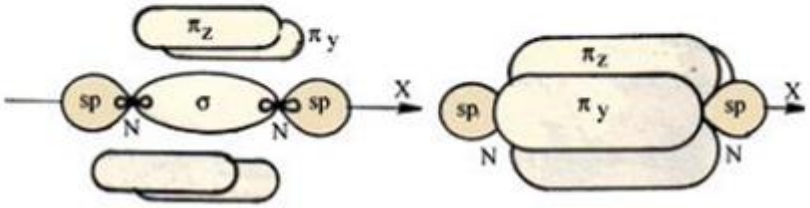
أي هنالك خمسة إلكترونات تكافئية اثنان منها في مدارات $2s$ وثلاثة في مدارات $2p$ الثلاثة. يمكن أن يندمج المدار $2s$ مع المدار $2p_x$ لإعطاء مدارين هجينين من نوع sp يحوي أحدهما زوج إلكتروني ولآخر إلكترون أعزب. يبقى عندئذٍ مداران ذريان هما $2p_z, 2p_y$ المتعامدين على بعضهما والمتعامدين أيضاً مع المدارين الهجينين sp كما في الشكل:



إن اقتراب ذرة آزوت أخرى فالمدار الهجين sp الذي يحتوي على إلكترون الأعزب من كل منهما سيشكل مدار جزيئي من نوع σ وأما المداران $2p_z, 2p_y$ في كل ذرة فيرتبط كل منها مع مثيله من الذرة الثانية ويتشكل مداران جزئيان من نوع π_z, π_y كما في الشكل:



وتتشكل نتيجة لذلك بين ذرتي الآزوت ثلاثة مدارات جزيئية رابطة هي σ, π_y, π_z كما في الشكل التالي:



بالإضافة إلى مدارين هجينين يحتوي كل منها على زوج إلكتروني غير رابط. أي أن هنالك فقط ستة إلكترونات تكافؤية تُستخدم لتشكيل ثلاثة روابط مشتركة، واحدة σ واثنتان π.

ملاحظة: عندما نريد فهم الترابط في جزيء مؤلف من ذرة أو أكثر نتخيل أننا نضع الإلكترونات التكافؤية جانباً، ثم نعين المدارات الجزيئية والمدارات الذرية الغير رابطة وعندها فقط نوزع الإلكترونات مثنى مثنى عليها بغض النظر عن مصدر الإلكترونات.

2-1-1-2- التهجين من النوع SP^2: Hybridization of the Type SP^2

ينتج التهجين sp^2 عن اندماج فلك من النوع s مع فلكين من النوع p في ذات الذرة وتشكيل ثلاثة أفلاك هجينة متكافئة من النمط sp^2 تقع في المستوي والزوايا بينها 120^o.

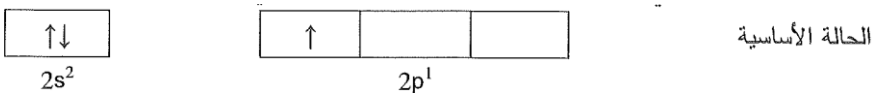
❖ مثال فلوريد البورون (BF_3):

العدد الذري لذرة الفلور 9 ، أما البورون فعدده الذري 5 .

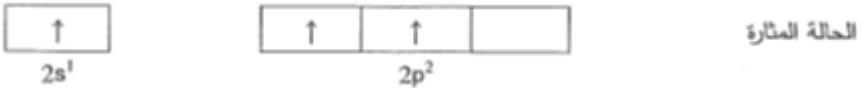
1. نكتب التوزع الإلكتروني لكل من البورون والفلور

B $1S^2\ 2S^2\ 2P^1$ F $1S^2\ 2S^2\ 2P^5$

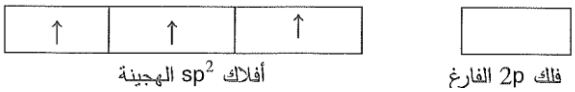
2. نكتب التشكيل الإلكتروني لإلكترونات طبقة التكافؤ بذرة البورون في الحالة الأساسية:



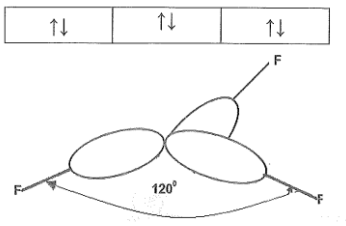
3. في الحالة المثارة يكون التشكيل الإلكتروني بعد انتقال أحد إلكتروني الطبقة $2s$ إلى الطبقة $2p$:



4. يتم خلط الفلك $2s$ مع الفلكين $2p$ لتشكل الأفلاك الهجينة الثلاثة من النوع sp^2 :



5. يتم التداخل بين الأفلاك المهجنة sp^2 مع فلك $(2p)$ لثلاث ذرات فلور فتتكون 3 روابط تساهمية أحادية Sigma. تقع الأفلاك الهجينة sp^2 في مستوى واحد (Plane) والزاوية بين أي فلكين هجينين تساوي (120^o) .



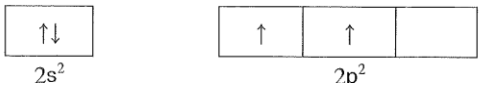
2-1-1-3 التهجين من النوع (SP^3): Hybiridization of the Type SP^3

ينتج التهجين sp^3 عن اندماج فلك من النوع s مع ثلاثة أفلاك من النوع p في الذرة ذاتها وتشكل أربع أفلاك هجينة من النمط sp^3 تتوجه فراغياً نحو رؤوس رباعي وجوه منتظم والزاوية بين الروابط 109.5^o.

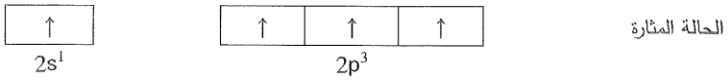
هناك مجموعة من الجزيئات التي تحتوي على ذرة مركزية ذات تهجين من النوع (sp^3) ومن هذه الجزيئات:

❖ **مثال جزيء الميتان CH_4:**

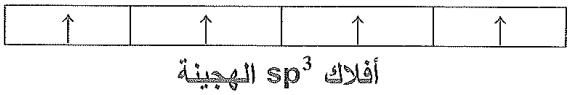
1. التشكيل الإلكتروني لإلكترونات التكافؤ للذرة المركزية (الكربون C^6) في الحالة الأساسية:



2. ينتقل أحد إلكتروني الفلك $(2s)$ إلى الفلك $(2p)$، فنحصل في الحالة المثارة على التشكيل الإلكتروني التالي:

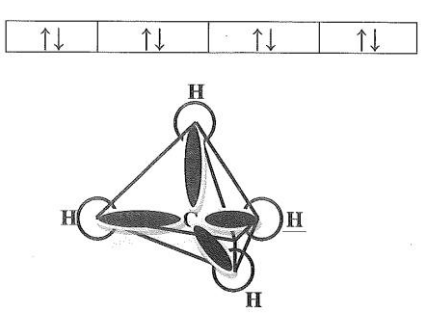


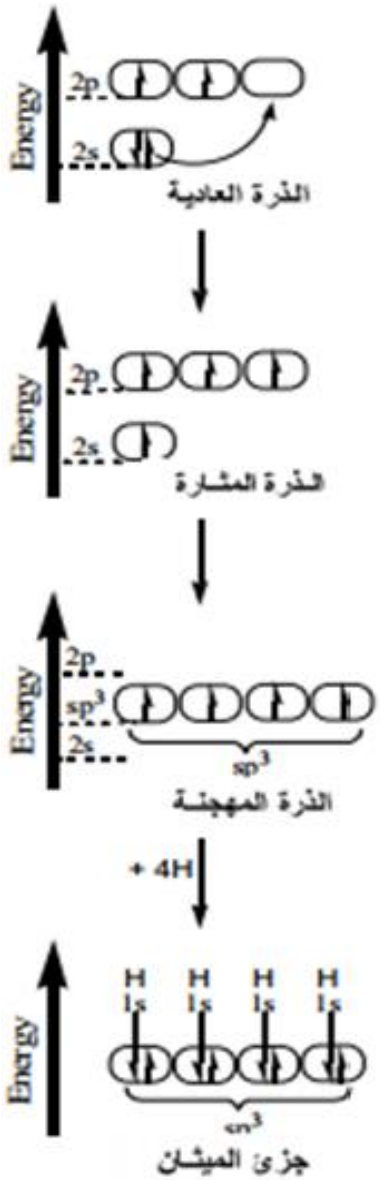
3. بعد هذا تتكون الأفلاك الهجينة الأربعة (sp^3) بخلط الفلك $(2s)$ مع أفلاك $(2p)$ الثلاثة لنفس الذرة.



أفلاك sp^3 الهجينة

4. يتم التداخل بين الأفلاك المهجنة وفلك 1S لأربع ذرات هيدروجين فتتكون 4 روابط تساهمية أحادية Sigma متوجهة هذه الأفلاك الهجينة في الفراغ نحو رؤوس رباعي الوجوه وتكون الزاوية بين كل فلكين مساويين لـ (109.5^o) وبذلك يتكون جزيء الميتان.





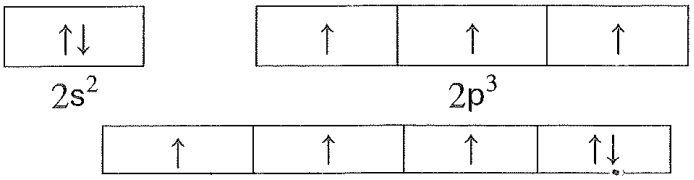
❖ **جزيء النشادر (NH_3):**

العدد الذري لذرة النتروجين 7 ، أما الهيدروجين فعدده الذري 1 .

1. نكتب التوزع الإلكتروني لكل من النتروجين والهيدروجين

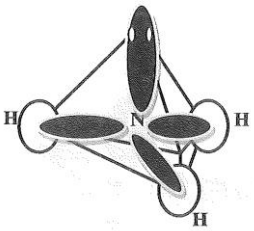
H $1S^1$ N $1S^2\ 2S^2\ 2P^3$

2. تتكون الأفلاك الهجينة الأربعة في ذرة الآزوت من النوع sp^3:



أفلاك sp^3 الهجينة

3. تُستخدم ثلاثة من الأفلاك الهجينة لتكوين الرابطة $(N-H)$ أما الفلك الهجين الرابع فيشغل بزوج من الإلكترونات الحرة على ذرة الآزوت والتنافر بين هذه الإلكترونات والإلكترونات فلك الربط يقلل زاوية الربط $(H-N-H)$ من (109.5^o) إلى (107.3^o) فأصبح الشكل هرمياً.



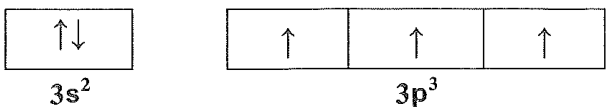
2-1-1-4 التهجين من النوع (sp^3d): Hybridization of the Type sp^3d

يحصل التهجين من هذا النوع في الجزيئات التي تحيط بذرتها المركزية خمس مجموعات حرة من الإلكترونات مثل (PCl_5, SF_4) ولتصور كيفية حدوث هذا التهجين في جزيء (PCl_5) علماً أن عددها الذري للفسفور 15و للكلور 17 .

نتبع الخطوات السابقة:

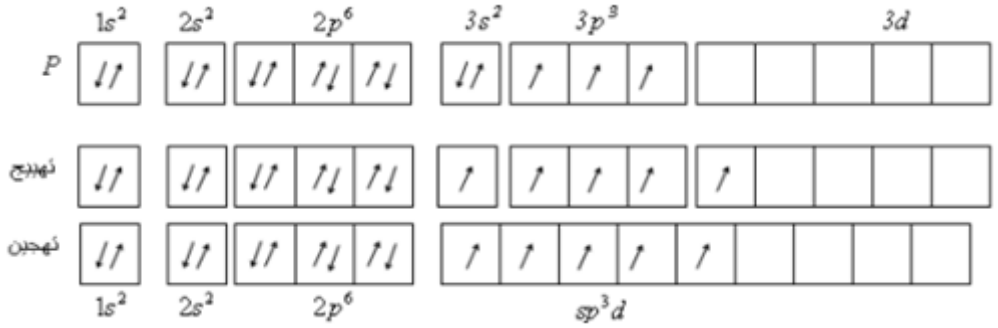
1. نكتب التوزع الاللكتروني لذرة الفوسفور المركزية في الحالة الأساسية

الحالة الأساسية



P^{15}

2. ينتقل أحد إلكترونات الطبقة $(3s)$ إلى الطبقة $(3d)$ فنحصل على التشكيل الإلكتروني لذرة الفوسفور في الحالة المثارة:



3. يحصل التهجين من النوع (sp^3d):

4. يوجد خمسة أفلاك نصف ممتلئة بالإلكترونات يمكن أن تشغل بالإلكترونات الخمسة التي تساهم بها ذرات الكلور الخمس لتكوين الروابط المشتركة بين ذرتي الفوسفور والكلور.

5. تتوجه هذه الأفلاك الهجينة الخمسة نحو رؤوس هرم مثلثي مضاعف (Triagonal Bipyramiol).

فكر معنا : حدد نمط تهجين المركبات التالية ، وماهو الشكل الفراغي لكل منها، وماهي الزاوية المتوقعة بين الروابط ولماذا ؟؟؟؟؟؟؟

مستعيناً بالجدول الدوري لمعرفة الأعداد الذرية (فصل الروابط) وآخذا بعين الاعتبار الأزواج الالكترونية للذرة المركزية .

- CO_2
- H_2O
- H_2S
- BF_3
- SF_6
- ClF_3
- PCl_3
- CCl_4
- $HgCl_2$
- PH_3
- SnF_4
- O_2

يُظهر الجدول أدناه ملخصاً لأشكال أفلاك التهجين.

شكل أفلاك التهجين	مثال	زاوية الربط	عدد الأزواج الإلكترونية	الأفلاك الذرية		الأفلاك المهجنة
خطي	$BeH_2, HgCl_2$	180^o	2	$s+p$	2	sp
ثلاثي مستوي	BF_3	120^o	3	$s+p+p$	3	sp^2
رباعي الوجوه	$CH_4, NH_4^+, BH_4^-, SnF_4$	109.5^o	4	$s+p+p+p$	4	sp^3
رباعي الوجوه	NH_3	107.3^o	4	$s+p+p+p$	4	sp^3
رباعي الوجوه	H_2O	104.5^o	4	$s+p+p+p$	4	sp^3
هرم مثلثي مضاعف	PCl_5	90^o 120^o	5	$s+p+p+p+d$	5	sp^3d
رباعي مستوي	$PtCl_4^{-2}$	90^o	4	$d+s+p+p$	4	dsp^2
ثماني الوجوه	CrF_6^{-3}	90^o	6	$d+d+s+p+p+p$	6	d^2sp^3
ثماني الوجوه	SF_6	90^o	6	$s+p+p+p+d+d$	6	sp^3d^2

وجه المقارنة	C – C	C = C	C ≡ C	C – H	=C–H	≡C–H
نوع الرابطة	σ	رابطة σ رابطة π	رابطة σ رابطتين π	σ	σ	σ
المجالات الداخلة في تكوينها	(SP^3-SP^3)	Sp^2-sp^2	Sp -sp	Sp^3-1s	Sp^2-1s	(SP–1S)
الزاوية	109.5	120	180	109.5	120	180