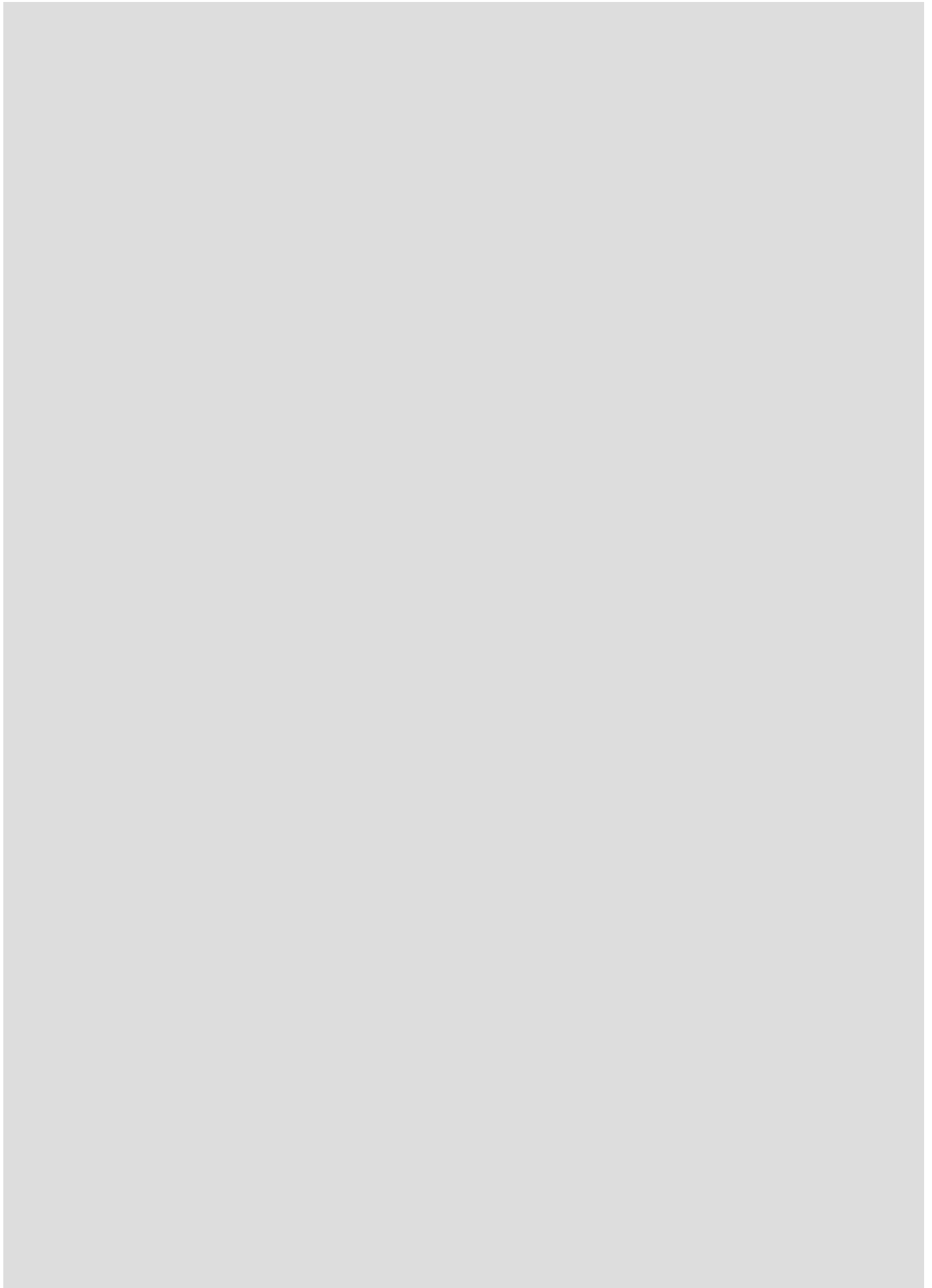




## Sisällysluettelo

### Kovalenttinen sidos

- Yhteinen elektronipari muodostaa kovalenttisen sidoksen

- Osittaisvaraus kuvaa sidoselektronien epätasaista jakautumista

- Sidoksen poolisuuden voi päätellä elektronegatiivisuuden avulla

- Sidosten lukumäärä

- Oktettisääntö

- HONC-muistisääntö

### 3D-malli

- Timantti

### Lisätietoa: Osittaisvarauksen merkintätapa

- Osittaisvarauksen suuruus

### Lisätietoa: Koordinaatiosidos

- Vapaa elektronipari voi muodostaa sidoksia

### Lisätietoa: Sidostyyppien selvittäminen laskemalla

- Rakenteen mallinnus

### Lisätietoa: Molekyylin rakenteen selittäminen VSEPR-teorialla

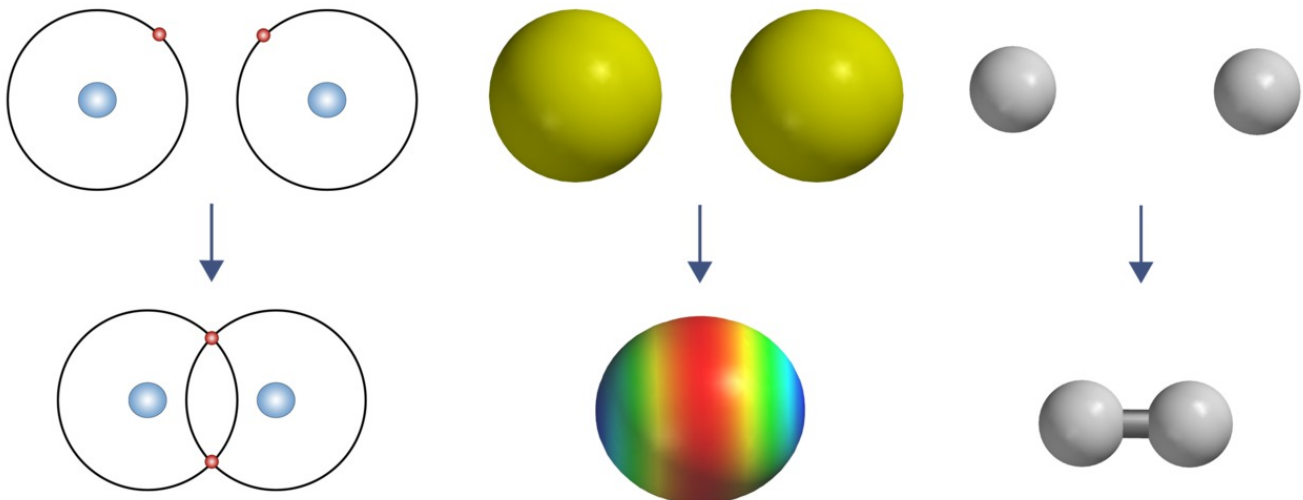
- Avaruusrakenne

## Kovalenttinen sidos

### Yhteinen elektronipari muodostaa kovalenttisen sidoksen

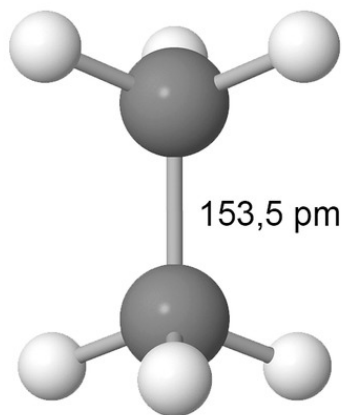
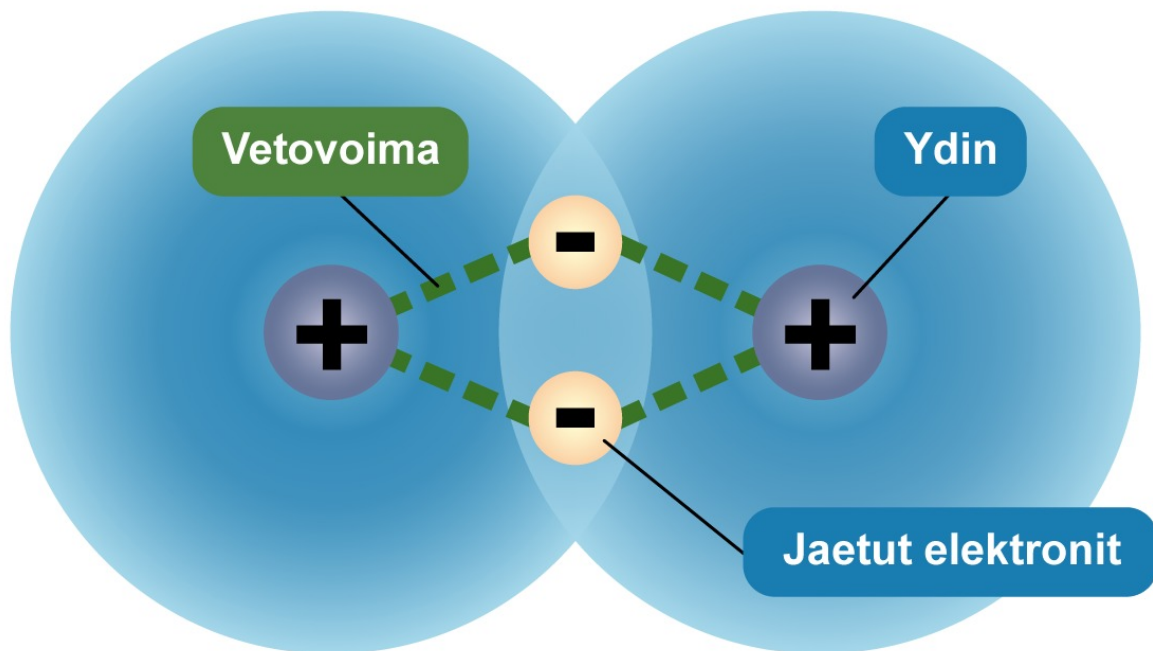
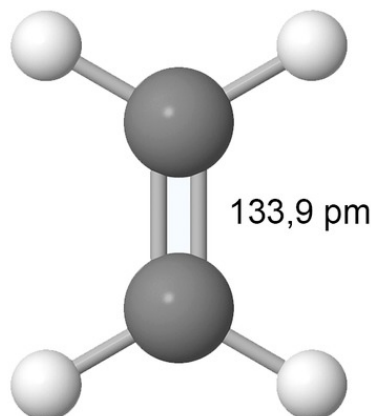
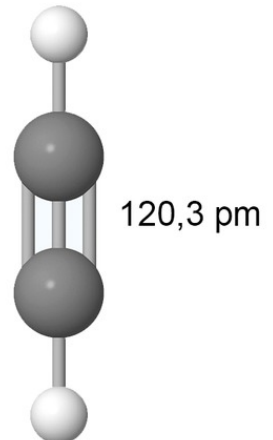
Yhteisen elektroniparin aiheuttamaa sähköistä vuorovaikutusta atomiydinten välillä sanotaan **kovalenttiseksi sidokseksi**. Kovalenttinen sidos on luja. Sidoksen muodostuessa vapautuu paljon energiaa ja vastaavasti sidoksen katkaiseminen vaatii paljon energiaa. Myös sidoksen pituuden muuttaminen vaatii paljon energiaa. Kovalenttisilla sidoksilla muodostuneen aineen kiteet ovat kovia ja aineilla on korkea sulamispiste.

Kovalenttinen sidos on molekyylinmuodostuksen tärkein mekanismi. Kahden vetyatomin liittyessä yhteen muodostuu vetymolekyyli,  $H_2$ . Se rakentuu kahdesta ytimeistä ja kahdesta elektronista. Kvanttikemian avulla voidaan määrittää avaruuden alue, jossa sitovat elektronit todennäköisimmin sijaitsevat. Laskennan perusteella on saatu selville, että elektronit löytyvät useimmin ydinten välisestä alueesta.

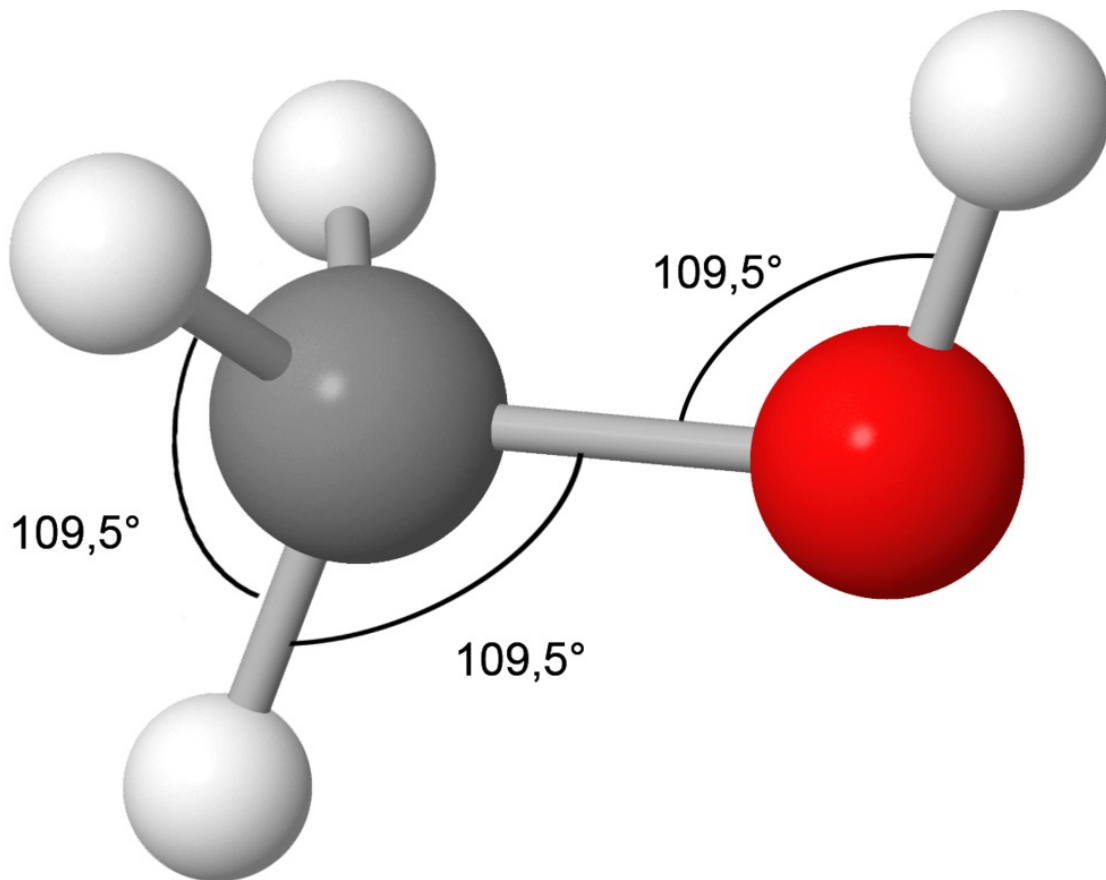


*Kun kaksi vetyatomia muodostaa molekyylin, elektronit liikkuvat etenkin atomien välisessä alueessa. Laskennallinen varausjakauma kuvaa elektronien jakautumista: punainen väri tarkoittaa aluetta, jossa elektronit sijaitsevat eniten, ja sininen väri aluetta, jossa elektronit käyvät vähiten.*

Positiivisesti varautuneet ytimet kokevat molempien negatiivisesti varautuneiden elektronien aiheuttaman sähköisen vetovoiman. Samanmerkkisesti varautuneet elektronit ja ytimet kohdistavat toisiinsa poistovoiman. Veto- ja poistovoimista johtuvaa ydinten välistä tasapainoetäisyyttä nimitetään **sidospituudeksi**.

Etaani  $\text{C}_2\text{H}_6$ Eteeni  $\text{C}_2\text{H}_4$ Etyyni  $\text{C}_2\text{H}_2$ 

Sidospituuksia.

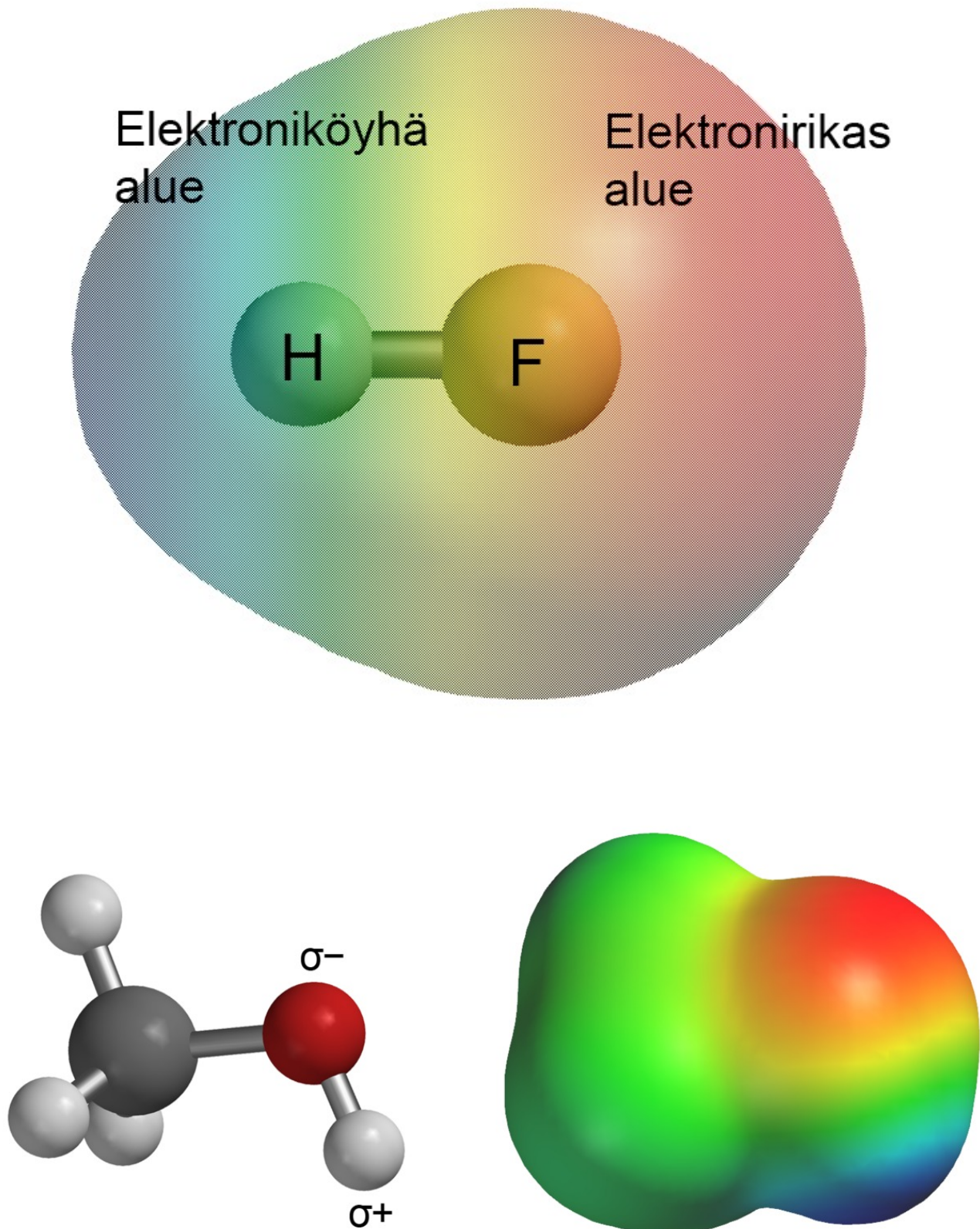


Kovalenttisella sidoksella on tietty suunta. Molekyylin muodostuessa atomiytimet asettuvat tiettyyn avaruudelliseen asemaan toistensa suhteen ja atomien välille muodostuu sidoskulmat. Sidosten suuntautuminen määrää molekyylin muodon ja kiinteän aineen kiderakenteen.

### Osittaisvaraus kuvaa sidoselektronien epätasaista jakautumista

Kahden erilaisen atomin liittyessä yhteen elektronit jakaantuvat epätasaisesti. Kokonaisuus on epäsymmetrinen ja molekyylisiin muodostuu varauksellisia alueita. Niiden avulla molekyylit voivat liittyä muihin sähköisesti varautuneisiin molekyyleihin ja ioneihin.

Metanolimolekyylissä olevan happiatomin ydinvaraus on suurempi kuin vetyatomin. Happi vetää yhteisiä sidoselektroneja voimakkaammin puoleensa kuin siihen sitoutuneet vedyt. Elektronitihentymä happiatomin ympärillä aiheuttaa hapelle negatiivisen **osittaisvarauksen**. Se merkitään yhdisteen rakennekaavassa kyseisen atomin viereen merkinnällä  $\delta^-$  (*kreik. delta,  $\delta$* ). Vastaavasti elektroniharventuma vetyatomin ympärillä aiheuttaa sille positiivisen osittaisvarauksen, jota osoitetaan merkinnällä  $\delta^+$ . Osittaisvarauksen suuruus on pienempi kuin alkeisvaraus eli yhden elektronin varaus. Se voi saada minkä tahansa lukuarvon nollan ja ykkösen väliltä.



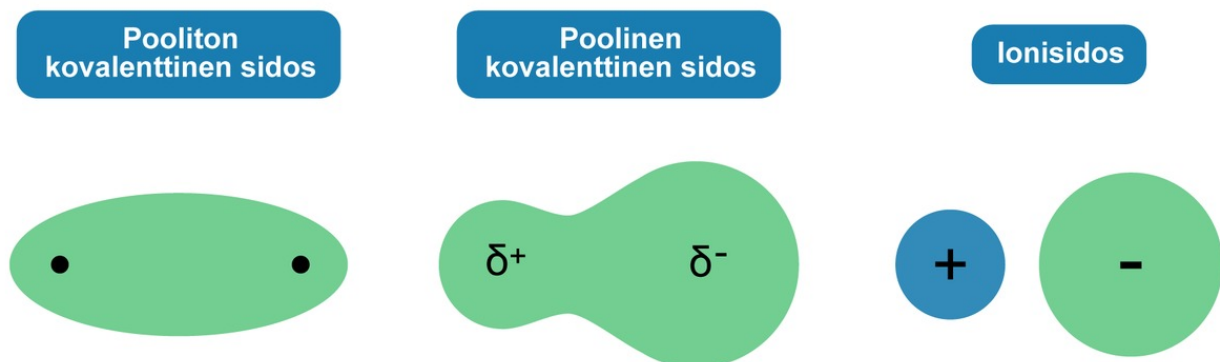
Metanolissa happiatomilla on negatiivinen osittaisvaraus ja happeen sitoutuneella vetyatomilla positiivinen osittaisvaraus. Varausjakaukuvassa nämä osittaisvaraukset näkyvät punaisena ja sinisenä alueena. Hiiliatomi on menettänyt negatiivista varausta happiatomille, mutta toisaalta se on saanut sitä takaisin kolmelta vetyatomilta, sillä hiili on hieman vetyä elektronegatiivisempi alkuaine. Hiiliatomin osittaisvarausta on siten hankala päätellä.

## Sidoksen poolisuuden voi päätellä elektronegatiivisuuden avulla

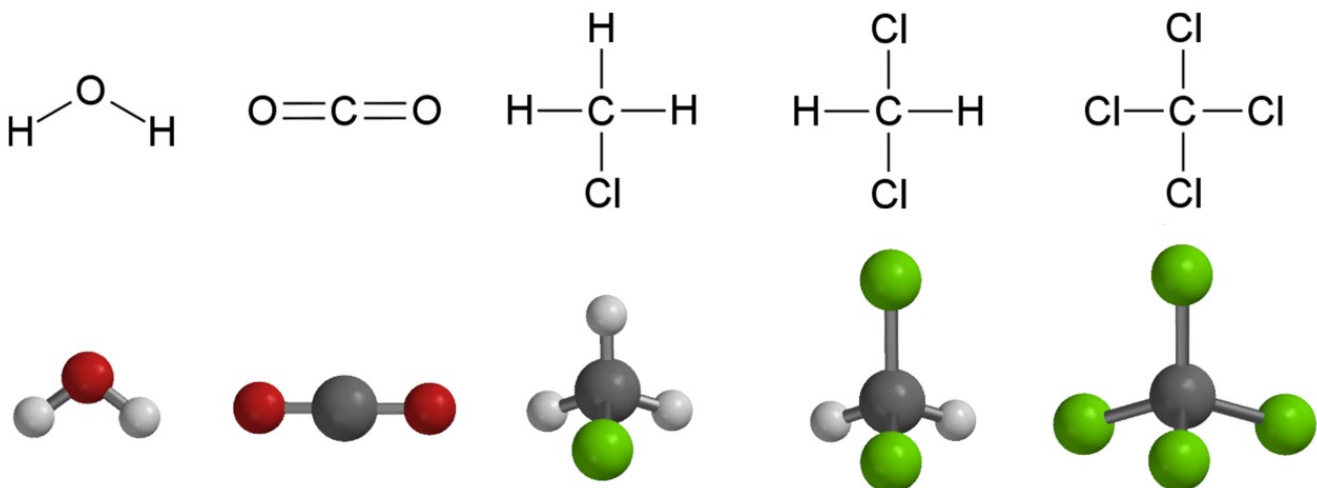
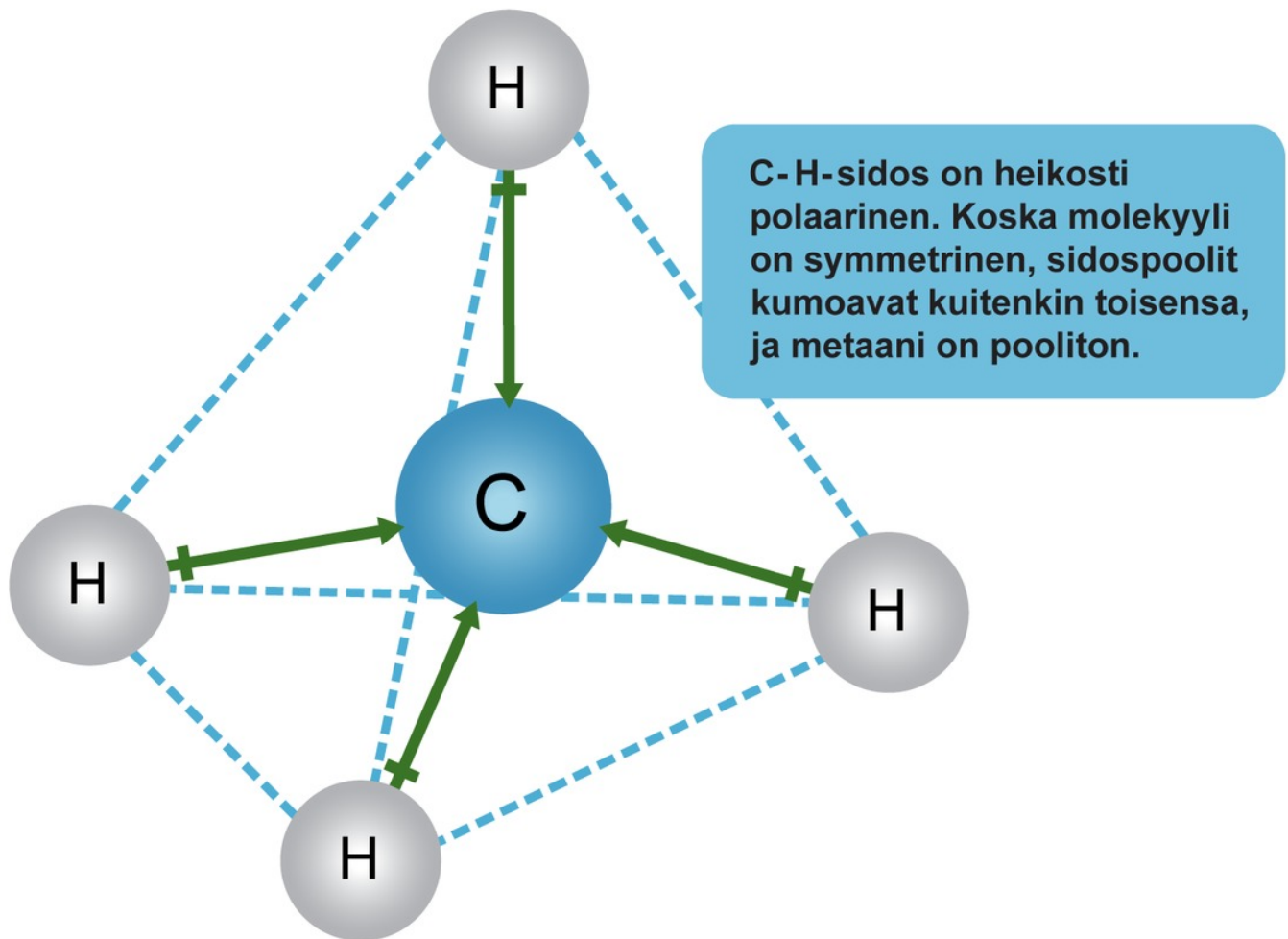
Kovalenttinen sidos on **pooliton**, jos sitoutuneet atomit vetävät sidoselektroneja yhtä voimakkaasti puoleensa. Sidoselektronit jakaantuvat tasan sidoksen muodostavien atomien kesken ja molekyyli on ulospäin varaukseton. Kovalenttisesta sidoksesta tulee **poolinen**, (engl. *pole*, napa) jos sitoutuneet atomit vetävät sidoselektroneja eri voimakkuudella puoleensa. Sidoselektronit jakaantuvat epätasaisesti sidoksen muodostavien atomien kesken ja molekyyli kokonaisuutena on polaarinen.

Esimerkiksi kahden vetyatomin välille muodostuu pooliton kovalenttinen sidos. Elektronit jakaantuvat tasaisesti ytimien ympärille, ja molekyyli on ulospäin varaukseton. Sen sijaan sidoksesta tulee poolinen, kun vetyatomi ja klooriatomi sitoutuvat keskenään. Poolittomia sidoksia ovat myös esimerkiksi kahden hiiliatomin välinen sidos tai hiili- ja rikkiatomin välinen sidos. Vaikka hiili- ja rikkiatomien rakenne poikkeaa toisistaan, niiden vaikutus sidoselektroneihin on yhtä vahva.

Kloori- ja vetyatomin sitoutuessa toisiinsa klooriatomi vaikuttaa yhteisiin sidoselektroneihin voimakkaammin kuin vetyatomi. Sidoselektronit liikkuvat lähempänä klooriatomia kuin vetyatomia ja sidoksesta tulee poolinen. Vetykloridimolekyylissä on vain yksi sidos, joka on poolinen, joten molekyyli on kokonaisuudessaan poolinen. Poolisia sidoksia ovat myös esimerkiksi hapen ja hiilen sekä typen ja vedyn väliset sidokset. Poolisia molekyyliä sanotaan **dipoleiksi** (*di* = kaksi, *pooli* = napa).



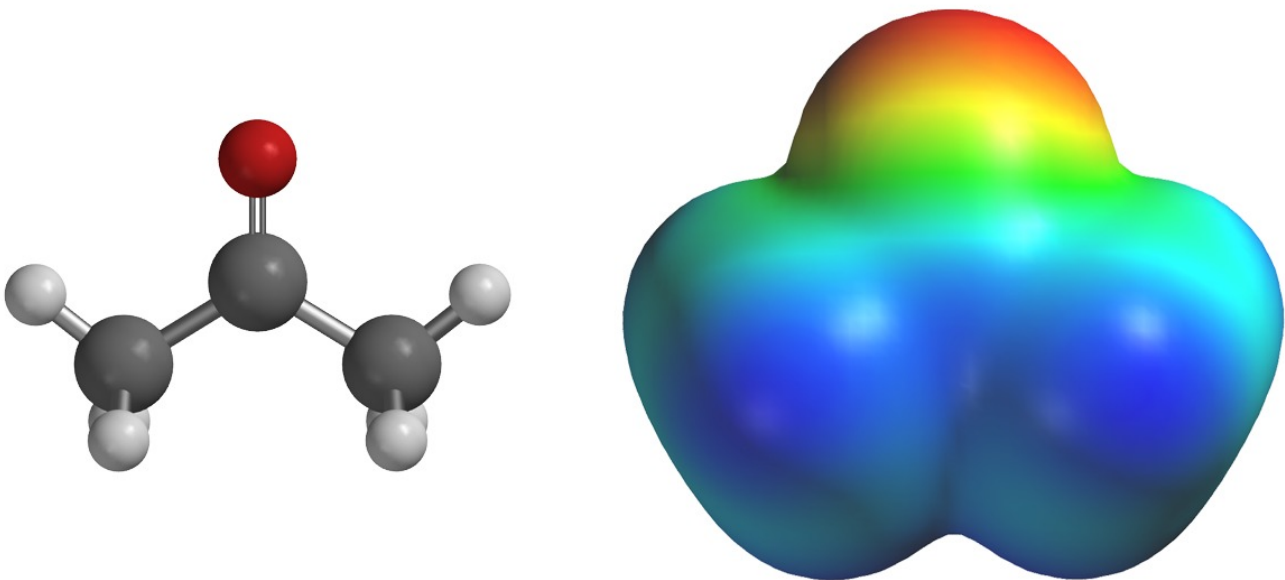
Jotta molekyyli olisi poolinen, siinä pitää olla vähintään yksi poolinen sidos. Poolisuus voi kumoutua rakenteen symmetrian vuoksi. Esimerkiksi hiili- ja vetyatomin muodostama sidos on heikosti poolinen. Metaanimolekyylissä hiiliatomiin on liittynyt neljä vetyatomia ja kaikki sidokset ovat poolisia. Molekyyli on kuitenkin kokonaisuudessa pooliton, koska vetyatomit suuntautuvat symmetrisesti tetraedrin kulmiin. Vastaavasti hiilidioksidimolekyyli on pooliton, vaikka siinä on kaksi poolista sidosta. Sidokset suuntautuvat kohtisuoraan toisiaan vastaan, molekyyli on symmetrinen ja poolisten sidosten vaikutus kumoutuu. Vesimolekyyli on poolinen, sillä sen kaksi poolista sidosta muodostavat keskenään terävän kulman. Molekyylin varausjakauma on tällöin epätasainen.



Hapen ja vedyn välinen sidos on poolinen, samoin hapen ja hiilen. Vain vesimolekyyli on poolinen, koska sen rakenne on epäsymmetrinen. Hiilidioksidimolekyylissä poolisuus kumoutuu symmetrian vuoksi. Hiilen ja vedyn välinen sidos on poolinen, samoin hiilen ja kloorin. Kloorimetaani ja dikloorimetaani ovat poolisia, koska rakenteet ovat epäsymmetrisiä poolisten sidosten suhteen. Vain tetrakloorimetaanissa pooliset sidokset suuntautuvat kokonaisuudessaan niin symmetrisesti, että molekyyli on pooliton.

Kovalenttisen sidoksen elektronit jakaantuvat luonnollisesti tasan, kun sitoutuvat atomit ovat samaa alkuainetta. Näin voi käydä myös, vaikka sitoutuvat atomit olisivat eri alkuaineita. Yleensä eri alkuaineiden atoomirakenne poikkeaa toisistaan niin paljon, etteivät elektronit jakaannu tasaisesti, ja

molekyyliin tulee poolisuutta. Esimerkiksi hiiliatomi vetää sidoselektroneja puoleensa heikommin kuin typpi- tai happiatomi mutta voimakkaammin kuin vetyatomi. Ero vetyyn ei ole kuitenkaan niin suuri kuin voisi päätellä ydinvarausten perusteella (hiiliatomilla on kuusi protonia ja vetyatomilla vain yksi). Sidoselektroneihin kohdistuvaan vetovoimaan vaikuttaa ydinvarauksen lisäksi ytimen etäisyys sidoselektroneihin. Vetyatomilla on vain yksi energiataso, joten vety on kooltaan selvästi pienempi atomi kuin hiiliatomi, jolla on elektroneja kahdella energiatasolla. Vetyatomin pieni koko tasaa pienen ydinvarauksen vaikutusta niin paljon, että vety- ja hiiliatomien väliset sidoselektronit jakautuvat melkein tasan. Atomin kykyä vetää puoleensa yhteisiä sidoselektroneja sanotaan **elektronegatiivisuudeksi**.



*Asetonissa on elektronegatiivinen happiatomi (kuvassa punaisella), joten varausjakaumassa hapen kohdalla on negatiivisen varauksen alue.*

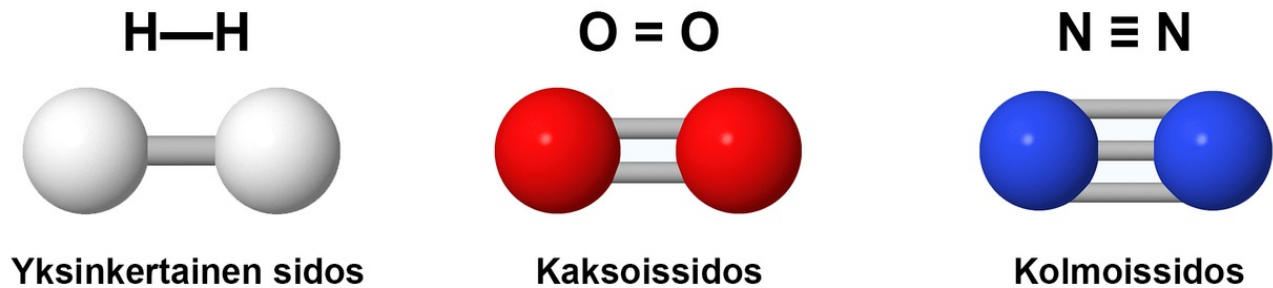
## Sidosten lukumäärä

Atomi voi muodostaa vain tietyn määrän kovalenttisia sidoksia. Sidosten lukumäärä riippuu atomin uloimman energiatason rakenteesta.

Alkuaineatomi muodostaa **yhden kovalenttisen sidoksen**, jos sen uloimmalla energiatasolla on yhden elektronin vaje verrattuna lähimmän jalokaasuatomien rakenteeseen. Tällaisia alkuaineatomeja ovat esimerkiksi halogeeniryhmän alkuaineet ja vety. Yhden kovalenttisen sidoksen muodostaminen mahdollistaa vain kaikkein yksinkertaisimmat kahden atomin väliset rakenteet.

Alkuaineatomi voi muodostaa **kaksi kovalenttista sidosta**, jos sen uloimmalla energiatasolla on kahden elektronin vaje. Tällaisia atomeja ovat esimerkiksi happiryhmän alkuaineet. Atomi voi muodostaa kaksi yksinkertaista sidosta tai yhden kaksinkertaisen sidoksen. Kahden kovalenttisen sidoksen muodostuminen mahdollistaa myös erilaiset ketjurakenteet ja rengasmaiset molekyylirakenteet.

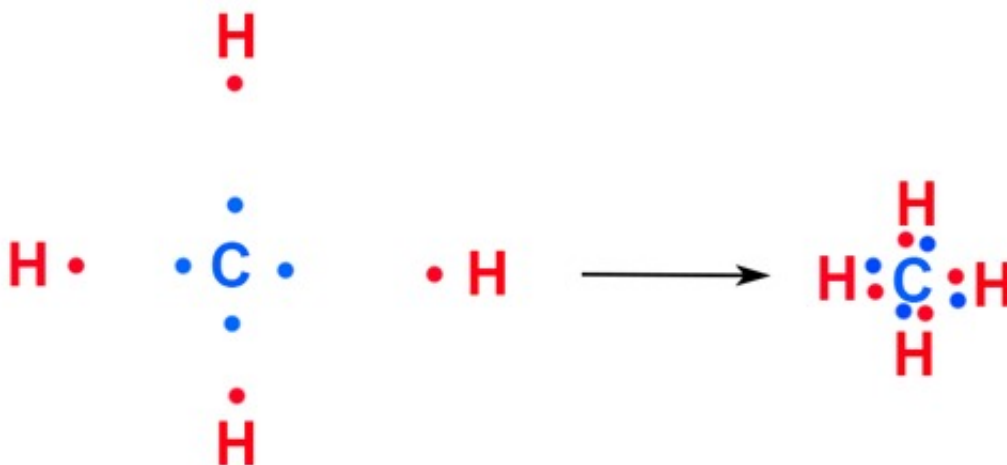
Alkuaineatomi voi muodostaa **kolme kovalenttista sidosta**, jos sen uloimmalla energiatasolla on kolmen elektronin vaje. Tällaisia atomeja ovat esimerkiksi typpiryhmän alkuaineet. Atomi voi muodostaa yksin-, kaksin- tai kolminkertaisia sidoksia. Kolmen kovalenttisen sidoksen muodostuminen mahdollistaa edellisten lisäksi erilaiset verkkomaiset ja haaroittuneet molekyylirakenteet.



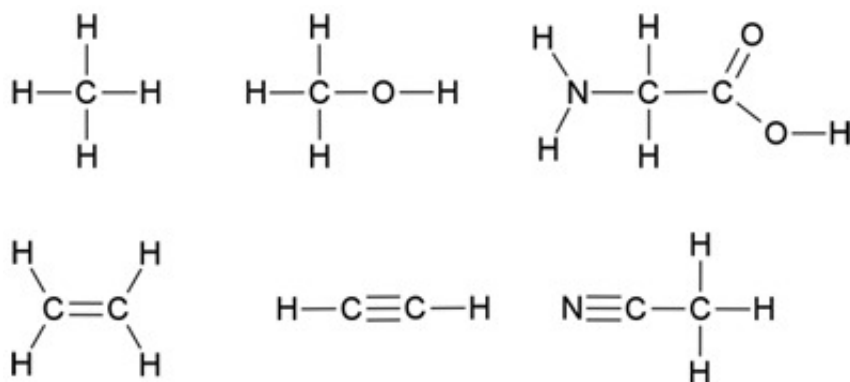
Vety voi muodostaa vain yhden kovalenttisen sidoksen, koska sen ainoalla energiatasolla on vain yhden elektronin vajoaus. Happiatomi voi muodostaa kaksi sidosta, koska sen uloimmalla energiatasolla on kahden elektronin vajoaus. Typpi voi muodostaa kolme sidosta, koska sen uloimmalla energiatasolla on kolmen elektronin vajoaus.

Alkuaineatomi voi muodostaa **neljä kovalenttista sidosta**, jos sen uloimmalla energiatasolla on neljän elektronin vajoaus. Tällaisia atomeja ovat esimerkiksi hiiliryhmän alkuaineet. Atomit muodostavat pääosin yksin-, kaksin- ja kolminkertaisia sidoksia. Neljä kovalenttista sidosta mahdollistaa kaikkein monimuotoisimmat kemialliset rakenteet. Erityisesti hiilen ja piin yhdisteillä on merkittäviä käytännöllisiä ja taloudellisia merkityksiä. Hiiliatomit voivat liittyä toisiinsa neljällä kovalenttisella sidoksella ja muodostaa erittäin vahvan timanttirakenteen. Timanttirakenteessa hiiliatomi on neljän muun hiiliatomin muodostaman tetraedrin keskellä ja liittynyt jokaiseen kovalenttisella sidoksella.

### 3D Timantti

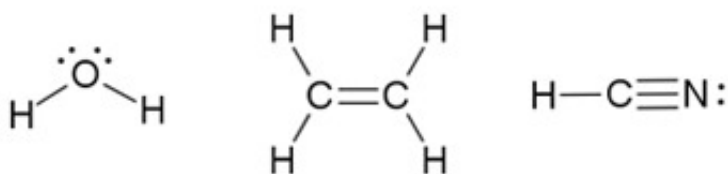


Metaanissa hiiliatomi on saavuttanut jalokaasurakenteen jakamalla ulkokuoren neljä elektroniaan neljän vetyatomin kanssa.



Tavallisimmat orgaanisten molekyylien sidokset. Kuvissa ensimmäisellä rivillä metaani, metanoli ja glysiini, toisella rivillä eteeni, etyyni ja asetonitrili.

Yksin-, kaksin- ja kolminkertaista sidosta merkitään molekyylin rakennekaavassa joko kaksoispiste- tai viivamerkinä. Esimerkiksi vetymolekyylin rakennekaava kirjoitetaan joko  $\text{H}:\text{H}$  tai  $\text{H}-\text{H}$ . Kaksoissidosta merkitään vastaavasti kahdella peräkkäisellä pisteparilla tai kahdella päällekkäisellä viivalla (esim.  $\text{O}::\text{O}$  tai  $\text{O}=\text{O}$ ) kolmoissidosta kolmella (esim.  $\text{N}:::\text{N}$  tai  $\text{N}\equiv\text{N}$ ). Viivamerkintä on yleisempi, koska yksöis- ja kaksoispisteillä voidaan tarkoittaa sitoutumatonta elektronia tai elektroniparia.



Veden, eteenin ja vetysyanidin rakennekaavat. Kaavoissa on esitetty, miten merkitään yksinkertainen sidos, kaksoissidos, kolmoissidos ja vapaa elektronipari.

## Oktettisääntö

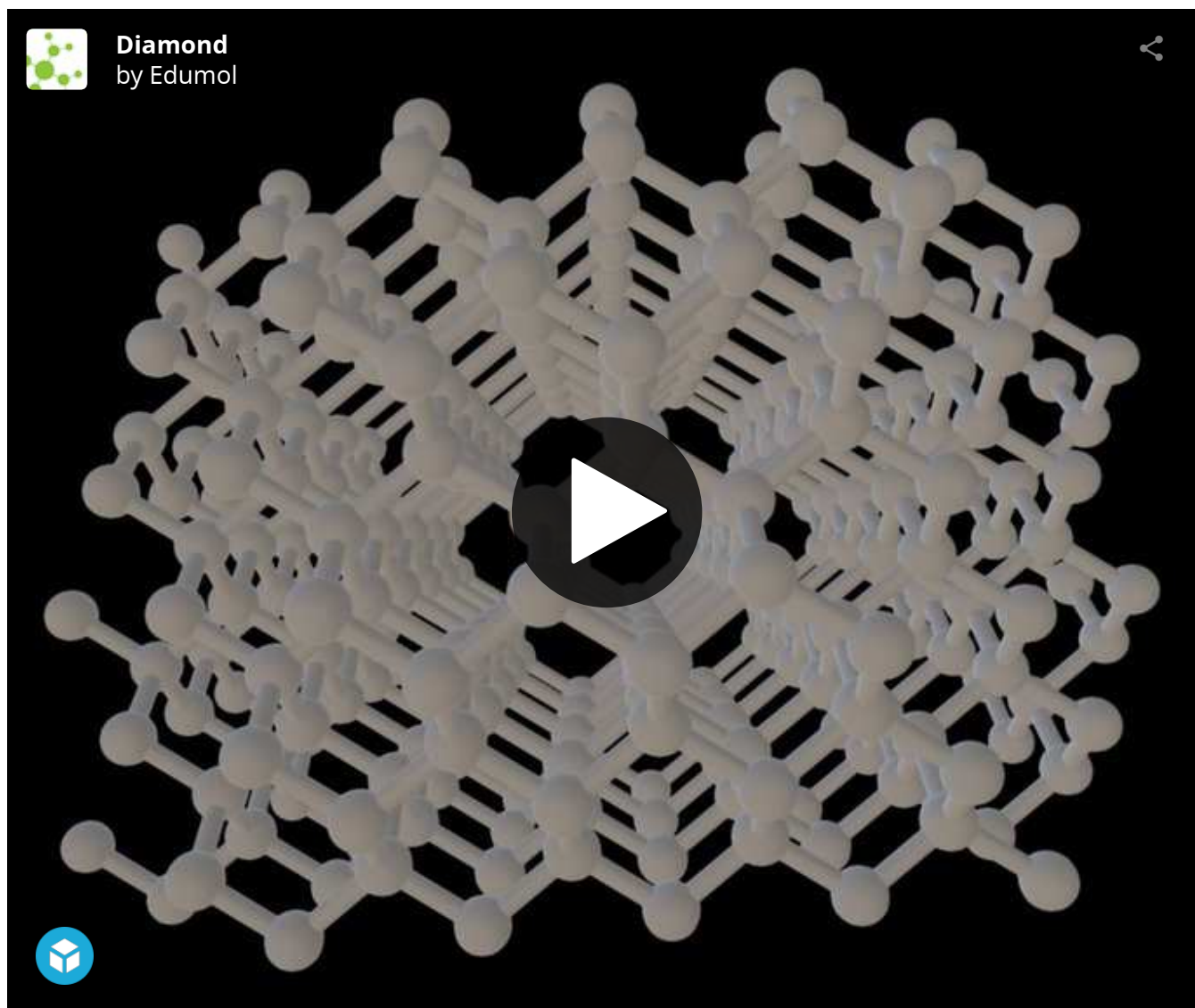
Oktettisäännön mukaan atomien uloimmalle energiatasolle muodostuu pysyvä kahdeksan elektronin rakenne, kun atomit muodostavat yhdisteitä. Oktettisäännöstä on poikkeuksia. Oktettisäännön sijaan puhutaan atomin saavuttavan jalokaasurakenteen. Tämäkään malli ei selitä kaikkia atomien välisiä sidoksia.

## HONC-muistisääntö

Sidosten lukumäärään liittyy HONC-muistisääntö. Ensimmäisenä mainittu vety voi muodostaa yhden sidoksen, toisena mainittu happi kaksi, kolmantena mainittu typpi kolme ja neljäntenä mainittu hiili neljä sidosta.

## 3D-malli

### Timantti



## Lisätietoa: Osittaisvarauksen merkintätapa

### Osittaisvarauksen suuruus

Miksi osittaisvaraus merkitään  $\delta^+$  tai  $\delta^-$  eikä  $+\delta$  tai  $-\delta$ ? Etumerkkihän on tapana kirjoittaa nimensä mukaisesti luvun eteen.

Merkintä  $\delta^+$  tarkoittaa luvun  $\delta$  ilmoittamaa määrää positiivista varausta. Vastaavalla tavalla merkitään muitakin määriä: rautatabletissa voi olla 100 mg rautaa eli luvun 100 ilmoittama määrä milligrammoja.

Ionivaraus merkitään vastaavalla tavalla. Esimerkiksi hemoglobiiniin kiinnittynyt rautaioni merkitään  $\text{Fe}^{2+}$ , sillä rauta-atomi on luovuttanut kaksi elektronia ja sillä on kahden alkeisvarauksen suuruinen positiivinen varaus. Se voitaisiin ilmoittaa myös merkinnällä  $\text{Fe}^{++}$  kuten rautatablettipakkauksessa, mutta tätä tapaa ei kemiassa enää juuri käytetä.



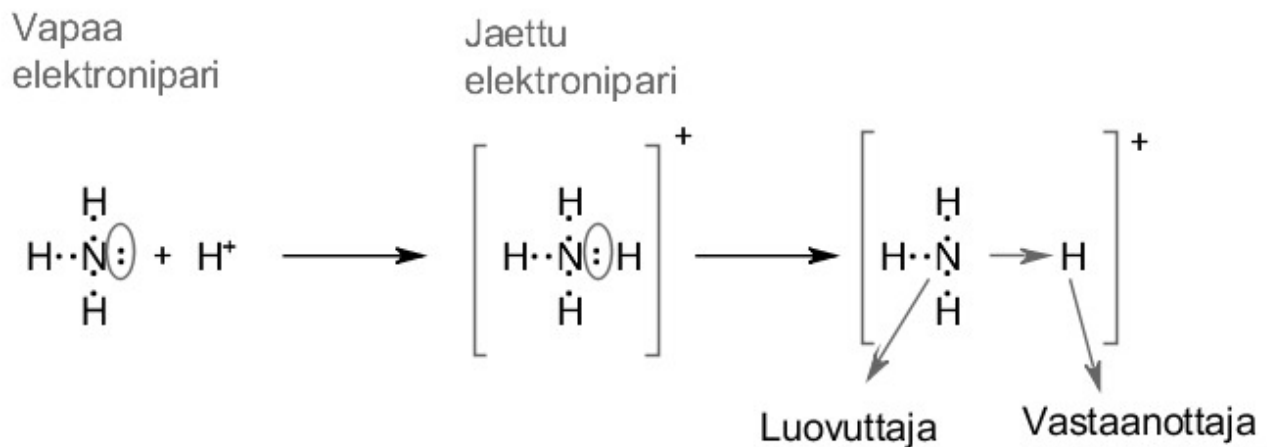
## Lisätietoa: Koordinaatiosidos

### Vapaa elektronipari voi muodostaa sidoksia

Tavallisesti kovalenttinen sidos muodostuu jakamalla elektroneja yhteiseen käyttöön. Sidoksen muodostavat elektronit voivat kuitenkin olla peräisin kokonaan toiselta sidokseen osallistuvalla atomilta. Tällaista sidosta nimitetään **koordinaatiosidokseksi**.

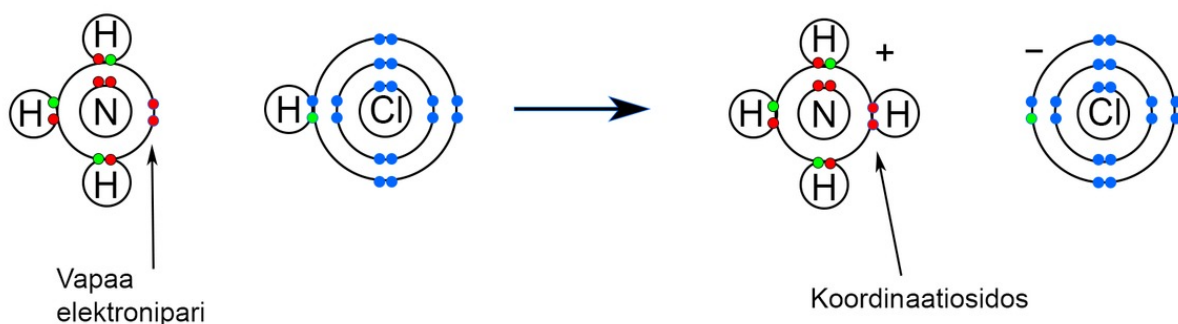
Typpiatomilla on uloimmalla energiatasollaan viisi elektronia. Kolme näistä elektroneista sijaitsee hieman korkeammalla energiatasolla kuin kaksi muuta. Typpiatomi voi muodostaa kolme kovalenttista sidosta näiden kolmen elektronin avulla. Sidokset voivat olla yksin-, kaksin- tai kolminkertaisia. Hieman alemmalla energiatasolla olevat kaksi elektronia ovat kytkeytyneet toisiinsa, joten on todennäköisempää, että ne molemmat osallistuvat saman sidoksen muodostamiseen kuin erikseen yksinkertaisten sidosten muodostumiseen.

Esimerkiksi ammoniakkimolekyylissä  $\text{NH}_3$  typpiatomi on muodostanut kolme yksinkertaista sidosta vetyatomien kanssa ja typen vapaa elektronipari pysyy sitoutumattomana. On kuitenkin hyvin tavallista, että typpi muodostaa neljännen sidoksen vapaan elektroniparin avulla esimerkiksi vetyionin  $\text{H}^+$  kanssa, jolloin muodostuu **ammoniumioni**  $\text{NH}_4^+$ . Sidoksen molemmat elektronit tulevat typeltä, joten molekyylissä on nyt yksi elektroni vähemmän kuin siinä on protoneja, joten kokonaisuus on varautunut yhden alkeisvarauksen verran positiivisesti.



Ammoniummolekyylissä koordinaatiosidosta kuvataan nuolella. Nuolen suunta osoittaa sen, mikä atomi toimii elektroniparin luovuttajana ja mikä vastaanottajana. Ionivaraus merkitään liittyneen vedyn sijaan hakasulkumerkinnän ulkopuolelle, koska sen aiheuttama varaus jakaantuu tasaisesti koko ioniin.

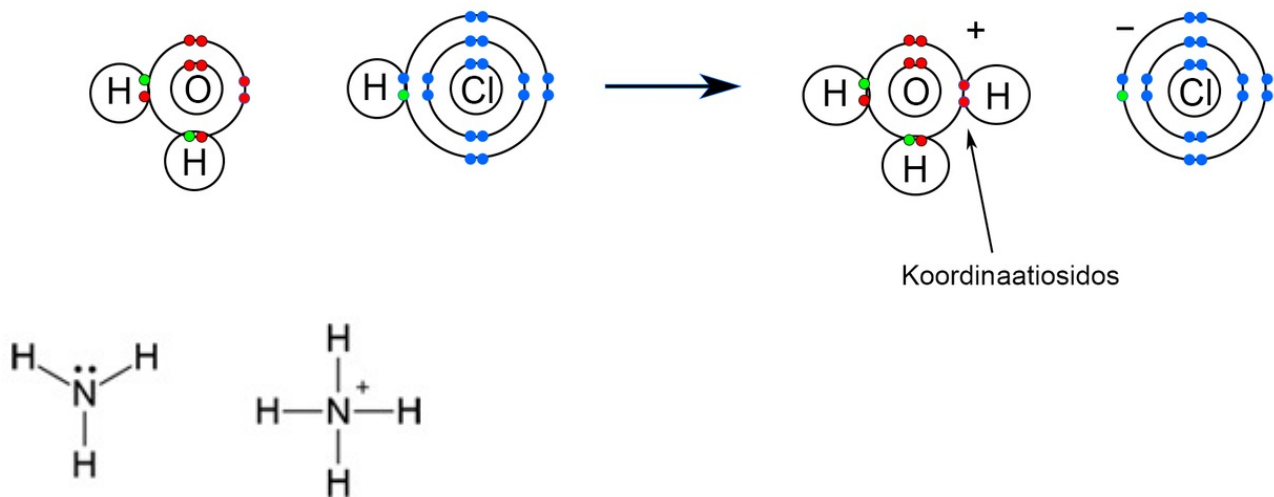
Ammoniakin ja vetykloridin (ark. suolahappo) reaktiossa muodostuu **ammoniumkloridia**. Reaktiossa vedyn ja kloorin välinen sidos katkeaa ja vetyioni liittyy typpiin koordinaatiosidoksella. Kloridille jää ylimääräinen elektroni ja se varautuu negatiivisesti. Ammoniumionissa puolestaan on ylimäärin positiivista varausta ja se varautuu positiivisesti. Erimerkkisesti varautuneet ionit liittyvät yhteen sähköstaattisen vuorovaikutuksen ansiosta ja muodostuu ammoniumkloridikide.



Koordinaatiosidoksen muodostumista havainnollistetaan erityyppisillä piirrosmerkinnöillä, mutta aineen rakennetutkimukset osoittavat, että lopputilanteessa kaikki typpi- ja vetyatomien väliset sidokset ovat identtisiä. Sidosten muodostumisen jälkeen on mahdotonta sanoa, mikä sidoksista on alkuperäinen yksinkertainen sidos ja mikä koordinaatiosidos.

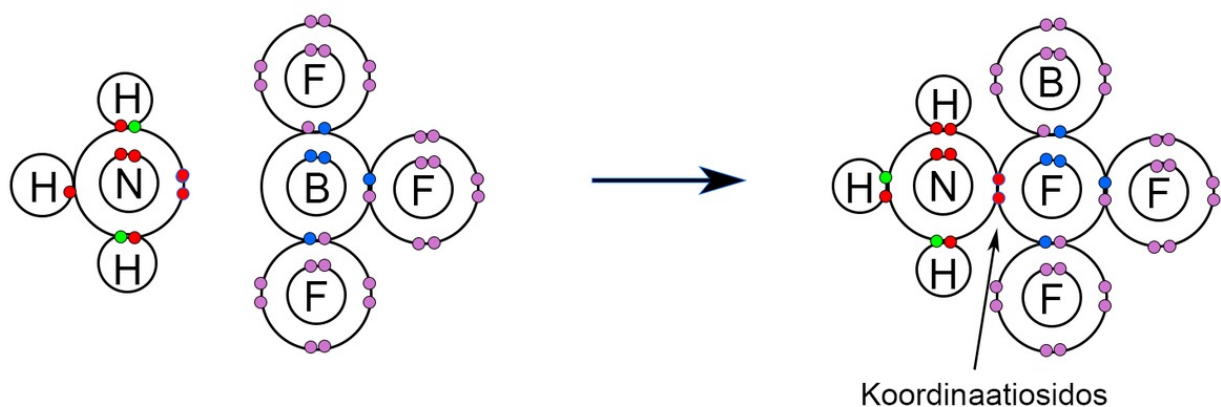
Happiatomi voi muodostaa vastaavalla tavalla kolmannen sidoksen vapaalla elektroniparillaan. Happiatomin uloimmalla energiatasolla on kuusi elektronia, joista kaksi sijaitsee alhaisimmalla energiatasolla, kaksi seuraavaa hieman korkeammalla ja kahdella jäljellä jäävällä on suurin kokonaisenergia. Esimerkiksi vesimolekyylissä happiatomi käyttää kahta korkeimman kokonaisenergian omaavaa elektronia sidoksiin vetyatomien kanssa. Jäljelle jäävät neljä elektronia muodostavat kaksi elektroniparia, jotka voivat muodostaa kaksi ylimääräistä sidosta. Vesimolekyyliin voi liittyä esimerkiksi vetyioni  $H^+$ , jolloin muodostuu **oksoniumioni**  $H_3O^+$ . Sekä vesimolekyyli- että oksoniumionimuodossa hapella on uloimmalla energiatasollaan pysyvä jalokaasurakenne. Esimerkiksi suolahapon liuetessa

veteen vedyn ja kloorin välinen sidos katkeaa ja vetyioni sitoutuu vesimolekyyliin koordinaatiosidoksella. Muodostunut oksoniumioni aiheuttaa liuoksen happamuuden.

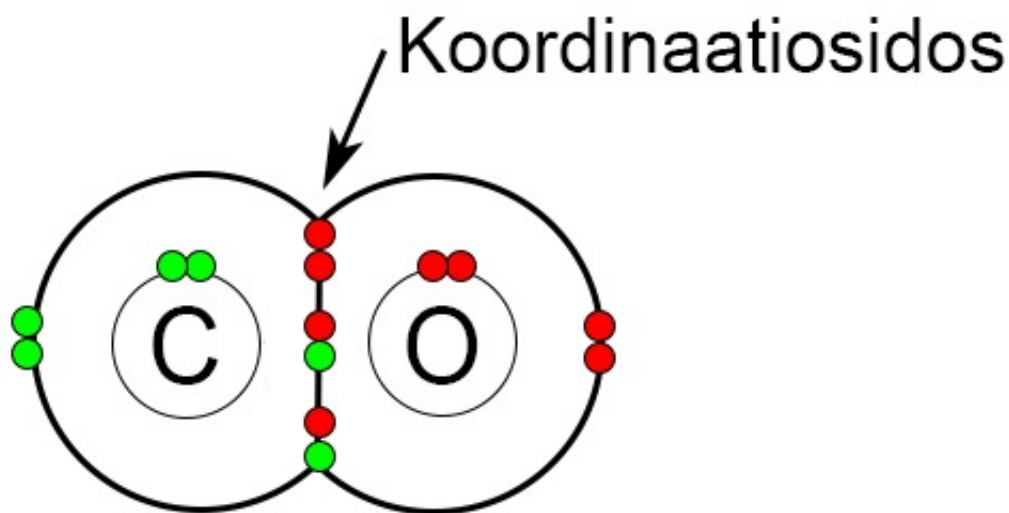
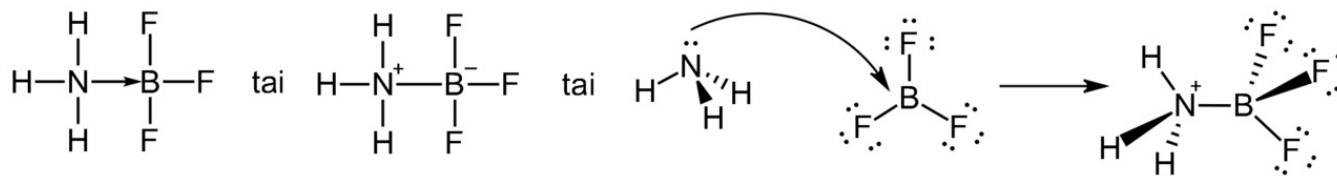


Ammoniakissa typpi atomi muodostaa tyypelle tavalliset kolme sidosta. Ammoniumionissa on yhtä monta elektronia kuin ammoniakissa, mutta siinä on yksi vety atomi ja siten yksi protoni enemmän. Rakennekaavassa positiivinen varaus merkitään typen viereen.

**Booritrifluoridin**  $\text{BF}_3$  elektronirakenne on pysyvä, vaikka molekyylissä boorilla on uloimmalla energiatasolla vain kuuden elektronin rakenne. Boorin uloimmalle energiatasolle mahtuu vielä kaksi elektronia, joten esimerkiksi ammoniakimolekyylin ja booritrifluoridin reaktiossa typpi luovuttaa vapaan elektroniparinsa sidoksen muodostukseen.

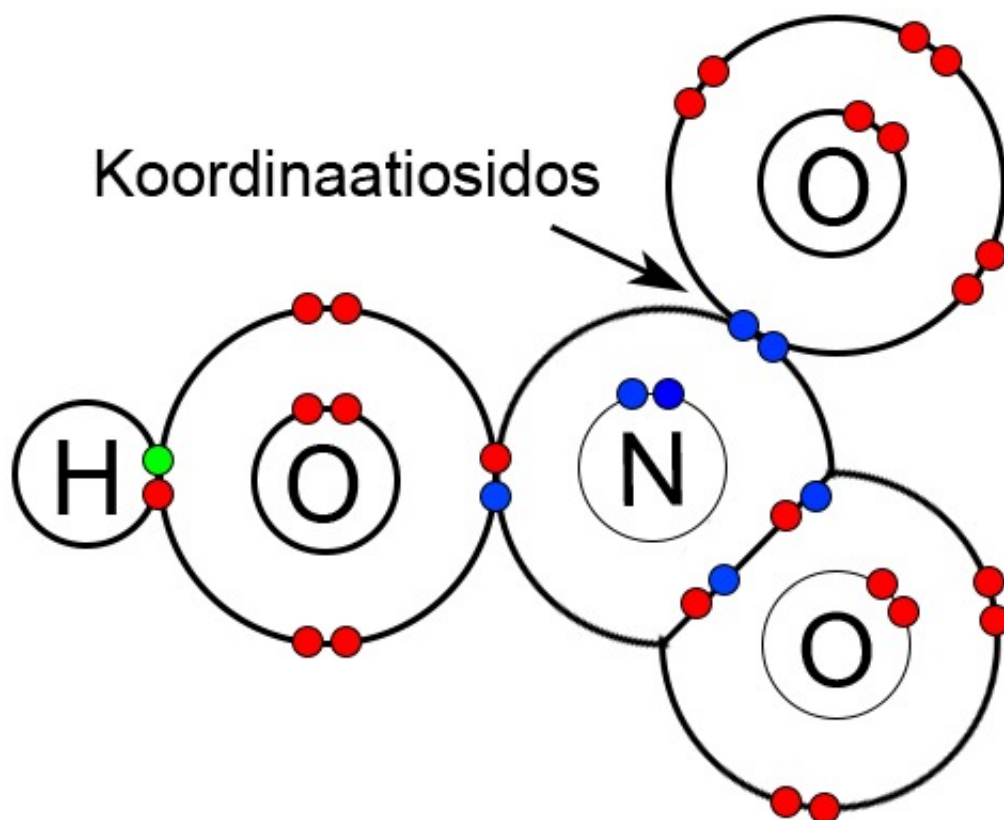


Koordinaatiosidos voidaan kuvata rakennekaavassa nuolella tai tavallisella sidosviivalla ja merkitä ionivaraukset näkyviin. Typpi varautuu positiivisesti ja boori negatiivisesti, koska elektronipari on siirtynyt typpiytimen vaikutuspiiristä booriytimen vaikutuspiiriin.

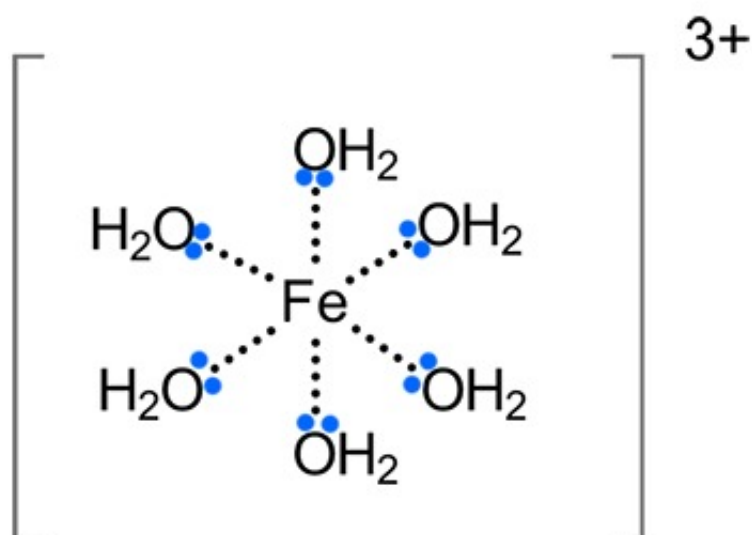


**Hiilimonoksidimolekyylissä** ( $\text{CO}$ ) on hiili- ja happiatomin välillä kolme sidosta. Kaksi näistä on muodostunut tavanomaisen elektronien yhteiskäyttöperiaatteen mukaisesti, mutta kolmas muodostuu hapen vapaaelektroniparin avulla koordinaatiosidoksena.

**Typpihappomolekyylissä** ( $\text{HNO}_3$ ) vety on liittynyt typpeen tavallisella kovalenttisella sidoksella. Toinen happiatomeista on liittynyt typpeen kaksoissidoksella ja toinen koordinaatiosidoksella, jonka elektronipari on peräisin happiatomilta. Rakennetutkimusten perusteella happiatomien sidokset ovat keskenään identtisiä, joten kaksoissidoksen ja koordinaatiosidoksen eroa havainnollistetaan piirrosmerkinnässä vain selvyuden vuoksi.



Erilaiset koordinaatiosidokselliset rakenteet ovat yleisiä epäorgaanisille yhdisteille. **Kompleksiyhdisteet** muodostuvat **keskusatomista** ja **ligandeista**. Keskusatomi on yleensä metalli ja ligandina yksi tai useampi vesimolekyyli. Kompleksiyhdisteitä tarkastellaan yksityiskohtaisemmin KE3-kurssilla.



## Lisätietoa: Sidostyyppien selvittäminen laskemalla

### Rakenteen mallinnus

Orgaanisen yhdisteen rakennekaavan piirtäminen aloitetaan selvittämällä mahdollisten renkaiden ja moninkertaisten sidosten lukumäärä. Olennaista on niin sanottu puuttuvien vetyatomien lukumäärä.

Vetyatomien määrä on vetyä, happea, hiiltä ja typpeä sisältävissä molekyyleissä on enintään  $2C + N + 2$ , missä  $C$  on hiiliatomien lukumäärä,  $N$  on typpiatomien lukumäärä ja luku kaksi tulee ketjun ensimmäisestä ja viimeisestä vetyatomista. Ketjun haaroittuminen tai yhdisteessä olevan hapen määrä ei vaikuta vetyjen lukumäärään.

Renkaiden ja moninkertaisten sidosten lukumäärä saadaan vähentämällä yhdisteen kaavassa ilmoitettu vetyatomien lukumäärä vetyatomien enimmäismäärästä ja jakamalla tulos kahdella. Renkaiden ja kaksoissidosten lukumäärä on siten

$$N_{\text{kaksoissidos/rengas}} = \frac{2C - N + 2 - H}{2}$$

Tarkastellaan molekyyliä, joka alkaa ja loppuu vetyatomiin. Yksinkertaisin mahdollinen on vetymolekyyli H-H. Kun molekyyliin lisätään esimerkiksi happiatomeja, niitä voidaan sijoittaa vain vetyatomien väliin, jotta vetyatomit säilyttävät paikkansa molekyyliketjun ensimmäisenä ja viimeisenä. Yhden hapen lisäämisellä saadaan rakenne H-O-H, kahden hapen lisäämisellä H-O-O-H, kolmen hapen lisäämisellä H-O-O-O-H ja niin edelleen. Soveltamalla edellä mainittua kaavaa kaksoissidosten ja moninkertaisten sidosten lukumääräksi saadaan nolla, koska happiatomi ei vaikuta yhdisteessä olevan vedyn maksimimäärään.

Tilanne muuttuu, kun hapen sijaan liitetään hiiltä tai typpeä. Vetyatomien väliin lisätään hiiliatomi ja hiiliatomissa olevat vapaat sidospaikat täytetään vetyatomeilla: ensin H-CH<sub>2</sub>-H, sitten H-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-H, sitten H-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-H ja niin edelleen. Typpiatomit voivat muodostaa kolme sidosta, joten jokaista yhtä typpiatomia kohden rakennekaavaan tulee myös yksi vetyatomi lisää: ensin H-NH-H, sitten H-NH-NH-H, sitten H-NH-NH-NH-H.

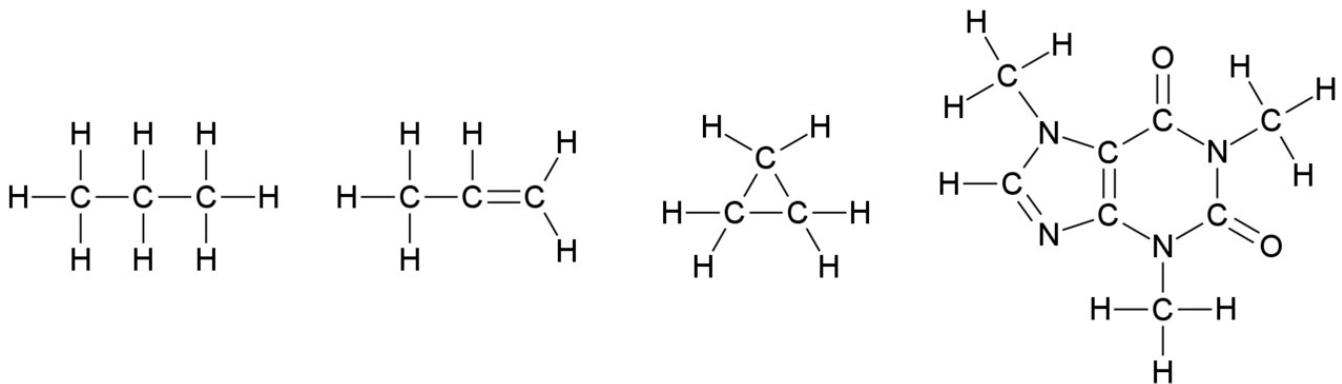
Jos ketju muodostaisi renkaan, ensimmäistä ja viimeistä vetyatomia ei tarvittaisi, sillä ensimmäinen ja viimeinen hiiliatomi liittyisivät toisiinsa. Vetyatomien määrä vähenisi tällöin kahdella. Myös kaksoissidos vähentää vetyatomien määrää kahdella, sillä kaksoissidos merkitsee, että kaksi atomia liittyy vetyjen sijaan toisiinsa. Kolmoissidos vastaa kahta kaksoissidosta, eli vetyatomit vähenevät neljällä.

Esimerkiksi molekyylin C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> vetyatomien enimmäismäärä on  $2C + N + 2 = 2 \cdot 3 + 0 + 2 = 8$ . Tämä vastaa molekyylikaavassa ilmoitettua vetyatomien määrää, joten rakenteessa ei ole renkaita tai moninkertaisia sidoksia. Molekyylin C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> vetyatomien enimmäismäärä on niin ikään  $2C + N + 2 = 2 \cdot 3 + 0 + 2 = 8$ . Yhdisteen molekyylikaavassa on kuitenkin ilmoitettu kaksi vetyatomia vähemmän kuin mikä olisi hiiliatomien perusteella laskettu maksimimäärä. Näin ollen rakenteessa on joko rengas tai kaksoissidos. Renkaan tai kaksoissidosten lukumäärän voidaan laskea

$$N_{\text{kaksoissidos/rengas}} = \frac{2C - N + 2 - H}{2} = \frac{2 \cdot 3 - 0 + 2 - 6}{2} = 1$$

Kofeiinin kaava on C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>. Koska tässä tapauksessa pätee  $2C + N + 2 = 2 \cdot 8 + 4 + 2 = 22$  ja moninkertaisten sidosten tai renkaiden lukumäärä  $(22 - 10)/2 = 6$ . Kofeiinimolekyyliä on siis kuusi kaksoissidosta tai jonkinlainen yhdistelmä kaksoissidoksia ja renkaita olettaen, että rakenteessa ei ole

kolmoissidoksia. Rakennetutkimuksen perusteella on selvitetty, että molekyylissä on kaksi rengasta ja neljä kaksoissidosta.



Molekyylikaavaa  $C_3H_8$  vastaa yksi rakenne, jossa on vain yksinkertaisia sidoksia. Kaava  $C_3H_6$  voi vastata kaksoissidoksellista tai rengasrakenteista molekyylä. Kaavan  $C_8H_{10}N_4O_2$  mukaisella yhdisteellä voi olla esimerkiksi kaksi rengasta ja neljä kaksoissidosta. Kuvissa propaani, propeeni, syklopropaani ja kofeiini.

## Lisätietoa: Molekyylin rakenteen selittäminen VSEPR-teorialla

### Avaruusrakenne

Molekyylin avaruusrakennetta voidaan lähestyä valenssielektronien repulsion – toisistaan poistyöntävän voiman – kautta. VSEPR-teoria (valence shell electron pair repulsion) kemian malli, jota käytetään molekyylin kolmiulotteisen muodon ennustamiseen. VSEPR-teoriasta on tehty erinomainen video.

VSEPR Theory

Molekyylin atomien sidokset ja atomit muodostavat avaruudellisen rakenteen sen mukaan, kuinka monta sidosta (yksin-, kaksin- tai kolminkertaista) ja elektroniparien muodostamaa elektronien tiheyttä niissä on. Taulukossa on luokiteltu erilaiset rakenteet koordinaatioluvun mukaan.

### Koordinaatorakenteita

| Koordinaatioluku | Geometrinen muoto                          |                                      |                        |
|------------------|--------------------------------------------|--------------------------------------|------------------------|
|                  | Ei vapaita elektronipareja                 | 1 elektronipari                      | 2 elektroniparia       |
| 2                | Lineaarinen, 180 astetta<br>Esim. $C_2H_2$ | Taipunut                             |                        |
| 3                | Tasokolmio, 120 astetta<br>Esim. $C_2H_4$  | Taipunut                             |                        |
| 4                | Tetraedri, 109 astetta<br>Esim. $CH_4$     | Trigonaalinen pyramidi, esim. $NH_3$ | Taipunut, esim. $H_2O$ |
| 5                | Trigonaalinen bipyramidi<br>Esim. $PCl_5$  |                                      |                        |

6

Oktaedri  
Esim. SF<sub>6</sub>

---

*Koordinaatioluku tarkoittaa yhdisteissä tiettyyn atomiin sitoutuneiden ryhmien tai vapaiden elektroniparien määrää.*