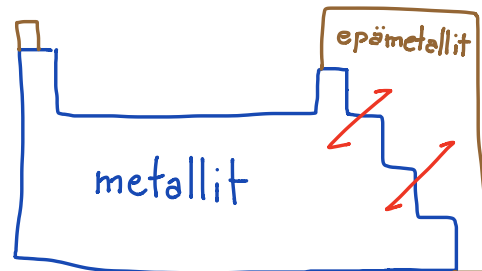
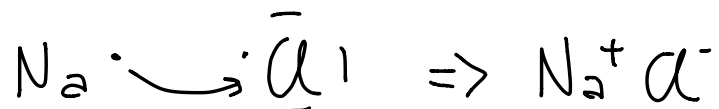


## 2.1 Vahvat sidokset

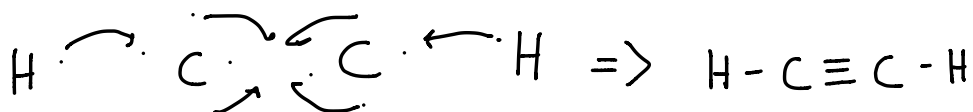
1. Ionisidokset
2. Kovalenttiset sidokset
3. Metallisidokset



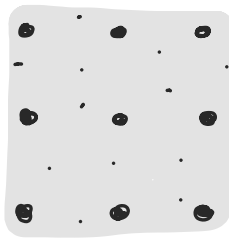
**Ionisidos** syntyy, kun elektronegatiivisuusero on tarpeeksi suuri (yli 1,7). Yleensä epämetallin (suuri el.neg.) ja metallin (pieni el.neg.) välille.



Kun el.neg.ero on pieni, mutta aineella on lähes täysi uloin orbitaali, pyrkii se saamaan puuttuvat elektronit muualta. Epämetallit voivat muodostaa keskenään sidoksia elektronipareilla, jolloin molempien osallistuvien atomien orbitaalit täyttyvät ja syntyy **kovalenttinen sidos**.



Metalleilla elektroneja ei ole riittävästi kovalenttisten sidosten syntyyn, joten ne jakavat ulkoelektroninsa yhteisiksi usean muun metalliatomin kanssa. Muodostuneessa **metallisidoksessa** elektronit liikkuvat vapaasti metallihilassa.



Kovalenttisten sidosten malli (sidoselektronipari muodostaa kovalenttisen sidoksen) ei riitä:

-miksi vesimolekyyli on V:n muotoinen?

-miksi C-C ei reagoi mutta C=C reagoi?

Tarvitaan uusi malli: *Hybridisaatio*

Atomin orbitaalit muodostavat keskenään *hybridiorbitaaleja*, jotka eroavat muodoltaan ja energioiltaan atomiorbitaaleista.

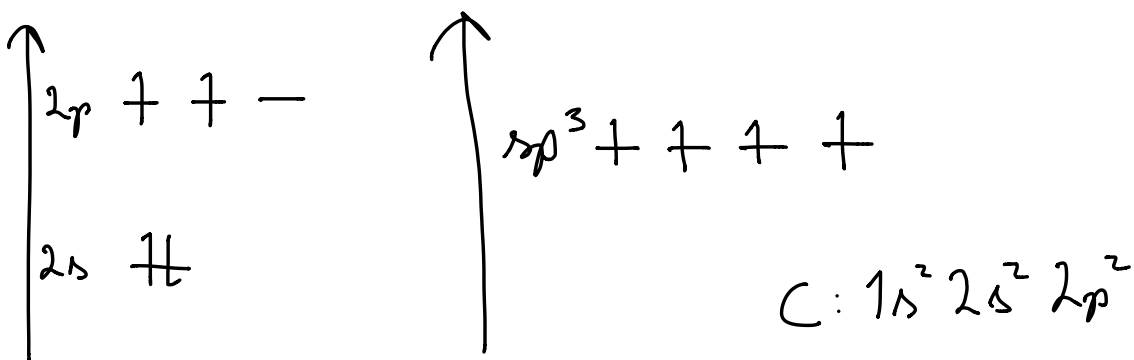
Kyseessä matemaattinen malli, jota ei voi suoraan havaita, mutta joka selittää edelliset kysymykset.

### sp<sup>3</sup>-hybridisaatio

-yhden atomin uloimmat s ja p-orbitaalit yhdistyvät neljäksi hybridiorbitaaliksi (s.43!)

-hybridiorbitaalit ovat samanlaisia, joten ne ovat samanlaisia ja osoittavat mahdollisimman eri suuntiin, muodostaen tetraedrikuvion

-hybridiorbitaalin energia on s ja p orbitaalien välistä, täytetään kuten atomiorbitaalit

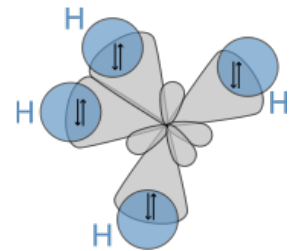


Hiili haluaa päästä puolittain täytettyyn orbitaaliin vajaiden sijaan, joten hybridiorbitaalin muodostaminen on energiatehokkaampaa (kvanttimalissa)

C-H sidoksen muodostuessa hiilen  $sp^3$ -orbitaali ja vedyn 1s orbitaali sulautuvat yhteen.

Nämä sidokset ovat nimeltään *sigma-sidoksia* eli symbolein  $\sigma(1s, sp^3)$  -sidoksia

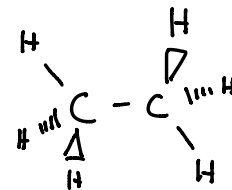
Esim. metaani s. 45



Kahden hiilen välinen yksinkertainen kovalenttinen sidos on myös sigmasidos ja sen muodostaa kummankin  $sp^3$  -hybridiorbitaali.

Symbolein  $\sigma(sp^3, sp^3)$

Esim. etaanissa  $H_3C - CH_3$

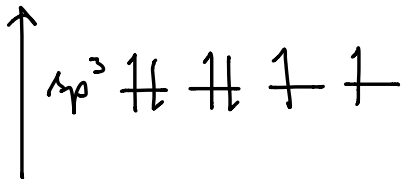


on yhteensä 7 sigma-sidosta:

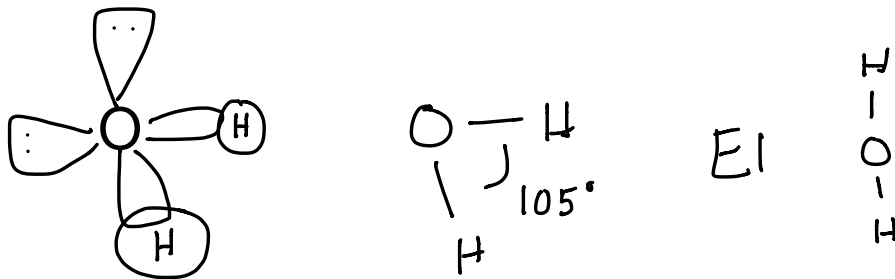
6  $\sigma(1s, sp^3)$  ja 1  $\sigma(sp^3, sp^3)$

Miksi sitten vesimolekyyli on V:n mallinen?

Hapella 2 elektronia enemmän kuin hiilellä:



Vain kaksi vetyä voi liittyä (hybridiorbitaalit täyttyvät silloin), mutta muodostaa silti tetraedri-rakenteen:

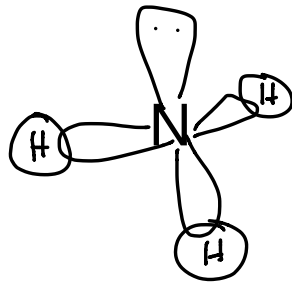


Vapaat elektroniparit hylkivät toisiaan enemmän kuin sigma-sidoksissa olevat, joten H-O-H kulma on jopa normaalia tetraedria pienempi!

Metaanissa sidoskulmat ovat  $109,5^\circ$

Vesimolekyylissä sidoskulma on  $105^\circ$

Typellä 1 elektroni vähemmän kuin hapella, joten sille jää vain 1 vapaa el.pari:



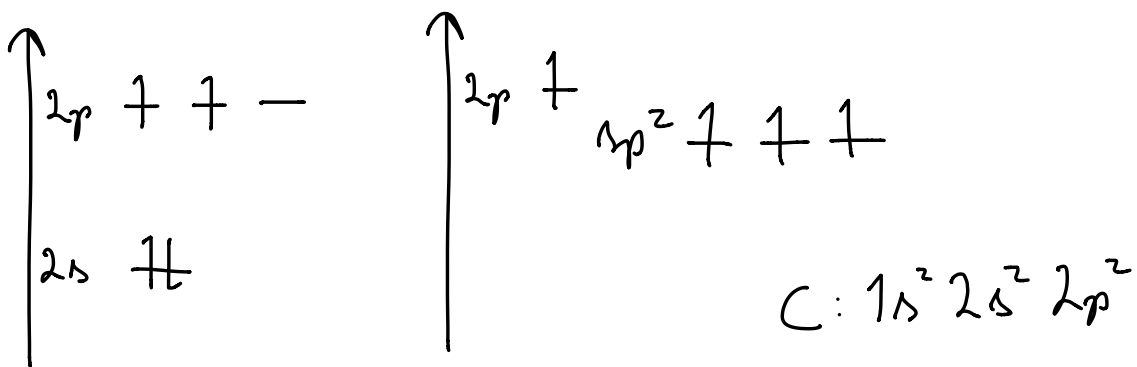
(siduskulmat  $107^\circ$ )

## $sp^2$ -hybridisaatio

-osallistuu yksi s-orbitaali ja kaksi p-orbitaalia, muodostaen kolme  $sp^2$ -hybridiorbitaalia (s.49!)

-jälleen eri suuntiin, mutta koska vain 3 niin kaikki ovat samassa tasossa,  $120^\circ$  kulmassa

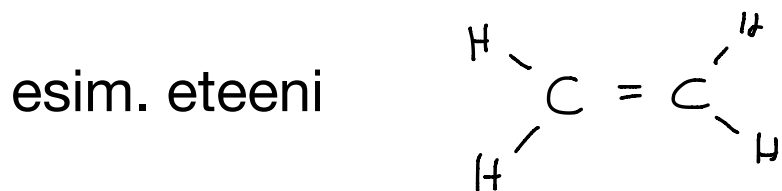
-jäljelle jäänyt p-orbitaali on vasten tätä tasoa



-kun  $sp^2$ -hybridiorbitaali yhdistyy toisen samanlaisen kanssa, tai vedyn 1s-orbitaalin kanssa, syntyy jälleen sigma-sidos

-jos  $sp^2$ -hybridiorbitaalein yhdistyneet kaksi hiiltä ovat vierekkäin, yhdistyy niiden ylimääräiset 2p-orbitaalit, muodostaen pii-sidoksen ( $\pi$ -sidos)

-pii-sidos ja sigma-sidos yhdessä muodostavat kaksinkertaisen kovalenttisen sidoksen



- $\pi$ -sidos ei päästä sidosta pyörimään, vaan lukkii sen liikkeen (cis- ja trans-isomeria 4.3)

- $\pi$ -sidos on sigma-sidosta heikompi ja siksi kaksoissidos on reaktiivinen

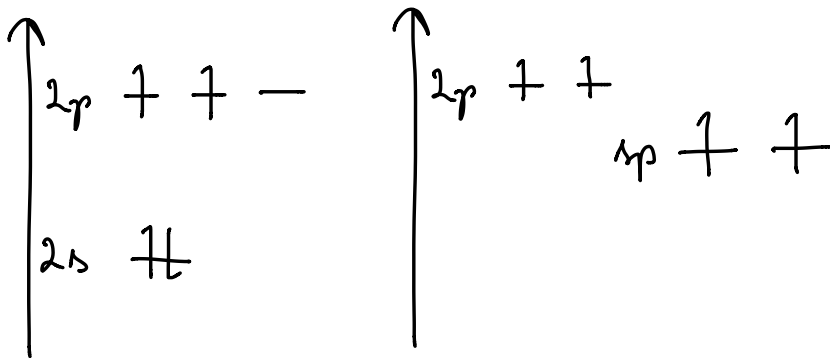
-bentseenissä kaikkien hielten ylimääräiset 2p-orbitaalit sulautuvat yhteiseksi, eli ne delokalisoituvat elektronipilveksi

-kaikki bentseenin sidokset ovat samanlaisia, mikä tekee bentseenistä hyvin pysyvän rakenteen (yhden hiilen poisto rikkoo koko yhteisen rakenteen!)

## sp-hybridisaatio

-yksi s ja yksi p orbitaali muodostavat kaksi sp-hybridiorbitaalia

-eri suuntiin,  $180^\circ$  kulmassa, eli suorassa



-sp-hybridiorbitaali muodostaa jälleen sigma-sidoksia

-ylimääräiset kaksi 2p orbitaalia (hiilellä) muodostavat kaksi  $\pi$ -sidosta, joista voi tulla



joko kolmoissidos (esim. etyyni HCCH)  
tai kaksi kaksoissidosta (esim. hiilidioksidi OCO)

-kolmoissidos on kaksoissidostakin  
reaktiivisempi

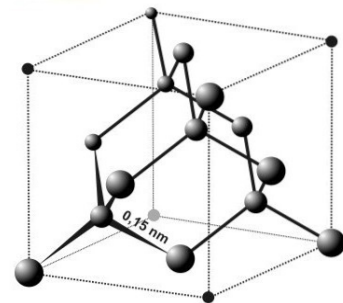
-kolmoissidos ei kierry kuten ei kaksoisidoskaa

## Atomihilat & allotropia

Myös pelkkä hiili voi muodostaa molekyylejä.

Kun  $sp^3$ -hybridisoituneet hiilet  
muodostavat keuhkon  
tetraedrarakenteellaan, syntyy  
timanttia. Yleisesti keuhkkoa  
kutsutaan *atomihilaksi*.

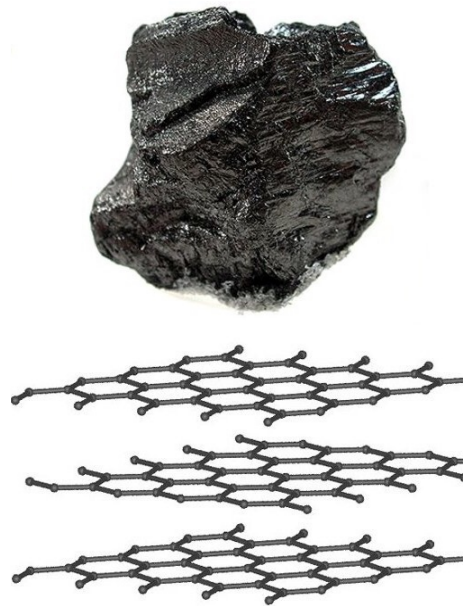
Tällainen rakenne on hyvin luja  
ja sillä on korkea sulamispiste,  
sillä sen muodostavat sigma-  
sidokset eivät reagoi tai liiku herkästi.



Timantti ei johda sähköä, koska sen elektronit ovat kiinnittyneet sigma-sidoksiin. Sen sijaan timantin lämmönjohtokyky on hyvä, sillä atomihila kuljettaa lämpöväärähtelyä tehokkaasti.

Grafiitti on hiilen toinen *allotrooppinen* muoto.

Grafiitin  $sp^2$ -hybridisoituneet, hiiliatomit muodostavat tasomaisen kehikon (hila!). Näitä tasoja on useita ja ne pysyvät toisissaan kiinni ylimääräisten 2p-orbitaalien muodostamalla elektronipilvellä, kuten bentseenissä.



Grafiitti ei ole hyvin kestävä, vaan sen tasoliuskat irtoavat helposti, minkä vuoksi lyijykynän pehmeä grafiitti jättää jäljen paperiin. Grafiitin tasojen välissä olevat elektronipilvet antavat grafiitille hyvän sähkönjohtokyvyn.

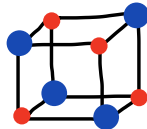
Allotrooppinen muoto tarkoittaa saman alkuaineen samassa olomuodossa olevia eri rakennemuotoja. Hiilellä allotrooppisia muotoja ovat paitsi timantti ja grafiitti, niin myös fullereenit ja grafeeni.

## 2.2 Ionidos

-ionidosokset muodostuvat (karkeasti) metallien antaessa elektroninsa epämetallille (molemmille oktetti)

-"varautuneet" metallit (+) ja epämetallit (-) muodostavat ionihilan

-esim:  $\text{Cl}^-$  ●  $\text{Na}^+$  ●



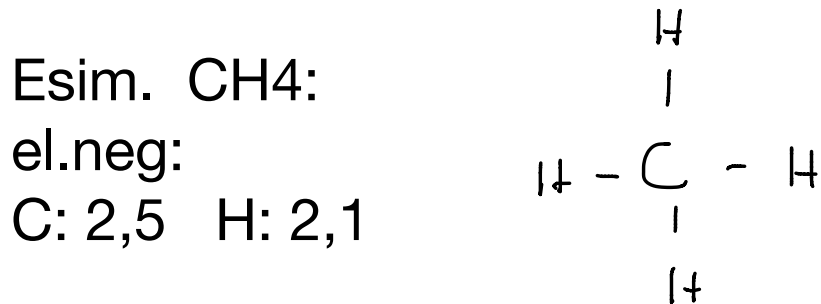
-pienin yksikkö, mihin kiteen rakenne mahtuu on *alkeiskoppi* (siitä selviää alkuaineiden suhde)

-kationeja (+) ja anioneja (-) on myös moniatomisina, ne merkitään sulkeissa

-esim.  $\text{HCOO}^-$ ,  $\text{NH}_4^+$

Mikäli halutaan tutkia ionisidoksellisiayhdisteitä, voidaan käyttää *hapetuslukuja*. Ne ilmoittavat, mikä kunkin atomin varaus olisi, mikäli sidoksessa olevat elektronit siirtyisivät täysin elektronegatiivisemmalle atomille eli muuttuisi täydellisesti ionivaraukseksi.

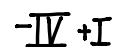
Hapetusluvut voidaan laskea mille tahansa sidokselle, mutta sillä on lähinnä käyttöä vain ionisidosten käsittelyssä.



hapetusluvut:

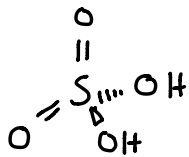
C: 4 ulkoelektronia - 8 tällä hetkellä = -4 = -IV

H: 1 ulkoelektroni - 0 tällä hetkellä = 1 = +I



hapetusluku H: 1 ulkoelektroni - 1 nyt = 0

Hapetuslukujen summa on sama kuin ionin ionivaraus, esim.



rikkihappo



el.neg:

H: 2,1      O: 3,5      S: 2,5

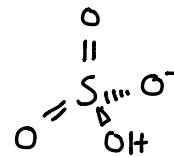
hapetusluvut:

H: 1 ulkoel. - 0 nyt = 1 = +I

S: 6 ulkoel. - 0 nyt = 6 = +VI

O: 6 ulkoel. - 8 nyt = -2 = -II

+I +VI -II



vetysulfaatti-ioni



+I +VI -II

Alkuaineiden yleisimmät hapetusluvut löytyvät MAOLin taulukoista. Joitakin perussääntöjä:

Yleensä:

H: +I    O: -II    halogeenit kuten Cl: -I

1.ryhmän metallit: +I    2.ryhmän metallit: +II

Monet muut täytyy päätellä tilanteesta. Muista, että yksi alkuaine voi saada eri hapetuslukuja eri tilanteissa.

Huomaa, että hapetusluvut EIVÄT ole sama asia kuin ionivaraukset!

Esim.  $\text{HCOO}^-$  (ionivaraus) ja  $\text{H} - \overset{+I}{\text{O}} - \overset{-II}{\text{H}}$  (hapetusluku)

## 2.3 Metallisidos

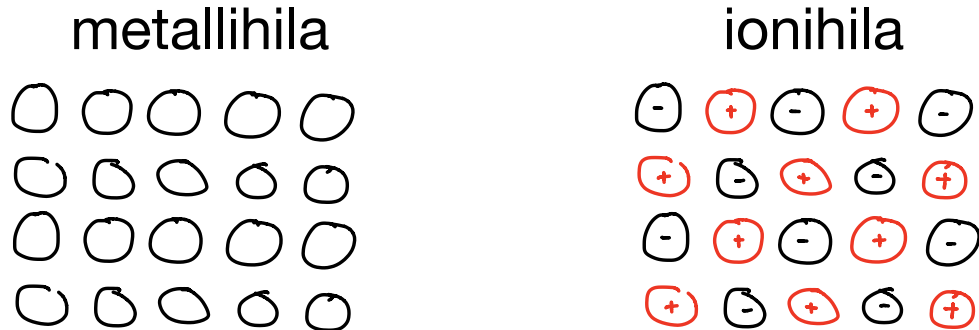
-ei tarpeeksi ulkoelektroneja kovalenttisiin sidoksiin

-ei tarpeeksi elektronegatiivisia aineita ionisidoksiin

-metallit muodostavat ulkoelektroneistaan elektronipilven, jolloin elektronit on jaettu mahdollisimman monelle metalliatomille

-rakenne on tiivis ja säännöllinen metallihila

-koska yhtenäinen joka puolelta, ei atomien liikuttelu riko rakennetta, toisin kuin ionisidoksessa!



-metalleja helppo muokata (takoa miekka?)

-koska elektronit liikkuvat vapaasti, johtaa metallit hyvin sähköä

-*lejeerinki* on metalliseos, jossa on useampaa alkuainetta

esim. *teräs*: rautaa ja hiiltä (+ muuta)  
(hiili asettuu rauta-atomien väleihin => lujaa!)

*pronssi*: kuparia ja tinaa (/muuta)

*messinki*: kuparia ja sinkkiä

*ruostumaton teräs*: rautaa, kromia ja nikkeliä



-eri seoksilla saadaan eri ominaisuuksia!

-koruissa ei ikinä pelkkää kultaa tai hopeaa, vaan erilaisia metalliseoksia!

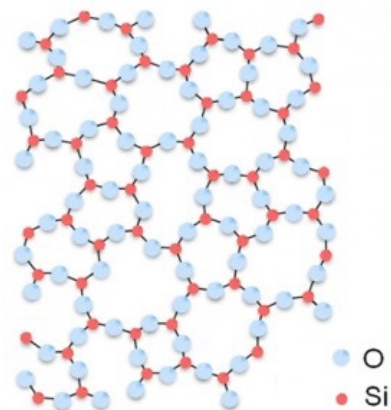
## 2.4 Vahvat sidokset ja aineen ominaisuudet

-puhdas aine joko *kiteistä* (hila!) tai *amorfista*, jolloin ei tarkkaa sulamispistettä (aine on epäjärjestyksessä = ei jaksollista rakennetta)

-amorfisia aineita ovat esim. lasi ja voi

-voidaan ajatella nesteinä, lämmitessään muuttuvat juoksevimmiksi

-lasin pää-rakennusaine on silika (piioksidi), mitä löytyy mm. hiekasta (kvartsina)



SiO<sub>2</sub>:n eli piioksidin epäsäännöllinen rakenne.

Erilaisia hilatyyppejä ovat

1. ionihila
2. atomihila
3. metallihila
4. molekyylihila (poolinen) (esim vetysidos)
5. molekyylihila (pooliton) (dispersiovoimat)

Kts. ominaisuudet taulukosta s.77

(

Ominaisuuksia:

1. korkea s.p., kovia, murtuvat, johtavat sähköä jos eivät ole kiinteitä
2. korkea s.p., kovia, murtuvat, yleensä eristeitä
3. sähköä ja lämpöä johtavia, muokattavia
4. matala s.p., eristeitä
5. matala s.p., eristeitä, haihtuvia

)