

sp^3 -Hybridisaatio

IHMISEN JA ELINYMPÄ-
RISTÖN KEMIA, KE2

Tarkastellaan metaanimolekyyliä ja yksinkertaisen hiili-vetysidoksen muodostumista. Hiilen kuusi elektronia ovat asettuneet eri atomiorbitaaleille seuraavasti $1s^2 2s^2 2p^2$. Voisi ajatella, että vain korkeenergisisimmät ("uloimmat") $2p^2$ -elektronit muodostaisivat kaksi kovalenttista sidosta muihin atomeihin.

Metaanimolekyyliässä hiili muodostaa kuitenkin 4 kovalenttista sidosta, jotka ovat mittausten perusteella yhtä pitkiä ja vahvoja.

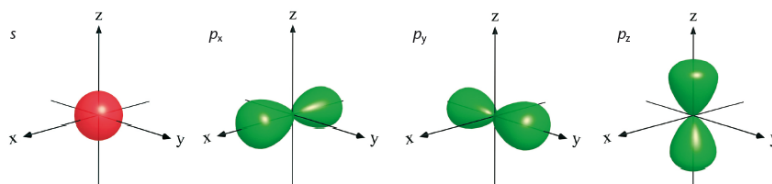
Metaanimolekyylin neljän yksinkertaisen, keskenään täysin samanlaisen sidoksen muodostuminen selitetään siten, että hiilen $2s$ -orbitaalilta ensin yksi elektroni virittyy $2p$ -orbitaalille, jonka jälkeen hiiliatomin $2s$ -orbitaali ja kolme $2p$ -orbitaalia muuntuvat neljäksi energialtaan samansuuruisiksi **sp^3 -hybridiorbitaaliksi**, joilla jokaisella on yksi pariton elektroni.

Määritelmä, hybridisaatio:

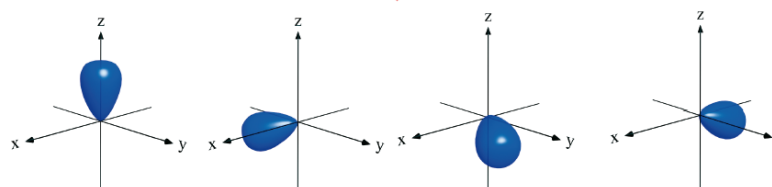
Hybridisaatiolla kuvataan atomiorbitaalien muuntumista energialtaan samantyyppisiksi hybridiorbitaaleiksi.

Huomaus Hybridiorbitaalien lukumäärä on aina sama kuin sekoittuvien atomiorbitaalien lukumäärä.

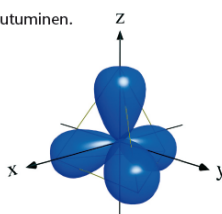
1 Atomiorbitaalit, 4 kpl.

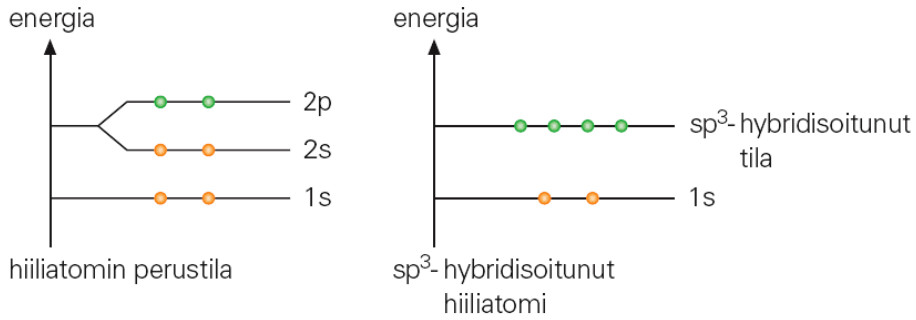


2 Näistä muodostuvat sp^3 -hybridiorbitaalit (4 kpl). \downarrow sp^3 -hybridisaatio



3 Neljän sp^3 -hybridiorbitaalin suuntautuminen.

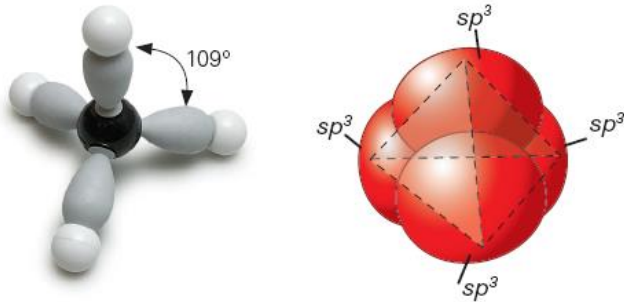




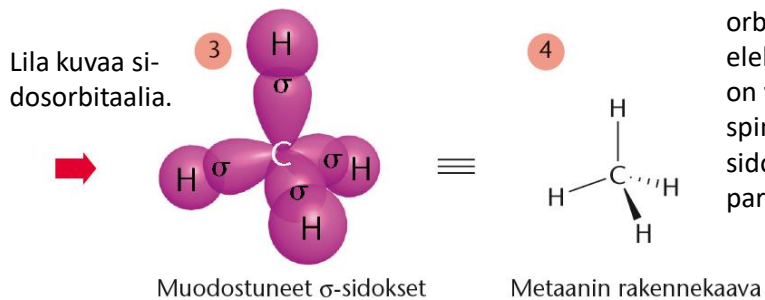
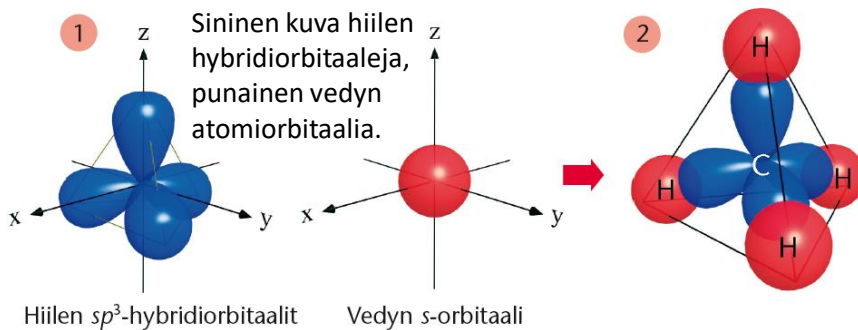
Huomaa, että hybridiorbitaalien elektronien energiat ovat pienemmät kuin p -atomiorbitaalien, mutta suuremmat kuin s -atomiorbitaalien elektronien energiat.

Esimerkki

Hybridisaatio selittää metaanimolekyylin neljä samanlaista hiili-vetysidosta.



Metaanin, CH_4 , sidosten ajatellaan muodostuvan seuraavasti:

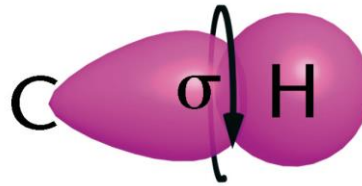


Jokaisessa sidorsorbitaalissa on 2 elektronia, joilla on vastakkaiset spinnit \rightarrow ovat ns. sidoselektronipareja.

Määritelmä, sigmasidos eli σ -sidos:

Pyörähdysymmetrisiä sidosorbitaaleja sanotaan σ -sidoksiksi (kuva oikealla).

Niitä syntyy kun sidoksen muodostavat orbitaalit sulautuvat yhteen päittäin ytimien kautta kulkevaa symmetria-akselia pitkin. Lisäksi voidaan ilmoittaa sulkeissa yhteen sulautuneet orbitaalit.

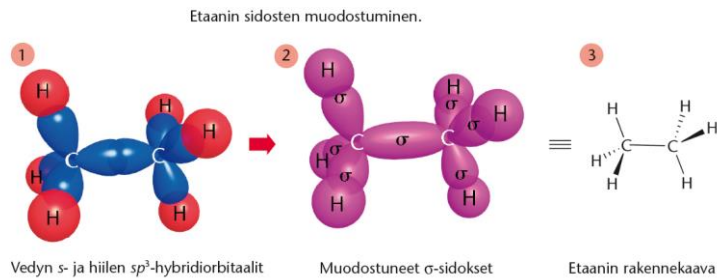


Pyörähdysymmetrinen σ -sidos.

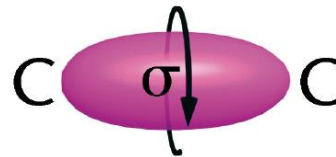
Esimerkkejä 1) Metaanin sidosorbitaalit ovat pyörähdysymmetrisiä. Siis sidos on sigmasidos eli σ -sidos. Metaanin sidokset ovat $\sigma(1s, sp^3)$ -sidoksia.

Esimerkkejä

2) Etaanilla kaikki sidokset sigmasidokset. Huomaa, että C-C sidos on $\sigma(sp^3, sp^3)$ -sidos.

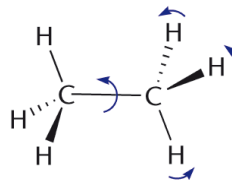
**Konformaatiot**

Koska etaanin C-C –sidos voi kiertyä vapaasti, niin eri näön muodostuvia erilaisia muotoja kutsutaan konformaatioiksi.

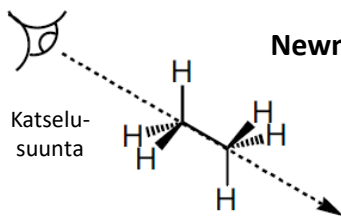
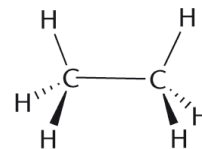
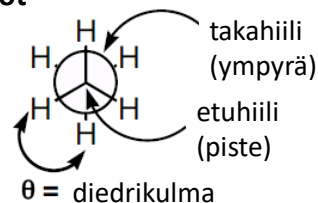


Tätä voidaan esim. etaanin tapauksessa tarkastella eri tavoin: Newmanin projektio, kohdakkain vai lomittain muoto, jne.

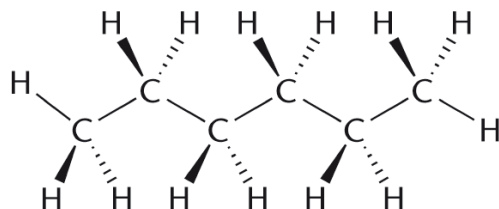
vedyt lomittain



vedyt kohdakkain

**Newmanin projektiot**

Yleistys: Hiilirungon muodon määrää σ -sidoksia muodostavien hybridiorbitaalien suuntautuminen. sp^3 -hybridisoitunut hiiliatomi sitoutuu aina muihin atomeihin neljällä yksinkertaisella, tetraedrisesti suuntautuneella σ -sidoksella.



heksaanin rakennekaava

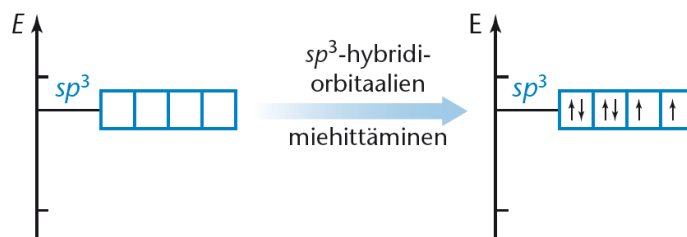


heksaanin viivakaava

Tämä siksak muoto kuvaa molekyylin (hiilirunko) pysyvintä konformaatiota.

Happi- ja typpiatomien sp^3 -hybridisaatio

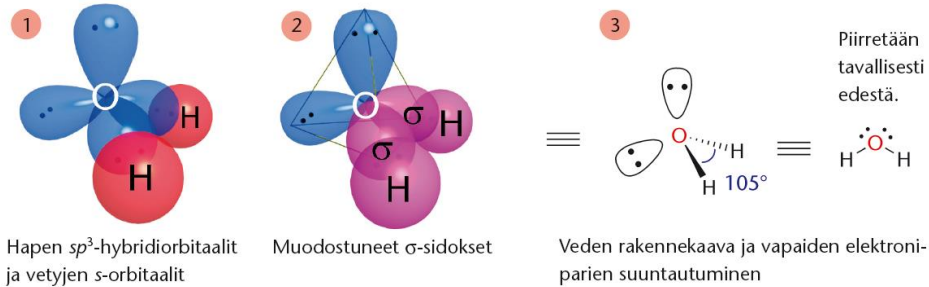
Happiatomin ($Z = 8$) elektronikonfiguraatio on $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$. Kun hapen kuusi ulkoelektronia sijoitetaan täyttymissääntöjen mukaisesti sp^3 -hybridiorbitaaleille, hapen kahdelle sp^3 -hybridiorbitaalille tulee kaksi σ -sidoksiin osallistumatonta vapaata elektroniparia.



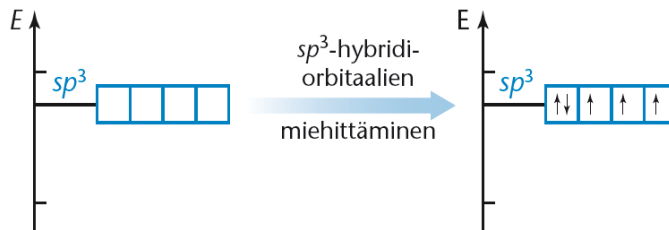
Hapen sp^3 -hybridiorbitaalien elektronimiehitys.

Esimerkki

Vesimolekyylissä H_2O kahden vetyatomin $1s$ -atomiorbitaalit sulautuvat niihin kahteen hapen sp^3 -hybridiorbitaaliin, joissa on parittomat elektronit. Vapaiden elektroniparien elektronit hylkivät toisiaan enemmän kuin σ -sidoksiin osallistuvat elektroniparit. Näin vapaat elektroniparit ”puristavat” σ -sidoksia lähemmäksi toisiaan, vesimolekyyli on V:n muotoinen ja sidoskulma on 105° .



Typpiatomien ($Z = 7$) elektronikonfiguraatio on $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. Kun typen sp^3 -hybridiorbitaalit miehitetään täyttymisjärjestyksen mukaisesti viidellä ulkoelektronilla, typen yhdelle sp^3 -hybridiorbitaalille tulee yksi vapaa elektronipari.



Esimerkki

Ammoniakilla samanlainen tilanne kuin vedellä.

