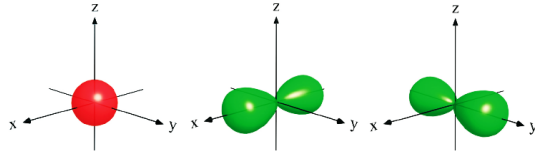


# $sp^2$ - ja $sp$ -hybridisaatio

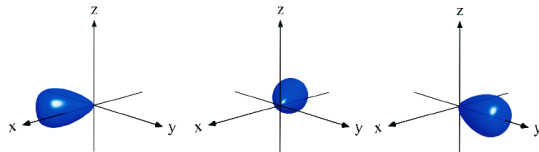
IHMISEN JA ELINYMPÄRISTÖN KEMIA, KE2

$sp^2$ -hybridisaatioissa, saman atomin yksi  $s$ -atomiorbitaali ja kaksi  $p$ -atomiorbitaalia sekoittuvat keskenään muodostaen kolme samanenergistä  $sp^2$ -hybridiorbitaalia.

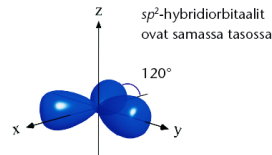
- 1 Atomiorbitaalit:  
 $s$ ,  $p_x$  ja  $p_y$  (3 kpl)



- 2 Muodostuneet  $sp^2$ -hybridiorbitaalit



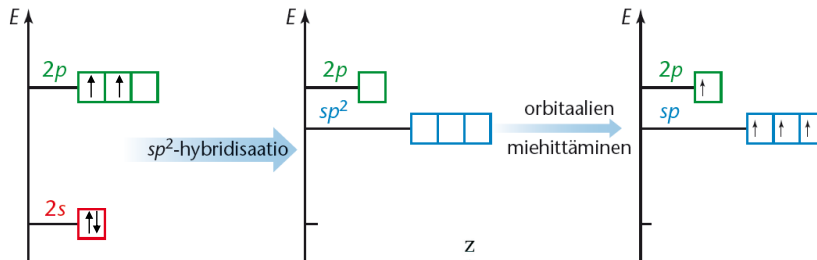
- 3  $sp^2$ -hybridiorbitaalien suuntautuminen



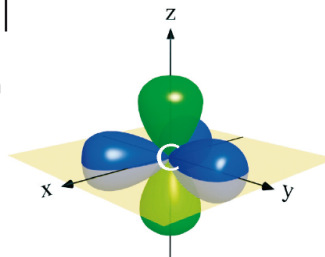
Tarkastellaan esimerkkien kautta  $sp^2$ -hybridisaatiota.

## Esimerkki Hiili.

Hiiliatomin  $sp^2$ -hybridisaatioissa sekoittuvat keskenään  $2s$ -atomiorbitaali ja kaksi  $2p$ -atomiorbitaalia. **Yksi hiilen  $2p$ -atomiorbitaaleista ei osallistu hybridisaatioon.** Tämä hybridisoitumaton  $p$ -atomiorbitaali on kohtisuorassa hybridiorbitaalien muodostamaa tasoa vastaan.



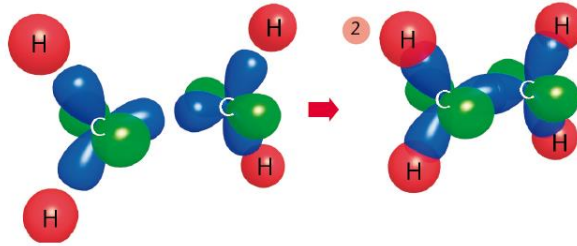
$sp^2$ - ja  $p_z$ -orbitaalien suuntautuminen



vihreällä kuvattu  $p_z$ -orbitaali suuntautuu tason ylä- ja alapuolelle

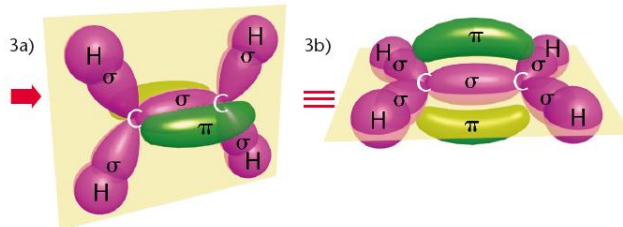
**Muista** yhdellä orbitaalilla kaksi max elektornia.

- 1 Hiilen  $sp^2$ - ja vetyjen  $s$ -orbitaalit

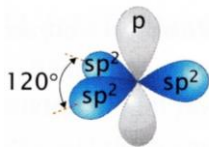
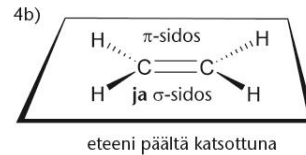
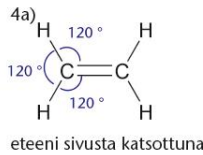


- 3 Muodostuneet  $\sigma$ - ja  $\pi$ -sidokset

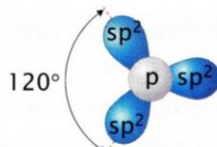
Huomaa, että vihreällä merkitty  $\pi$ -sidos koostuu kahdesta osasta.



- 4 Rakennekaavat



malli sivulta



malli päältä

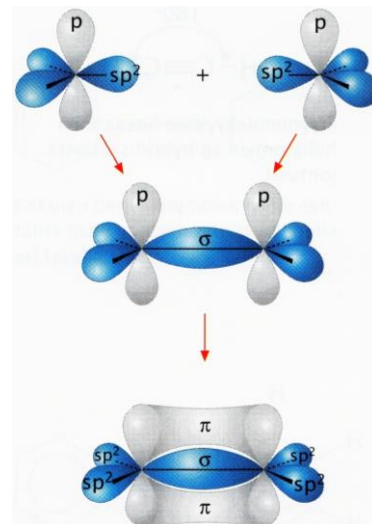
Eteenin hybridisoitumattomat  $2p$ -atomiorbitaalit sulautuvat yhteen kaksiosaiseksi sidosorbitaaliksi.

### Määritelmä, piisidos:

Tällaista tason suhteen symmetristä sidosta, jossa atomiorbitaalit ovat sivuttain sulautuneet yhteen sidosorbitaaliksi, kutsutaan  $\pi$ -sidokseksi.

**Huom.** Piisidos on heikompi ja reaktiivisempi kuin sigmasidos.

Muodostuva kaksoisidos on rakenteellisesti jäykkä, eli atomit (atomiryhmät) eivät pääse vapaasti kiertymään  $\rightarrow$  cis-trans isomeria.

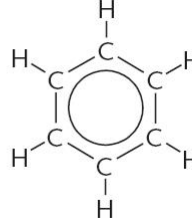


Hiili-hiilikaksoisidos muodostuu siis yhdestä  $\sigma$ - ja  $\pi$ -sidoksesta.

## Esimerkki Bentseenirengas ja 1,3-butadieeni (konjukoituminen).

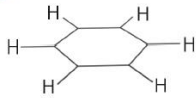


Bentseenillä kaikki hiilet  $sp^2$ -hybridisoituneet



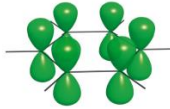
Bentseenillä pii-sidosten delokalisoituminen  
→ rengasrakenteinen  $\pi$ -sidos

1a



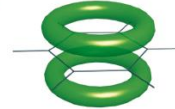
Bentseenin  $\sigma$ -sidosverkosto.

2a



Bentseenirenkaan hiiliatomien hybridisoitumattomat  $p$ -atomiorbitaalit.

3a



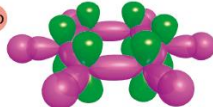
$p$ -atomiorbitaalit sulautuvat yhteen kahdeksi elektronipilveksi.

1b



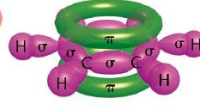
Kuvassa hiiltien väliset ( $sp^2$ ,  $sp^2$ )- ja hiiltien ja vetyjen väliset ( $1s$ ,  $sp^2$ )-sidosorbitaalit.

2b



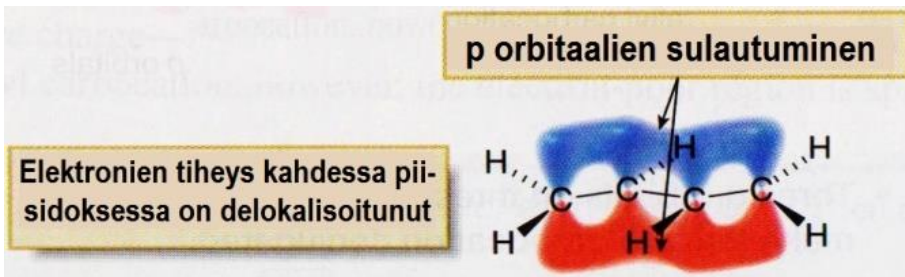
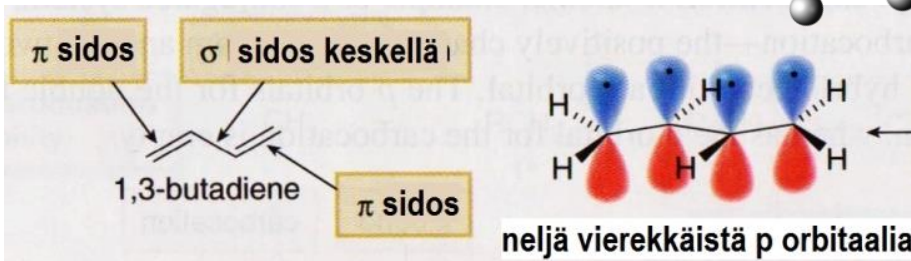
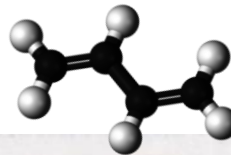
Myös  $p$ -atomiorbitaalit näkyvissä.

3b

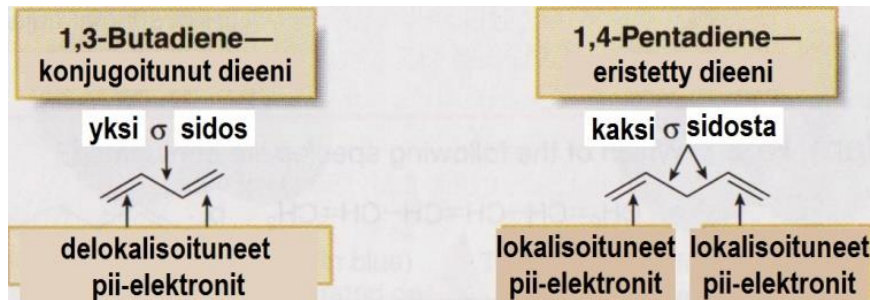


Lopullinen sidosverkosto:  $\sigma$ -sidokset ja delokalisoituneiden  $\pi$ -elektronien muodostamat elektronipilvet.

1,3-butadieenin tapauksessa tapahtuu ns. konjukoituminen eli  $p$ -atomiorbitaalien sulautuminen. Tällöin elektronit delokalisoituvat (ei-paikallistuvat).

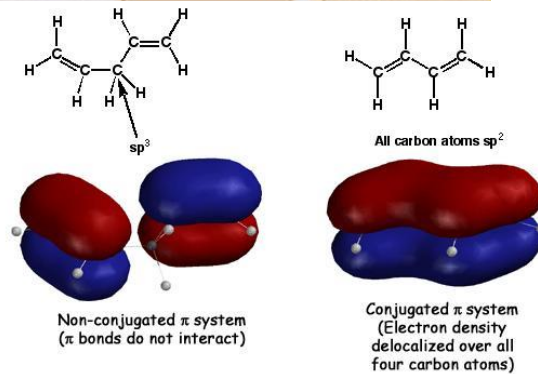


Huomaa milloin delokalisoituminen on mahdollista.



**Yleisesti:** Kun  $p$ -atomiorbitaalit sulautuvat, jokaisen  $\pi$ -sidoksen elektronitiheys leviää tasaisesti laajemmalle tilavuudelle. Näin molekyylin energia alenee ja siitä tulee pysyvämpi. Tämä on hyvin yleistä kemiassa.

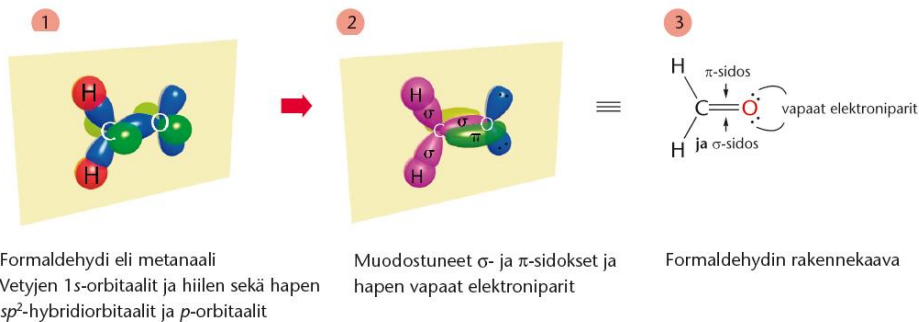
(Konjugoitumista ei kysytä kokeessa ☺ !)



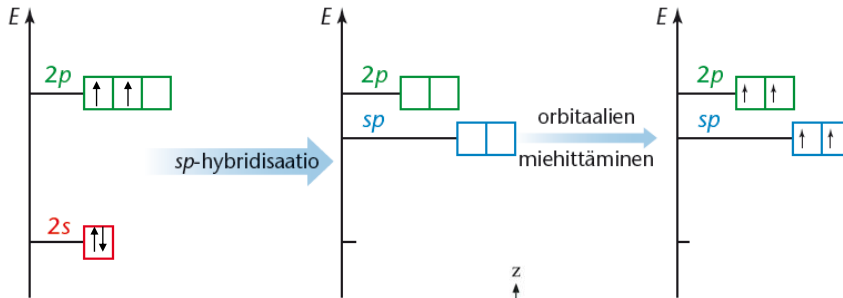
## Karbonyyliryhmän rakenne

Hiili-happi-kaksoissidos,  $>C=O$ , on reaktioiden kannalta hiiliyhdisteiden tärkein funktionaalinen ryhmä (ketonit/aldehydit, hapot/esterit jne).

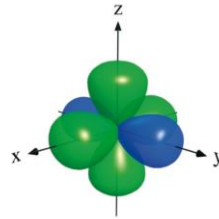
Karbonyyliryhmässä sekä hiili, että happiatomi on  $sp^2$ -hybridisoitunut.



$sp$ -hybridisaatiossa, saman atomin yksi  $s$ -atomi-orbitaali ja yksi  $p$ -atomi-orbitaali sekoittuvat keskenään muodostaen kaksi samanenergistä  $sp$ -hybridiorbitaalia.

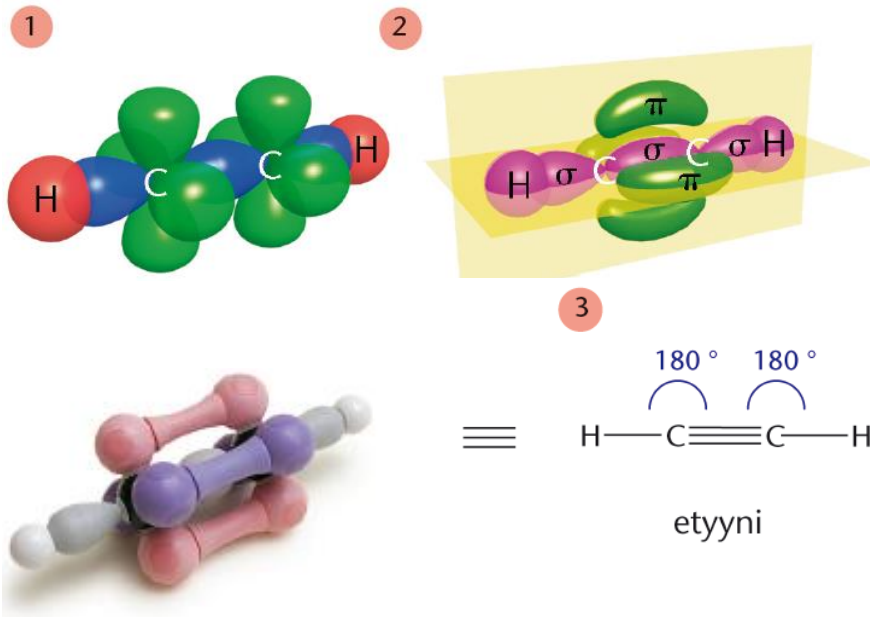


Kuten aiemminkin, hybridisoi- tumattomat  $2p$ -atomi-orbitaalit ovat kohtisuorassa toisiaan ja  $sp$ -hybridiorbitaaleja vastaan.

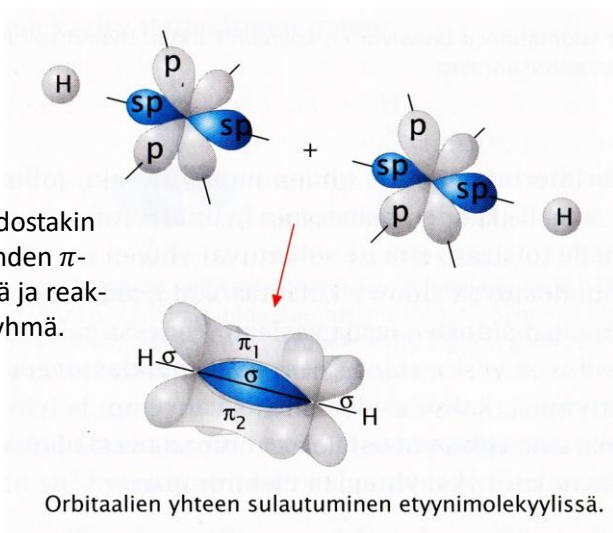


Hiiliatomin  $p_x$ - ja  $p_z$ -orbitaalit (vihreitä) sekä  $sp$ -hybridiorbitaalit (sininen)

**Esimerkki** Etyyni.



Kolmoissidos on kaksoissidostakin lyhyempi ja vahvempi. Kahden  $\pi$ -sidoksen takia se on jäykkä ja reaktiivinen funktionaalinen ryhmä.


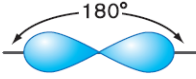

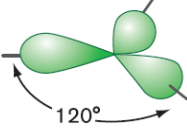

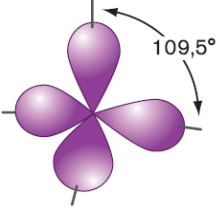


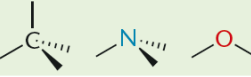
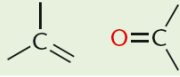

$sp$ -hybridisoitunut hiili muodostaa kaksi sigmasidosta ja kaksi piisidosta.

Yhteenvetoa hiilen hybridisaatioista.

	$sp^3$ -hybridisaatio	$sp^2$ -hybridisaatio	$sp$ -hybridisaatio
Hybridisoituneita elektroneja	4	3	2
Sidoksen merkintä	C – C	C = C	C $\equiv$ C
Siduskulma	109,5°	120°	180°
Sidostyyppi	$\sigma$	$\sigma$ ja $\pi$	$\sigma$ , $\pi$ ja $\pi$
C–C-sidoksen pituus	154 pm	134 pm bentseeni: 139 pm	120 pm
Sidoksen energia	348 kJ/mol	612 kJ/mol bentseeni: 550 kJ/mol	837 kJ/mol

## Hybridisaatio ja molekyylin muoto

Hybridisaatioon osallistuvien elektroniparien lukumäärä	Molekyylin muoto	Geometria	Hybridityyppi	Hybridiorbitaalit
2		lineaarinen	sp	
3		kolmiomainen tasossa	sp <sup>2</sup>	
4		tetraedrinen	sp <sup>3</sup>	

	sp <sup>3</sup> -hybridisaatio	sp <sup>2</sup> -hybridisaatio	sp-hybridisaatio
Sidoskulmat	109° (hiili, typpi ja happi)	120°	180°
Sidoksen avarusrakenteen esittäminen			
Sidostyypit	σ	σ + π	σ + 2π
Hiili–hiili-sidoksen pituus/pm (pm = 10 <sup>-9</sup> m)	154 (C–C)	134 (C = C)	120 (C ≡ C)
Hiili–hiili-sidosten sidosenergia (kJ/mol)	348	612, josta π-sidoksen osuus 256	837, josta kahden π-sidoksen osuus 511

### Jäikö mieleen?

- Milloin muodostuu a) sigma- b) piisidos?
- Mitä tarkoittaa orbitaalien hybridisaatio?
- Millaisia hybridiorbitaalit ovat toisiinsa verrattuina? Miten ne suuntautuvat avaruudessa?
- Millaisista orbitaaleista  $sp^3$ -hybridiorbitaalit rakentuvat?
- Mikä on  $sp^3$ -hybridiorbitaalien muodostamien sidosten välinen kulma?
- Mitä eroa on kaksoissidoksen kovalenttisilla sidoksilla?
- Miksi kaksoissidoksin muodostuu tasomaisia molekyyilejä?
- Miksi kolmoissidoksin muodostuu lineaarisia molekyyilejä?