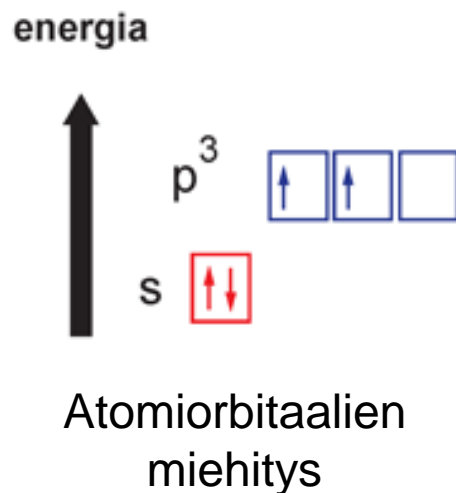


Hybridisaatio



Miksi metaanimolekyyli on muodoltaan tetraedi?

- Metaanimolekyyllissä hiilen ulkoelektronit muodostavat sidoksen vedyn s-orbitaalien kanssa. Metaanimolekyylin vetyatomeja tutkimalla on voitu todeta, että jokaisen vedyn ulkoelektronien energiatasojen täytyy olla samat. Lisäksi todettiin, että hiili- ja vetyatomien välisten sidosten pituudet ja sidoskulmat ovat samat (109°). Miten tämä voidaan selittää atomiorbitaaliteorialla?

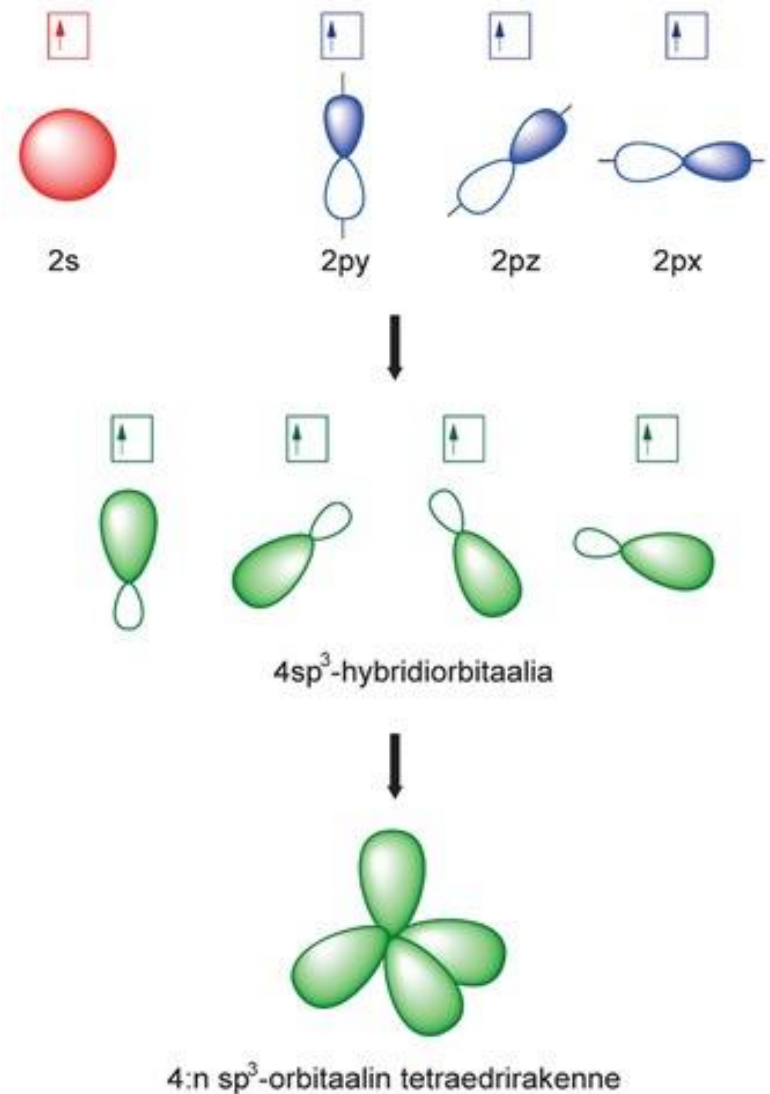


Kuvan elektronit muodostavat neljä sidosta. Elektroneista 2 on s-orbitaalilta ja 2 p-orbitaaleilta (Hundin säännön mukaan eri orbitaaleilta).

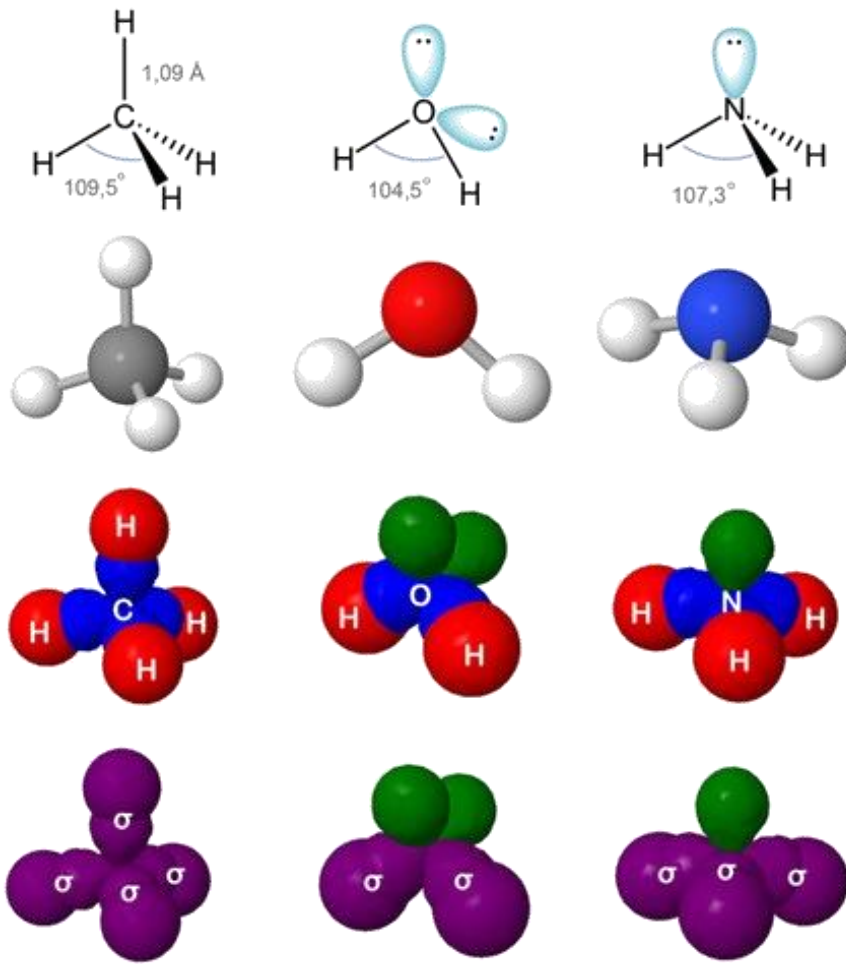
Eli neljästä syntyvästä sidoksesta kaksi olisi samankaltaista ja toiset kaksi ”erilaisia” tämän teorian mukaan?

sp³-hybridisaatio

- olemassa olevat mallit eivät pystyneet selittämään metaanin rakennetta
- malli, jossa kaikki neljä elektronia ovat samalla energiatasolla
- teoria atomiorbitaalien hybridisaatiosta
- Metaanin tapauksessa tehdään oletus **sp³-hybridisaatiosta**.
- Hiilen 2s-orbitaali ja 2p-orbitaalit muodostavat uudet saman energiatason omaavat (hybridi)orbitaalit
- Uudet orbitaalit nimettiin sp³-(hybridi)orbitaaleiksi.



Metaani-, vesi- ja ammoniakkimolekyylien avaruusrakenne hybridisaatio-mallin mukaan



Kaikki sidokset ovat sigma-sidoksia (σ -sidoksia)

Etaani-molekyyli kiertyy

Etaanimolekyyliässä on kaksi tetraedriä vastakkain.

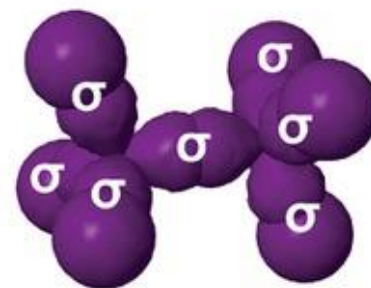
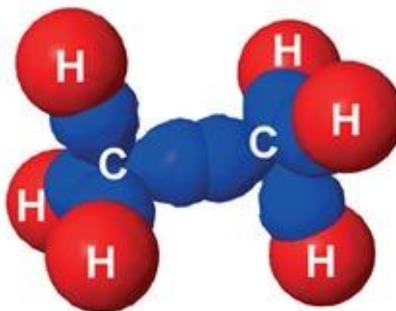
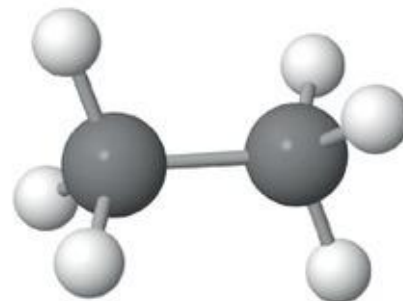
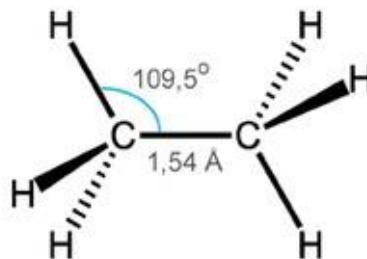
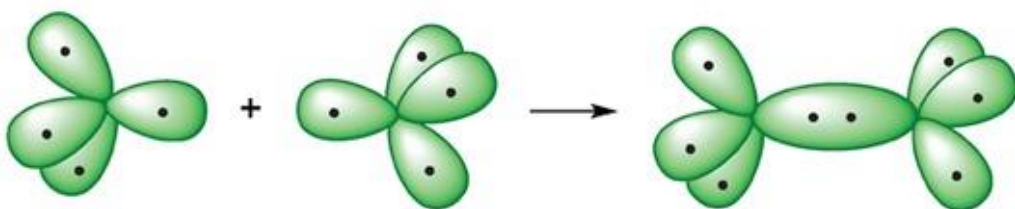
Hiili-atomien välinen σ -sidoks korvaa metaanin yhden hiilivety-sidoksen.

Sidoskulmat ovat edelleen samat, mutta sidospituudet ovat erilaiset.

Yksinkertaisten sidosten kohdalla on havaittu, että **hiili-hiili-sidos (σ -sidos) voi kiertyä**. Tästä seuraa mm. myöhemmin esiteltävä konformaatio-isomeria.

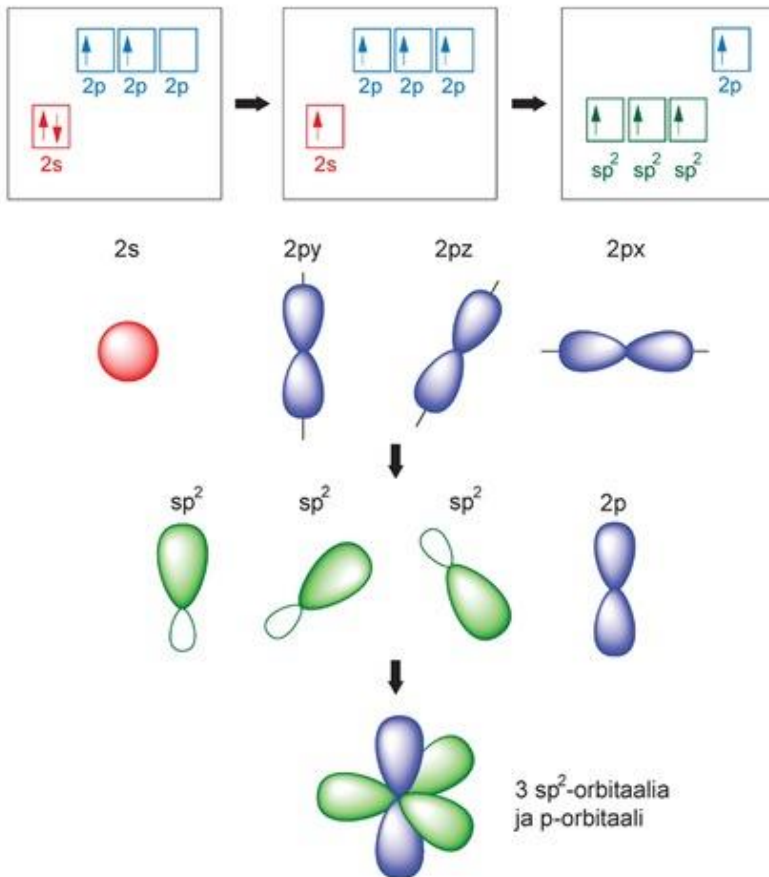
Kts.

<http://www.youtube.com/embed/o93dfVOG7cg>



Miksi eteenin rakenne on lisäksi tasomainen?

- Neljä sidosta (hiili-vety) ovat samanlaisia, mutta hiilien välinen sidos erilainen ja molekyyli tasomainen (vedyt kaikki samassa tasossa)

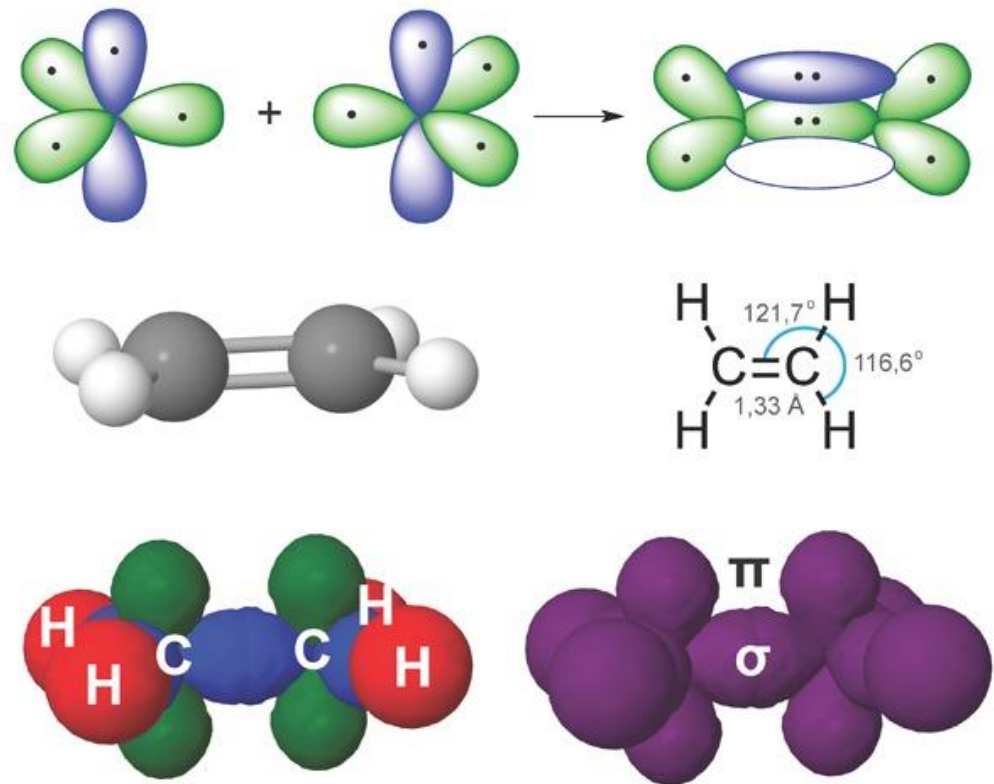


Eteenimolekyylin on todettu olevan tasomainen. Sidosten väliset sidokset ovat noin 120° kulmassa toisiinsa nähden. Yksi sidoksista on kaksoissidos ($C=C$), joten nyt täytyy olla kyse toisenlaisesta hybridisaatiosta kuin sp^3 -hybridisaatiosta, jossa oli vain yksinkertaisia sidoksia.

Tehdään oletus, että $2s$ -orbitaali ja kaksi $2p$ -orbitaalia muodostavat kolme **sp^2 -hybridiorbitaalia**. Kolmas $2p$ -orbitaali jää oletuksessa yksinäiseksi $2p$ -orbitaaliksi, joka asettuu hybridiorbitaalien muodostamaan tasoon nähden 90° kulmaan.

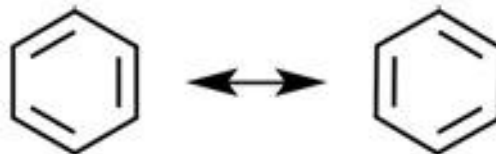
sp²-hybridisaatio

- Hybridisoituneet orbitaalit muodostavat vetyatomien s-orbitaalien ja kahden hiiliatomin välillä **σ-sidokset** (3 kpl).
- Hybridiorbitaalien muodostamien sidosten lisäksi hiiliatomien 2p-orbitaalit asettuvat vastakkain ja muodostavat erilaisen sidoksen, jota kutsumme **π-sidokseksi** (pii).



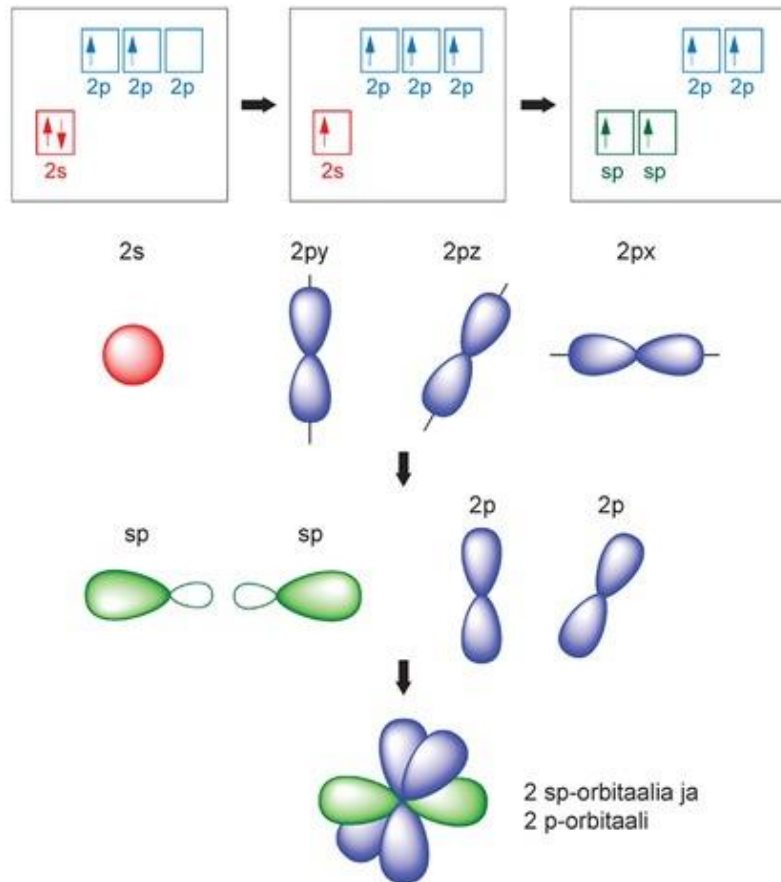
Bentseenin rakenne -delokalisoituminen

- Bentseenirenkaan hiiliatomit ovat sp^2 -hybridisoituneet. Renkaan jokainen hiiliatomi muodostaa sp^2 -hybridiorbitaaleillaan σ -sidoksen kahden vierekkäisen hiiliatomin sekä yhden vetyatomin kanssa. Hiili- ja vetyatomit ovat samassa tasossa ja sidoskulmat ovat 120 astetta, minkä vuoksi bentseenirengas on muodoltaan tasomainen säännöllinen kuusikulmio.
- Osa 2p-orbitaaleista on vielä vapaana. Ne ovat kohtisuorassa asennossa hybridiorbitaalien muodostamaan tasoon nähden. Nämä 2p-orbitaalit sulautuvat vierekkäisten orbitaalien kanssa yhteen muodostaen kolme π -orbitaalia. Muodostuneet π -orbitaalit eivät saa ennalta määrättyjä paikkoja renkaassa, vaan ne muodostavat elektronipilven. π -sidoselektronit ovat **delokalisoituneita**.



Miksi etyynin rakenne on lineaarinen?

- Eli kaksi sidosta (vetyihin) ovat samanlaisia, mutta hiilien välinen sidos erilainen ja molekyyli lineaarinen



Etyynimolekyyli on lineaarinen ja siinä on hiiliatomien välillä kolmoissidos. Hiilellä on kaksi samankaltaista sidosta, koska niiden sidoskulma on 180°.

Teemme oletuksen **sp-hybridisaatiosta**, johon sisällytetään 2s-orbitaali ja yksi 2p-orbitaali. Jäljelle jäävät kaksi 2p-orbitaalia jäävät aiempaan asemaansa.

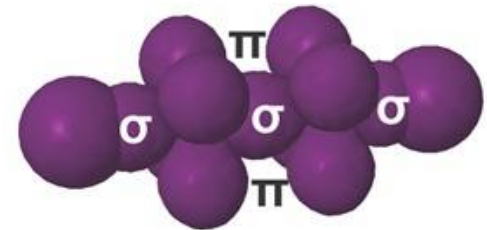
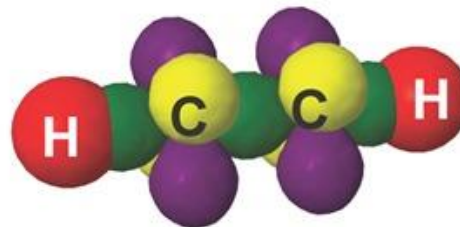
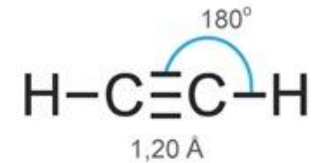
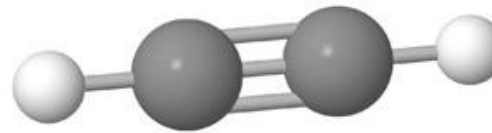
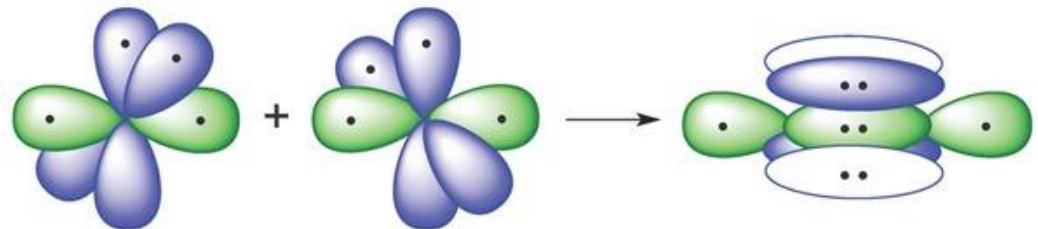
Aineen rakenne ja sidokset

- Kemiallinen reaktio = **sidoksia hajoaa ja sidoksia syntyy**
- Olomuodon muutos → sidoksia hajoaa ja/tai syntyy (vahvoja tai heikkoja sidoksia)
- Sidoksien **hajottaminen vaatii energiaa**
- Miten spontaani reaktio on mahdollinen?
 - Aktivoitumisenergia
 - Entalpia, entropia, Gibbsin energia
- Esimerkkejä
 - Etaanin, eteenin ja etyynin hiilien välisten sidoksien sidosenergia
 - Mikä on yksinkertaisen sidoksen sidosenergia?
 - Mikä on kaksois-/kolmoissidoksen sidosenergia per sidos?
 - Mikä on kaksois-/kolmoissidoksen eri sidoksien energia, jos oletetaan, että yksi sidoksista on samankaltainen (energialtaan sama) kuin etaanin yksinkertainen sidos

	Kok. energia	Sid.en/2,3	Sid.en. – C-C
Etaani C-C	348	348	Sigma, 348
Eteeni C=C	612	306 (ero 42)	Pii, 264
Etyyni C≡C	873	291 (ero 57)	2 Pii, 263

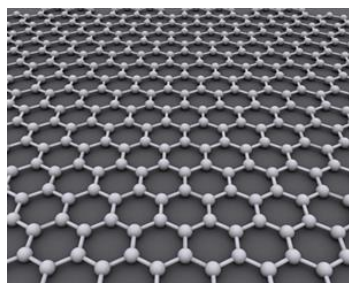
sp-hybridisaatio

- Hybridisoituneet sp-orbitaalit muodostavat **σ -sidokset**, yhden vedyn s-orbitaalin ja toisen kahden hiilen välille.
- Jäljelle jääneet 2p-orbitaalit ovat 90° kulmassa toisiinsa nähden ja molemmat ovat 90° kulmassa hybridisoituneisiin orbitaaleihin nähden.
- 2p-orbitaalit asettuvat vastakkain ja muodostavat kaksi **π -sidosta** kuvan mukaisesti.

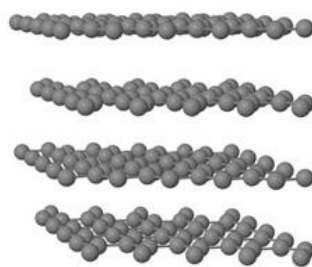


Hiilen allotropia

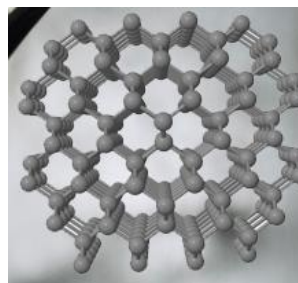
- Allotropia on alkuaineiden kyky esiintyä samassa paineessa ja lämpötilassa erilaisissa kemiallisissa muodoissa. Allotropia on seurausta saman alkuaineen atomien erilaisesta sitoutumisesta ja niiden muodostamasta kiderakenteesta. Tunnetuin esimerkki allotropiasta on kiinteän hiilen esiintyminen grafeeninä, grafiittina, timanttina, fullereenina ja nanoputkena.



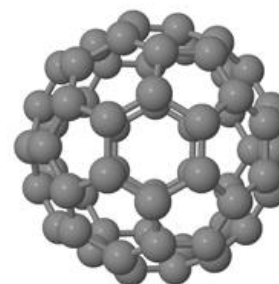
Grafeeni



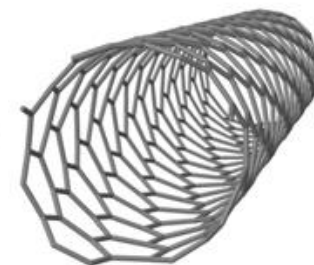
Grafiitti



Timantti



Fullereeni



Nanoputki