

Kemisk bindning I,  
"Chemical bonds" A&J kap. 2

# Dagens

## Olika bindningstyper

- Jonbindning
- Kovalent bindning
- Polär kovalent bindning
- Metallbindning

## Elektronegativitet

- Jonbindning eller kovalent bindning?

## Lewisstrukturer

- Oktettregeln
- Resonansstrukturer
- Formell laddning

## Nästa vecka

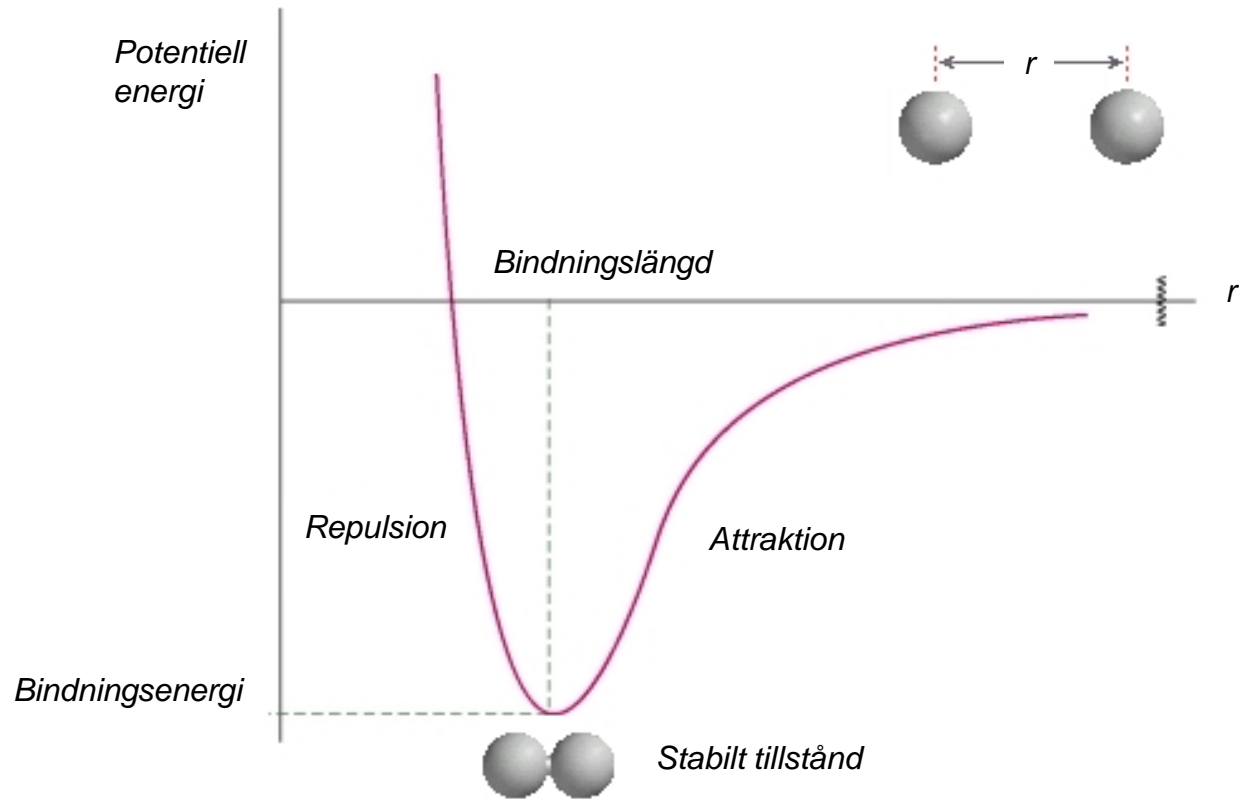
-VSEPR (valence shell electron pair repulsion). Beskriver geometrin hos molekyler.

- Hybridorbitaler – Linjär kombination av atomorbitaler (från samma atom) genererar s.k. hybridorbitaler vilka beskriver en molekyls geometri.

- MOT - (Molecular Orbital Theory) – Atomorbitaler från olika atomer bildar s.k. molekylorbitaler. Beskriver en molekyls bindingsenergier och stabilitet

*Vad är en kemisk bindning?*

# Kemisk bindning - Energi och avstånd



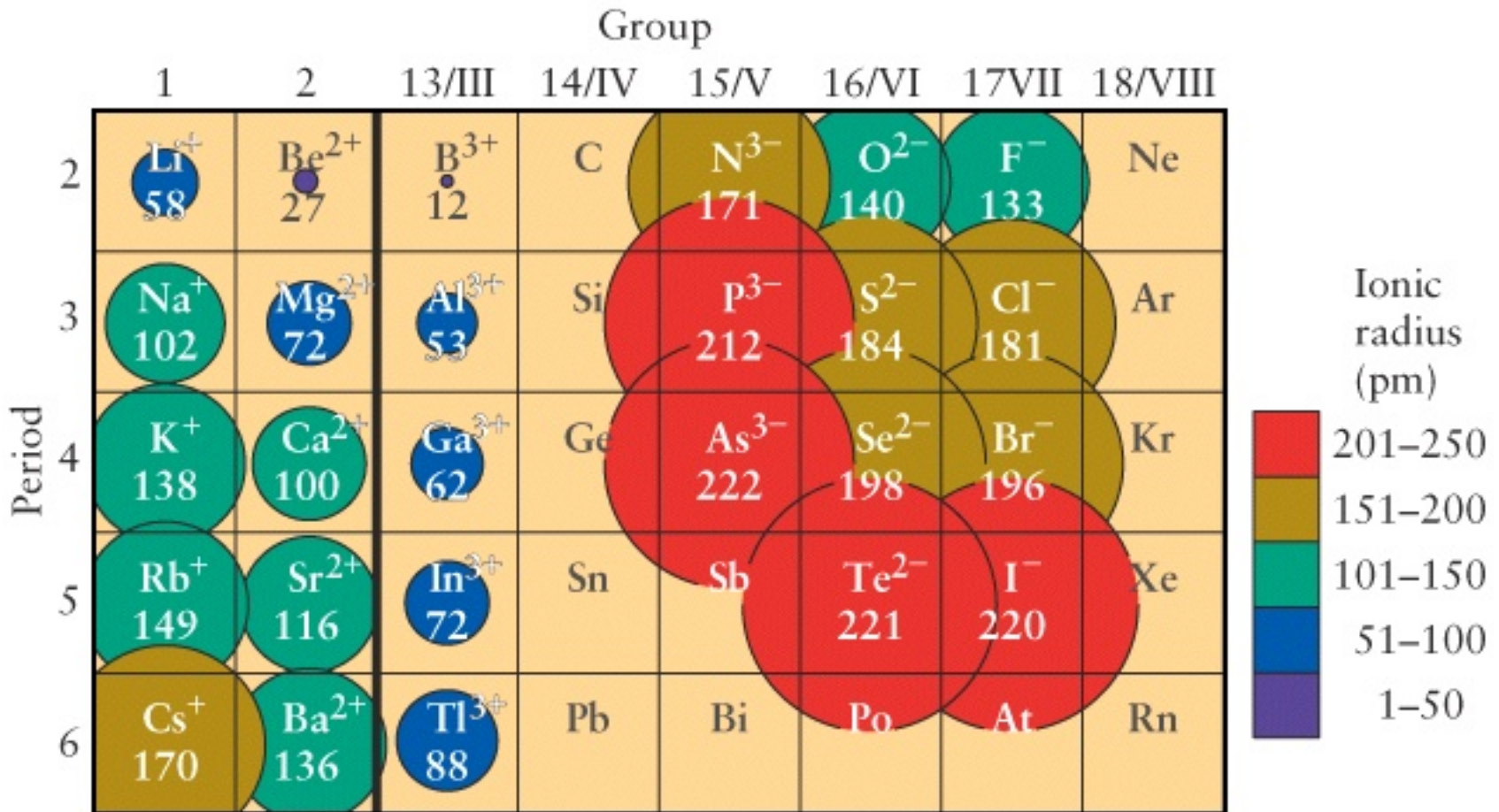
# Jonbindning

Attraktion mellan positiva joner (katjoner) och negativa joner (anjoner)

$$E_{P,12} = \frac{z_1 e \times z_2 e}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} = \frac{2.307 z_1 z_2}{r_{12}} \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$r_{12} \text{ i nm}$$

$$E_{P,12} = \frac{z_1 e \times z_2 e}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} = \frac{2.307 z_1 z_2}{r_{12}} \times 10^{-19} \text{ J}$$



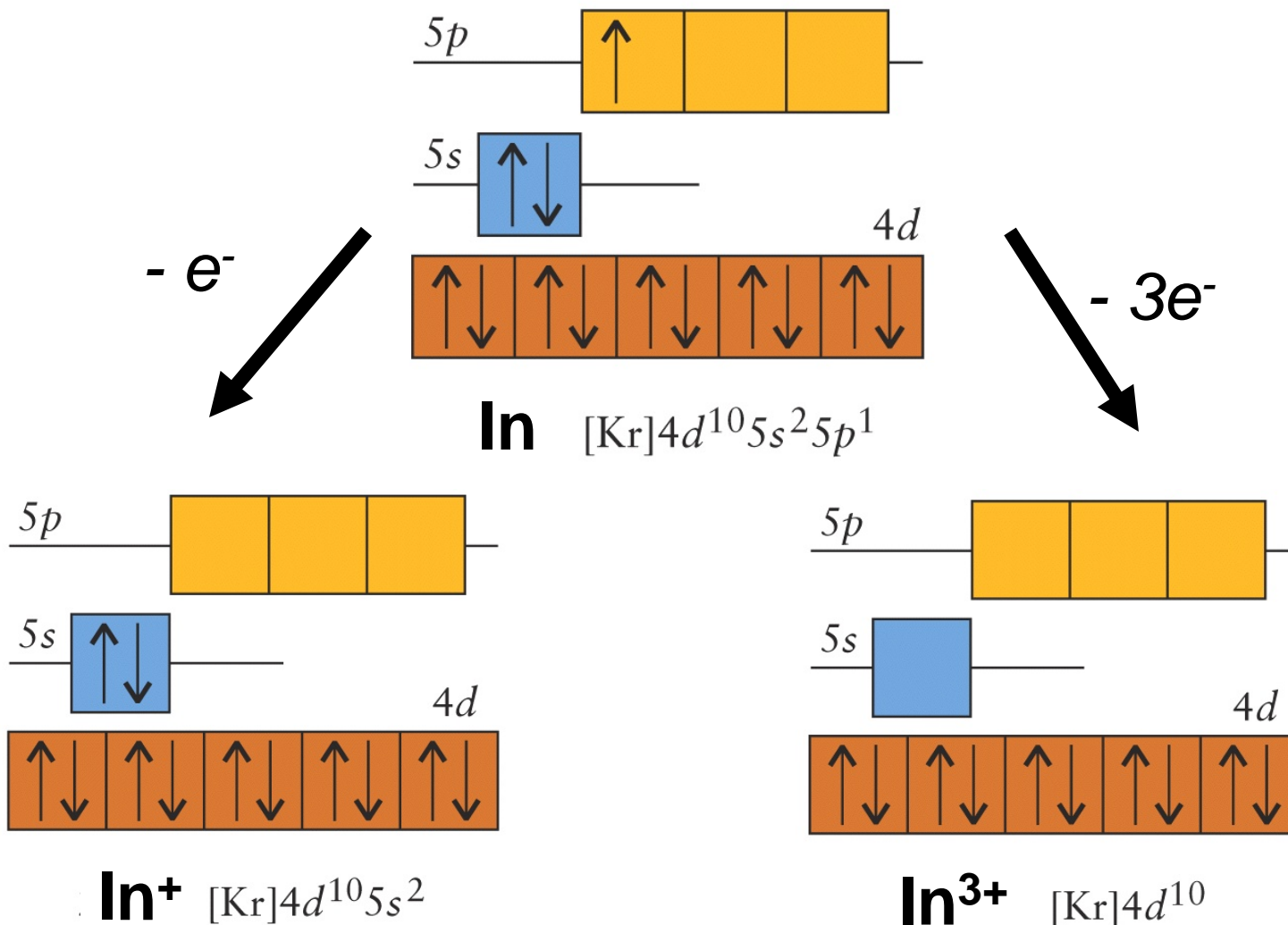
# Jonbindning

## *Vilka joner kan bildas?*

- De som får ädelgaskonfiguration
- Ädelgaskonfiguration + *d*-skal
- De som dessutom har ett "inert par"

	13/III	14/IV	15/V	16/VI
	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
	In <sup>+</sup>	Sn <sup>2+</sup>	Sb <sup>3+</sup>	
Cd	In <sup>3+</sup>	Sn <sup>4+</sup>	Sb <sup>5+</sup>	
	Tl <sup>+</sup>	Pb <sup>2+</sup>	Bi <sup>3+</sup>	
Hg	Tl <sup>3+</sup>	Pb <sup>4+</sup>	Bi <sup>5+</sup>	

# Joner "Inert par"





# Jonbindning

Övergångsmetallerna kan förlora en eller flera elektroner.

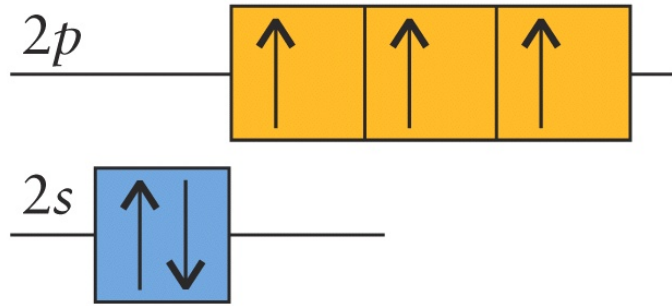
I *d*-blocket har (n-1)*d*-elektronerna nu lägre energi än (n)*s* elektronerna. (T.ex. 3*d* har lägre energi än 4*s* för Fe)

Övergångsmetallkationerna  $M^{k+}$  får därför alltid konfigurationen [ädelgas](n-1) $d^m(n)s^0$

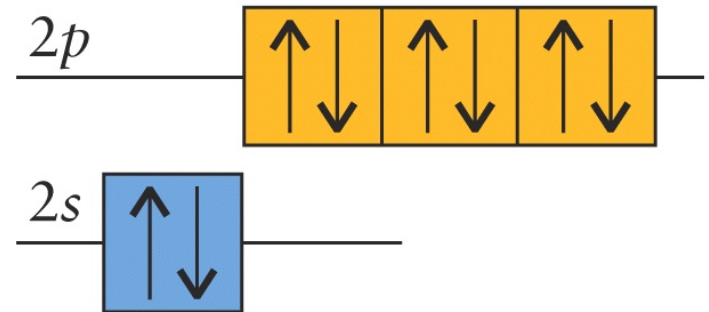
Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg



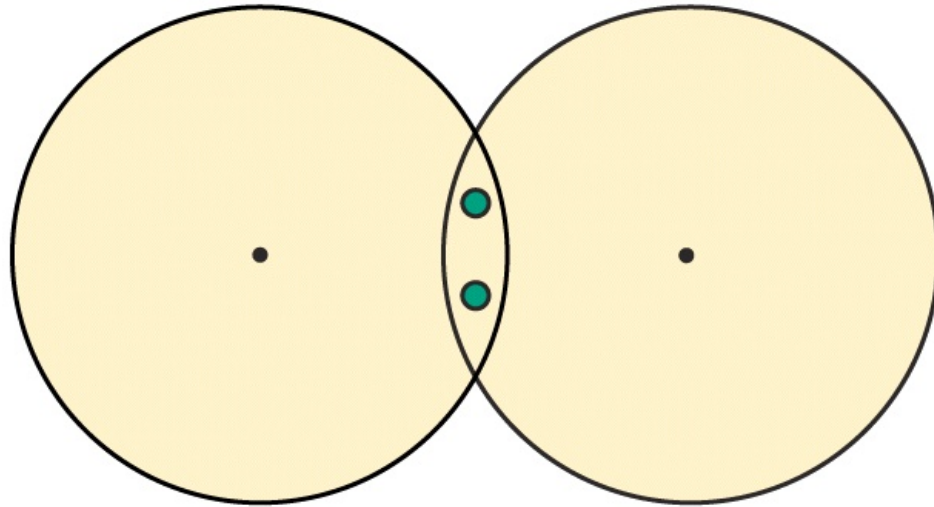
# Nitridjon - Elektronkonfiguration



+ 3e<sup>-</sup>



# Lewisstrukturer och kovalent bindning



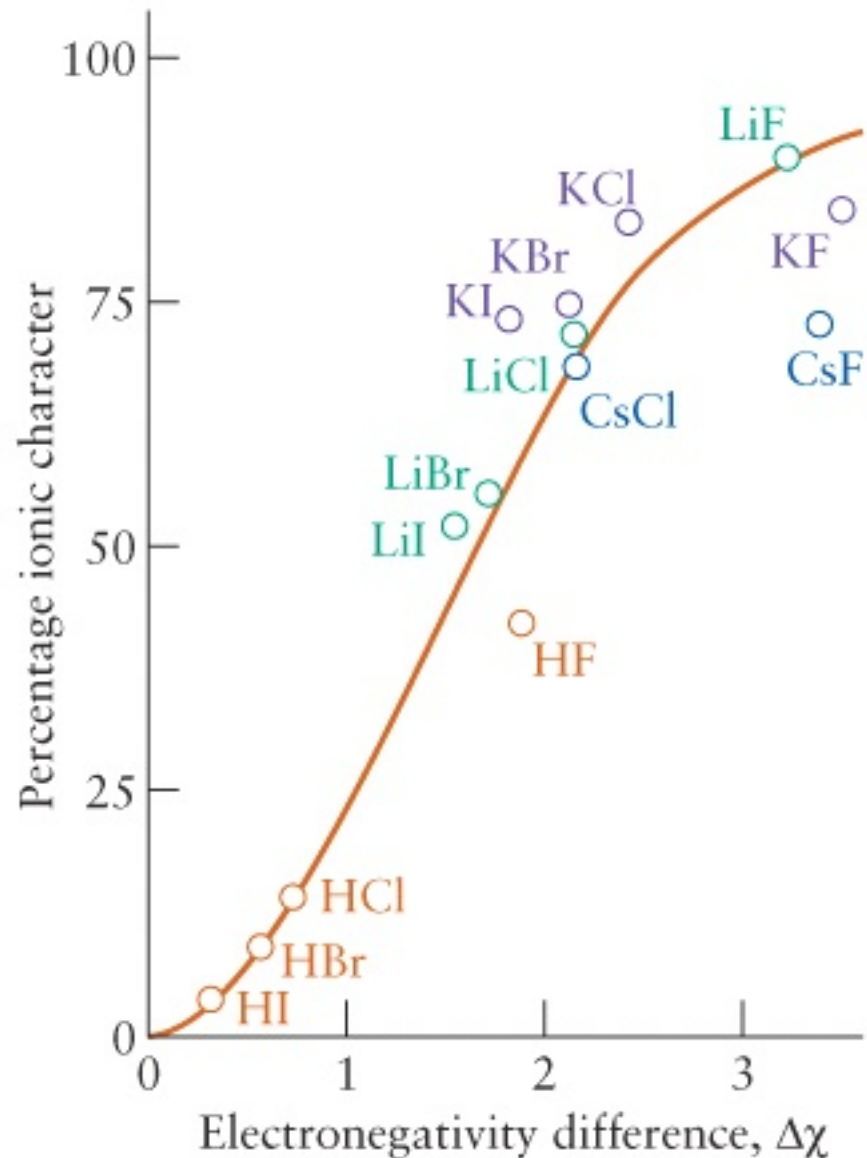
Shared electron pair

Ett delat elektronpar - elektronparbindning

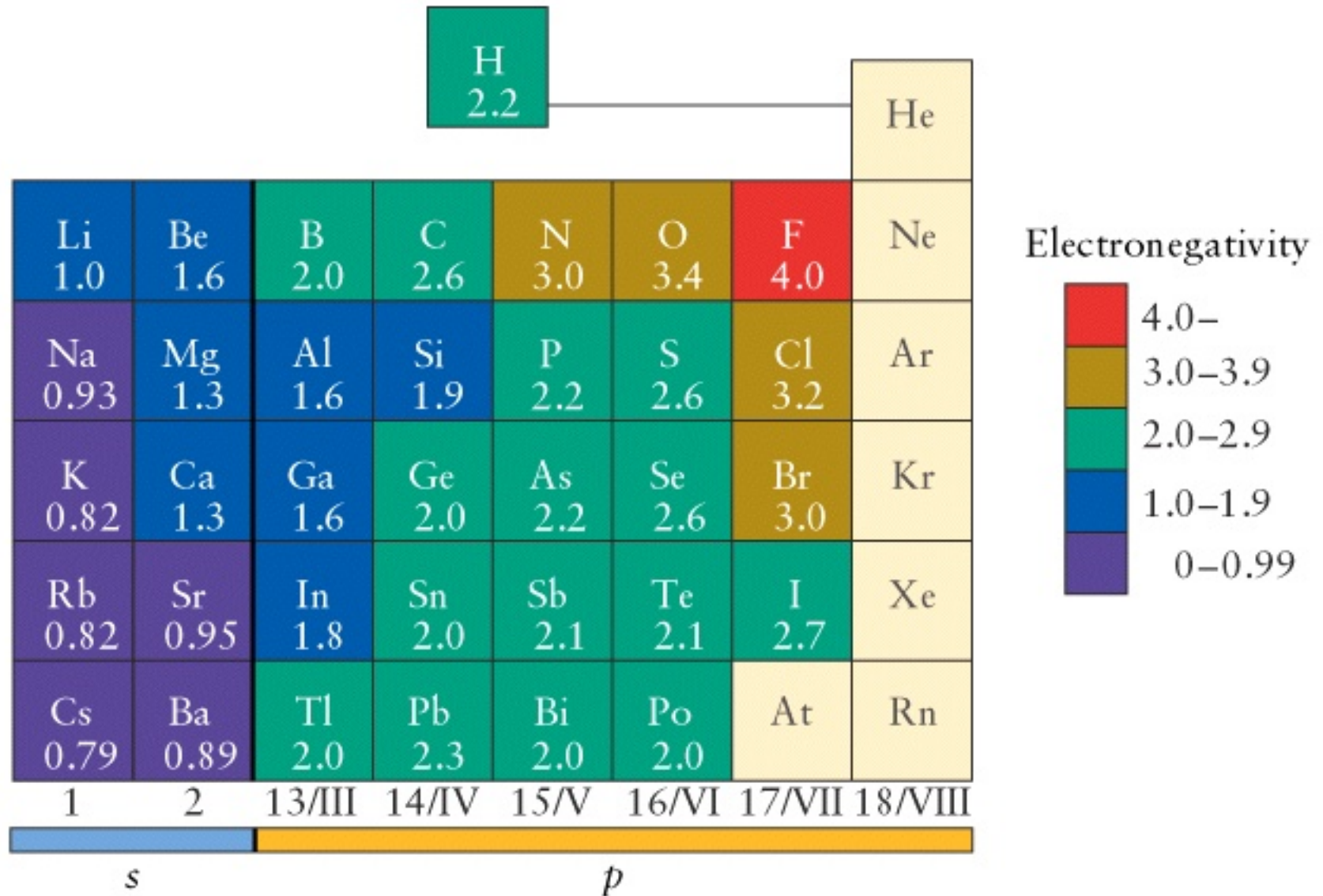
# När delas elektroner och när får vi joner?

*Tumregel:*

jonbindningsinslaget är  
dominerande när  
skillnaden i  
elektronegativitet är  $>2$   
( $\Delta\chi > 2$ )



# Elektronegativitet



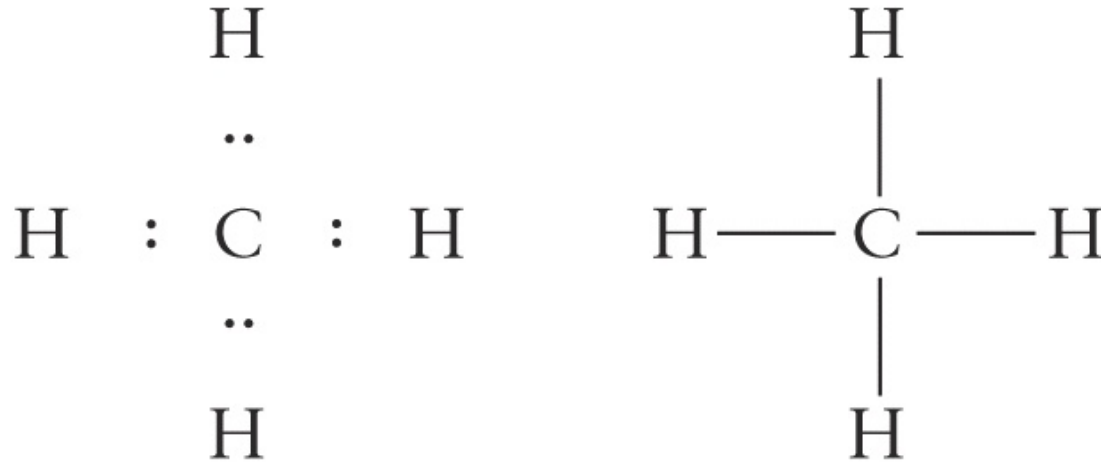
# Elektronegativitet

Linus Pauling beräknade elektronegativiteter från bindningsenergies

Men de kan också fås från joniseringsenergies och elektronaffiniteter. Kan alltså i princip beräknas med hjälp av elektronkonfigurationerna och det periodiska systemet

# Lewisstruktur

**Elektronparbindningar tecknas med streck**



Methane, CH<sub>4</sub>

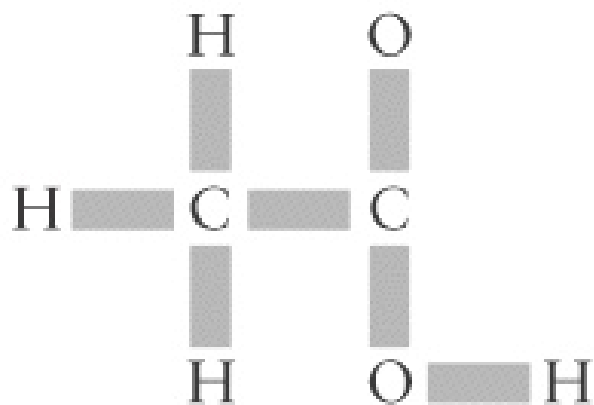


# Hur man ritar Lewisstrukturer

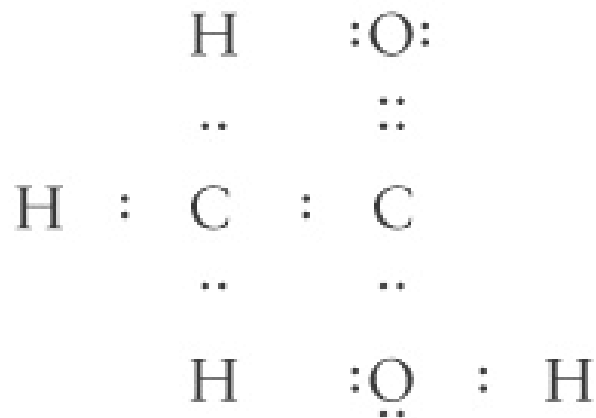
- Räkna antalet valenselektroner. Glöm inte att ta hänsyn till ev. laddning. Dela med två för att få antal elektronpar.
- Rita ut atomerna i den ordning de sitter ihop. Om du inte vet, gör ett rimligt antagande.
- Bind ihop atomerna med elektronpar.
- Gör kompletta oktetter för alla atomer genom att placera ut de återstående elektronparen.
- Tar elektronerna slut, gör dubbelbindningar för att uppnå 8 elektroner runt varje atom.

**Rita Lewisstrukturen för ättiksyra !!**

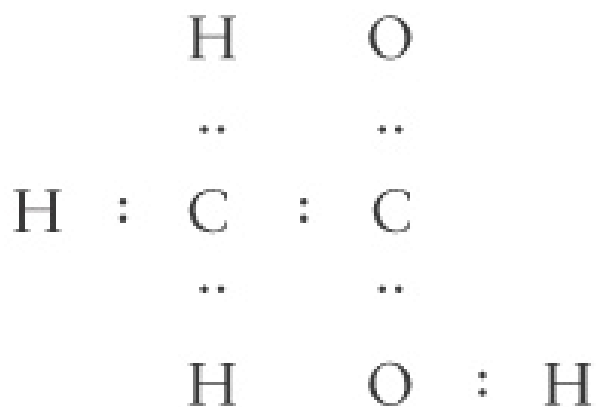
# Lewisstrukturen för ättiksyra



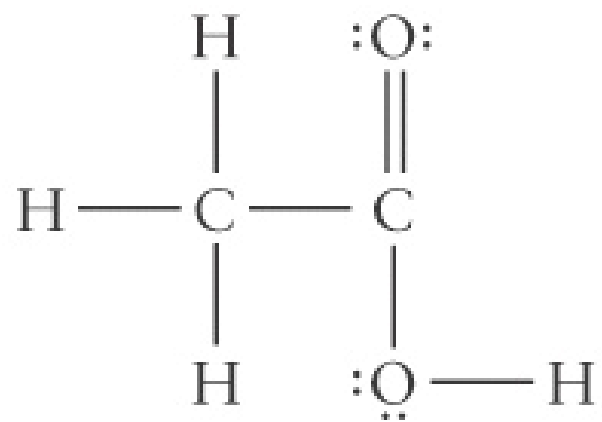
(a)



(c)

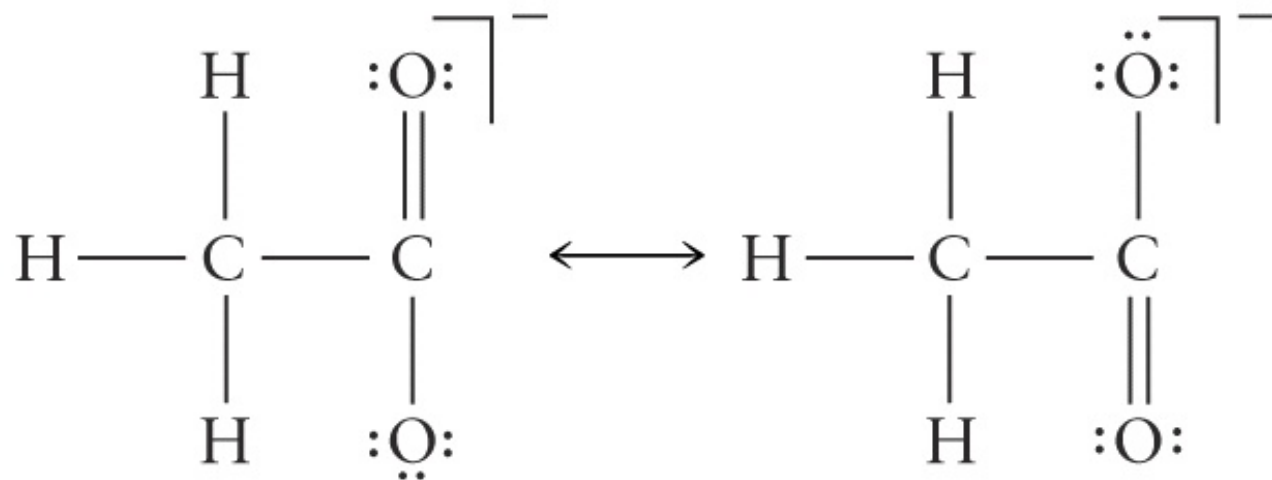


(b)



(d)

# Hur ser Lewisstrukturen ut för ättiksyraanjonen?



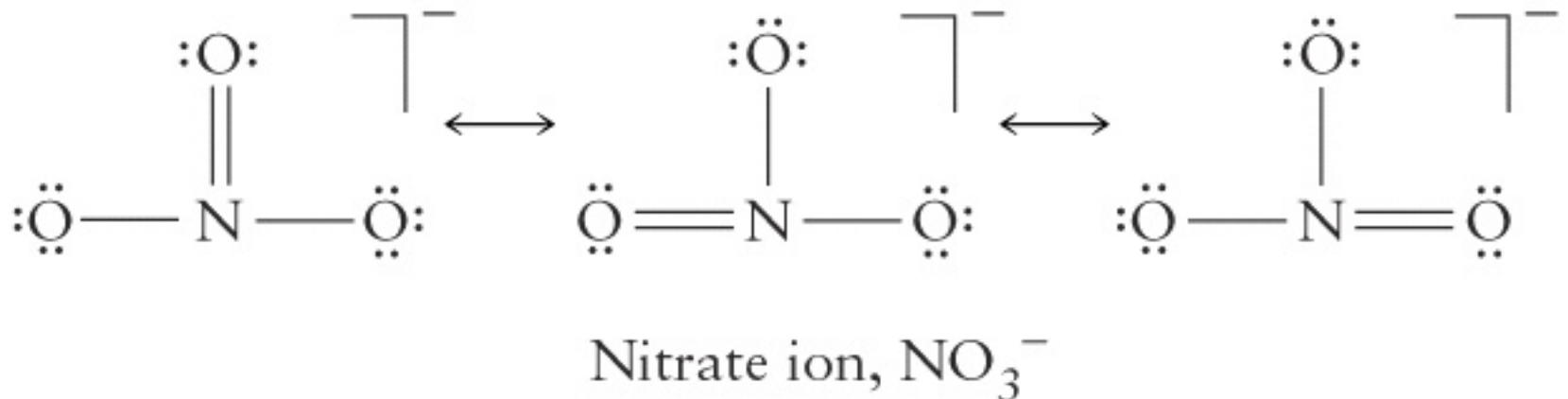
Acetate ion,  $\text{CH}_3\text{CO}_2^-$

Resonansstrukturer!

Ättiksyraanjonen (acetatjonen) kan sägas vara en blandning av dessa två Lewisstrukturer

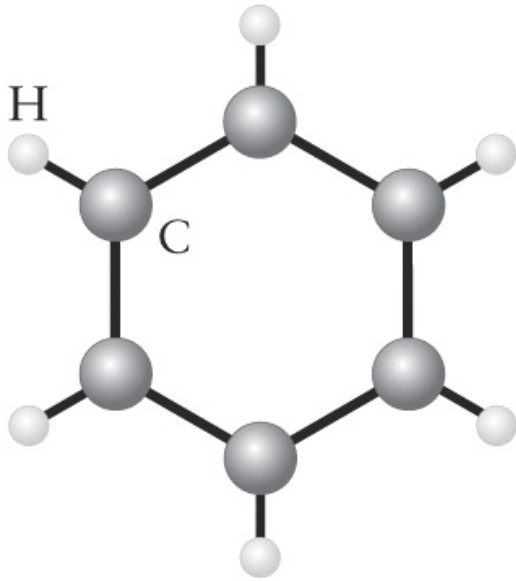
# Resonansstrukturer

Resonansstrukturer innebär att en enda Lewisstruktur inte ger en rättvisande bild av molekylen

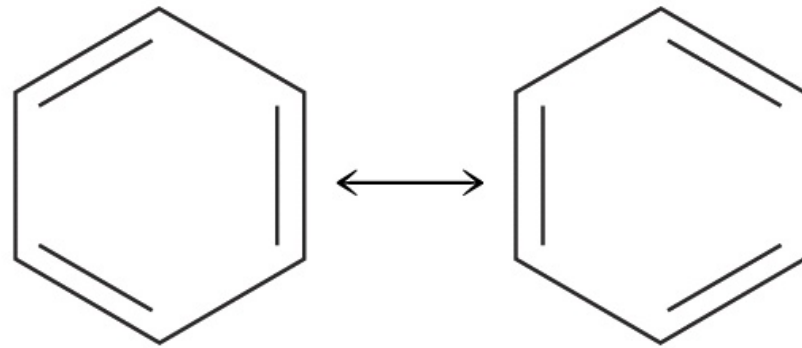


Nitratjonen t.ex. har tre lika långa N-O bindningar

# Resonansstrukturer



Benzene,  $C_6H_6$



Benzene resonance structure

Strukturer med flera resonansformer är mer stabila (lägre energi)

# Formell laddning

Formell laddning (på viss atom) =  $V - (L + 0.5S)$

Där

$V$  = antal valenselektroner på den fria atomen

$L$  = antal fria elektroner

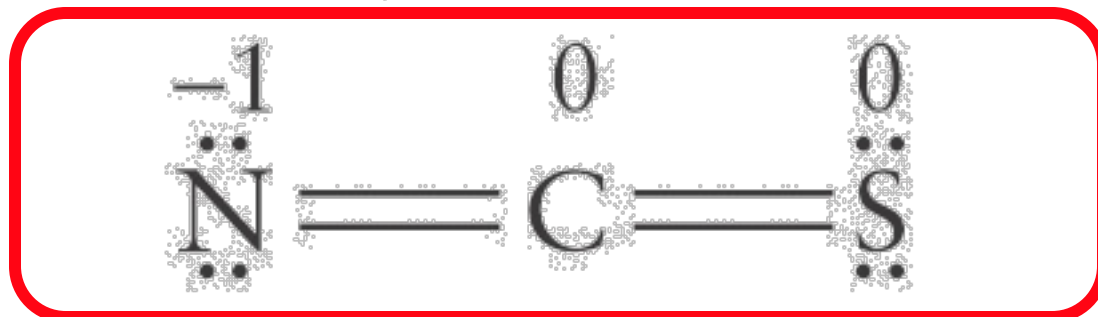
$S$  = antal delade elektroner

Den mest stabila strukturen (lägst energi) ges av den Lewisstruktur som har formell laddning närmast noll på alla atomer

**Hur ser tiocyanatjonen ut?**

**SCN<sup>-</sup>, CNS<sup>-</sup> eller CSN<sup>-</sup>?**

# Hur ser tiocyanatjonen ut?



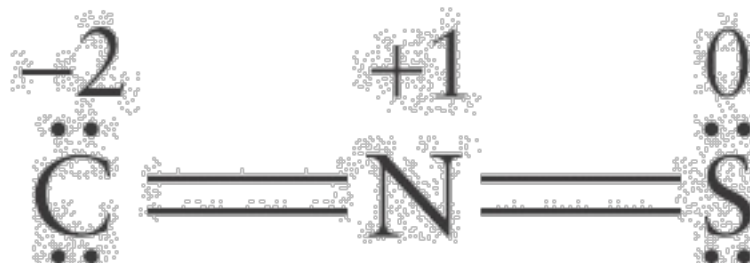
Valenselektroner

N: 5 st

C: 4 st

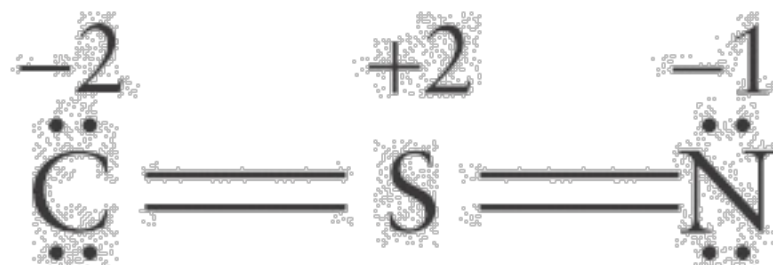
S: 6 st

Ladd: 1 st



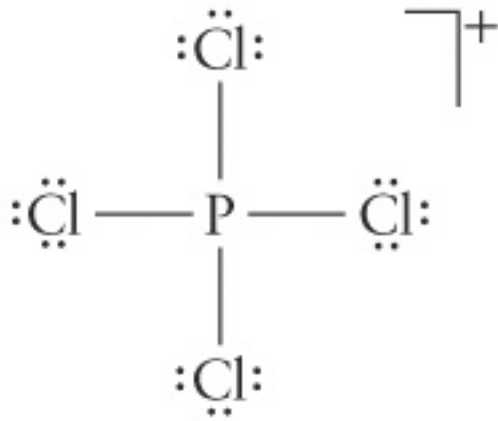
16 st

(totalt 8 elektronpar)

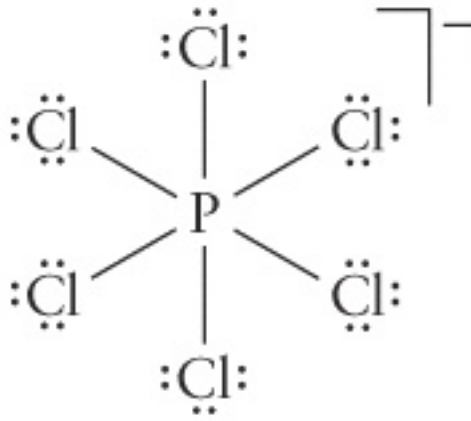


Bäst med negativa laddningar på mest elektronegativa atomerna

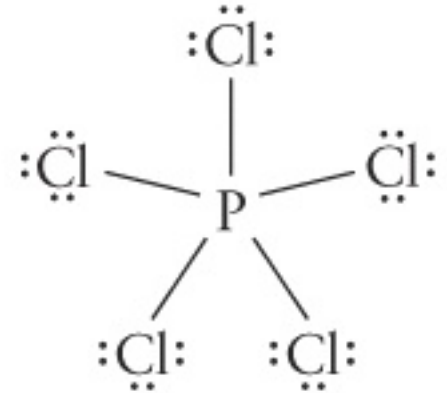
Problem med oktettregeln ?  
Lewisstrukturer för  $\text{PCl}_4^+$ ,  $\text{PCl}_6^-$  och  $\text{PCl}_5$  ?



(a)  $\text{PCl}_4^+$



(b)  $\text{PCl}_6^-$



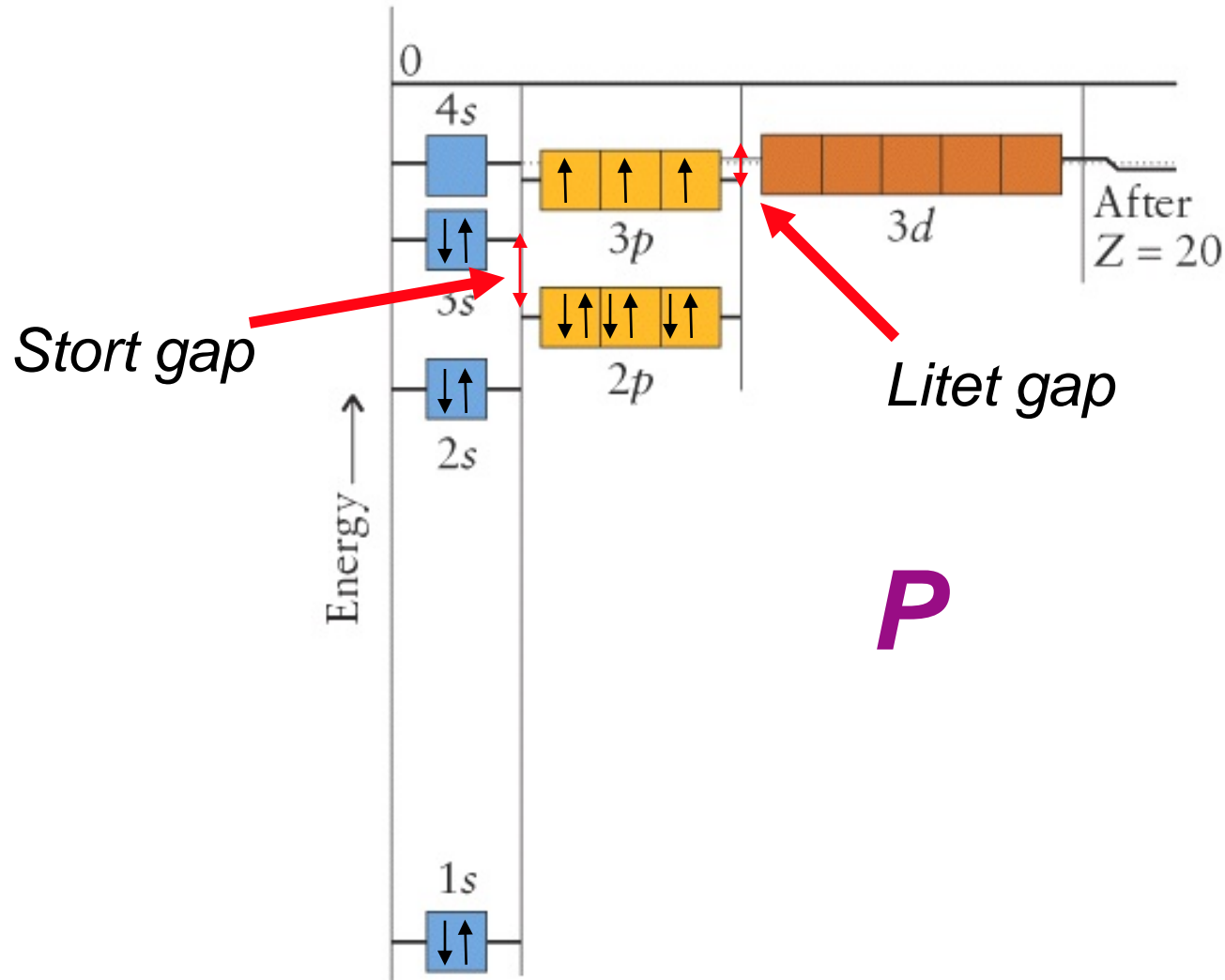
(c)  $\text{PCl}_5$

P måste få ha mer än 8 elektroner, hur ?



# Problem med oktettregeln ?

Fyll på med *d*-elektroner om det finns lediga platser!



# Hur mycket energi som behövs för att bryta en bindning

**TABLE 2.2** Average Bond Dissociation Energies,  $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

Bond	Average bond dissociation energy	Bond	Average bond dissociation energy
C—H	412	C—I	238
C—C	348	N—H	388
C=C	612	N—N	163
C $\angle$ C*	518	N=N	409
C $\equiv$ C	837	N—O	210
C—O	360	N=O	630
C=O	743	N—F	195
C—N	305	N—Cl	381
C—F	484	O—H	463
C—Cl	338	O—O	157
C—Br	276		

\* In benzene.

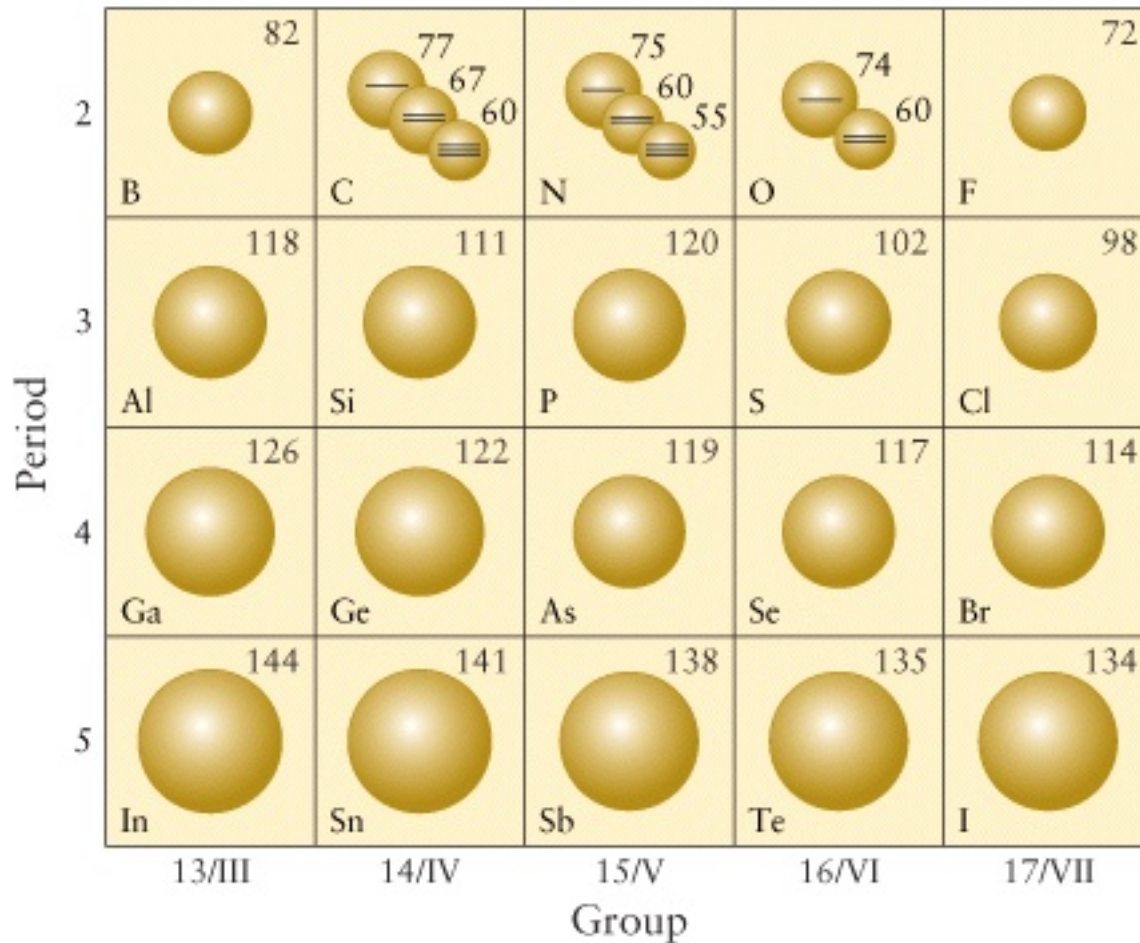
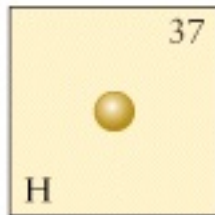
# Kortare bindning = starkare ?

**TABLE 2.3** Average and Actual Bond Lengths

Bond	Average bond length, pm	Molecule Molecule	Bond length, pm
C—H	109	H <sub>2</sub>	74
C—C	154	N <sub>2</sub>	110
C=C	134	O <sub>2</sub>	121
C <sup>⌊</sup> C*	139	F <sub>2</sub>	142
C≡C	120	Cl <sub>2</sub>	199
C—O	143	Br <sub>2</sub>	228
C=O	112	I <sub>2</sub>	268
O—H	96		
N—H	101		
N—O	140		
N=O	120		

\* In benzene.

# Kovalenta atomradier



# Bindningsstyrka

Ökar med bindningsordningen (enkel, dubbel osv).

Minskar med ökat antal fria elektronpar på grannatomerna

Minskar när atomradierna ökar.

Resonans stabiliserar molekyler, dvs den totala bindningsstyrkan ökar