

# Kemisk bindning II, A&J kap. 3

Varför är vattenmolekylen böjd medan koldioxid är rak?  
Kan en stabil  $\text{He}_2$  molekyl bildas?

- Lewisstrukturer – Beskriver valenselektronerna i en molekyl (Förra föreläsningen!)
- VSEPR (valence shell electron pair repulsion) – Beskriver geometrin hos molekyler (Idag!)
- Hybridorbitaler – Linjär kombination av atomorbitaler (från samma atom) genererar s.k. hybridorbitaler vilka beskriver en molekyls geometri (Idag!)
- MOT - (Molecular Orbital Theory) – Atomorbitaler från olika atomer bildar s.k. molekylorbitaler. Beskriver en molekyls bindingsenergies och stabilitet (Idag!)

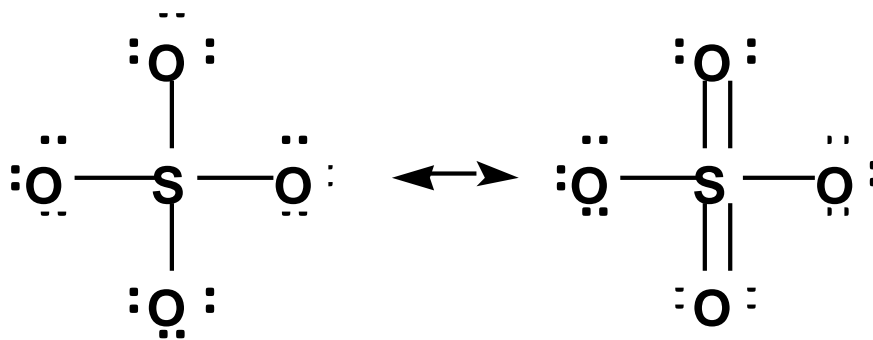
# VSEPR modellen

## Valence Shell Electron Pair Repulsion

Bygger på att minimerar den elektrostatiska repulsionen mellan negativt laddade elektronpar och bindningar (som ju också är negativt laddade)

⇒ Placera molekylens elektronpar och bindningar så långt ifrån varandra som möjligt!!

I VSEPR modellen räknas en dubbelbindning på samma sätt som en enkelbindning, vilket ger samma geometri för ex sulfatjonens resonansformer:

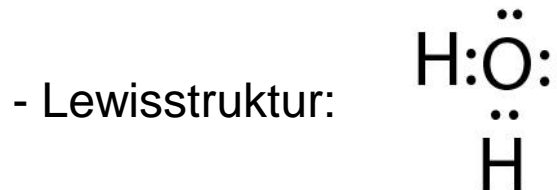


# VSEPR modellen

## Valence Shell Electron Pair Repulsion

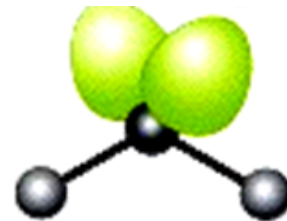
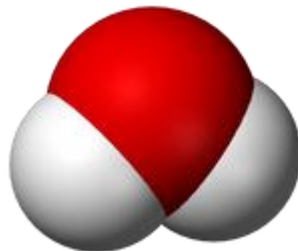
OBS! Viktigt att skilja på VSEPR-geometri och molekylgeometri!!

Ex. H<sub>2</sub>O



- Enligt VSEPR: 2 fria elektronparen 2 bindningarna  $\Rightarrow$  Tetraeder  
(Idealt en tetraeder om de "stöter bort" varandra lika mycket)

- Molekylgeometri: Böjd



# Geometrier

## Molekylgeometri

Steric No.	Basic Geometry 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs
2	 linjär			
3	 plantrigonal	 böjd		
4	 tetraeder	 trigonal pyramid	 böjd	
5	 trigonal bipyramid	 gungbräda	 T-formad	 linjär
6	 oktaeder	 plankvadratisk pyramid	 plankvadrat	
7	 pentagonal bipyramid	 pentagonal pyramid		

VSEPR-geometri

Linjär

Plantrigonal

Tetraeder

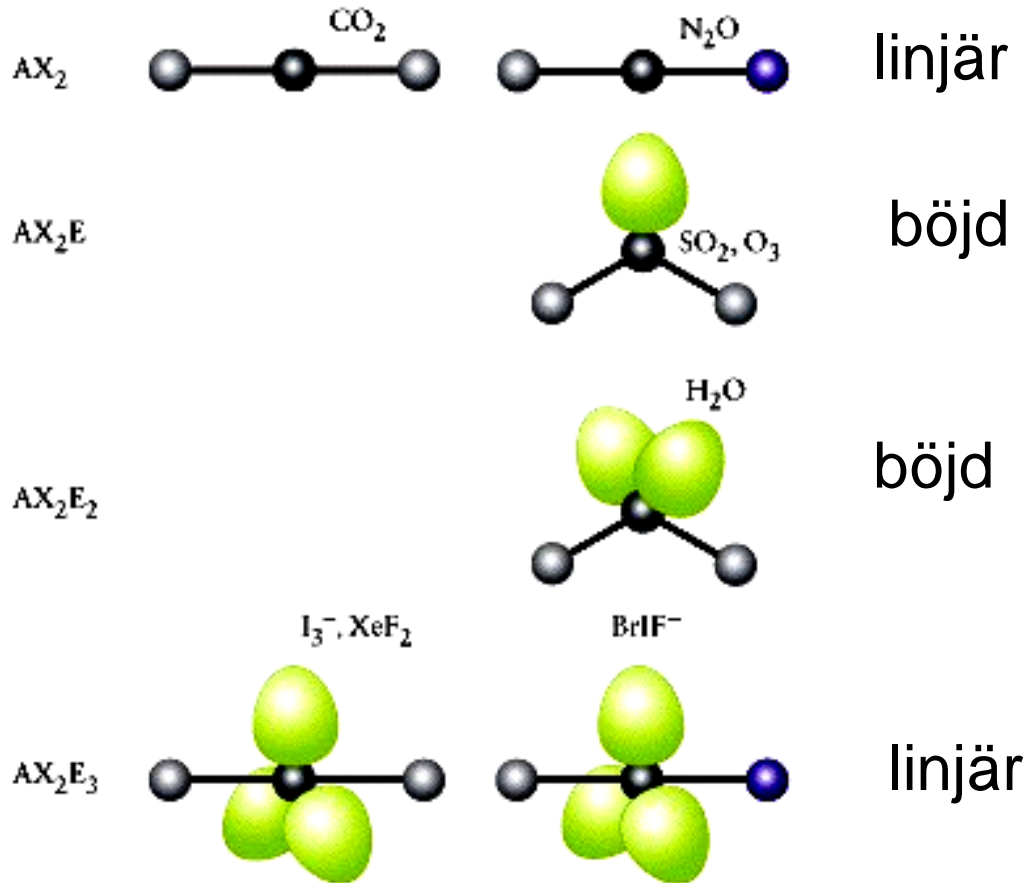
Trigonal bipyramid

Oktaeder

Pentagonal bipyramid

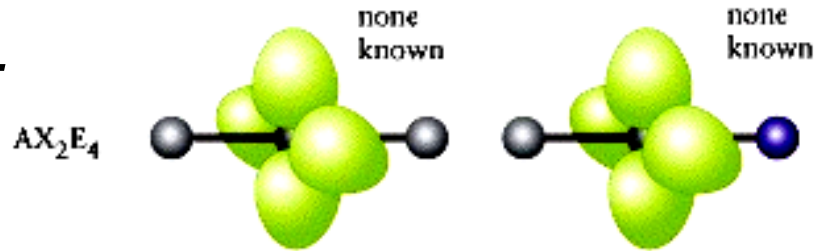
# Geometrier

*Ex.*

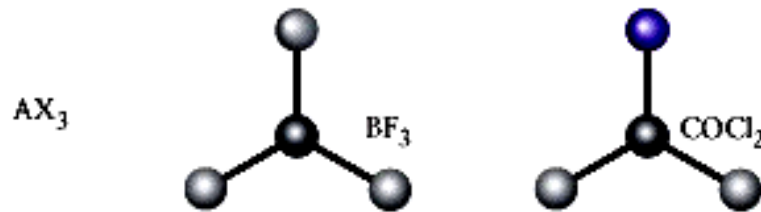


# Geometrier

*Ex.*



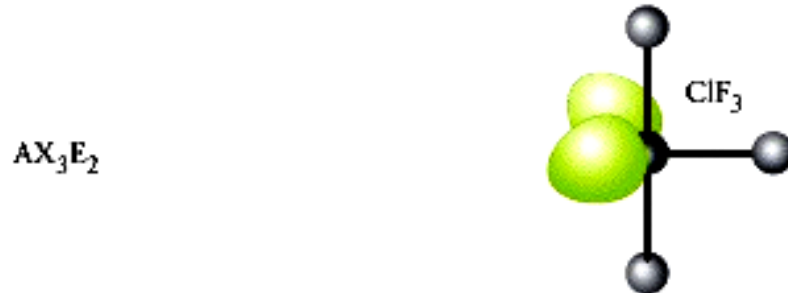
*linjär*



*plantrigonal*



*trigonal  
pyramid*

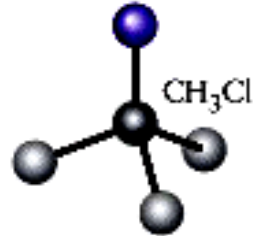
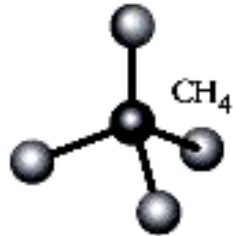


*T-formad*

# Geometrier

*Ex.*

$AX_4$



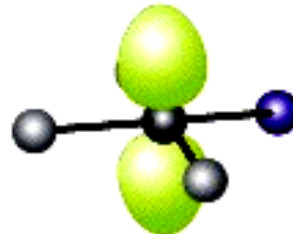
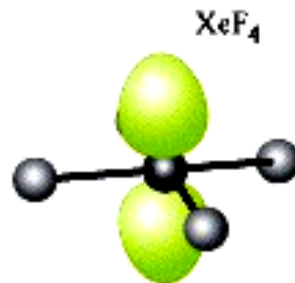
tetraeder

$AX_4E$



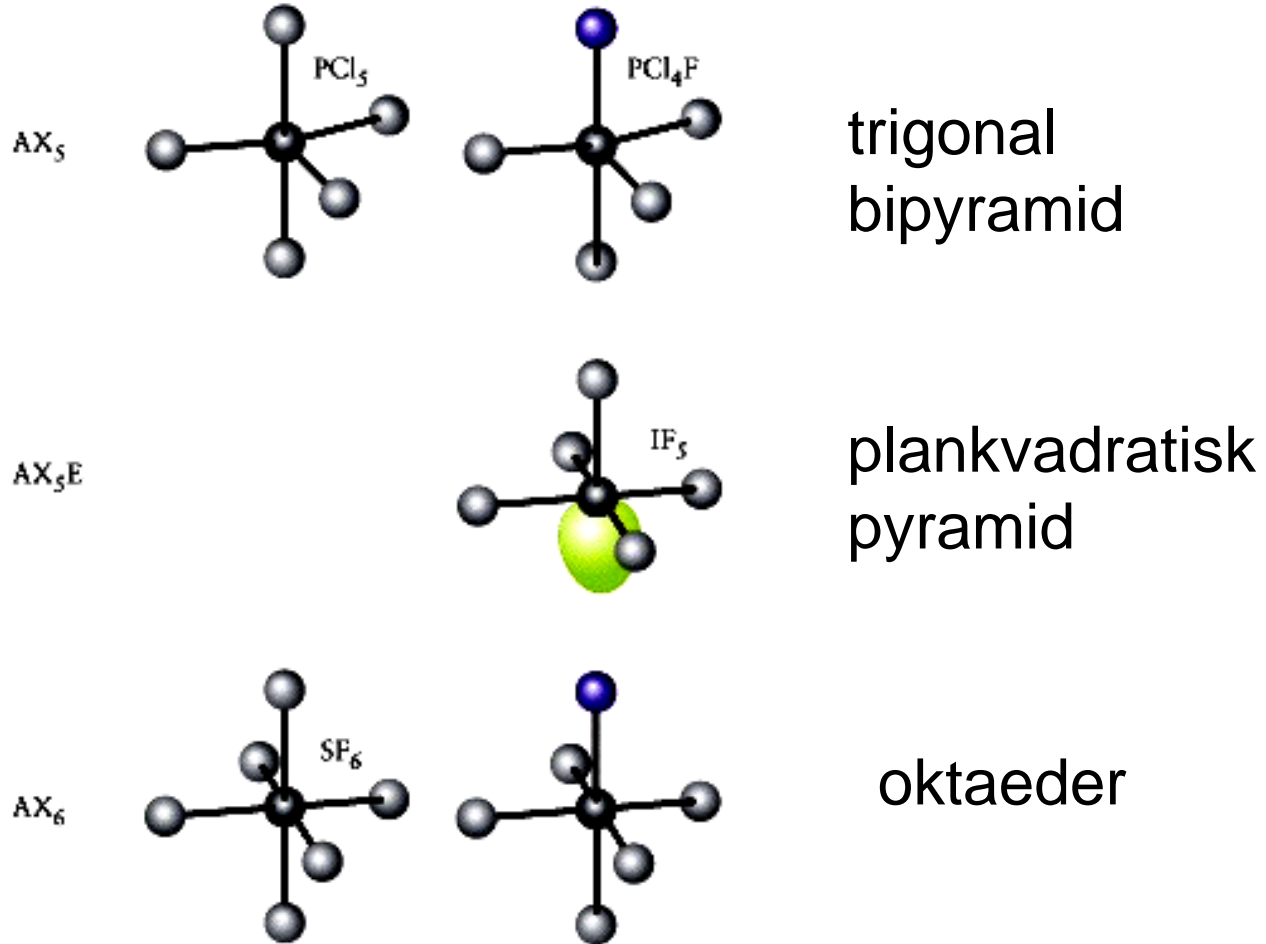
gungbräda,  
"see-saw"

$AX_4E_2$



plankvadratisk

# Geometrier





# Hur ser molekylgeometrin ut för $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$ i tre dimensioner?

Börja med Lewisstrukturen  
Antal valenselektroner blir:

$$\text{C} \Rightarrow 2 \cdot 4 = 8$$

$$\text{S} \Rightarrow 1 \cdot 6 = 6$$

$$\text{O} \Rightarrow 1 \cdot 6 = 6$$

$$\text{H} \Rightarrow 6 \cdot 1 = 6$$

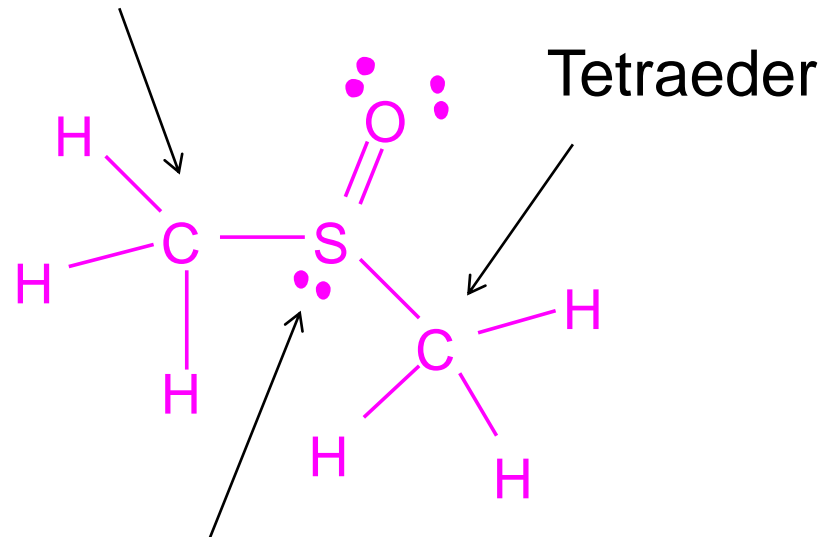
Summa: 26  $\Rightarrow$  13 par

**9 bindande par**

**4 fria par**

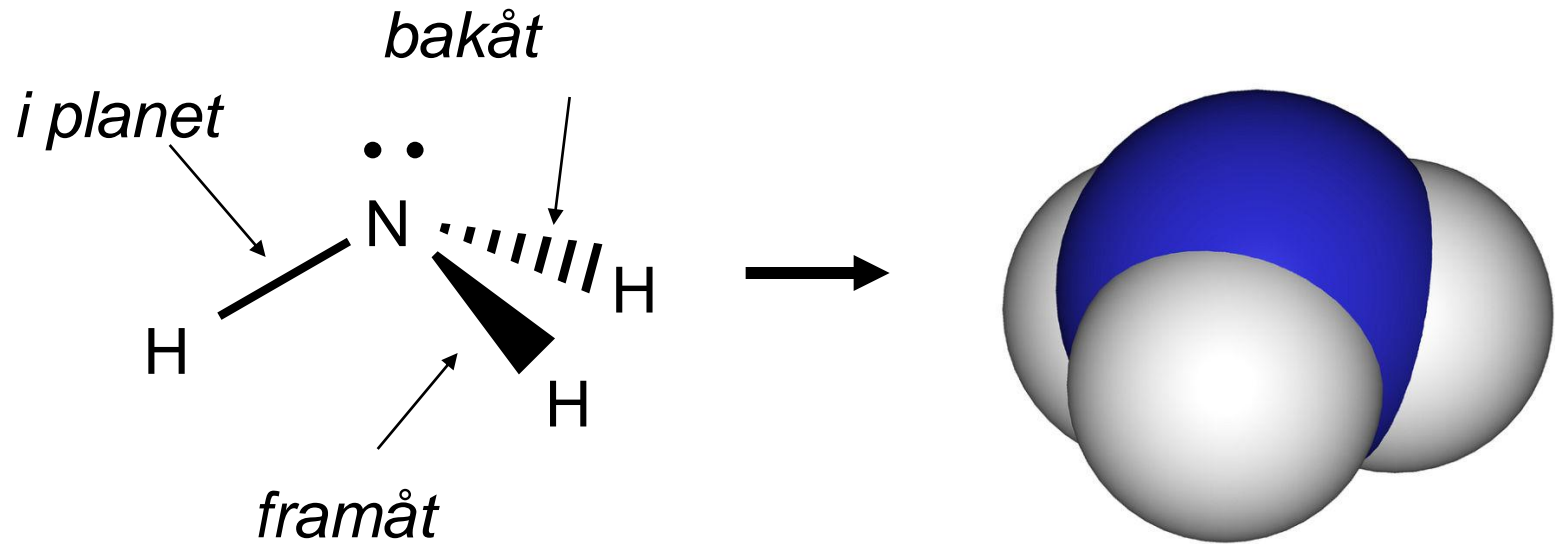
(Att det är  $\text{S}=\text{O}$  och inte  $\text{S}-\text{O}$   
avgörs med formell laddning!  
Testa själv!!)

Tetraeder



Trigonal pyramid

# Repulsion och bindningsvinklar



Repulsion mellan  
fria elektronpar

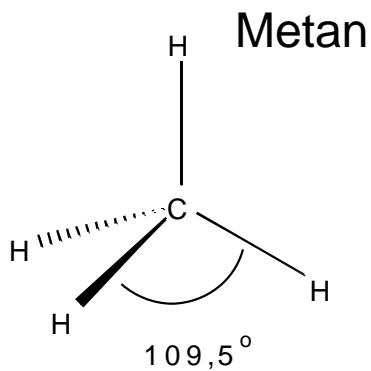
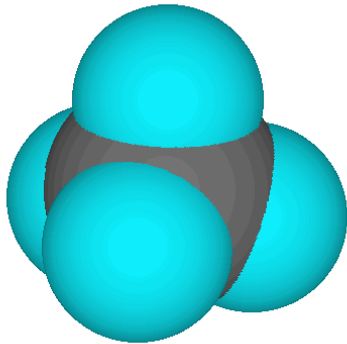
>

Repulsion mellan  
bindande och fria  
elektronpar

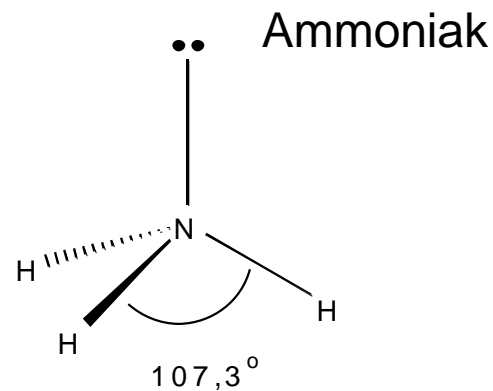
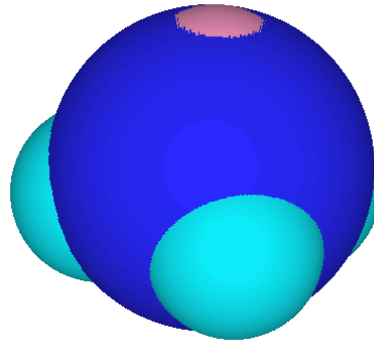
>

Repulsion mellan  
bindande elektronpar  
(bindningar)

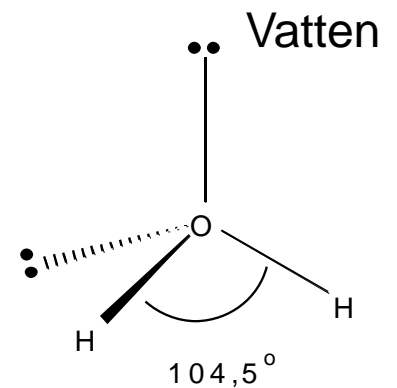
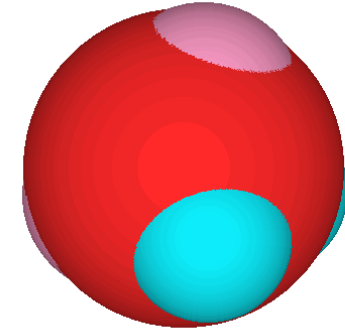
# Repulsion och bindningsvinklar



Tetraeder  
109,5



Ett fritt elektronpar  
trycker ihop  
bindningsvinkel till 107,3



Två fria elektronparen  
trycker ihop  
bindningsvinkel till 104,5

# Hybridorbitaler

Enligt VSEPR är metan tetraediskt men kan vi på något sätt få denna geometri om vi utgår från atomorbitaler (alltså från Schrödingerekvationen)?

Linjärkombination av kolets orbitaler:  
 $2s$  och  $2p_x$   $2p_y$   $2p_z$  (dessa har snarlika energier)  $\Rightarrow$  4st hybridorbitaler med tetraedrisk geometri!

Men hur??

# Hybridorbitaler

$$\phi_1 = \frac{1}{2} [(s) + (p_x) + (p_y) + (p_z)]$$

$$\phi_2 = \frac{1}{2} [(s) + (p_x) - (p_y) - (p_z)]$$

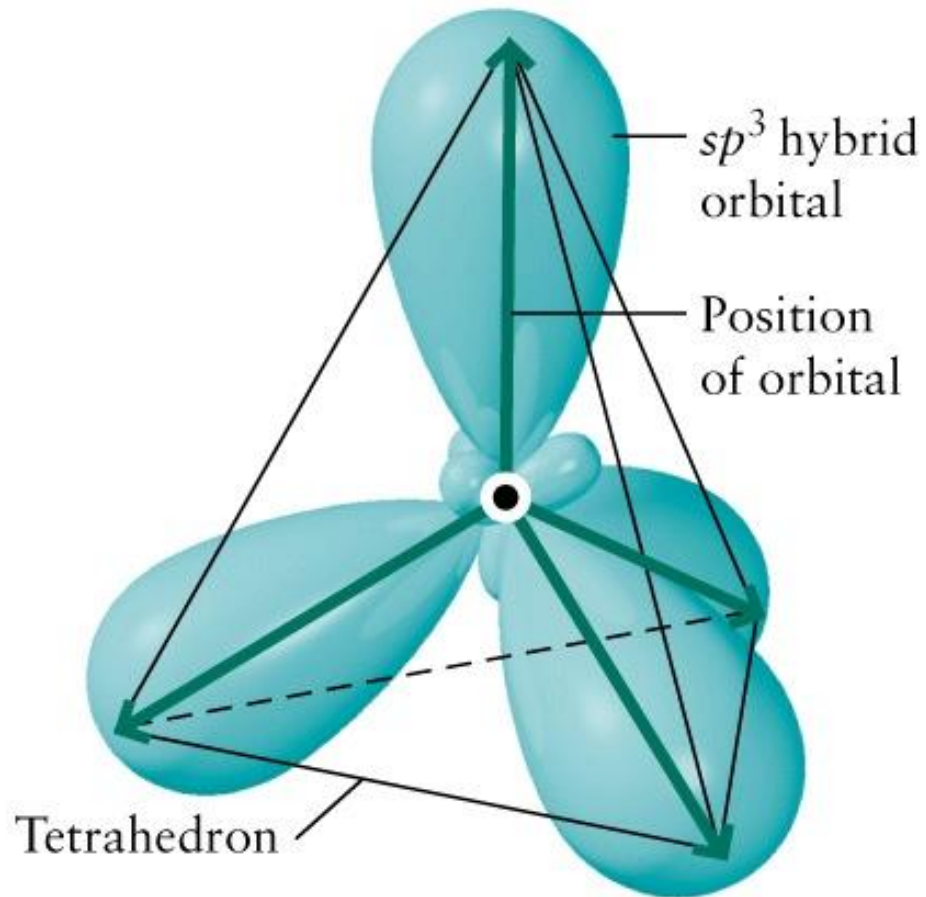
$$\phi_3 = \frac{1}{2} [(s) - (p_x) + (p_y) - (p_z)]$$

$$\phi_4 = \frac{1}{2} [(s) - (p_x) - (p_y) + (p_z)]$$

Detta ger 4 st hybridorbitaler som kallas  $sp^3$ -hybridorbitaler ( $\phi^2$  beskriver elektrontätheten)

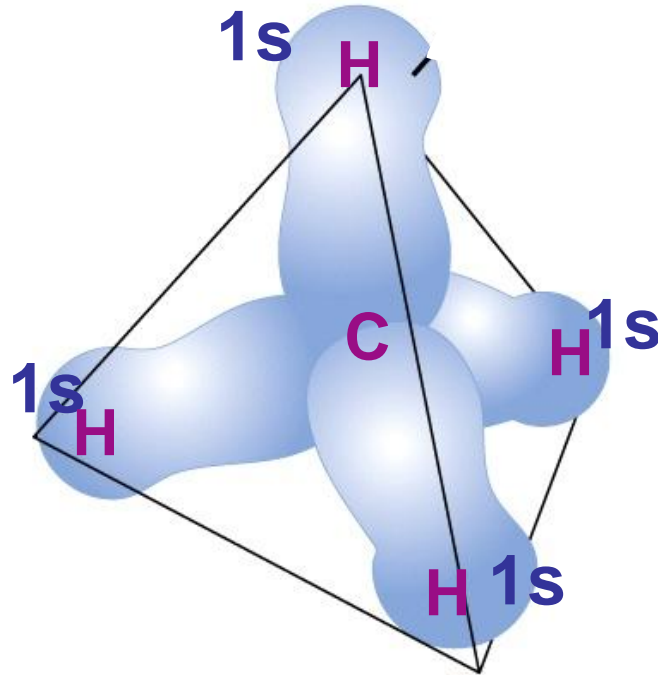
Det geometriska arrangemanget av  $sp^3$ -hybridorbitalerna är tetraedriskt

# $sp^3$ -hybridorbitaler



(c)

# $sp^3$ -hybridorbitaler och metanmolekylen



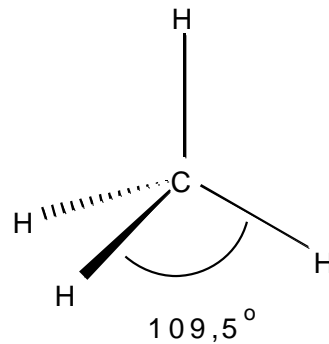
Vätets 1s-orbital överlappar med kolets  $sp^3$ -hybridorbital och bildar en bindning

# Tetraedisk geometri - $sp^3$ -hybridisering

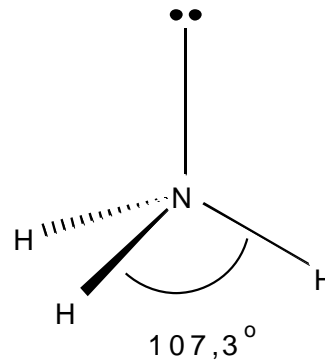
Tetraedisk geometri m.a.p. fria och bindande elektronpar kan beskriva med  $sp^3$ -hybridorbitaler

Ex

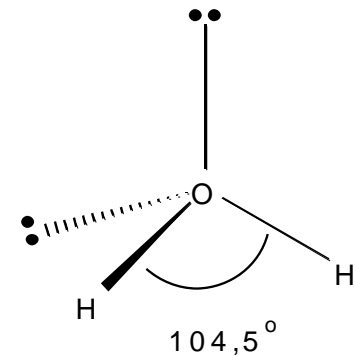
Metan



Ammoniak



Vatten



OBS! Molekylgeometri:

Tetraeder

Trigonal pyramid

Böjd

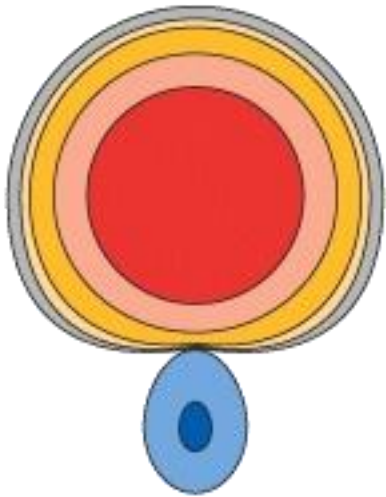


# Hybridisering för några vanliga geometrier

Analoga linjärkombinationer kan göras för andra geometrier och det resulterar i nedanstående hybridiseringar

Elektron arrangemang	Hybridisering av centralatomen	Antal hybridorbitaler (=antal använda atomorbitaler)
<i>Linjär</i>	$sp$	2
<i>Plan trigonal</i>	$sp^2$	3
<i>Tetraedrisk</i>	$sp^3$	4
<i>Trigonal bipyramid</i>	$sp^3d$	5
<i>Oktaedrisk</i>	$sp^3d^2$	6

# $sp^2$ och $sp$ hybridorbitaler

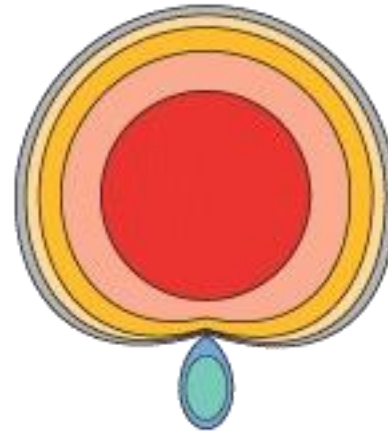


(a)

$\Psi$



**3 st.  $sp^2$   $\Psi^2$**



(b)

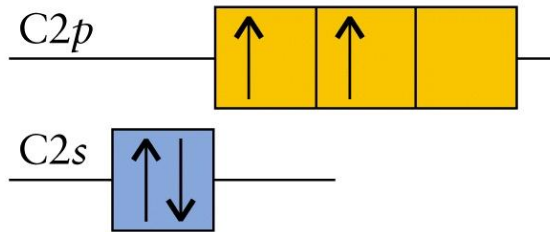
$\Psi$



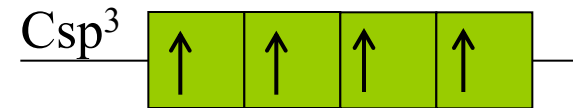
**2 st.  $sp$   $\Psi^2$**

# Hybridiseringar av kolatomen

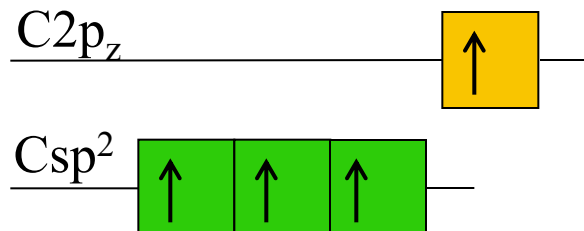
## Atomärt C:



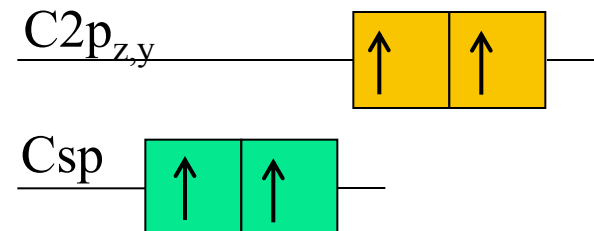
## C i tetraedrisk geometri:



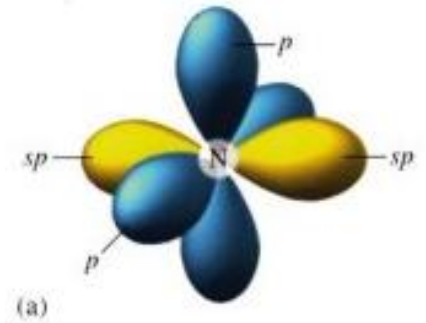
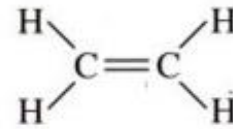
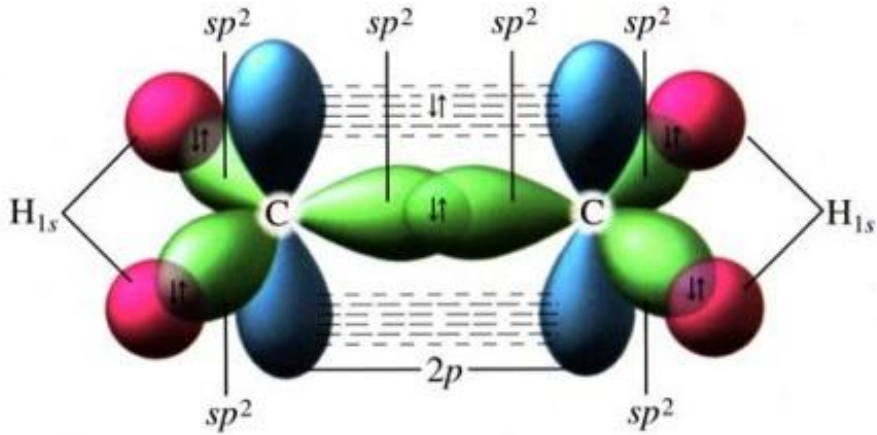
## C i plantrigonal geometri:



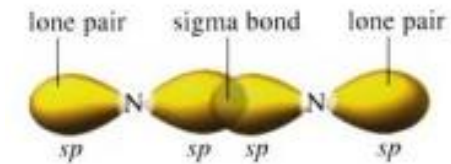
## C i linjär geometri:



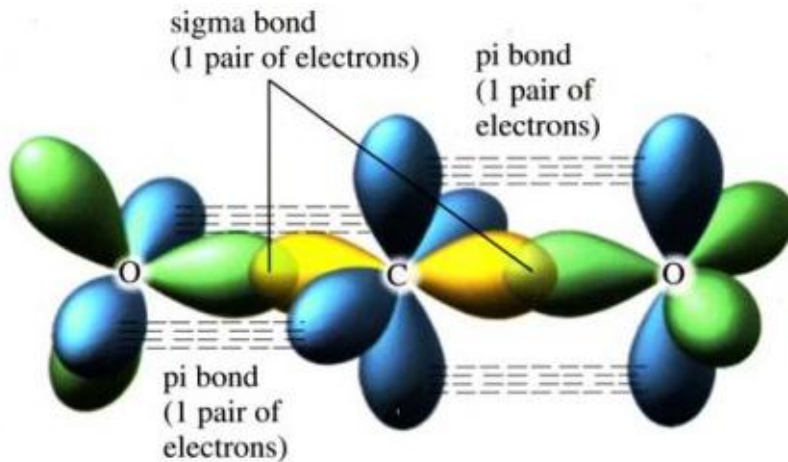
# Hybridiseringar



(a)



(b)



# Molekylorbitaler

1. Bildandet av molekylorbitaler kan ses som ett överlapp mellan enskilda atomorbitaler.
2. För att molekylorbitaler skall bildas måste de ursprungliga atomorbitalerna överlappa (ha snarlik energi) .
3. Geometrin hos atomorbitalerna måste stämma för att en kombination ska vara möjlig.
4. Antalet erhållna molekylorbitaler är lika med antalet kombinerade atomorbitaler.
5. I en molekyl existerar inte atomorbitalerna utan endast molekylorbitaler (gäller för valenselektronernas AO).

# Molekylorbitaler

6. Varje molekylorbital kan hålla 2 st elektroner som har motsatt spinn (samma som för AO).
7. Kvadraten på molekylorbitalerna vågfunktion representerar elektrontätheten (samma som för AO).
8. Beteckningarna för molekylorbitalerna liknar den för atomorbitaler och elektronkonfigurationen skrivs på liknade sätt.
9. Bindningarna beskrivs som  $\sigma$  (sigma) eller  $\pi$  (pi) (samma som tidigare)

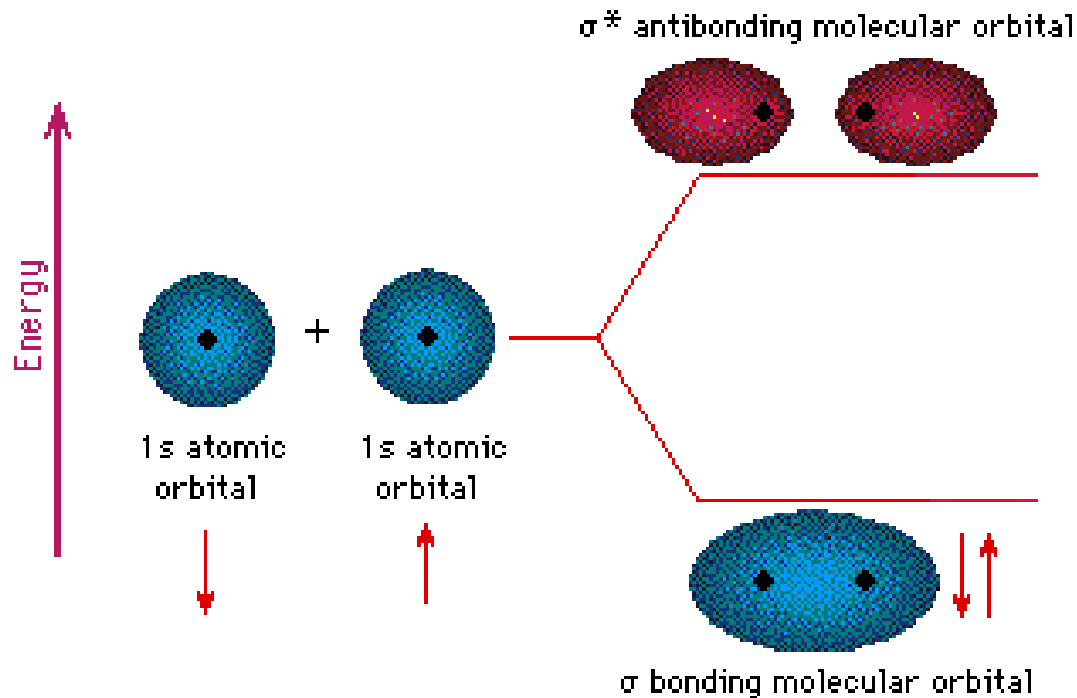
$\sigma$  (sigma): Plan genom båda atomkärnorna där sannolikheten att finna elektron/elektroner är  $> 0$ .

$\pi$  (pi): Plan genom båda atomkärnorna där sannolikheten att finna elektron/elektroner är  $= 0$ .

# Molekylorbitaler

10. Bindningarna kan vara bindande eller antibindande (och även icke-bindande). Antibindande beskrivs med en asterisk  $\sigma^*$  eller  $\pi^*$ .
11. För bindande orbitaler gäller generellt att elektronerna befinner sig närmare atomkärnorna

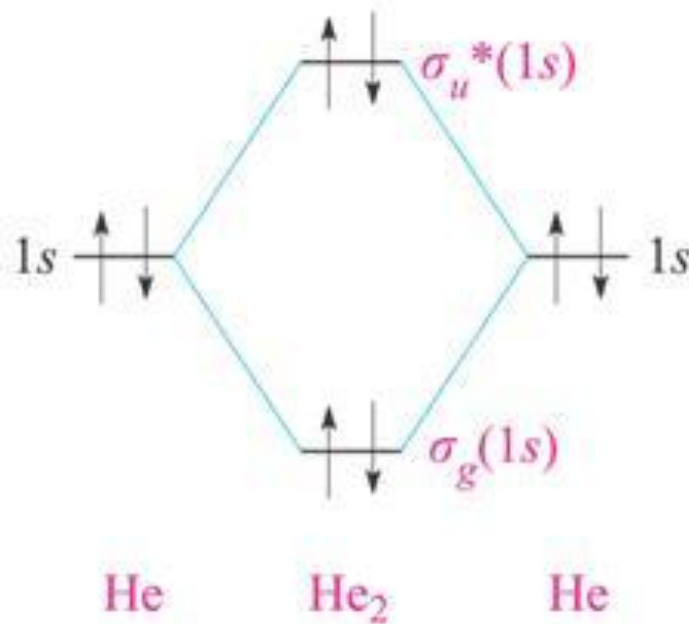
# Molekylorbitaler - Energinivådiagram för H<sub>2</sub>



Bindningstal = 1



# Molekylorbitaler - Energinivådiagram för He<sub>2</sub>

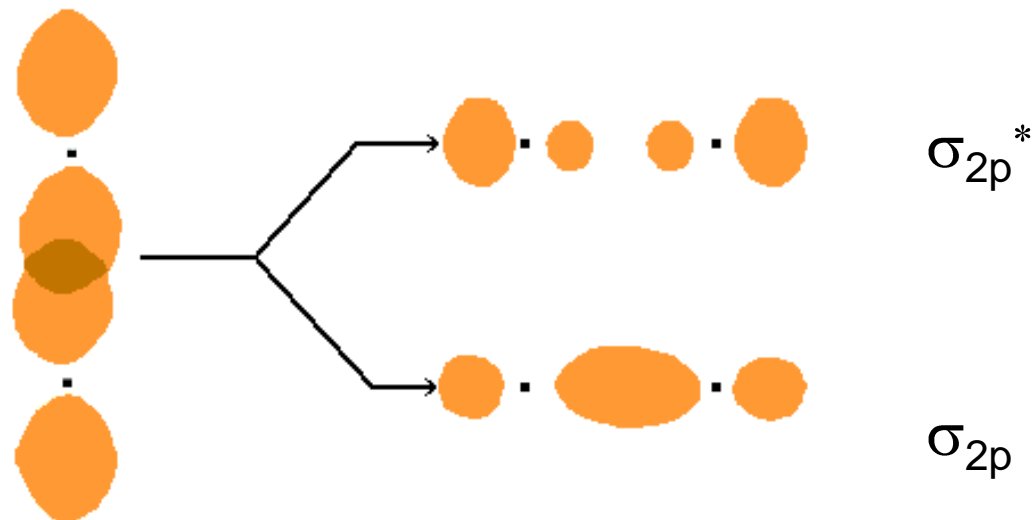
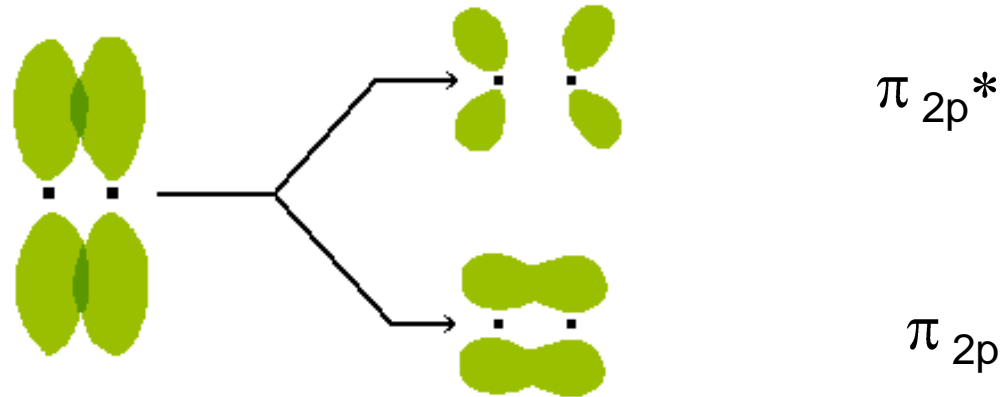


Bindningstal= 0 (ej stabil och existerar inte!)

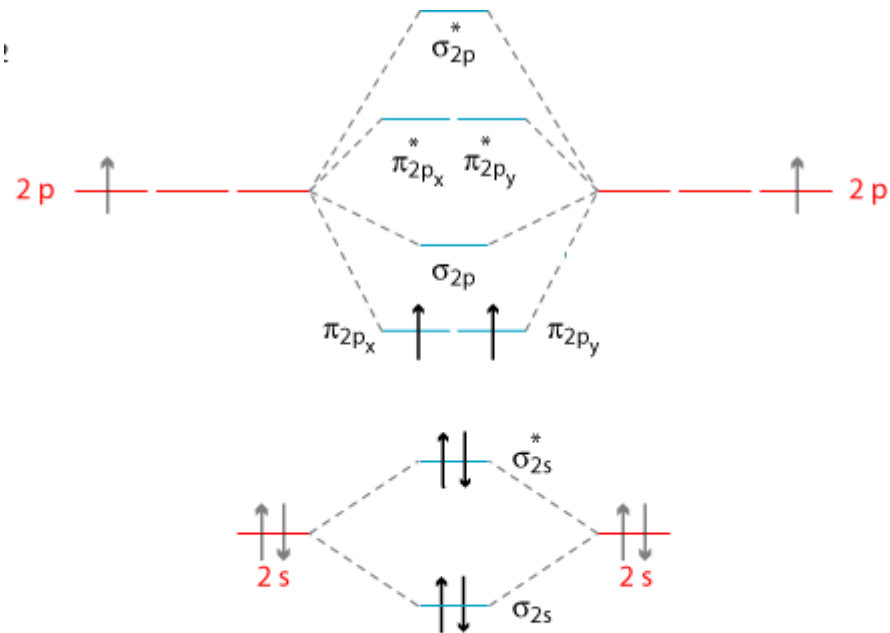
*Existerar en He<sub>2</sub><sup>+</sup>-molekyl och vad är dess bindningstal?*

*(Svar: Ja, BT = 0,5)*

# Molekylorbitaler – p-orbitaler



# Molekylorbitaler - Energinivådiagram för B<sub>2</sub>



Elektronkonfiguration:  $(\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2p})^2$

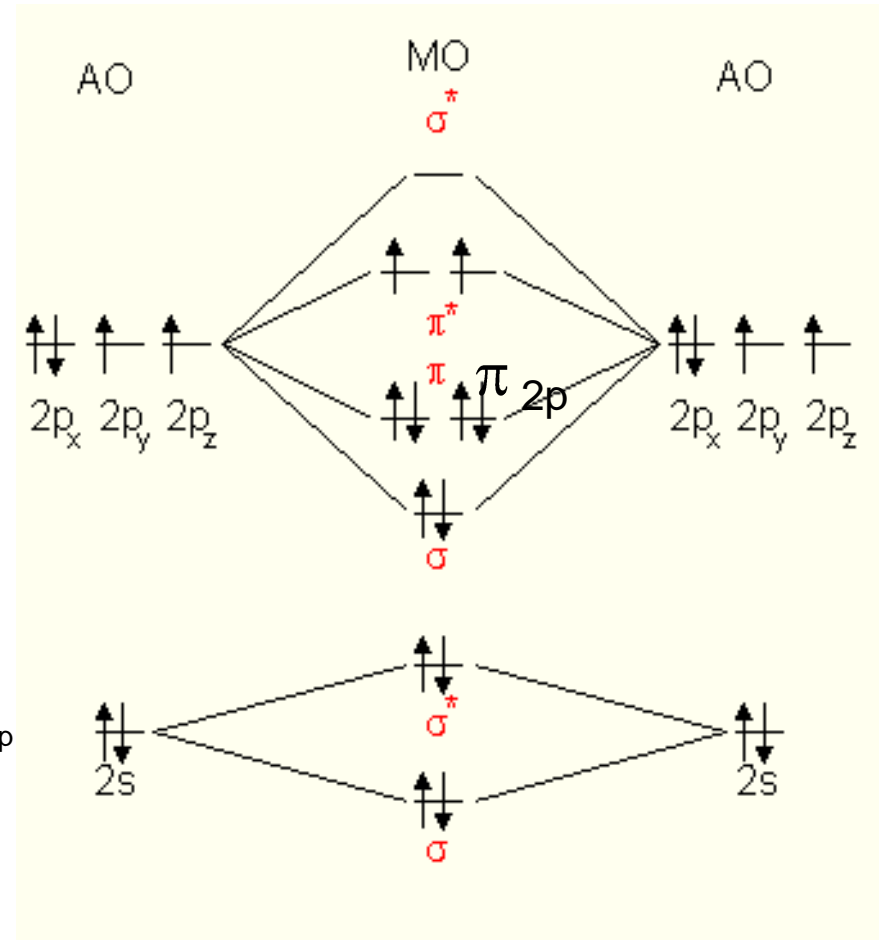
BT = 1

Paramagnetisk (oparade elektroner)

(Samma diagram gäller även för C<sub>2</sub> och N<sub>2</sub> fast med annat antal elektroner. Rita själv!)

# Molekylorbitaler - Energinivådiagram för O<sub>2</sub>

Repulsionen mellan  $\sigma_{2s}$  och  $\sigma_{2p}$  elektroner minskar åt höger i perioden beroende på att den ökande kärnladdningen drar  $\sigma_{2s}$  elektroner mot kärnan. Detta leder till att  $\sigma_{2s}$ -orbitalen blir mindre och därav minskar  $\sigma_{2s} - \sigma_{2p}$  växelverkan. Detta gör att energin för  $\sigma_{2p}$  hamnar under  $\pi_{2p}$ .



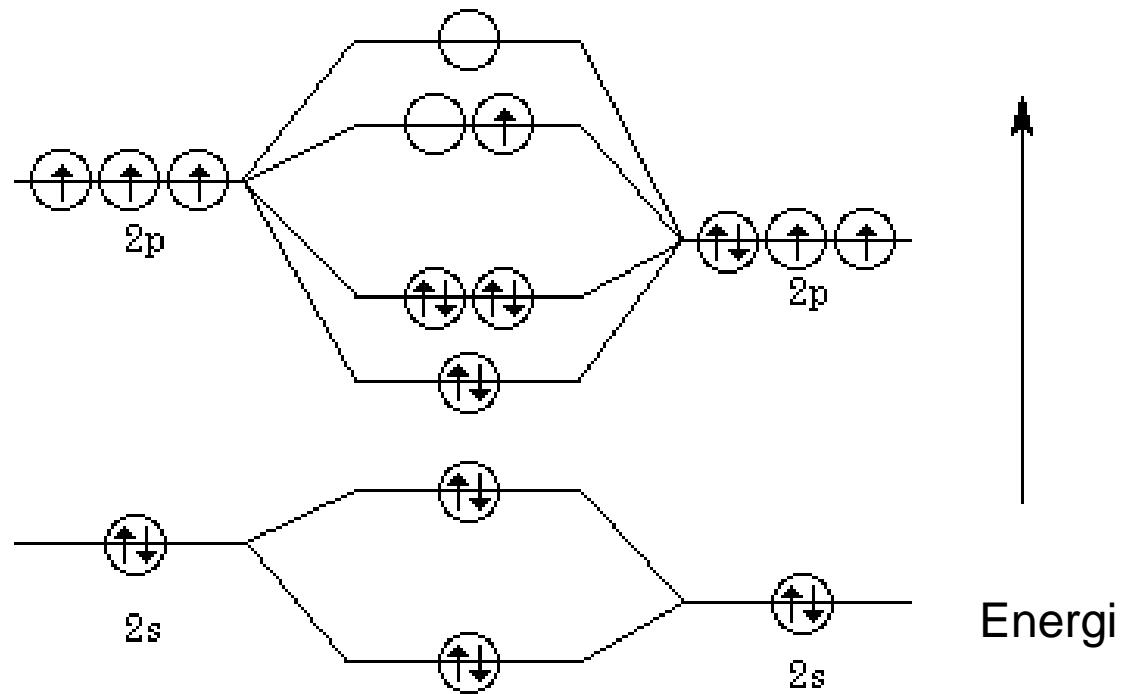
(Samma diagram gäller även för F<sub>2</sub> fast med annat antal elektroner. Rita!)

# Molekylorbitaler - Energinivådiagram för NO

N och O har  
tillsammans  
11 valenselektroner

-Lewisstrukturen blir  
därför "konstig" pga  
en udda elektron.

-Dock är det inga  
konstigheter att rita  
upp ett energinivådiagram  
enligt MO-teorin!



BT = 2,5 Paramagnetisk

# Vad står det mer i kapitel 3?

- *Molekylorbitaler för bensen*
- *HOMO - LUMO begreppet*  
*Highest Occupied MO och Lowest Occupied MO*
- *Bandteori (fasta material)*