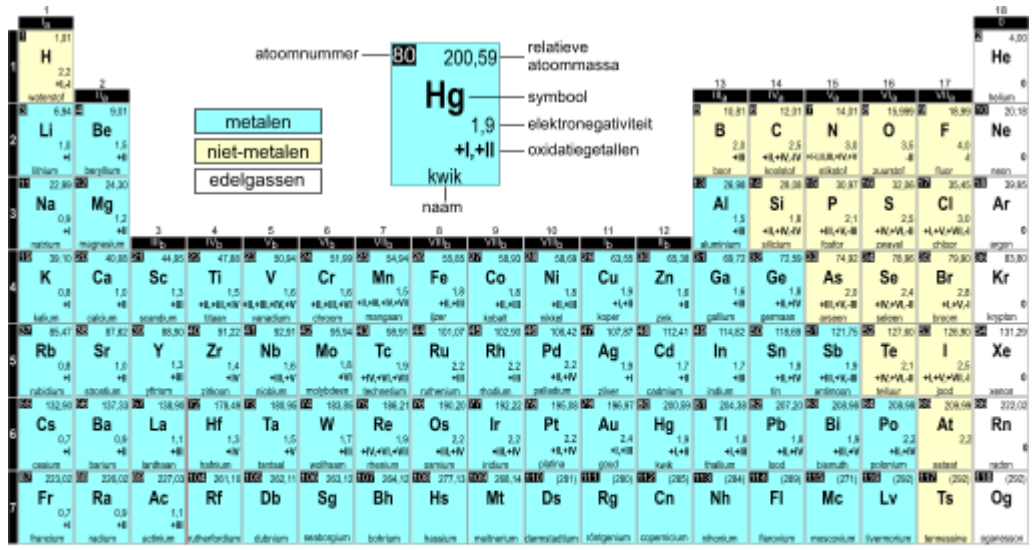


3. Chemische binding

1. Edelgassen

De edelgassen zijn de elementen uit groep 0 (18) van het Periodiek Systeem. In vergelijking met de meeste andere elementen werden ze pas laat ontdekt. Dit komt omdat ze chemisch niet actief zijn: ze vormen geen verbindingen met andere elementen, ze zijn chemisch inert. Vandaar dat men ze ook inerte gassen noemt.



De edelgassen hebben volgende elektronenconfiguraties:

- $2\text{He} \quad 1s^2$
- $10\text{Ne} \quad [\text{He}] 2s^2 2p^6$
- $18\text{Ar} \quad [\text{Ne}] 3s^2 3p^6$
- $36\text{Kr} \quad [\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^6$
- $54\text{Xe} \quad [\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p^6$
- $86\text{Rn} \quad [\text{Xe}] 4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$

In de buitenste schil treffen we telkens 8 elektronen aan (uitzondering: He): s^2p^6 .

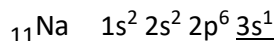


Deze configuratie, 8 elektronen of vier elektronenparen in de buitenste schil, blijkt een zeer stabiele configuratie te zijn. Men spreekt van een octetstructuur. Trouwens, ook de configuratie van helium met 2 elektronen of 1 elektronenpaar in het 1s-subniveau (het enige niveau in de K-schil) is bijna even stabiel. Deze stabiele configuraties ($1s^2$ en $ns^2 np^6$) noemt men edelgasconfiguraties.



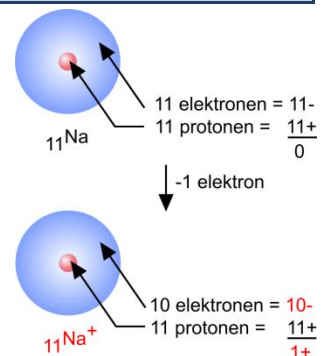
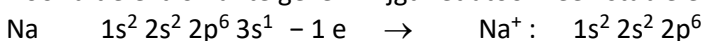
2. Positieve mono-atomische ionen

Natrium



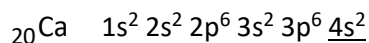
Een natriumatoom heeft 1 elektron in de buitenste schil.

Door dit elektron af te geven krijgt het atoom een stabiele edelgasconfiguratie:



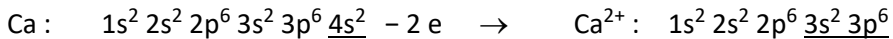
Het neutrale atoom krijgt daardoor echter een positieve lading. Het wordt een positief ion.

Calcium

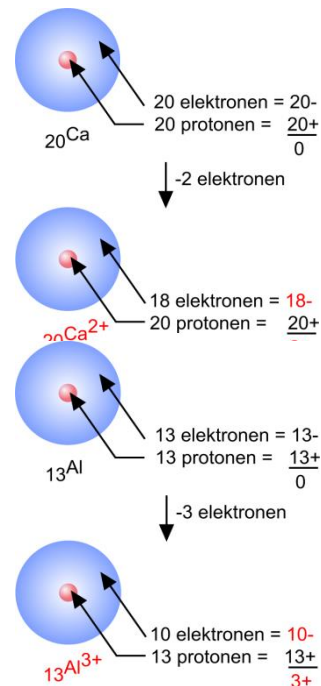


Een calciumatoom heeft 2 elektronen in de buitenste schil.

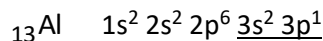
Door die elektronen af te geven krijgt het atoom een stabiele edelgasconfiguratie:



Het neutrale atoom krijgt daardoor echter een tweemaal-positieve lading. Het wordt een tweewaardig positief ion.

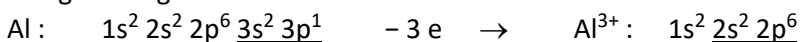


Aluminium



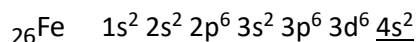
Een aluminiumatoom heeft 3 elektronen in de buitenste schil.

Door die elektronen af te geven krijgt het atoom een stabiele edelgasconfiguratie:



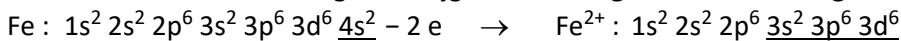
Het neutrale atoom krijgt daardoor echter een driemaal-positieve lading. Het wordt een driewaardig positief ion.

IJzer

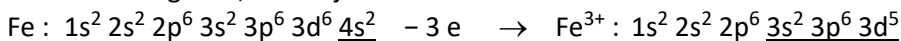


Een ijzeratoom heeft 2 elektronen in de buitenste schil.

Door deze elektronen af te geven krijgt het atoom **geen stabiele edelgasconfiguratie**: Afb. 3 – Vorming van een Al^{3+} -ion



Nochtans is deze configuratie stabielere dan de originele atoomconfiguratie en Fe^{2+} -ionen worden vaak gevormd. Maar, zoals vaak het geval is bij metalen uit de overgangsgroepen, ijzeratomen kunnen ook drie elektronen afgeven, waarbij dan Fe^{3+} -ionen ontstaan:

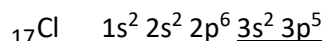


De configuratie van dit ion is zelfs nog stabielere dan die van het Fe^{2+} -ion.

Metalen uit de hoofdgroepen I_a, II_a en III_a bezitten 1, 2 of 3 elektronen in de buitenste schil. Door dit (die) elektron(en) af te geven verkrijgen ze een stabiele edelgasconfiguratie, maar de gewijzigde atomen krijgen daarbij een positieve lading: 1+ , 2+ of 3+. Het worden positieve (+ , 2+ , 3+) ionen of kationen. Metalen uit de nevgroepen geven soms 1, meestal 2 elektronen af om stabielere te worden. Ze kunnen echter meestal meerdere ionen vormen. De ionen bezitten echter geen edelgasconfiguratie.

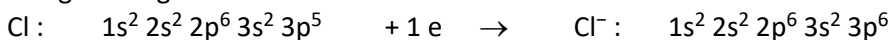
3. Negatieve monoatomische ionen

Chloor

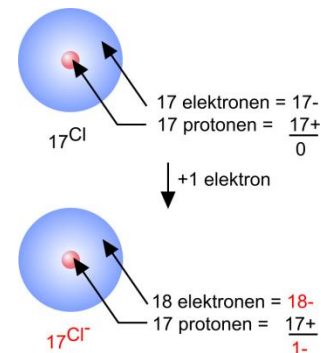


Een chlooratoom heeft 7 elektronen in de buitenste schil.

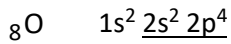
Door één elektron op te nemen krijgt het atoom een stabiele edelgasconfiguratie:



Het neutrale atoom krijgt daardoor echter een negatieve lading. Het wordt een negatief ion.

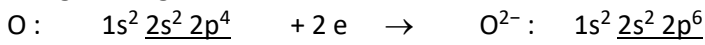


Zuurstof



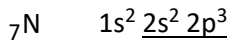
Een zuurstofatoom heeft 6 elektronen in de buitenste schil.

Door twee elektronen op te nemen krijgt het atoom een stabiele edelgasconfiguratie:



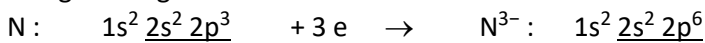
Het neutrale atoom krijgt daardoor echter een tweemaal-negatieve lading. Het wordt een tweewaardig negatief ion.

Stikstof

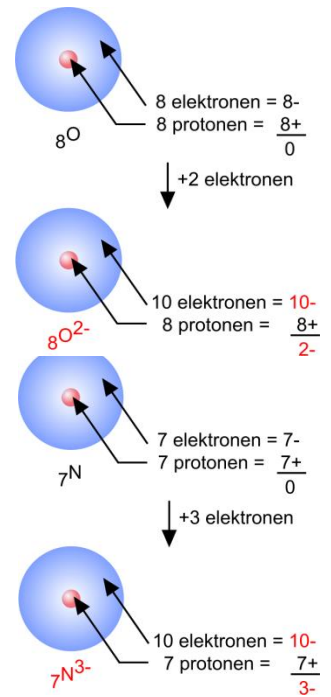


Een stikstofatoom heeft 5 elektronen in de buitenste schil.

Door drie elektronen op te nemen krijgt het atoom een stabiele edelgasconfiguratie:



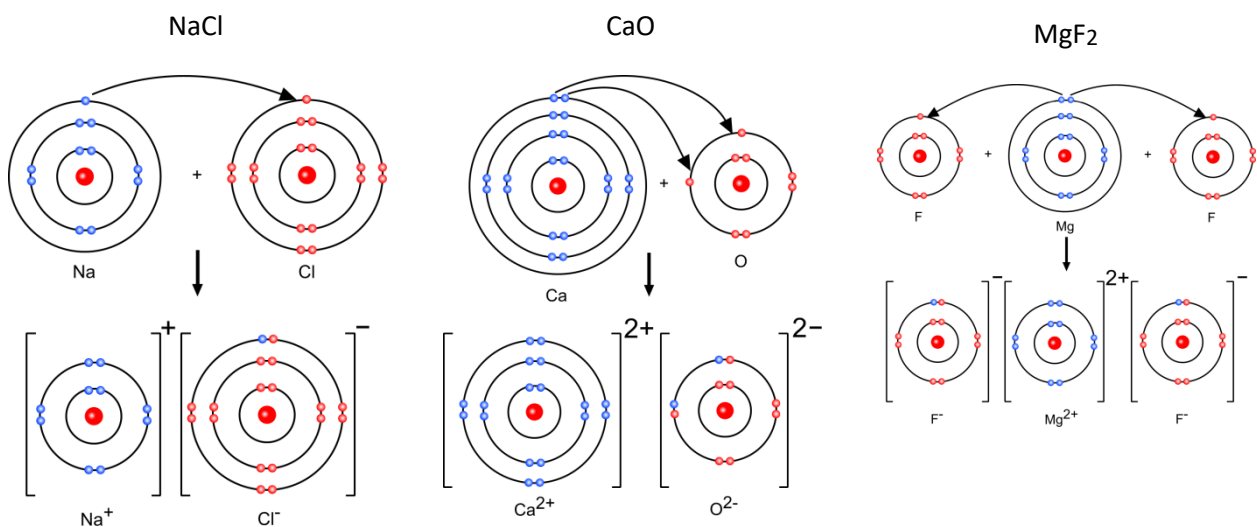
Het neutrale atoom krijgt daardoor echter een driemaal-negatieve lading. Het wordt een driewaardig negatief ion.



Niet-metalen uit de hoofdgroepen VII_a, VI_a en V_a bezitten 7, 6 of 5 elektronen in de buitenste schil. Door 1, 2 of 3 elektron(en) op te nemen verkrijgen ze een stabiele edelgasconfiguratie, maar de gewijzigde atomen krijgen daarbij een negatieve lading: 1-, 2- of 3-. Het worden negatieve (-, 2-, 3-) ionen of anionen.

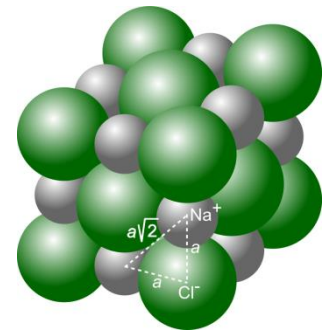
4. Ionbinding

De octetstructuur bereiken langs de minst energie vergende weg betekent voor bepaalde atomen (behorend tot de metalen) één of meerdere elektronen afstaan met vorming van positieve ionen of kationen. Voor andere atomen (behorend tot de niet-metalen) kan de achtomringing gerealiseerd worden door één, twee of maximaal drie elektronen op te nemen met vorming van negatieve ionen of anionen. Eens de tegengesteld geladen ionen gevormd zal een elektrostatische aantrekkingskracht zorgen voor een sterke ionbinding.



Anionen en kationen trekken elkaar elektrostatich aan waardoor een neutraal geheel ontstaat = **formule-eenheid**.

Deze aantrekkingskracht werkt in alle richtingen: een maximaal aantal anionen zullen zich ordenen rond een maximaal aantal kationen en omgekeerd = **ionenrooster** (of zout)



Een metaal reageert met een niet-metaal. Daarbij geeft het metaal één of meer elektronen af en neemt het niet-metaal één of meer elektronen op. De gevormde metaalionen (kationen) en niet-metaalionen (anionen) trekken elkaar elektrostatich aan: **ionbinding**. Ze vormen een ionenrooster.

5. Enkelvoudige covalente binding

Niet-metalen reageren vaak met andere niet-metalen, soms zeer fel.

Voorbeelden

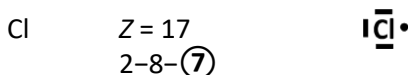
diwaterstof + dizuurstof → water
 diwaterstof + dichloor → waterstofchloride

Bij deze reacties ontstaan molecuulverbindingen: water en waterstofchloride. Deze verbindingen geleiden de elektrische stroom niet, ook niet als ze vloeibaar zijn. Ze zijn dus niet opgebouwd uit ionen, maar uit elektrisch **neutrale** moleculen.

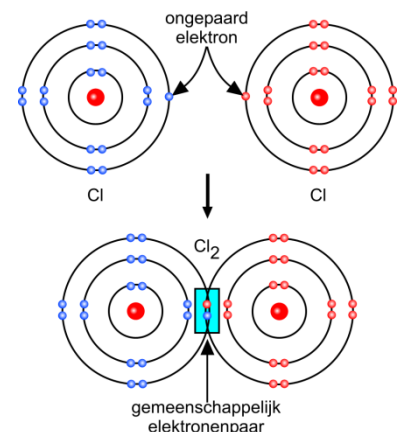
Niet-metalen hebben in hun buitenste schil 5, 6 of 7 elektronen: ze vertonen dus de neiging om 1 of meer elektronen op te nemen. Bij een reactie tussen twee niet-metalen zullen er dus geen elektronen overgedragen worden. Er zullen dus geen ionen ontstaan. Beide niet-metalen vertonen immers de neiging om elektronen op te nemen, maar geen van beide vertoont de neiging om elektronen af te geven. Toch kunnen de niet-metalen een stabiele edelgasconfiguratie verkrijgen zoals blijkt uit volgende voorbeelden.

Dichloor: Cl₂

Stel je voor dat in een bepaalde ruimte alleen maar chlooratomen aanwezig zijn:



Alle aanwezige chlooratomen vertonen de neiging om 1 elektron op te nemen. Er zal dus geen enkel Cl-atoom bereid zijn om een elektron af te geven. Toch kunnen de Cl-atomen een stabiele edelgasconfiguratie verkrijgen: de Cl-atomen zullen, per twee, hun ongepaarde elektronen omvormen tot een gemeenschappelijk elektronenpaar. Daardoor krijgen beide Cl-atomen een stabiele edelgasconfiguratie. Dit is echter slechts het geval zolang de beide Cl-atomen samenblijven: m.a.w. ze zijn aan elkaar gebonden door middel van een zogenaamde **covalente binding** (soms ook **atoombinding** genoemd).



Het gemeenschappelijke elektronenpaar wordt vaak voorgesteld door een bindingsstreepje tussen beide atomen.

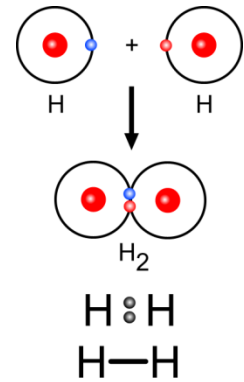


In het voorbeeld hierboven spreken we van een dichloormolecule, die we kortweg voorstellen als Cl₂.

Diwaterstof: H₂

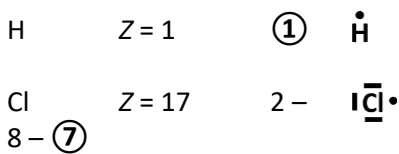


Beide H-atomen hebben 1 elektron in de buitenste schil. Omdat dit de K-schil is, vertonen ze de neiging hierin 2 elektronen te hebben, om op die manier een stabiele configuratie te verkrijgen (net als het edelgas He). De H-atomen zullen, per twee, hun ongepaarde elektronen omvormen tot een gemeenschappelijk elektronenpaar. Daardoor krijgen ze beide een stabiele He-configuratie. Ook dit is echter slechts het geval zolang de beide H-atomen samenblijven: ze zijn gebonden door een **covalente binding** of **atoombinding**.



Waterstofchloride: HCl

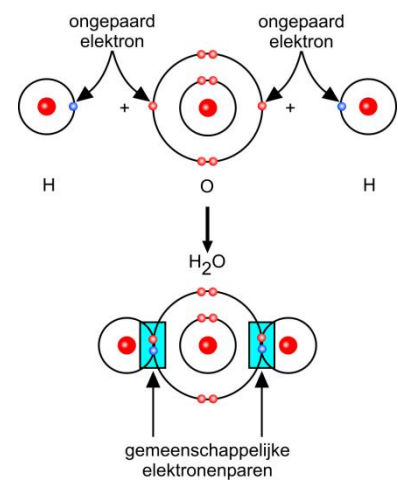
Het zijn niet altijd identieke atomen die door middel van een atoombinding aan elkaar gebonden zijn.



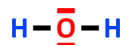
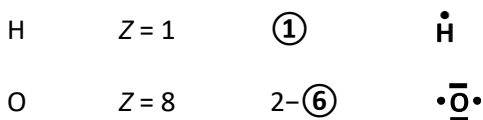
In de buitenste schil (K-schil) van het H-atoom zit er één elektron. Er is dus één elektron te weinig om een stabiele elektronenconfiguratie (He) te hebben.

In de buitenste schil van het Cl-atoom is er ook één elektron te weinig om de stabiele Ar-configuratie te hebben.

Ook hier is de vorming van een gemeenschappelijk elektronenpaar en dus van een atoombinding tussen beide atomen een oplossing: dit is het geval in een molecule HCl.

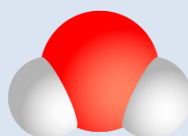


Water: H₂O



De covalente binding (atoombinding) is de kracht die neutrale niet-metaal-atomen samenhoudt door één (of meer) gemeenschappelijke elektronenparen.

Een molecule is een afzonderbare, neutrale groep van twee of meer (dezelfde of verschillende) niet-metaal-atomen, die aan elkaar gebonden zijn door covalente bindingen.

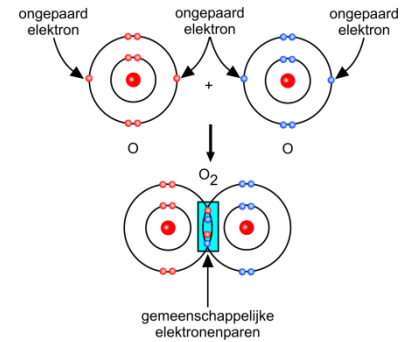
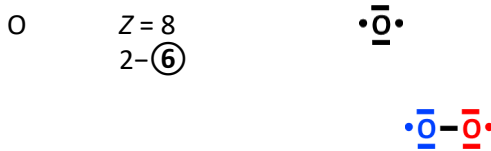


De hier voorgestelde watermolecule bevat 2 H-atomen die door covalente bindingen aan het centrale O-atoom gebonden zijn.

6. Dubbele en drievoudige covalente binding

Dizuurstof: O₂

In heel wat gevallen volstaat het vormen van één gemeenschappelijk elektronenpaar niet om een edelgasconfiguratie te bereiken. Er kunnen dan twee gemeenschappelijke paren ontstaan.



Eén gemeenschappelijk elektronenpaar is niet voldoende. Beide O-atomen hebben dan slechts 7 elektronen in de buitenste schil. Pas na het vormen van 2 gemeenschappelijke paren hebben beide O-atomen een edelgasconfiguratie.

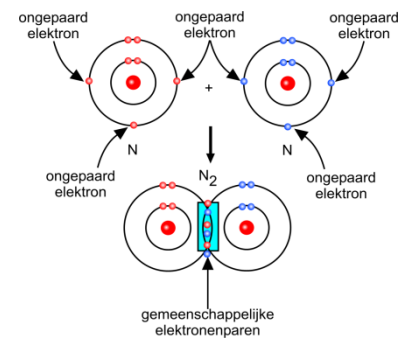


We noemen dit een **dubbele covalente of atoombinding**.

Distikstof: N₂



Ook hier volstaat het vormen van één gemeenschappelijk elektronenpaar niet. Beide N-atomen hebben dan slechts 6 elektronen in de buitenste schil. Pas na het vormen van 3 gemeenschappelijke paren hebben beide N-atomen een edelgasconfiguratie.



De beide N-atomen zijn aan elkaar gebonden door middel van een **drievoudige covalente of atoombinding**.

Viervoudige atoombindingen bestaan niet.

De voorstelling van een molecule waarbij de doubletten (zowel de bindende als de niet-bindende) als streepjes rond de elementsymbolen worden weergegeven, noemt men de uitgebreide **structuurformule**.

Voorbeelden



Wanneer niet-metalen onderling reageren, ontstaan neutrale moleculen, waarin de atomen aan elkaar gebonden zijn door één of meer gemeenschappelijke elektronenparen. Dit soort binding noemen we een covalente binding (atoombinding). We spreken van enkelvoudige, dubbele of drievoudige covalente bindingen als er één, twee of drie gemeenschappelijke elektronenparen zijn tussen de twee atomen.

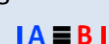
Enkelvoudige covalente binding



Dubbele covalente binding



Drievoudige covalente binding



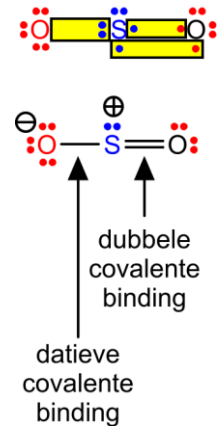
7. Datieve covalente binding of donor-acceptorbinding – Formele lading

De structuur van sommige moleculen kan soms niet volledig verklaard worden met gewone covalente bindingen.



Zwavedioxide SO₂

Er is een dubbele binding tussen het zwavelatoom en één van beide zuurstofatomen. Het zwavelatoom kan nadien geen normale covalente binding meer aangaan. Bij het tweede zuurstofatoom kunnen de beide ongepaarde elektronen een elektronenpaar vormen, zodat het elektronenpaar van zwavel een gemeenschappelijk paar kan worden tussen het S- en het O-atoom. Dit gemeenschappelijke elektronenpaar dat voor de binding zorgt, wordt dus volledig geleverd door het S-atoom (= donor). Het O-atoom noemt men de acceptor.

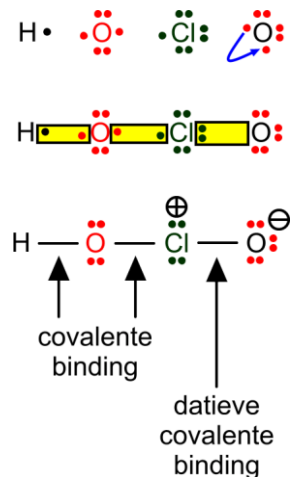


Een vrij elektronenpaar van de donor (S-atoom) wordt een gedeeld elektronenpaar tussen donor (S) en acceptor (O). Het donoraatoom verliest dus virtueel een elektron en krijgt een formele positieve lading. Het acceptoraatoom daarentegen krijgt er virtueel een elektron bij: de acceptor krijgt een formele negatieve lading.

Dit is een **datieve binding** of **donor-acceptorbinding**.

Chlorigzuur HClO₂

Ook in een molecule chlorigzuur is er een datieve binding tussen het Cl-atoom en het rechter O-atoom.



Als het gemeenschappelijke elektronenpaar volledig geleverd wordt door één atoom (donor), dan spreekt men van een **datieve covalente binding** of **donor-acceptorbinding**.

De virtuele ladingen die de donor (+) en de acceptor (-) daardoor krijgen noemt men **formele ladingen**.

8. Tekenen van lewisstructuren

Voor de opbouw van complexere moleculen kan men ook beroep doen op enkele regels die steunen op de edelgasconfiguratie. We bespreken deze regels aan de hand van enkele voorbeelden.

Voorbeeld 1: H₃PO₄

1^{ste} stap

We bepalen de som van alle valentie-elektronen, eventueel vermeerderd met het aantal negatieve ladingen bij een negatief polyatomisch ion of verminderd met het aantal positieve ladingen bij een positief polyatomisch ion. Dit getal noemen we **V**.

$$V = 3 \times 1 \text{ (H)} + 1 \times 5 \text{ (P)} + 4 \times 6 \text{ (O)} = 32$$

2^{de} stap

We berekenen het aantal elektronen nodig om aan ieder atoom de gepaste edelgasconfiguratie te geven. Dit getal noemen we **E**.

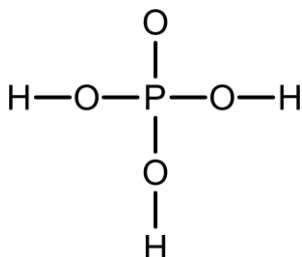
$$E = 3 \times 2 (\text{H}) + 1 \times 8 (\text{P}) + 4 \times 8 (\text{O}) = 46$$

3^{de} stap

Vermits er 46 elektronen nodig zijn om voor edelgasconfiguraties te zorgen (E) en we slechts over 32 elektronen (V) beschikken, zullen er elektronen tweemaal moeten geteld worden. Enkel de bindende paren worden dubbel geteld. Uit het voorgaande cijfermateriaal kunnen we berekenen dat er **14** (= E - V) elektronen dubbel moeten geteld worden wat overeenkomt met **7** bindende paren.

4^{de} stap

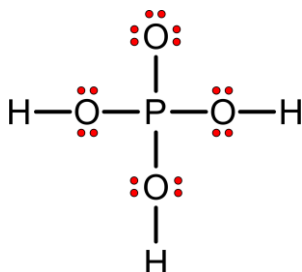
We tekenen de structuur zo symmetrisch mogelijk en brengen de bindende paren aan. Hierbij letten we er op dat waterstof steeds eindstandig is, dat bij oxozuren (zoals H₃PO₄) de zuurstofatomen gebonden zijn aan het centrale atoom.



5^{de} stap

We berekenen het aantal niet-bindende of vrije elektronenparen. Hiervoor nemen we het aantal aanwezige valentie-elektronen (= V) en trekken daarvan het aantal bindende elektronen af. Om het aantal paren te bekomen delen we door twee. We brengen een aantal niet-bindende elektronenparen rond ieder atoom aan. Hierbij houden we rekening met de twee- (He) of achtomringing.

$$\frac{32 - 14}{2} = 9$$

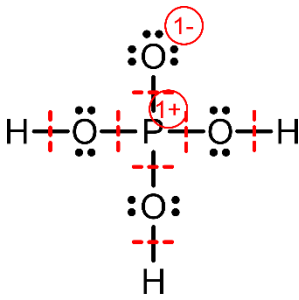


6^{de} stap

We brengen de formele ladingen aan.

Wanneer in een lewisformule een covalent gebonden atoom in zijn onmiddellijke omgeving meer of minder valentie-elektronen heeft dan in ongebonden toestand, draagt het atoom een negatieve of positieve formele lading.

Voor de bepaling van het aantal elektronen rond het gebonden atoom rekt men niet-bindende paren tot het atoom waarbij ze staan. Van de bindende paren krijgt iedere bindingspartner één elektron toegewezen. De aldus bekomen som wordt vergeleken met het normale aantal valentie-elektronen om de formele lading te bepalen. De formele lading speelt een belangrijke rol bij heel wat begrippen: zuursterkte, organische reactiemechanismen, ...



Voorbeeld 2: NO_3^-

1^{ste} stap

We bepalen de som van alle valentie-elektronen, eventueel vermeerderd met het aantal negatieve ladingen bij een negatief polyatomisch ion of verminderd met het aantal positieve ladingen bij een positief polyatomisch ion. Dit getal noemen we **V**.

$$V = 1 \times 5 (\text{N}) + 3 \times 6 (\text{O}) + 1 (\text{lading}) = \mathbf{24}$$

2^{de} stap

We berekenen het aantal elektronen nodig om aan ieder atoom de gepaste edelgasconfiguratie te geven. Dit getal noemen we **E**.

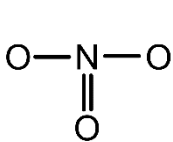
$$E = 1 \times 8 (\text{N}) + 3 \times 8 (\text{O}) = \mathbf{32}$$

3^{de} stap

Vermits er 32 elektronen nodig zijn om voor edelgasconfiguraties te zorgen (E) en we slechts over 24 elektronen (V) beschikken, zullen er elektronen tweemaal moeten geteld worden. Enkel de bindende paren worden dubbel geteld. Uit het voorgaande cijfermateriaal kunnen we berekenen dat er **8** ($= E - V$) elektronen dubbel moeten geteld worden wat overeenkomt met **4** bindende paren.

4^{de} stap

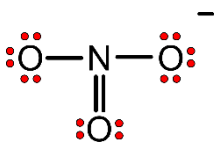
We tekenen de structuur zo symmetrisch mogelijk en brengen de bindende paren aan. Drie enkelvoudige bindingen volstaan dus niet. Eén binding wordt een dubbele binding.



5^{de} stap

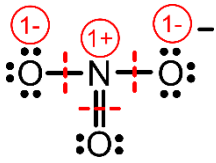
We berekenen het aantal niet-bindende of vrije elektronenparen. Hiervoor nemen we het aantal aanwezige valentie-elektronen ($= V$) en trekken daarvan het aantal bindende elektronen af. Om het aantal paren te bekomen delen we door twee. We brengen een aantal niet-bindende elektronenparen rond ieder atoom aan. Hierbij houden we rekening met de twee- (He) of achtomringing.

$$\frac{24 - 8}{2} = \mathbf{8}$$



6^{de} stap

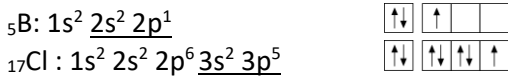
We brengen de formele ladingen aan.



In een lewisstructuur hebben de atomen **meestal** een octetomringing (uitz. H). Dit is echter niet altijd het geval. In die gevallen gaan we anders tewerk.

Voorbeeld 3: BCl_3

Schrijf de elektronenconfiguratie van B en Cl en stel de valentie-elektronen voor:

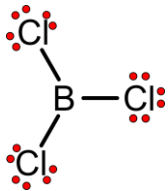


Het B-atoom kan 3 bindingen vormen in geëxciteerde toestand:



Het Cl-atoom heeft één ongepaard elektron en kan dus 1 covalente binding vormen.

Een B-atoom kan op die manier 3 Cl-atomen binden.

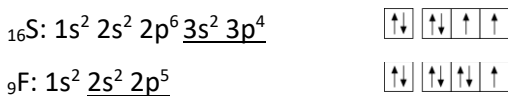


Het B-atoom verkrijgt echter geen octetstructuur: het heeft maar 6 elektronen rond zich.

Alle atomen hebben het normale aantal elektronen rond zich (B: 3 ; Cl: 7). Er zijn geen formele ladingen.

Voorbeeld 4: SF_6

Schrijf de elektronenconfiguratie van S en F en stel de valentie-elektronen voor:



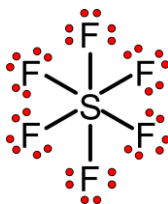
Het S-atoom kan slechts 2 bindingen vormen.

In geëxciteerde toestand kan het 6 bindingen vormen:



Het F-atoom heeft één ongepaard elektron en kan dus 1 covalente binding vormen.

Een S-atoom kan op die manier 6 F-atomen binden.



Het S-atoom verkrijgt echter geen octetstructuur: het heeft zelfs 12 elektronen rond zich.

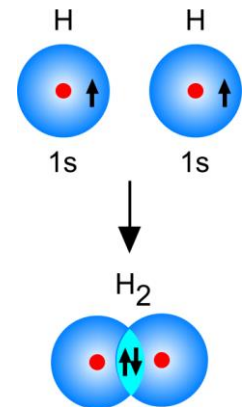
Alle atomen hebben het normale aantal elektronen rond zich (S: 6 ; F: 7). Er zijn geen formele ladingen.

Bij een asymmetrische verdeling van het bindende paar spreken we van een **polaire covalente binding**.

Elektronegativiteit χ

De elektronegativiteit of elektronegatieve waarde χ van een element is een onbenoemd getal, dat uitdrukt in welke mate het atoom bij een covalente binding het gemeenschappelijke elektronenpaar naar zich toetroekt.

H																
2,1																
Li	Be											B	C	N	O	F
1,0	1,5											2,0	2,5	3,0	3,5	4,0
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl
0,9	1,2											1,5	1,8	2,1	2,5	3,0
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
0,8	1,0	1,3	1,5	1,6	1,6	1,5	1,8	1,9	1,9	1,9	1,6	1,6	1,8	2,0	2,4	2,8
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I
0,8	1,0	1,2	1,4	1,6	1,8	1,9	2,2	2,2	2,2	1,9	1,7	1,7	1,8	1,9	2,1	2,5
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At
0,7	0,9	1,0	1,3	1,5	1,7	1,9	2,2	2,2	2,2	2,4	1,9	1,8	1,9	1,9	2,0	2,2
Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U											
0,7	0,9	1,1	1,3	1,4	1,4											



10. σ - en π -bindingen

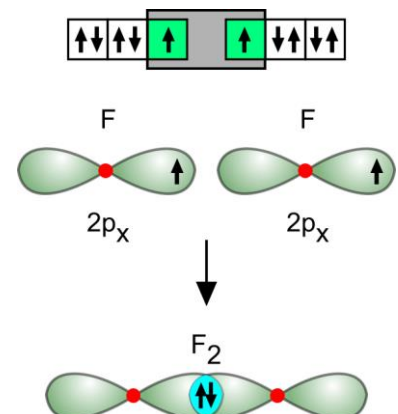
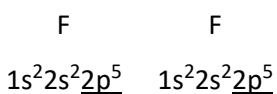
Er wordt verondersteld dat, als twee atomen zich met elkaar binden, de orbitalen waarin de ongepaarde elektronen zich bevinden, elkaar overlappen. Op die manier kan in de overlappingsruimte een gemeenschappelijk elektronenpaar ontstaan.

Men spreekt van een σ -overlapping of een σ -binding als de symmetrieassen van de overlappende orbitalen in elkaars verlengde liggen.

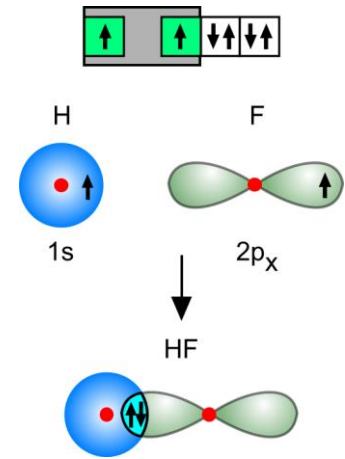
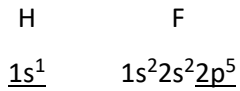
De bindende elektronen (het bindende doublet) worden aangebracht in de overlappingsruimte. De elektronen moeten een tegengestelde spin hebben omdat ze tot éénzelfde orbitaal moeten kunnen behoren. Bij een deze bindingsbenadering is de sterkte van de binding evenredig met de grootte van de overlappingsruimte.

Andere voorbeelden

Difluor F_2



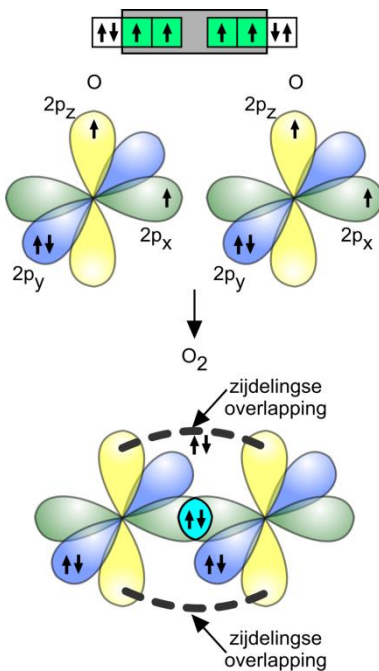
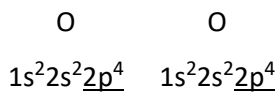
Waterstoffluoride HF



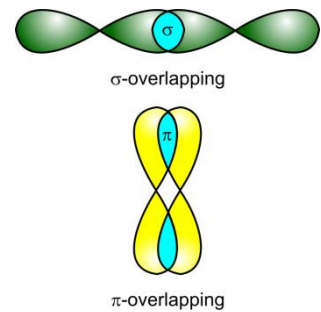
In heel wat moleculen komen er dubbele en/of drievoudige bindingen voor: er zijn twee of drie gemeenschappelijke elektronenparen tussen twee atomen. In die gevallen moet er dan ook twee of drie keer overlapping tussen orbitalen optreden. Dit is o.a. het geval bij dizuurstof.

Voorbeelden

Dizuurstof O₂

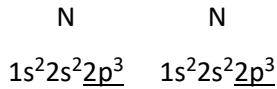


De p_x -orbitalen overlappen elkaar rechtstreeks: er ontstaat een σ -binding. De p_z -orbitalen overlappen elkaar zijdelings (alhoewel dit op de figuur, voor de leesbaarheid, niet zo is). In dit geval spreekt men van een π -overlapping of π -binding: de symmetrie-assen van de overlappende orbitalen lopen evenwijdig, maar vallen niet samen.

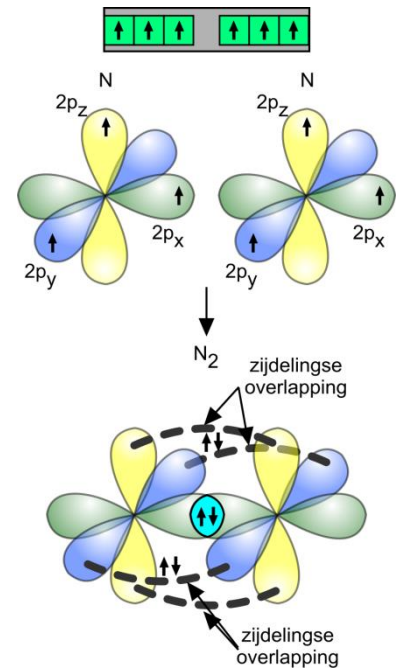


Men spreekt van een π -overlapping of een π -binding als de symmetrieassen van de overlappende orbitalen parallel lopen (zijdelingse overlapping).

Distikstof N₂



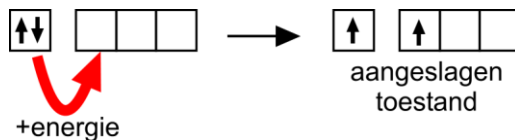
Naast de σ -binding (rechtstreekse overlapping tussen de p_x -orbitalen) zijn er nu twee π -bindingen (zijdellingse overlapping tussen respectievelijk de p_y -orbitalen en de p_z -orbitalen).



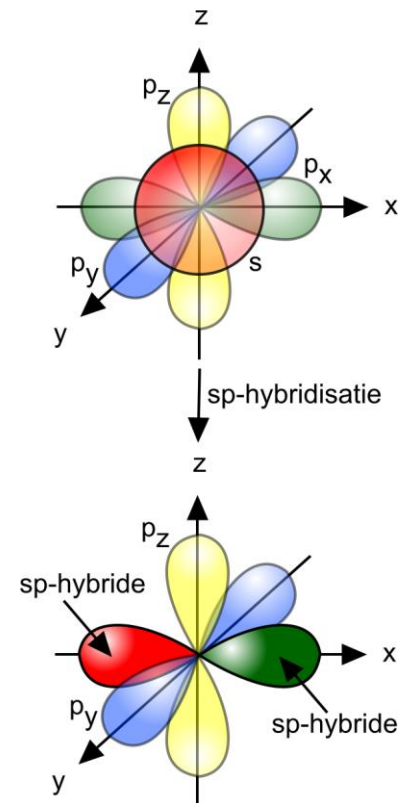
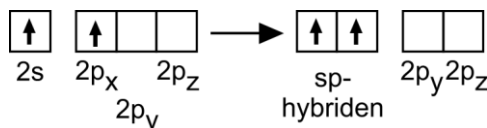
11. sp-hybridisatie

We nemen als voorbeeld de BeH₂-molecule.

Beschouwen we de elektronenconfiguratie van Be in de grondtoestand, dan zien we dat Be geen enkele normale covalente binding kan aangaan. Immers, $1s^2 2s^2 2p^0$ is een configuratie die geen enkel ongepaard elektron bezit. Om de nodige covalente bindingsmogelijkheden te scheppen, moet er energie aan het Be-atoom toegevoegd worden om één 2s-elektron naar één van de 2p-orbitalen te brengen. Het Be-atoom bevindt zich dan in **aangeslagen toestand**.



Metingen hebben aangetoond dat de beide Be-H-bindingen gelijk zijn in sterkte en in lengte. Een overlapping van een s-orbitale (van H) met respectievelijk een s- en een p-orbitale van Be kan dit niet verklaren. Men moest twee volkomen gelijkwaardige waarschijnlijkheidsverdelingen in het leven roepen en dat heeft men gedaan door een combinatie te maken van de 2s- en de ene half-bezette 2p orbitaal.



Enkele kenmerken van de hybridisatie en hybridorbitalen

De hybridisatie treedt slechts op op het ogenblik van de binding.

Alle hybridorbitalen hebben dezelfde vorm.

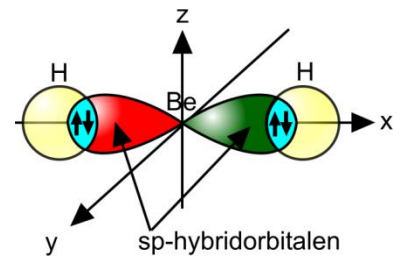
De hybridorbitalen zijn energetisch gelijkwaardig.

De hybridorbitalen liggen in de ruimte rond de kern zo ver mogelijk uit elkaar.

De hybridorbitalen worden gesymboliseerd door de symbolen van de aan de hybridisatie deelnemende orbitalen na elkaar te schrijven en het aantal van iedere deelnemende orbitaalsoort als een exponent bij het betrokken symbool weer te geven.

Zover mogelijk uit elkaar betekent hier dat de twee sp-hybridorbitalen een hoek van 180° maken.

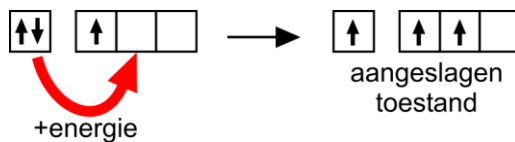
De structuur van BeH_2 is dus lineair.
 Beide lege p-orbitalen staan haaks op de sp-hybridorbitalen.



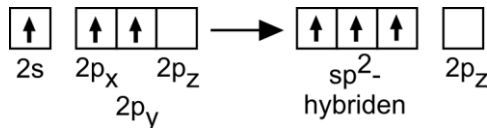
12. sp^2 -hybridisatie

We nemen als voorbeeld de BH_3 -molecule.

Beschouwen we de elektronenconfiguratie van het B-atoom: $1s^2 2s^2 2p^1$. We zien we dat B slechts één normale covalente binding kan vormen. De praktijk geeft echter drie bindingen aan. Om de nodige covalente bindingsmogelijkheden te scheppen, moet er energie aan het B-atoom toegevoegd worden om één $2s$ -elektron naar één van de lege $2p$ -orbitalen te brengen. Het B-atoom bevindt zich dan in aangeslagen toestand.



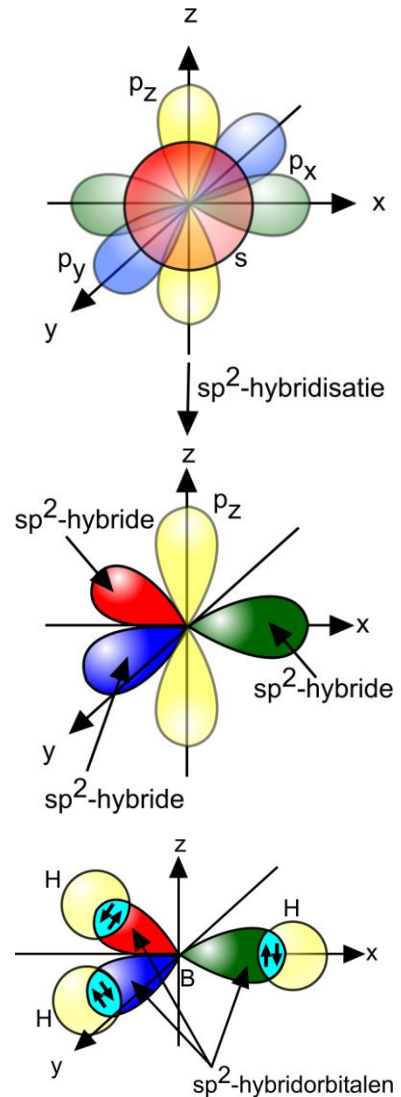
Metingen hebben aangetoond dat de drie B-H-bindingen gelijk zijn in sterkte en in lengte. Een overlapping van een s-orbitale (van H) met respectievelijk een s- en twee p-orbitalen van B kan dit niet verklaren. Men moest drie volkomen gelijkwaardige waarschijnlijkheidsverdelingen in het leven roepen en dat heeft men gedaan door een combinatie te maken van de $2s$ en de twee half-bezette $2p$ orbitalen.



Zover mogelijk uit elkaar betekent hier dat de drie sp^2 -hybridorbitalen een hoek van 120° maken.

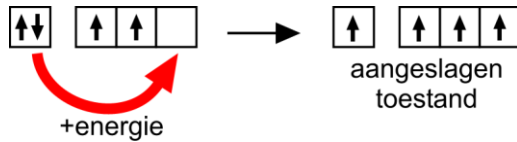
De structuur van BH_3 is dus planair.

De lege p-orbitale staat loodrecht op het vlak van de sp^2 -hybridorbitalen.

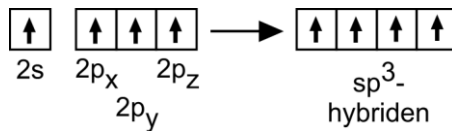
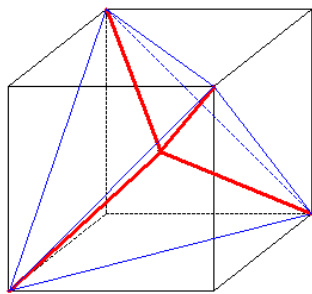


13. sp³-hybridisatie

We nemen als voorbeeld de CH₄-molecule (methaan).
 Beschouwen we de elektronenconfiguratie van het C-atoom: 1s² 2s²2p².
 We zien dat C slechts twee normale covalente bindingen kan vormen. De praktijk geeft echter vier bindingen aan. Om de nodige covalente bindingsmogelijkheden te scheppen, moet er energie aan het C-atoom toegevoegd worden om één 2s-elektron naar de lege 2p-orbitale te brengen. Het C-atoom bevindt zich dan in aangeslagen toestand.



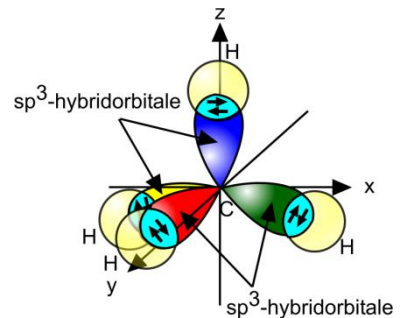
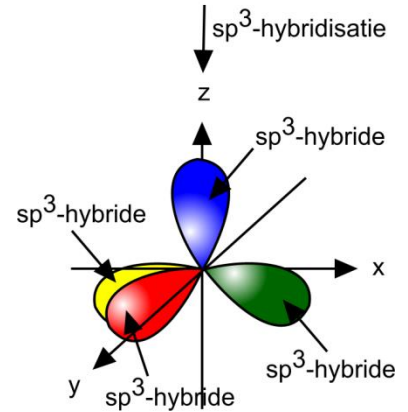
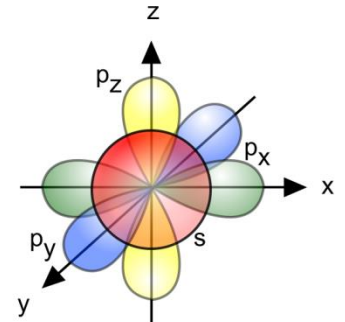
Metingen hebben aangetoond dat de vier C–H-bindingen gelijk zijn in sterkte en in lengte. Een overlapping van een s-orbitale (van H) met respectievelijk een s- en drie p-orbitalen van C kan dit niet verklaren. Men moest vier volkomen gelijkwaardige waarschijnlijkheidsverdelingen in het leven roepen en dat heeft men gedaan door een combinatie te maken van de 2s en de drie half-bezette 2p orbitalen.



De symmetrie-assen van deze vier hybridorbitalen moeten zo ver mogelijk uit elkaar liggen. Dit betekent dat ze gericht zijn naar de hoekpunten van een regelmatig viervlak of een tetraëder: de assen van de vier sp³-hybridorbitalen

vormen een hoek van 109° 28'.

De structuur van CH₄ is dus tetraëdrisch.



14. Ruimtelijke structuur - Geometrie

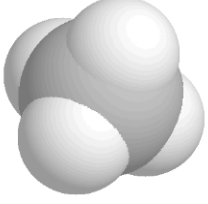
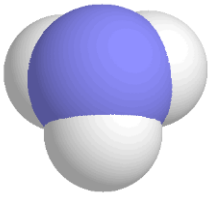
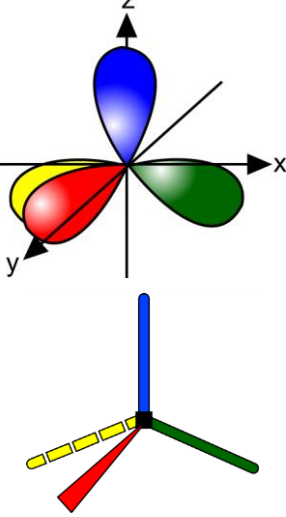
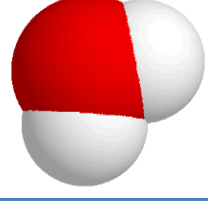
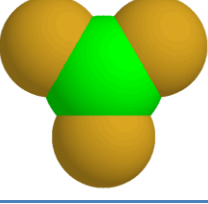
Het hybridisatiemodel is opnieuw een hulpmiddel om de ruimtelijke voorstelling van moleculen en polyatomische ionen zo dicht mogelijk te doen aansluiten bij de realiteit. Alhoewel het in enkele gevallen niet nodig is om beroep te doen op het hybridisatiemodel om de juiste waarden van de bindingshoeken af te leiden, spreken wij af om bij de ruimtelijke voorstelling van moleculen en polyatomische ionen de hierin voorkomende atomen in de gepaste hybridisatietoestand voor te stellen. Om te bepalen in welke hybridisatietoestand een bepaald atoom in een verbinding zich bevindt, passen we volgende regel toe.

Maak de som van het **aantal bindingspartners** en het **aantal niet-bindende elektronenparen** rond het atoom.

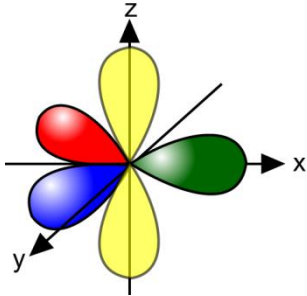
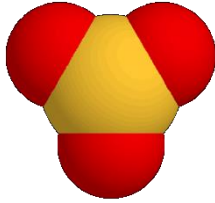
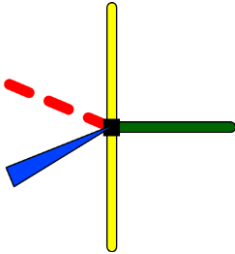
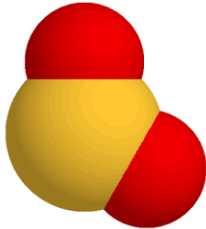
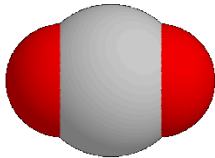
Som	Hybridisatie
4	sp ³
3	sp ²
2	sp

In de tabel hieronder vind je een gedetailleerd overzicht van alle mogelijkheden.

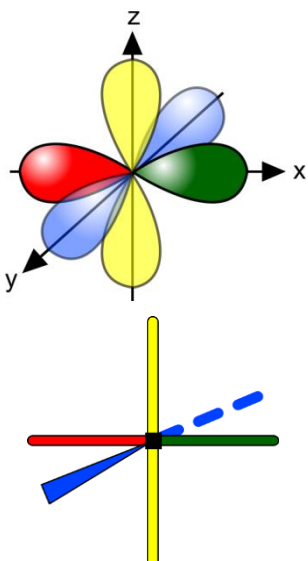
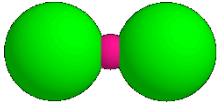
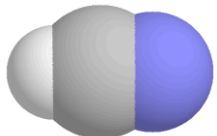
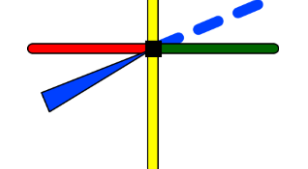
sp³-hybridisatie

Aantal bindingspartners van X		Aantal niet-bindende paren op X		Som	Hybridisatietoestand van X	Ruimtelijke structuur van X	Voorbeeld (X is vetgedrukt)
4	0						<p>CH₄</p> 
3	1						<p>NH₃</p> 
2	2	4		4	sp ³		<p>H₂O</p> 
1	3						<p>BF₃</p> 

sp²-hybridisatie

Aantal bindingspartners van X	Aantal niet-bindende paren op X	Som	Hybridisatie-toestand van X	Ruimtelijke structuur van X	Voorbeeld (X is vetgedrukt)
3	0	3	sp ²		<p>SO₃</p> 
2	1				<p>SO₂</p> 
1	2				<p>CO₂</p> 

sp-hybridisatie

Aantal bindingspartners van X	Aantal niet-bindende paren op X	Som	Hybridisatie-toestand van X	Ruimtelijke structuur van X	Voorbeeld (X is vet gedrukt)
2	0	2	sp		<p>BeCl₂</p>  <p>HCN</p> 
1	1				N₂

15. Dipoolmoleculen

Als bindende elektronenparen zich naar de meest elektronegatieve bindingspartner verplaatsen, kan dit aanleiding geven tot moleculen die een positieve en een negatieve (elektrische) pool bezitten. Dergelijke moleculen, waarbij de positieve en negatieve ladingszwaartepunten niet samenvallen, worden **dipoolmoleculen** genoemd. Dergelijke moleculen richten zich in een elektrisch veld met de positieve pool naar de negatieve zijde en met de negatieve pool naar de positieve zijde van het aangelegde veld.

Om na te gaan of we te doen hebben met een dipoolmolecule gebruiken we de vectormethode. Hierbij gaan we als volgt tewerk.

We tekenen de juiste ruimtelijke structuur van de molecule. Dat kan via de lewisvoorstelling, waarbij ervoor gezorgd wordt dat de exacte bindingshoeken worden weergegeven. We brengen langs de bindingen vectoren aan. De zin van die vectoren is van δ^+ naar δ^- en de grootte is (zo goed als mogelijk) evenredig met $\Delta\chi$. Vervolgens wordt de som van alle aanwezige vectoren gemaakt.

Is deze som nul dan is de molecule een apolaire molecule, is deze som niet nul dan hebben we te maken met een dipoolmolecule.

Deze vectoren zijn een kwantitatieve uitdrukking voor de graad van verschuiving van het bindende elektronenpaar.

Hier zullen wij de vectorgrootte evenredig nemen met het verschil in elektronegatieve waarde tussen de bindingspartners.

Overzicht

● Enkelvoudige stoffen

Vermits er bij enkelvoudige stoffen geen verschuivingen van de bindende paren plaatsgrijpen, kunnen er nooit dipoolmomenten optreden en zijn deze moleculen dus steeds apolair.

H_2 , Cl_2 , O_2 , N_2

● Samengestelde stoffen

➤ Diatomische moleculen

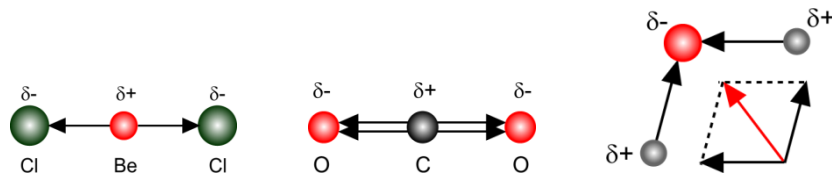
Deze moleculen zullen, als er een verschil in χ is tussen de bindingspartners, steeds polair zijn. Het zijn n.l. steeds lineaire moleculen.

HF , HCl , HBr , HI , ICl

➤ Polyatomische moleculen

Moleculen van het type AB_2

$BeCl_2$, CO_2 , H_2O

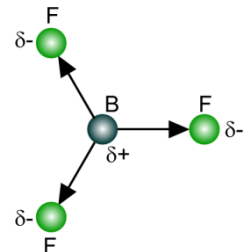


Bij de watermolecule zien we duidelijk dat de vectorsom verschillend is van nul. De watermolecule is dus een dipoolmolecule.

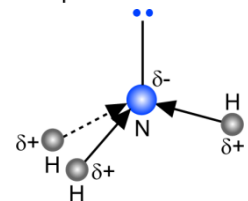
Moleculen van het type AB_3

BF_3 , NH_3

Bij BF_3 is het duidelijk te merken dat de som van de vectoren gelijk is aan nul. Het is een apolaire molecule.



Ook bij NH_3 is het tekenen van de vectoren niet echt nodig om te zien dat de som verschillend is van nul. De ammoniakmolecule is dus een dipoolmolecule.



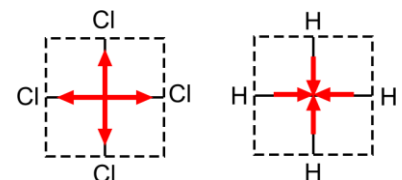
Moleculen van het type AB_4

CCl_4 , CH_4 , CCl_2F_2

Tekenen we de ruimtelijke voorstelling van de tetraëders, zoals het eigenlijk hoort, dan kunnen we ons via deze perspectieftekening geen som van vectoren voorstellen en wordt het moeilijk om het juiste besluit te trekken. Daarom gaan we de vier bindingen in één vlak afbeelden.

CCl_4 en CH_4

Het is duidelijk dat in beide gevallen de som van deze vier vectoren gelijk is aan nul: CCl_4 en CH_4 zijn apolaire moleculen.



In het geval van CCl_2F_2 moeten we alle mogelijkheden, waarop Cl en F t.o.v. elkaar op het vierkant kunnen geplaatst worden, onderzoeken. Blijkt dat bij één van die gevallen de som der vectoren verschillend is van nul, dan hebben we een dipoolmolecule. In de linkervoorstelling is de som nul, in de rechter daarentegen verschilt de som van nul. Het is een dipoolmolecule.

