ORGANSKA KEMIJA 1 – seminar

3. Hibridizacija

Seminar: Matija Popović, mag. chem. (mpopovic1@chem.pmf.hr)

Predavanja: prof. dr. sc. Ivana Biljan (ibiljan@chem.pmf.hr)

Linearna kombinacija atomskih orbitala

- Valne funkcije atomskih orbitala se mogu zbrajati i oduzimati te se na taj način dobe valne funkcije novih orbitala ***-linearna kombinacija atomskih orbitala.***

- Broj novih orbitala uvijek je jednak broju početnih orbitala

- Kombinacijom orbitala **različitih** atoma nastaju **molekulske orbitale (MO)** koje pokazuju vezna ili protuvezna međudjelovanja.

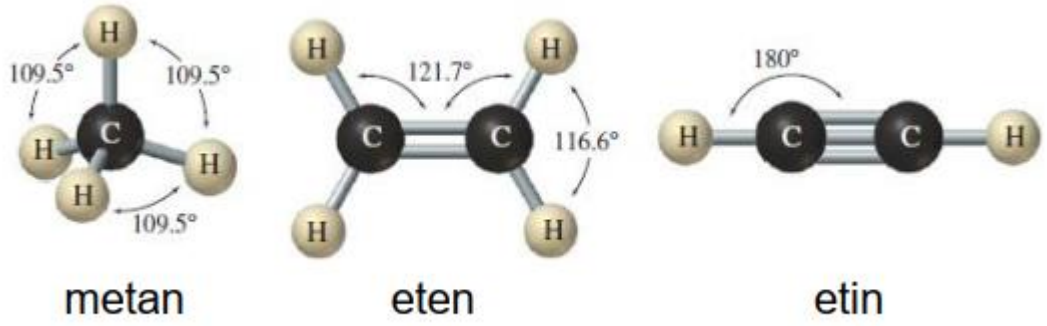
- Kombinacijom orbitala istog atoma nastaju hibridne atomske orbitale kojima je definirana geometrija veze.

Hibridizacija

- Hibridne atomske orbitale nastaju miješanjem orbitala **istog atoma**.

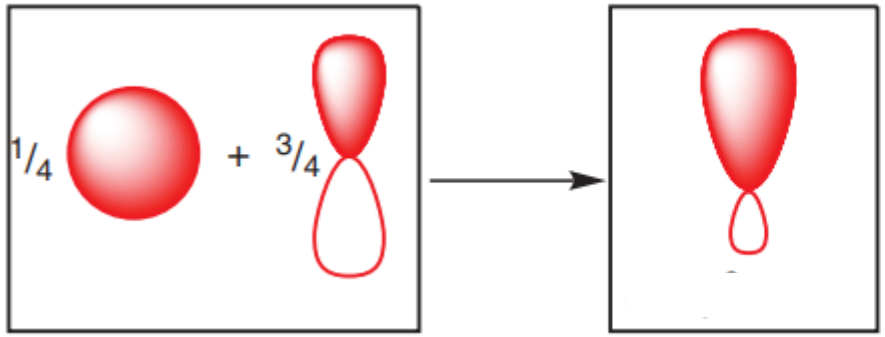
- One određuju geometriju molekula: s-orbitale i p-orbitale kombiniraju se tvoreći hibridne orbitale u kojima su elektronski parovi u najvećoj mogućoj mjeri udaljeni, a većina elektronske gustoće smještena je u području između jezgara.

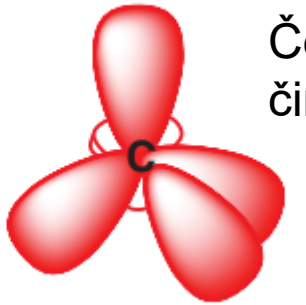
- Kut od 109,5° najveći je ako je riječ o odbijanju četiriju elektronskih parova, 120° je najveći razmak između triju, a 180° između dvaju parova.



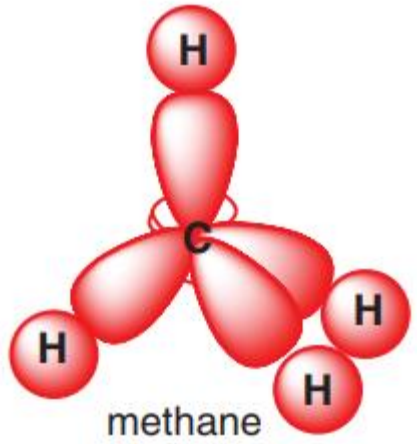
sp^3 – hibridne orbitale

- Međudjelovanjem 1 *s* i 3 *p* orbitale nastaju četiri sp^3-hibridne orbitale
- One su usmjerene pod kutem od **109,5°** - tetraedarska geometrija





Četitri sp^3 hibridne orbitale na jednom C atomu čine tetraedar



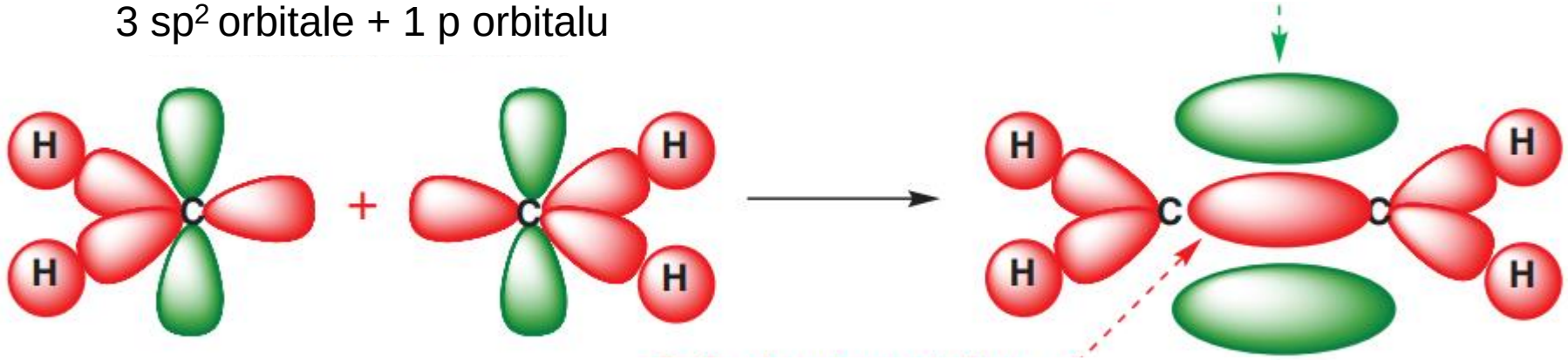
Ukoliko atom ugljika na promatronoj molekuli ima 4 σ veze možemo reći da je sp^3 hibridiziran.

sp^2 – hibridne orbitale

- Međudjelovanjem 1 *s* i 2 *p* orbitale nastaju tri sp^2 - hibridne orbitale.
- One su usmjerene pod kutem od **120°** - trigonska geometrija
- Na ravnivu triju sp^2-hibridnih orbitala okomita je nehibridizirana p_z-orbitala

U molekuli etena svaki C atom ima:
3 sp^2 orbitale + 1 p orbitalu

C–C π veza nastaje preklapanjem slobodnih *p* orbita C atoma



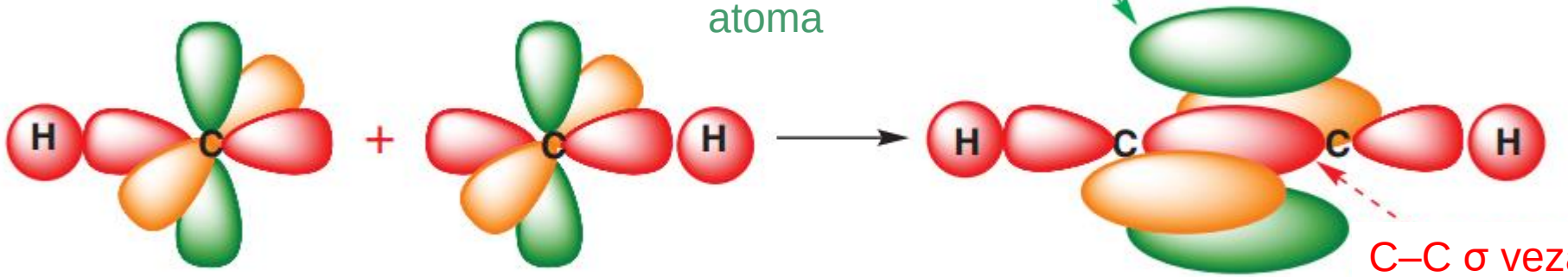
C–C σ veza nastaje preklapanjem sp^2 orbitalama C atoma

sp – hibridne orbitale

- Međudjelovanjem 1 *s* i 1 *p* orbitale nastaju dvije *sp*-hibridne orbitale.
- One su usmjerene u suprotnim smjerovima, a najveća elektronska gustoća je u području vezanja σ-veze.
- Vezni kut je **180°** - linearne veze

U molekuli etena svaki C atom ima:
2 sp orbitale + 2 p orbitalu

C–C π veze nastaju preklapanjem slobodnih *p* orbita C atoma



C–C σ veza nastaje preklapanjem sp^2 orbitalama C atoma

Opća pravila za određivanje hibridizacije orbitala i veznih kuteva u organskim molekulama:

1. U hibridnu orbitalu mogu ući σ-vezni elektroni i osamljeni elektronski parovi. Broj hibridnih orbitala može se izračunati zbrajanjem broja σ veza i osamljenih elektronskih parova odgovarajućeg atoma.

2. Na osnovi hibridizacije dobiva se uvid o najvećem mogućem veznom kutu (osamljeni elektronski parovi smanjuju odgovarajuće vezne kutove).

3. Kod višestrukih veza, “prva” veza je σ-veza nastala prekrivanjem hibridnih orbitala. “Druga” veza je π-veza nastala bočnim prekrivanjem nehibridiziranih p-orbitala, a “treća” veza (uključena u trostruku vezu) je druga π-veza, koja je okomita na prvu π-vezu.

Hibridne orbitale	Hibridizacija	Geometrija	Vezni kutovi / °
2	sp	Linearna	180
3	sp^2	Trigonska	120
4	sp^3	Tetraedarska	109,5

1. Za svaki od sljedećih spojeva: navedite hibridizaciju svih atoma osim vodika, prikažite prekrivanje orbitala prilikom nastanka veze pri čemu ćete naznačiti njihov prostorni raspored, definirajte veze i približne kutove među vezama.

a) $H_2C{=}CH_2$

b) $CH_3CH{=}NH$

c) CH_3COOH

d) CH_3CN

2. Nacrtajte Lewisove strukture navedenih spojeva. Opišite hibridizaciju, geometriju i vezne kutove svakog atoma, osim vodika. Nacrtajte trodimenzijski prikaz tih struktura služeći se klinovima i crtkanim linijama.

a) CH_3CHNCH_3

b) $(CH_3)_3N$

c) HCCCHO

