Hybridisatie

Uitweiding 1 (Een verklaring voor de tetraëdrische structuur van CH_4.)**.** De elektronenstructuur van C is $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$, en C heeft dus twee ongepaarde elektronen in de orbitalen $2p_x$ en $2p_y$. De elektronenstructuur van H is $1s^1$, en H heeft dus één ongepaard elektron in het orbitaal $1s$.

Ondanks het feit dat het koolstofatoom maar *twee* ongepaarde elektronen bevat stelt men vast dat één koolstofatoom zich aan *vier* waterstofatomen kan binden ter vorming van CH_4.

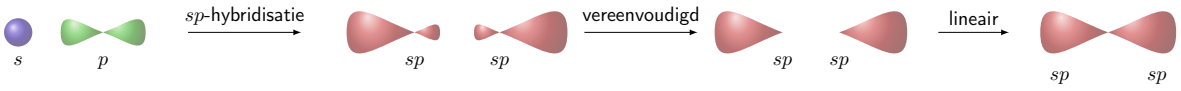
Een eenvoudige verklaring zou kunnen zijn dat één elektron van het $2s$ orbitaal van C zich verplaatst naar het $2p_z$ orbitaal, waardoor C dan *vier half-gevulde* orbitalen zou hebben (namelijk $2s$, $2p_x$, $2p_y$ en $2p_z$). Via elk van deze orbitalen zou dan een binding met één H atoom mogelijk zijn. Deze vier bindingen zouden dan wel niet gelijkwaardig zijn, want het $2s$ orbitaal heeft een andere structuur dan de $2p$ orbitalen.

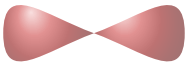
Men stelt echter vast dat in de realiteit de vier bindingen in het molecule CH_4 volledig gelijkwaardig zijn, en een tetraëdrische structuur vormen.

In 1931 stelde de chemicus Linus Pauling volgende oplossing voor: door de aanwezigheid van de vier H atomen vormen de drie (gevulde) $2s$, $2p_x$ en $2p_y$ en het (lege) $2p_z$ orbitaal samen vier **nieuwe, gemengde of hybride orbitalen van een nieuw type** dat hij het sp^3 type noemde, en waarbij elk sp^3 orbitaal één elektron bevat. Deze vier hybride orbitalen kunnen nu elk een binding maken met een H atoom door het delen van elektronen. Deze uitleg van Pauling verklaart niet alleen de gelijkwaardigheid van de vier verbindingen, maar ook de tetraëdrische ruimtelijke structuur. Inderdaad, omwille van de afstotende elektrische krachten gaan de vier gelijkwaardige hybride orbitalen zo ver mogelijk uit elkaars buurt blijven, en dat is precies in de vorm van een tetraëder zoals experimenteel werd vastgesteld.

Deze theorie van Pauling van *hybride orbitalen* verklaarde ook vele andere andere bindingen, en werd algemeen aanvaard. Ondertussen wordt ze zelf verklaard door de kwantummechanica, die zegt dat het sp orbitaal een 'superpositie' is van een s en een p orbitaal. Maar dat valt (tamelijk ver!) buiten deze cursus.

De ruimtelijke schikking van de elektronenwolken rond een centraal atoom van een molecule kan worden verklaard doordat de orbitalen van de buitenste schil zich vermengen ('hybridiseren') tot nieuwe soorten orbitalen, zogenaamde **hybride orbitalen**. We bespreken hier enkel de meest eenvoudige types, namelijk de hybride types sp, sp^2 en sp^3 die gevormd worden door vermenging van s en p orbitalen van het centrale atoom. Deze types hybride orbitalen hebben –zoals de p orbitalen– de vorm van een halter, maar nu met één erg grote lob en één erg kleine lob. Omdat bindingen plaatsvinden langs de grote lob, en om de tekeningen niet te complex te maken tekenen we in deze cursus de kleine lob zelfs meestal niet.



Let dus op:  is *één* p-orbitaal, maar  zijn *twee* sp-orbitalen.

De hybride orbitalen sp, sp^2 en sp^3 hebben dezelfde vorm, en hebben een energieniveau dat ligt *tussen* het energieniveau van de oorspronkelijke s en p orbitalen, zoals te verwachten bij een vermenging. Door de elektrische afstotingskrachten krijgen de hybride orbitalen een positie rond het centrale atoom, en dat verklaart de basisgeometrie van deze (eenvoudige) bindingen.

De vermenging of hybridisatie van één s-orbitaal met één, twee of drie p-orbitalen kan als volgt plaatsvinden:

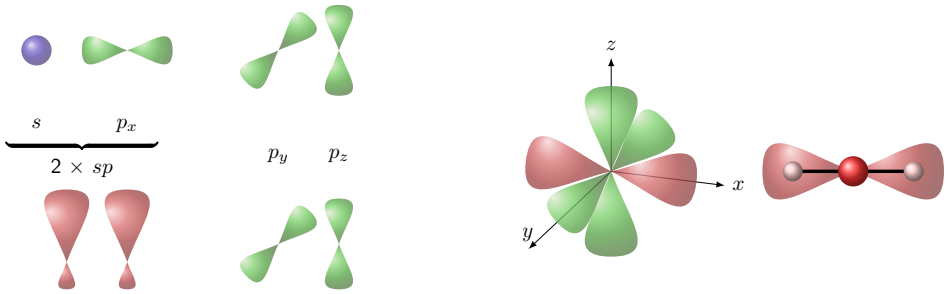
één s-orbitaal mengt zich met **één** p orbitaal tot **twee** (hybride) sp orbitalen (sp **hybridisatie**)

één s-orbitaal mengt zich met **twee** p orbitalen tot **drie** (hybride) sp^2 orbitalen (sp^2 **hybridisatie**)

één s-orbitaal mengt zich met **drie** p orbitalen tot **vier** (hybride) sp^3 orbitalen (sp^3 **hybridisatie**)

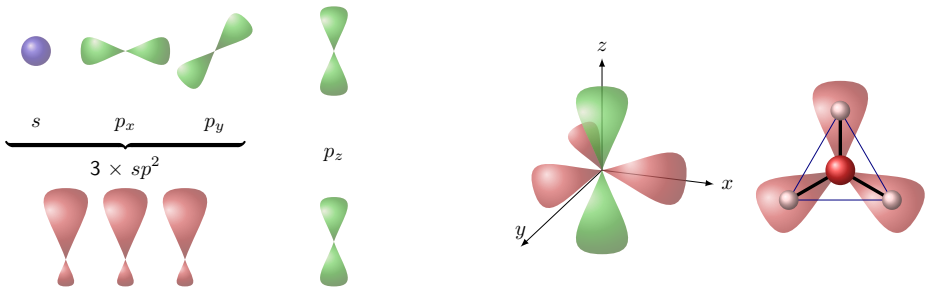
Bij **sp hybridisatie** liggen de twee hybride orbitalen op één lijn, dus met hoek van $180\,°$, omdat ze elkaar maximaal afstoten, en de ruimtelijke schikking is dus **lineair**. De twee niet gehybridiseerde p-orbitalen staan *loodrecht* op de lineaire schikking van de twee hybride orbitalen.

CC BY-NC-SA 4.0



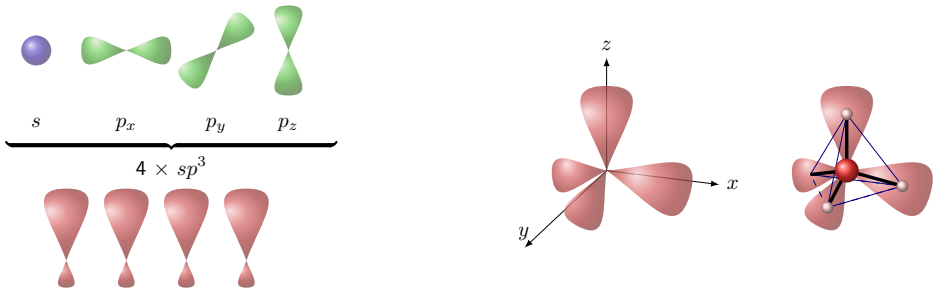
Figuur 1 – sp hybridisatie

Bij **sp^2 hybridisatie** liggen de drie hybride orbitalen in één vlak, met onderlinge hoeken gelijk aan $120\,^\circ$, en heet de ruimtelijke schikking **trigonaal vlak**. Het overblijvende p-orbitaal staat *loodrecht* op dit vlak.



Figuur 2 – sp^2 hybridisatie

Bij **sp^3 hybridisatie** vormen de vier hybride orbitalen een **tetraëder**, met onderlinge hoeken van $109{,}5\,^\circ$.



Figuur 3 – sp^3 hybridisatie

SG:	2	3	4
Hybridisatie:	sp	sp^2	sp^3
Atoomorbitalen:	$s + 1{\times}p$	$s + 2{\times}p$	$s + 3{\times}p$
Hybride orbitalen:	$2 \times sp$	$3 \times sp^2$	$4 \times sp^3$
Basisgeometrie:	**lineair**	**trigonaal vlak**	**tetraëder**
Hoeken :	$180\,^\circ$	$120\,^\circ$	$109{,}5\,^\circ$

Tabel 1 – Verband tussen sterisch getal, hybridisatie en schikking hybride orbitalen.

CC BY-NC-SA 4.0