

2 Molecuulmodellen

1 Edelgassen

The periodic table highlights the noble gases (Edelgassen) in yellow. They are located in group 18, which includes Helium (He), Neon (Ne), Argon (Ar), Krypton (Kr), Xenon (Xe), and Radon (Rn). The table also shows the Lanthanides and Actinides at the bottom.

Afb. 1 – Positie van de edelgassen in het PS



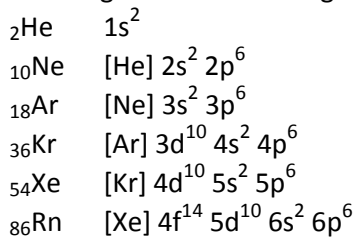
Afb. 2 – William Ramsay



Afb. 3 – Lord Rayleigh
(John William Strutt)

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 (zie jaartal). 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:



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



Edelgas	Jaartal	Ontdekker(s)	Naam
Helium	1895	Ramsay	Helios = zon
Neon	1898	Ramsay & Travers	Neos = nieuw
Argon	1894	Rayleigh & Ramsay	Argos = inactief
Krypton	1898	Ramsay & Travers	Kryptos = verborgen
Xenon	1898	Ramsay & Travers	Xenos = vreemdeling

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 Atoombinding of covalente binding

Wanneer twee niet-metalen met elkaar in contact komen onder reactieomstandigheden is het meestal zo dat, om de edelgasconfiguratie te bekomen, er teveel elektronen moeten worden afgestaan of teveel elektronen moeten worden opgenomen, wat in beide gevallen energetisch niet haalbaar is binnen een bepaalde reactie. Ook wanneer atomen van hetzelfde element zich met elkaar gaan binden (H_2 , O_2), kunnen we niet aannemen dat het ene atoom elektronen zou afstaan aan het andere vermits deze atomen evenveel van elektronen houden. Hier zal het samenbrengen van valentie-elektronen uitkomst bieden. We spreken van een covalente binding.

Voorbeeld: Afb. 4

Beide waterstofatomen beschikken, na het ontstaan van het gemeenschappelijke elektronenpaar, over twee elektronen (heliumconfiguratie). Zo wordt de diwaterstofmolecule gevormd.

Een molecule is een ongeladen deeltje waarbij de samenstellende atomen op covalente wijze gebonden zijn.

Energetisch bekeken is het ook zo dat de enthalpie van twee waterstofatomen groter is dan deze van de diwaterstofmolecule. In 1927 slaagden Heitler en London er in via de combinatie van de golf functies van de elektronen van twee waterstofatomen de verandering van energie-inhoud in functie van de afstand tussen de kernen van twee waterstofatomen te berekenen.

Bij grote onderlinge afstand tussen de kernen van beide atomen is er geen wisselwerking en de atomen bestaan onafhankelijk van elkaar met een bepaalde energie-inhoud. Deze energie stellen wij in ons diagram arbitrair gelijk aan nul. Als zij naderen tot de twee atomen elkaar raken ontstaan aantrekkende krachten tussen het elektron van het ene waterstof atoom en de kern van het andere en vice-versa. Ook ontstaan er afstotende krachten tussen de elektronen onderling en de kernen onderling. Zolang de energie van het systeem daalt is de aantrekking belangrijker dan de afstoting en wordt het geheel stabiel. Op een onderlinge afstand van 74 pm tussen de kernen is de energie-inhoud van het systeem minimaal en is de aantrekkende kracht tussen beide waterstofatomen maximaal. Er is dan bij de vorming van een stabiele diwaterstofmolecule 436 kJ/mol vrijgekomen. Dit is trouwens ook het energiebedrag dat we aan 1 mol diwaterstofmoleculen zullen moeten toevoegen om alle bindingen tussen de waterstofatomen te breken. Men noemt dit de bindingsenergie.

Brengt men de waterstofkernen op minder dan 74 pm van elkaar, dan worden de afstotingskrachten snel groter om zeer groot te worden als de kernafstand tot nul (kernfusie) nadert.

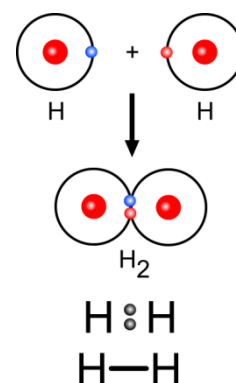
Lewisvoorstelling van de covalente binding

Om snel moleculen, bouwstenen van niet-metalen en niet-zouten, te kunnen voorstellen doen we beroep op de voorstellingwijze van Lewis. Deze lewisvoorstelling leert ons niets over de juiste ruimtelijke schikking van de atomen in de moleculen. Dit aspect volgt later.

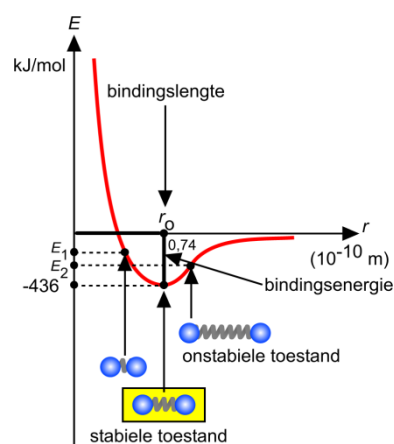
Gilbert Newton Lewis, die in 1916 aan de basis lag van de idee van de covalente binding, gebruikte bij de introductie van dit model elektronenstipformules voor de moleculen. De elektronenstipvoorstelling geeft van de atomen in die molecule de elektronenverdelingen op de buitenste schillen weer, samen met de gemeenschappelijke of bindende elektronenparen. Deze elektronenstipvoorstelling noemt men ook **lewisformule** of **structuurformule**.

We onderscheiden, naar het aantal valentie-elektronen dat door beide bindingspartners gemeenschappelijk gedeeld wordt, **enkelvoudige**, **dubbele** en **drievoudige bindingen**.

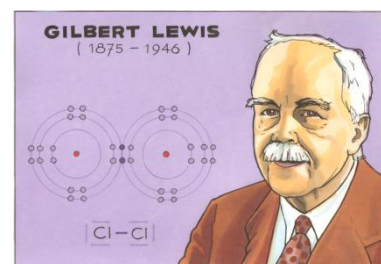
Naar de herkomst van het gemeenschappelijke paar onderscheiden we normale covalente bindingen, waarbij beide bindingspartners een gelijke bijdrage leveren tot de gemeenschappelijke elektronenparen, en datieve covalente bindingen, waarbij het gemeenschappelijke paar afkomstig is van één van beide bindingspartners (donor) en waarbij de andere partner, die



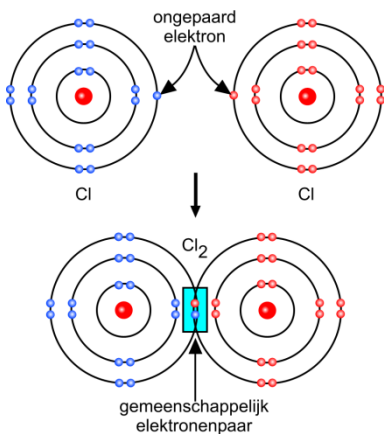
Afb. 4 – H₂-molecule



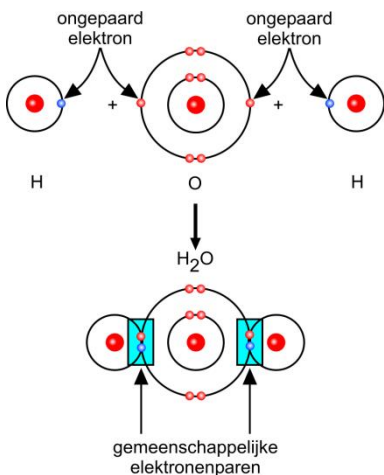
Afb. 5 – Energiediagram H-H-binding



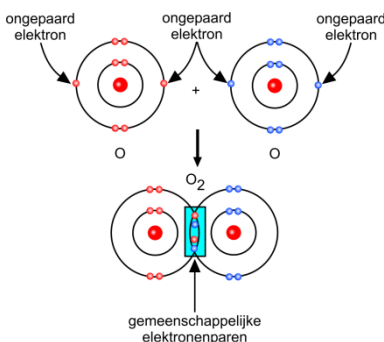
Afb. 6 – Gilbert Lewis



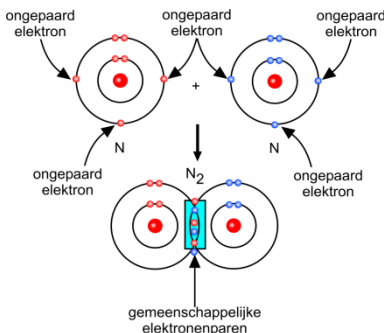
Afb. 7 – Enkelvoudige covalente binding in Cl_2



Afb. 8 – Enkelvoudige covalente bindingen in H_2O



Afb. 9 – Dubbele covalente binding in O_2



Afb. 10 – Drievoudige covalente binding in N_2

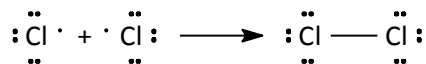
geen bijdrage levert, acceptor genoemd wordt. Vandaar ook de naam donor-acceptorbinding.

Voorbeelden

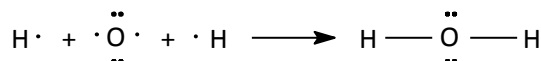
Normale covalente bindingen

Enkelvoudige covalente bindingen

Cl_2

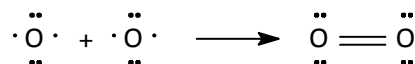


H_2O

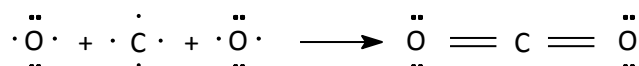


Dubbele covalente bindingen

O_2

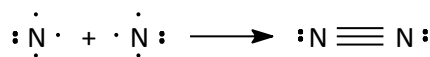


CO_2

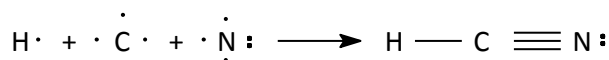


Drievoudige covalente bindingen

N_2

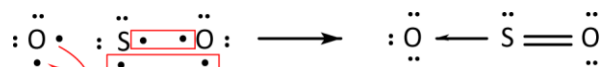


HCN



Datieve covalente binding of donor-acceptorbinding

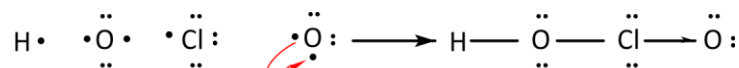
SO_2



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 tweedezuurstofatoom kunnen de beide ongepaarde elektronen in één orbitaal plaatsnemen, zodat er een lege orbitaal ontstaat die kan overlappen met de volledig gevulde van zwavel.

De **donor-acceptorbinding** wordt weergegeven door een pijl van donor naar acceptor.

HClO_2



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 een voorbeeld.



1^{ste} regel

We maken 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.

$$V = 2 \times 1 (\text{H}) + 1 \times 6 (\text{S}) + 4 \times 6 (\text{O}) = \mathbf{32}$$

2^{de} regel

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

$$E = 2 \times 2 (\text{H}) + 1 \times 8 (\text{S}) + 4 \times 8 (\text{O}) = \mathbf{44}$$

3^{de} regel

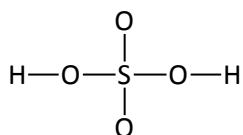
We berekenen het aantal bindende paren $= B = \frac{E - V}{2}$.

Vermits er 44 elektronen nodig zijn en we slechts over 32 elektronen beschikken, zullen er elektronen tweemaal moeten geteld worden. Enkel de bindende paren worden dubbel geteld. Uit het voorgaande cijfermateriaal kunnen we berekenen dat er **12** ($= E - V$) elektronen dubbel moeten geteld

worden wat overeenkomt met **6** ($= B = \frac{E - V}{2}$) bindende paren.

4^{de} regel

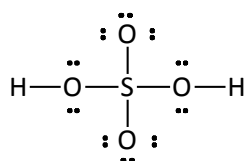
We tekenen de structuur zo symmetrisch mogelijk en brengen de bindende paren aan. Hierbij letten we er op dat waterstof steeds eindstandig is, dat er geen ringstructuren gemaakt worden en dat atomen van de zelfde elementensoort niet met elkaar verbonden worden. (Enkelvoudige stoffen en koolstofketens, vooral in de organische chemie, vormen hierop de uitzondering.)



5^{de} regel

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 ($= 2B = E - V$) 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 achtoomringing.

$$\frac{32 - 12}{2} = \mathbf{10}$$

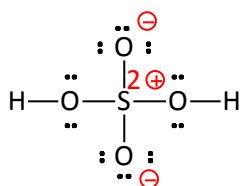


6^{de} regel

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 rekent 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, ...



Welke atomen aan elkaar gebonden zijn en met welk type binding moet bij meer complexe moleculen volgen uit grondig structuuronderzoek en ons dan ook worden medegedeeld. Toch komen we met hogervermelde regels al een heel eind als we bovendien nog met het volgende rekening houden: structuren met het kleinste aantal formele ladingen leveren de grootste bijdrage tot de realiteit (rekening houdend met hoger vermelde regels):

- structuren met gelijknamige ladingen op naburige atomen dragen in geringe mate bij tot de realiteit,
- structuren met positieve formele ladingen op sterk elektronegatieve atomen zoals zuurstof dragen weinig bij tot de realiteit.



4 Gebruik bovenstaande regels om de lewisstructuren (formules) te schrijven van volgende oxozuren.

H ₂ CO ₃	diwaterstofcarbonaat koolzuur
HNO ₃	waterstofnitraat salpeterzuur
HNO ₂	waterstofnitriet salpeterigzuur
H ₃ PO ₄	triwaterstoffsfaat fosforzuur
H ₂ SO ₄	diwaterstofsulfaat zwavelzuur
H ₂ SO ₃	diwaterstofsulfiet zwaveligzuur
HClO ₄	waterstofperchloraat perchloorzuur

HClO ₃	waterstofchloraat chloorzuur
HClO ₂	waterstofchloriet chloorigzuur
HClO	waterstofhypochloriet onderchloorigzuur hypochloorigzuur
H ₂ S ₂ O ₃	diwaterstofthiosulfaat

Valentiebindingstheorie (VB-theorie van Heitler en London)

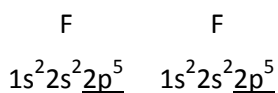
Deze theorie is de eenvoudigste. Er wordt verondersteld dat, als twee atomen zich met elkaar binden, de orbitalen waarin de ongepaarde elektronen zich bevinden, elkaar overlappen. Op die manier kan in de overlappingsruimte een gemeenschappelijk elektronenpaar ontstaan.

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

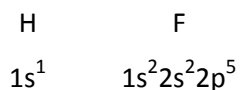
De bindende elektronen (het bindende doublet) worden aangebracht in de overlappingsruimte. De elektronen moeten een tegengestelde spin hebben omdat ze tot éénzelfde waarschijnlijkheidsverdeling of orbitaal moeten kunnen behoren. Bij een dergelijke bindingsbenadering is de sterkte van de binding evenredig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

Andere voorbeelden

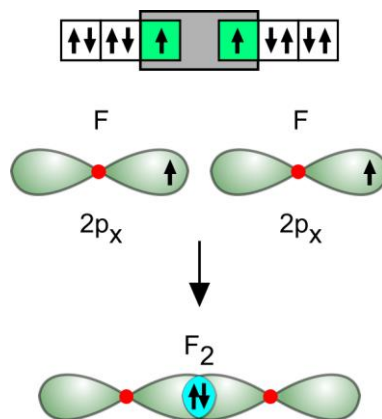
Difluor F₂: Afb. 14



Waterstoffluoride HF: Afb. 15



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.



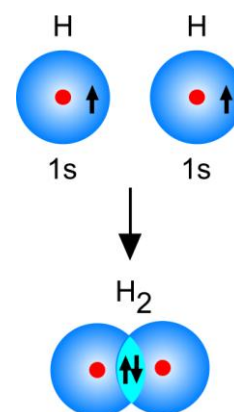
Afb. 14 – σ -binding in F₂



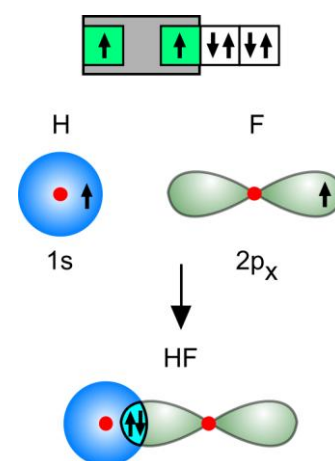
Afb. 11 – Walter Heitler



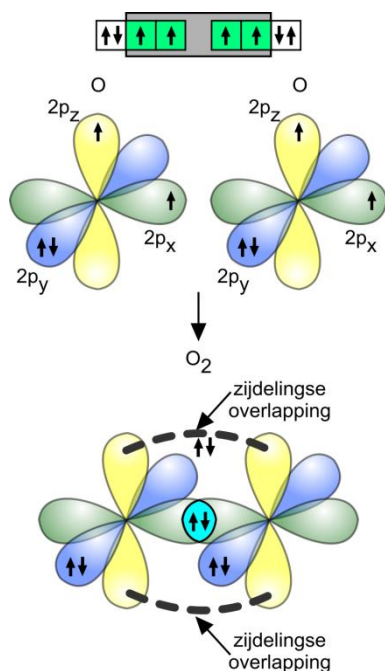
Afb. 12 – Fritz London



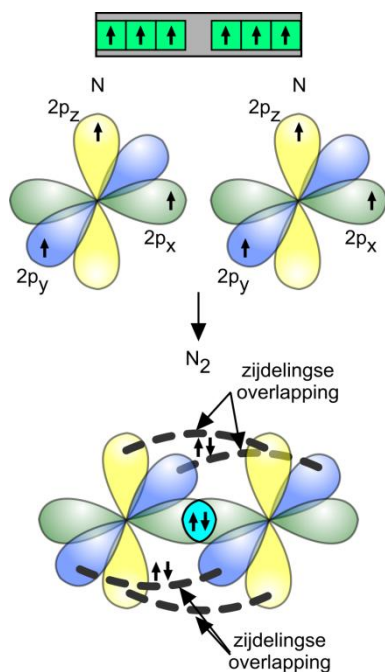
Afb. 13 – σ -binding in H₂



Afb. 15 – σ -binding in HF

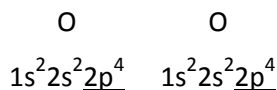


Afb. 16 – σ - en π -binding in O_2



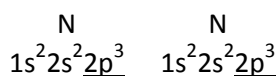
Afb. 18 – σ - en π -binding in N_2

Dizuurstof O_2 : Afb. 16



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.

Distikstof N_2 : Afb. 18

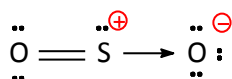


Naast de σ -binding (rechtstreekse overlapping tussen de p_x -orbitalen) zijn er nu twee π -bindingen (zijdelingse overlapping tussen respectievelijk de p_y -orbitalen en de p_z -orbitalen).

De VB-theorie levert ons vooral informatie over de ruimtelijke structuur van de moleculen.

Mesomerie

SO_2



Via metingen werd vastgesteld dat de beide S–O-bindingen dezelfde bindingslengte en dezelfde bindingssterkte hebben, niettegenstaande ze in de lewisstructuur volledig anders zijn: dubbel covalent voor de linkerbinding, datief-covalent voor de rechterbinding. Daaruit moeten we besluiten dat er iets schort aan onze voorstellingswijze, want we stellen immers volkomen identieke bindingen op een verschillende wijze voor.

De oplossing voor dit probleem is het mesomerie-model. In dit model tekent men meerdere lewisstructuren (kanonieke), die alle voldoen aan de twee- of achtoomringing. In deze kanonieke bevinden de atoomkernen zich op dezelfde plaats, maar is de elektronenomringing verschillend. Men neemt aan dat geen enkele van deze kanonieke de realiteit voorstelt, maar dat de reële toestand, de hybride, het best benaderd wordt door een kruising van deze kanonieke.

De oplossing voor dit probleem is het mesomerie-model. In dit model tekent men meerdere lewisstructuren (kanonieke), die alle voldoen aan de twee- of achtoomringing. In deze kanonieke bevinden de atoomkernen zich op dezelfde plaats, maar is de elektronenomringing verschillend. Men neemt aan dat geen enkele van deze kanonieke de realiteit voorstelt, maar dat de reële toestand, de hybride, het best benaderd wordt door een kruising van deze kanonieke.

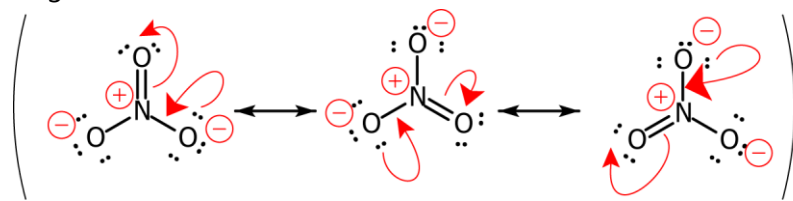


Volgende regels zijn in dit opzicht belangrijk:

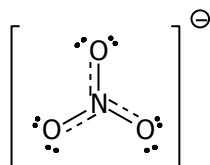
- structuren met het kleinste aantal formele ladingen leveren de grootste bijdrage tot de hybride,
- structuren met gelijknamige ladingen op naburige atomen dragen in geringe mate bij tot de hybride,
- structuren met positieve formele ladingen op sterk elektronegatieve atomen zoals zuurstof dragen weinig bij tot de realiteit.

We kunnen slechts spreken van mesomerie vanaf het ogenblik dat een aantal elektronen over minstens drie atoomkernen verdeeld zijn. De elektronen noemt men gedelokaliseerde elektronen. In het geval SO_2 zijn er vier elektronen over drie kernen verdeeld.

Soms gebruikt men één structuur om de reële toestand of de hybride weer te geven. Daarbij $\text{:}\ddot{\text{O}}\text{---}\ddot{\text{S}}\text{---}\ddot{\text{O}}\text{:}$ worden de gedelokaliseerde elektronen met stippellijnen weergegeven en worden er geen formele ladingen geschreven. In deze voorstelling voldoen niet alle atomen aan de twee- of achtomringing.



Er zijn zes gedelokaliseerde elektronen.



5 Geef de structuur van:





3 Hybridisatie

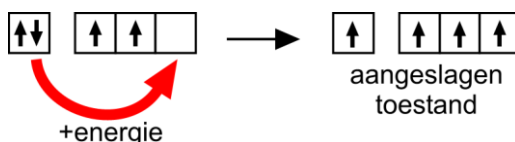
De VB-theorie levert ons informatie over de ruimtelijke structuur van moleculen. In veel gevallen is de structuur die we afleiden door gebruik te maken van de VB-theorie, niet overeen te stemmen met de realiteit. Dit komt omdat golf functies opgesteld werden voor losse atomen (in feite voor het waterstofatoom), terwijl in moleculen de atomen elkaar onderling beïnvloeden. Om het model op dit vlak te verfijnen werd het hybridisatiemodel ingevoerd.

Hybridisatie betekent kruising. Chemisch gaat het om combinaties van wiskundige functies (orbitalen).

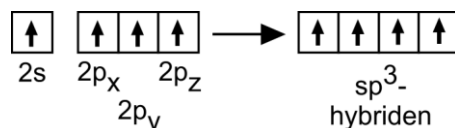
Tetragonale of sp^3 -hybridisatie

We nemen als voorbeeld de CH_4 -molecule (methaan).

Beschouwen we de elektronenconfiguratie van het C-atoom: $1s^2 2s^2 2p^2$. 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.

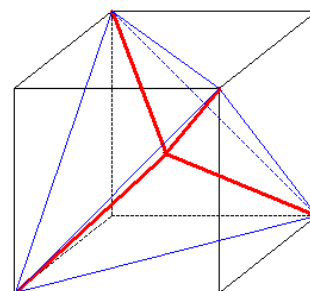


Metingen hebben aangetoond dat de vier C-H-bindingen gelijk zijn in sterkte en in lengte. Een overlapping van een s -orbitale (van H) met respectievelijk een s - en drie p -orbitalen van C kan dit niet verklaren. Men moest vier volkomen gelijkwaardige waarschijnlijkheidsverdelingen in het leven roepen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

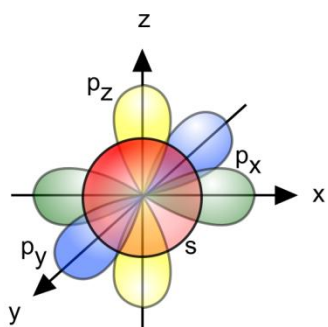


De symmetrie-assen van deze vier hybridorbitalen moeten zo ver mogelijk uit elkaar liggen. Dit betekent dat ze gericht zijn naar de hoekpunten van een regelmatig viervlak of een tetraëder: de assen van de vier sp^3 -hybridorbitalen vormen een hoek van $109^\circ 28'$.

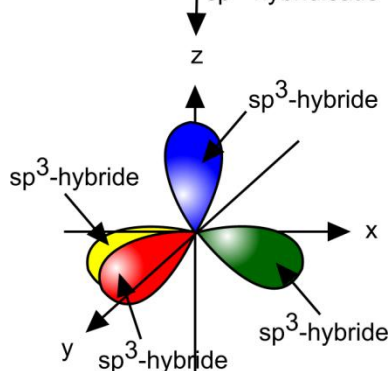
De structuur van CH_4 is dus tetraëdrisch.



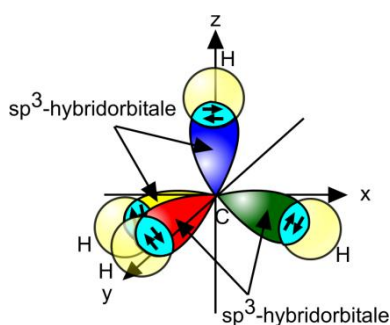
Ook in een ethaanmolecule C_2H_6 vertonen de C-atomen een sp^3 -hybridisatietoestand.



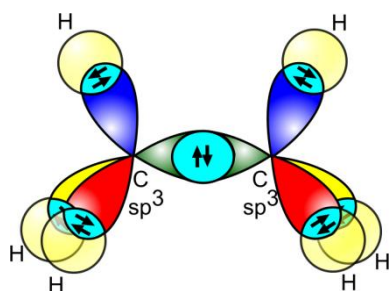
sp^3 -hybridisatie



Afb. 19 – sp^3 -hybridisatie



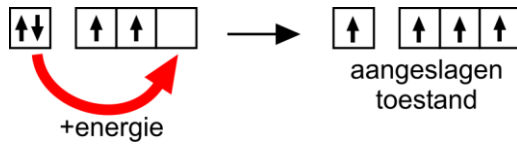
Afb. 20 – Tetraëdrische structuur van CH_4



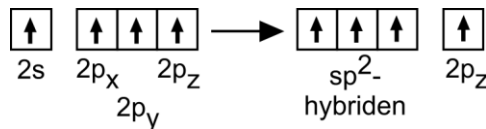
Afb. 21 – C_2H_6 -molecule

Trigonale of sp^2 -hybridisatie

We nemen als voorbeeld de C_2H_4 -molecule (etheen).
De C-atomen bevinden zich in aangeslagen toestand.



In dit geval maakt men een combinatie van de 2s en twee 2p orbitalen: sp^2 -hybridisatie.

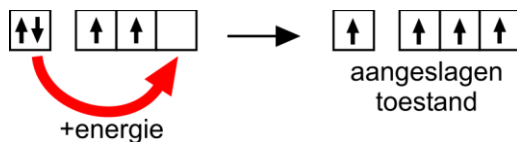


Er ontstaan daarbij 3 hybridorbitalen, die zover mogelijk uit elkaar liggen: dit betekent in dit geval dat de drie sp^2 -hybridorbitalen een hoek van 120° maken. De lege p-orbitale staat loodrecht op het vlak van de sp^2 -hybridorbitalen.

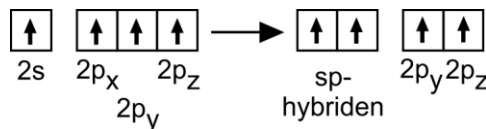
Dit levert voor de etheenmolecule het volgende resultaat op: Afb. 23. Tussen beide koolstofatomen hebben we een dubbele binding, bestaande uit een σ -binding (rechtstreekse overlapping) en een π -binding (zijdelingse overlapping). De H-atomen zijn aan C gebonden d.m.v. een σ -binding. De bindingen rond beide C-atomen vormen hoeken van 120° .

Digonale of sp -hybridisatie

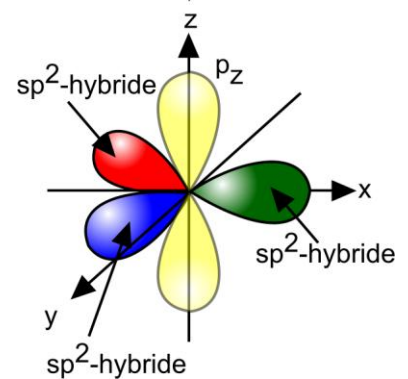
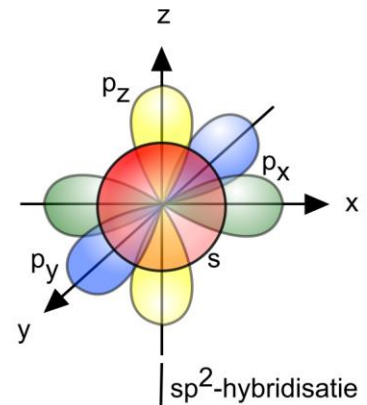
We nemen als voorbeeld de C_2H_2 -molecule (ethyn).
De C-atomen bevinden zich in aangeslagen toestand.



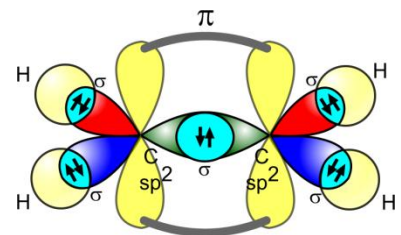
In dit geval maakt men een combinatie van de 2s en slechts één 2p orbitale: sp -hybridisatie.



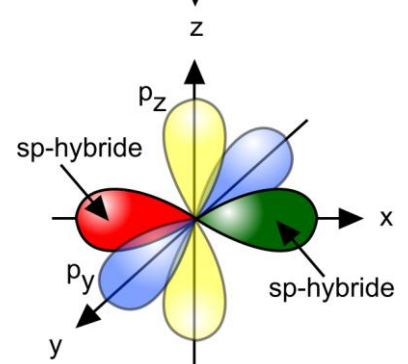
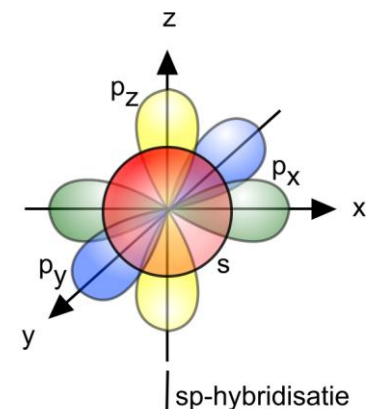
Er ontstaan daarbij 2 hybridorbitalen, die zover mogelijk uit elkaar liggen: dit betekent in dit geval dat de twee sp -hybridorbitalen een hoek van 180° maken (lineair). De beide lege p-orbitalen staan loodrecht op de sp -hybridorbitalen en ook loodrecht op elkaar.



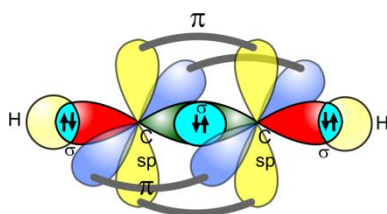
Afb. 22 – sp^2 -hybridisatie



Afb. 23 – C_2H_4 -molecule



Afb. 24 – sp -hybridisatie
Hoofdstuk 2 – Molecuulmodellen



Afb. 25 – C₂H₂-molecule

Dit levert voor de ethynmolecule het volgende resultaat op: Afb. 25Afb. 23. Tussen beide koolstofatomen hebben we een drievoudige binding, bestaande uit een σ -binding (rechtstreekse overlapping) en twee π -bindingen (zijdelingse overlapping). De H-atomen zijn aan C gebonden d.m.v. een σ -binding. De bindingen rond beide C-atomen vormen hoeken van 180°: de molecule heeft een lineaire structuur.

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.

Keuze van de hybridisatie

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.

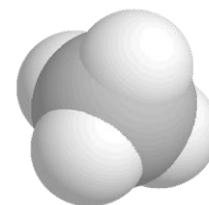
Som	Hybridisatie
4	sp^3
3	sp^2
2	sp

In de tabel op de volgende bladzijde vind je een gedetailleerd overzicht van alle mogelijkheden.

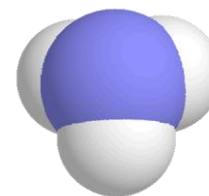


6 Werk de voorbeelden uit de tabel zelf uit.

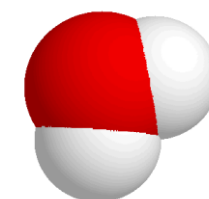
Aantal bindingspartners van X	Aantal niet-bindende paren op X	Som	Hybridisatietoestand van X	Ruimtelijke structuur van X	Voorbeelden (X is vet gedrukt)
4	0	4	sp^3		$\text{CH}_4 - \text{NH}_4^+ - \text{SO}_4^{2-}$
3	1				$\text{NH}_3 - \text{H}_3\text{O}^+$
2	2				H_2O
1	3				$\text{BF}_3 - \text{Cl}_2$
3	0	3	sp^2		$\text{BF}_3 - \text{C}_2\text{H}_4 - \text{SO}_3 - \text{NO}_3^-$
2	1				SO_2
1	2				$\text{CO}_2 - \text{S}_2 - \text{SO}_2$



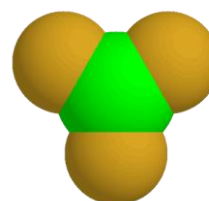
Afb. 26 – Bolkapmodel
 CH_4



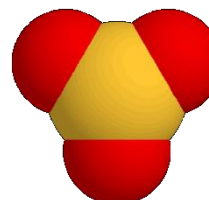
Afb. 27 - Bolkapmodel
 NH_3



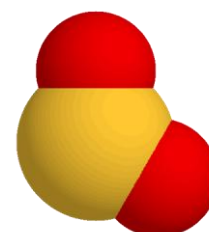
Afb. 28 - Bolkapmodel
 H_2O



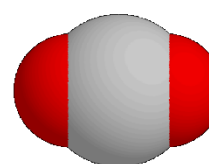
Afb. 29 - Bolkapmodel
 BF_3



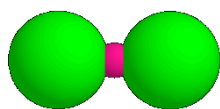
Afb. 30 - Bolkapmodel
 SO_3



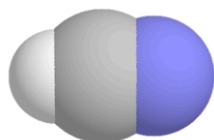
Afb. 31 - Bolkapmodel
 SO_2



Afb. 32 - Bolkapmodel
 CO_2



Afb. 33 - Bolkapmodel
BeCl₂



Afb. 34 - Bolkapmodel
HCN

Aantal bindingspartners van X	Aantal niet-bindende paren op X	Som	Hybridisatietoestand van X	Ruimtelijke structuur van X	Voorbeelden (X is vet gedrukt)
2	0	2	sp		CO ₂ - C ₂ H ₂ - Be Cl ₂ - HCN
1	1				N ₂ - CN ⁻
0	1				H ₂

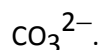
De hybridisatietoestand van een atoom kan ook bepaald worden op de volgende manier.

Tel het aantal π -bindingen rond het atoom. Houd daarbij rekening met volgende regels.

Binding	Aantal π -bindingen	Hybridisatie
— σ	0	sp^3
= π σ	1	sp^2
≡ π π σ	2	sp

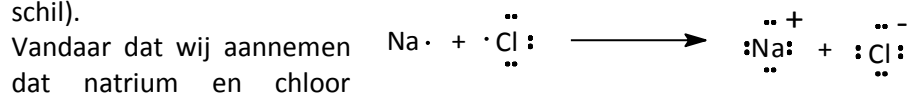


8 Geef, naar analogie met wat voorafgaat, de ruimtelijke structuur van:



4 Ionbinding – Covalente binding

In natriumchloride is er tussen het natrium- en het chlooratoom waarschijnlijk geen covalente binding gevormd. Dit heeft inderdaad weinig zin: het chlooratoom bereikt er wel een edelgasconfiguratie door, het natriumatoom helemaal niet (slechts 2 elektronen in de buitenste schil).



Vandaar dat wij aannemen dat natrium en chloor gebonden zijn door een ionbinding: het elektron uit de buitenste schil van Na wordt volledig afgestaan aan het Cl-atoom en er ontstaan ionen.

Volgens Pauling heeft de binding in NaCl echter ook een zeker covalent karakter. Hij gaat ervan uit dat ook in ionverbindingen mesomerie optreedt en dat NaCl een hybride is tussen NaCl(100% covalent) en NaCl(100% ionair) en dat het verschil in χ bepaalt welk karakter de bovenhand haalt. Bij NaCl is $\Delta\chi = 3,2 - 0,9 = 2,3$, wat volgens Pauling betekent dat de binding 73% ionkarakter heeft.

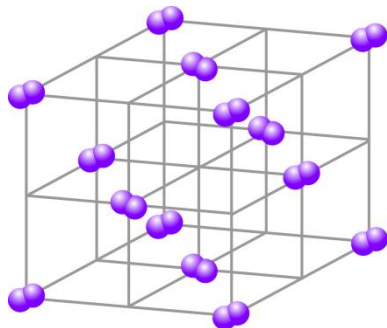
Uit onderstaande tabel kan je het karakter van een binding afleiden.

$\Delta\chi$	% ionkarakter	% covalent karakter	$\Delta\chi$	% ionkarakter	% covalent karakter
0,0	0	100	2,1	67	33
0,4	4	96	2,2	70	30
0,8	15	85	2,3	73	27
1,2	30	70	2,6	82	18
1,6	47	53	3,0	89	11
1,7	50	50	3,2	92	8

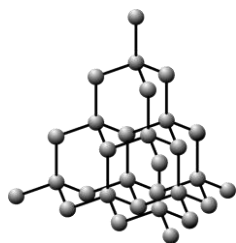
Is $\Delta\chi = 0$, dan spreken we van een zuivere covalente binding.

Als $0 < \Delta\chi < 1,7$, dan spreken we van een covalente binding met ionkarakter.

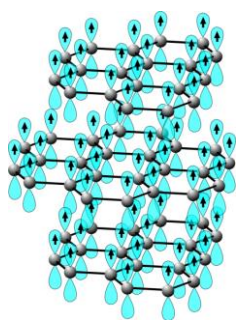
Is $\Delta\chi > 1,7$, dan spreken we van een ionbinding (met gedeeltelijk covalent karakter).



Afb. 35 – Kristalstructuur van diijood



Afb. 36 – Atoomrooster van diamant



Afb. 37 – Atoomrooster

5 Eigenschappen van de covalente verbindingen

De covalente verbindingen hebben lage smelt- en kookpunten ten gevolge van de zwakke intermoleculaire krachten. Uiteraard zijn de meeste covalente verbindingen gassen of vloeistoffen. Toch zijn er ook vaste verbindingen, die dan, in tegenstelling tot de ionverbindingen, niet alleen bros, maar ook zacht zijn. De smelt- en kookpunten zullen toenemen met stijgende molecuulmassa (dispersiekrachten), maar bij ongeveer gelijke molecuulmassa zullen de andere intermoleculaire krachten een rol spelen.

Dibroom bijvoorbeeld (Br_2) is een roodbruine vluchtige vloeistof ($M = 160 \text{ g/mol}$) en ICl is een vaste stof met smeltpunt 27°C ($M = 162 \text{ g/mol}$). Het is duidelijk dat de dipool-dipoolattractiekrachten hiervoor verantwoordelijk zijn.

De vaste covalente verbindingen vormen molecuulkristallen, waarbij de moleculen door zwakke vanderwaalskrachten (overkoepelende term voor intermoleculaire krachten) vastgehouden worden en waaruit de moleculen vaak vrij gemakkelijk ontsnappen. We denken aan het sublimerende diijood en aan de pyrofore witte fosfor die onder water dient bewaard.

Een uitzondering hierop vormt diamant (C_n), de hardste stof. In diamant is ieder koolstofatoom op covalente wijze aan vier andere koolstofatomen gebonden in tetraëderverband. Er is hier sprake van één reusachtige molecule (macromolecule) die even groot is als het diamantkristal zelf. We hebben hier een atoomkristal.

Noch in vaste, noch in gesmolten toestand geleiden de covalente verbindingen de elektrische stroom. De uitzondering hierop vormt grafiet, de andere verschijningsvorm van C_n . Grafiet is een zachte stof die zelfs als smeermiddel gebruikt wordt. Deze zachtheid komt vooral door de lagenstructuur, waarbij de lagen gemakkelijk over elkaar kunnen schuiven.

De lagen zelf bestaan uit zeshoeken waarbij ieder koolstofatoom sp^2 -gehybridiseerd is en hiermee aan drie andere koolstofatomen gebonden is. De geleiding voor elektrische stroom gebeurt via de beweeglijke p-elektronen in de evenwijdige p-orbitalen die loodrecht staan op de lagen waarin de sp^2 -orbitalen liggen.