

Az atomi pályák hibridizációja

(Segédanyag a Szervetlen kémia I. előadáshoz)

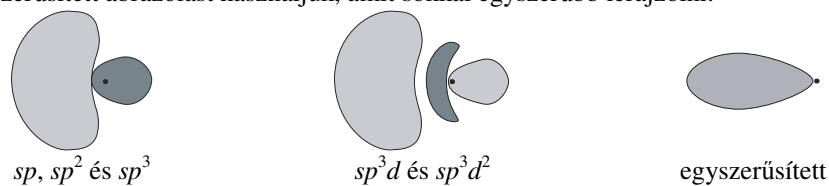
1. A hibridizáció nem egy valódi fizikai jelenség, hanem egy matematikai eljárás, amelyet azért találtak ki, hogy segítségével értelmezni tudjuk egy vegyület térbeli szerkezetét. A hibridizációt csak molekulákban lévő atomok esetén használhatjuk.
2. A hibridizációban az atomi pályákból indulnak ki, és azok matematikai kombinációjával állítanak elő új pályákat, amelyeket hibridpályáknak nevezünk. A hibridizációs eljárásból kihagyott atomi pályák továbbra is megmaradnak atomi pályának.
3. Kötelező szabály, hogy ahány atomi pályát szerepeltetünk a hibridizációban, ugyanannyi hibridpályának kell keletkeznie.
4. A hibridizációban az üres, a félig betöltött és a teljesen betöltött atomi pályák egyaránt részt vehetnek.
5. A hibridizáció során mindig az s pályával kezdünk, és ezzel kombinálódhatnak először a p , majd pedig a d pályák. Nyilvánvaló, hogy minimum két atomi pályának kell részt venni a folyamatban.
6. A leggyakoribb főcsoportbeli hibridizációk típusai találhatók az alábbi felsorolásban:

sp	$s + p_x = sp$,	hibridpálya: h_1, h_2	atomi pálya: p_y és a p_z
sp^2	$s + p_x + p_y = sp^2$,	hibridpálya: h_1, h_2, h_3	atomi pálya: p_z
sp^3	$s + p_x + p_y + p_z = sp^3$	hibridpálya: h_1, h_2, h_3, h_4	atomi pálya: -
sp^3d ,	$s + p_x + p_y + p_z + d = sp^3d$	hibridpálya: h_1, h_2, h_3, h_4, h_5	atomi pálya: a többi d
sp^3d^2	$s + p_x + p_y + p_z + d + d = sp^3d^2$	hibridpálya: $h_1, h_2, h_3, h_4, h_5, h_6$	atomi pálya: a többi d

(az sp^3d és sp^3d^2 elnevezések helyett gyakran találkozni az irodalomban a dsp^3 és d^2sp^3 jelöléssel, ami arra a sorrendiségre utal, hogy a d pálya még az előző főkvantumszámhoz tartozik)

7. A keletkezett hibridpálya is ugyanúgy lehet üres, illetve félig vagy teljesen betöltött, mint az atomi pályák.
8. A hibridpályák (amelyeknek a molekula szerkezetében leggyakrabban kémiai kötések vagy nemkötő elektronpárok felelnek meg) egymáshoz viszonyított helyzetére ugyanaz vonatkozik, mint az atomi vagy molekulapályákra, azaz egymástól térben a lehető legmesszebb helyezkednek el.
9. A hibridpályák szimmetria okok miatt csak szigma kötés kialakítására képesek, míg a megmaradt atomi pályák a pi kötések kialakításában vesznek részt.

Balra az sp , sp^2 vagy sp^3 hibridpályák, középen pedig az sp^3d és sp^3d^2 hibridpályák egyikének általános alakja látható (a szürke árnyalatai a pályarész előjelére utalnak). A fekete pont az atommag helyzetét jelöli. A gyakorlatban a pontos alak helyett inkább a jobb oldalon látható egyszerűsített ábrázolást használjuk, amit sokkal egyszerűbb lerajzolni.



A hibridpályák elhelyezkedése látható a különböző hibridizációs módokban az alábbi ábrákon. (A maradék atomi pályák az eredeti helyükön maradnak, ezeket az átláthatóság kedvéért most nem rajzoltuk be.)

