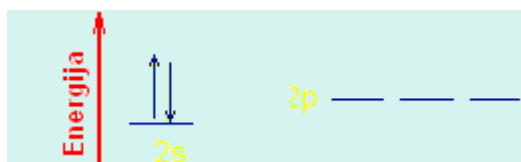


Poteškoće u primjeni Lewisove teorije valentne veze - Hibridizacija

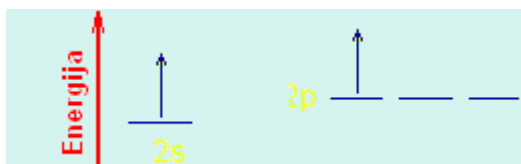
Jednostavnom Lewisovom teorijom valentne veze nije moguće objasniti neka strukturna svojstva nekih vrlo jednostavnih molekula kao što su napr. BeCl_2 , BF_3 , CH_4 , NH_3 , ili H_2O . Zbog toga je bilo nužno teoriju proširiti uvođenjem postupka kojeg zovemo hibridizacija atomskih orbitala.

sp hibridizacija

Berilij spada u **IIa** skupinu periodnog sustava atomski broj mu je **4**, a njegova elektronska konfiguracija je $1s^2 2s^2$. U valentnoj ljusci ima **2** elektrona sparena u $2s$ orbitali i prema teoriji valentne veze ne bi smio praviti spojeve jer nema nesparenih elektrona u vanjskoj ljusci.



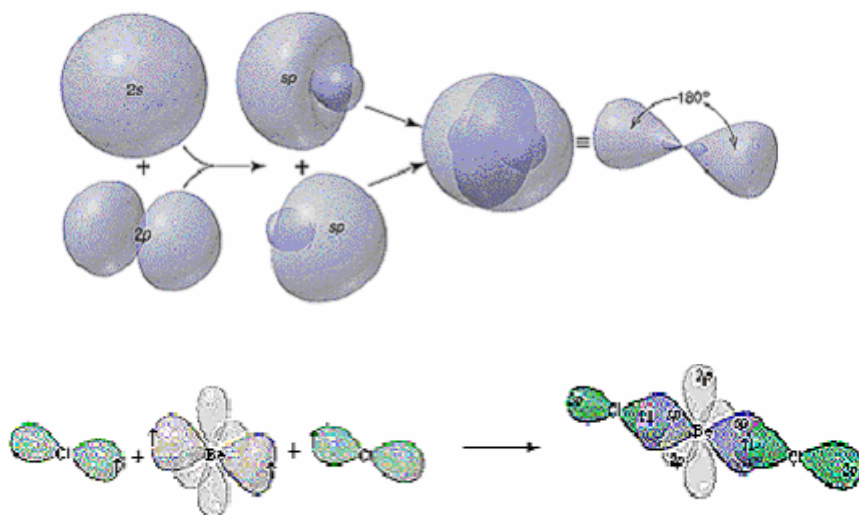
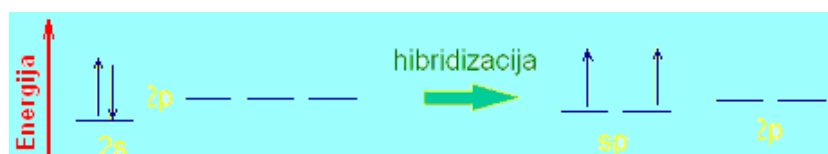
Međutim Be je u spojevima dvovalentan što znači da ima dva nesparena elektrona. To mu je relativno lako ostvariti prebacivanjem jednog od elektrona u praznu $2p$ orbitalu.



Proces prebacivanja jednog od valentnih elektrona iz $2s$ u $2p$ orbitalu zahtjeva dodatnu energiju međutim nju sustav može kompenzirati stvaranjem dviju stabilnih kemijskih veza (stvaranje veze je oblik stabiliziranja sustava). Te dvije veze bi se napr. u BeCl_2 morale razlikovati jer je jedna nastala prekrivanjem s a druga p valentne orbitale berilija s valentnom orbitalom klorovog atoma.

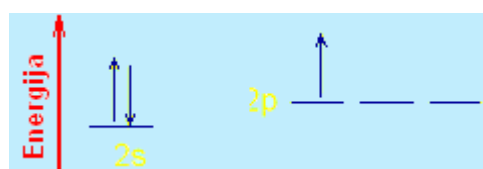
Jednakost veza u BeCl_2 moguće je objasniti uvođenjem postupka **hibridizacije atomskih orbitala**, tj. matematičkog postupka u kojem se linearnim kombiniranjem valnih funkcija energijski bliskih $2s$ i $2p$ orbitala stvaraju dvije nove – **hibridne** – orbitale. Iz jedne s i jedne p orbitale hibridizacijom nastaju dvije **sp hibridne orbitale**,

koje su položene pravocrtno, tj. pod kutom od 180° , jer su tada elektronska odbijanja najslabija.

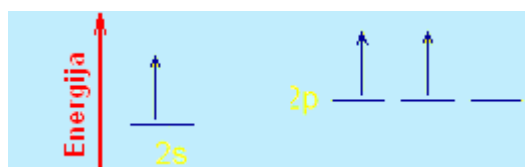


sp^2 hibridizacija

Bor spada u **IIIa** skupinu periodnog sustava, atomski broj mu je **5**, a njegova elektronska konfiguracija je $1s^2 2s^2 2p^1$. U valentnoj ljusci ima **3** elektrona od čega su dva sparena u 2s orbitali, a jedan nespareni elektron je u $2p_x$ orbitali ($2p_y$ i $2p_z$ orbitale su mu prazne). Prema VB teoriji bor bi mogao stvarati samo jedan zajednički elektronski par, tj. samo jednu vezu, odnosno atom bora bi morao biti **jednovalentan** i vezati jedan fluorov atom a ne tri!



Bor je u spojevima trovalentan što znači da ima tri nesparena elektrona. To mu je relativno lako ostvariti prebacivanjem jednog od elektrona iz 2s orbitale u praznu 2p orbitalu.



Dodatnu energiju za prebacivanje jednog od valentnih elektrona iz $2s$ u $2p$ orbitalu nadoknađuje stvaranje tri umjesto jedne stabilne kemijskih veze. Te tri veze u BF_3 bi se morale razlikovati jer je jedna nastala prekrivanjem $2s$ a druge dvije $2p$ valentne orbitale bora s valentnom $2p$ orbitalom fluorovog atoma. Međutim u BF_3 ustanovljene su sve tri veze jednake jakosti, a kut među njime iznosi 120° (da su u vezu uključene dvije $2p$ orbitale očekivali bismo kut između dviju veza $\sim 90^\circ$). Dakle sve tri valentne orbitale na borovom atomu su jednake što se može postići hibridizacijom jedne s i dviju p orbitala. Iz jedne s i dviju p orbitala nastaju tri **sp^2 hibridne orbitale** položene u ravnini pod kutovima od 120° , gdje je odbijanje elektronskih gustoća slabije nego kada bi orbitale bile položene pod pravim kutom.



-
-
-
-

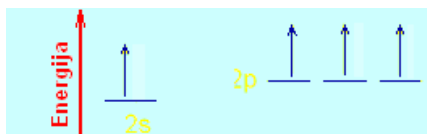
sp^3 hibridizacija

- Ugljik spada u **IVa** skupinu periodnog sustava, atomski broj mu je **6**, a njegova elektronska konfiguracija je **$1s^2 2s^2 2p^2$** . U valentnoj ljusci ima **4** elektrona od

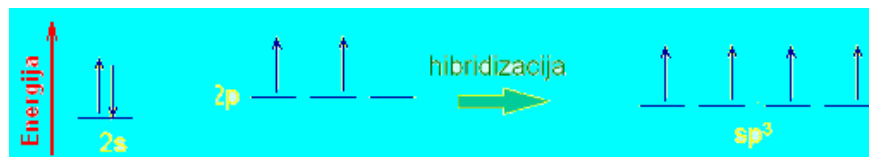
čega su **2** sparena u $2s$ orbitali a dva su nesparena u $2p$ orbitalama. Zbog toga bi atom ugljika morao biti **divalentan**!



- Međutim u nizu svojih spojeva (CH_4 , CH_3CH_3 , CCl_4 , itd.) ugljik je **četverovalentan**!
- Stvaranje **4** veze moguće je ako jedan elektron iz $2s$ orbitale pređe u $2p_z$ orbitalu (energijska razlika $2s$ i $2p$ orbitala nije prevelika jer su elektroni u tim orbitalama zasjenjeni samo s dva s elektrona prve ljuske, pa bi energija uložena za pomicanje elektrona iz $2s$ u $2p$ orbitalu lako mogla biti nadoknađena stvaranjem 4 umjesto 2 kemijske veze).



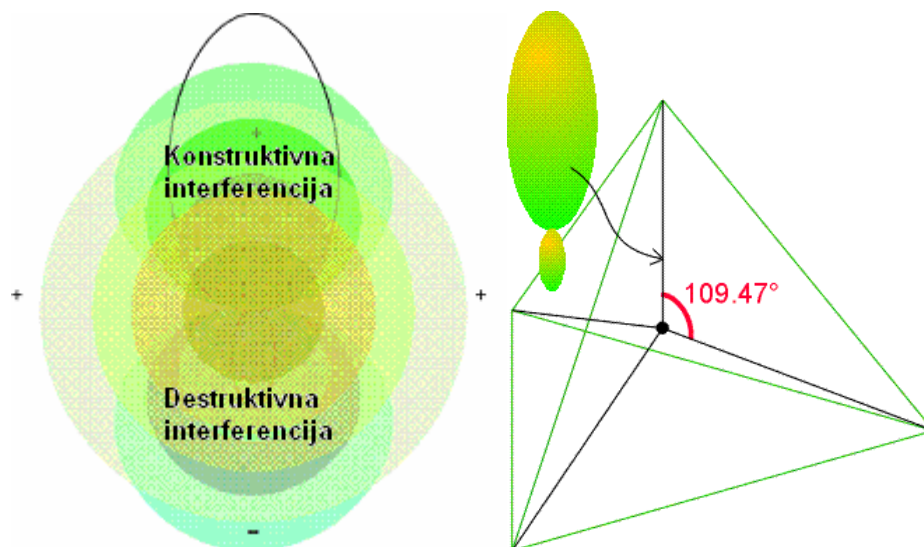
- Naime, takvim prelaskom elektrona nastala bi 4 nesparena elektrona koji mogu tvoriti 4 veze. **Tri veze bi morale biti potpuno jednake i međusobno bi zatvarale kut od $\sim 90^\circ$** , a **četvrta** bi se od njih **razlikovala po dužini odnosno jakosti**.
- Međutim, utvrđeno je da su u **metanu** (CH_4) **sve 4 veze potpuno jednake** a to znači da su valentni elektroni u atomu ugljika smješteni u potpuno **jednake orbitale**, te da tri veze nisu smještene pod pravim kutom.
- Te orbitale nastaju **miješanjem jedne s i tri p atomske orbitale** pri čemu nastanu **4 jednake (hibridne) orbitale** koje nazivamo **sp^3 hibridne atomske orbitale**.
-



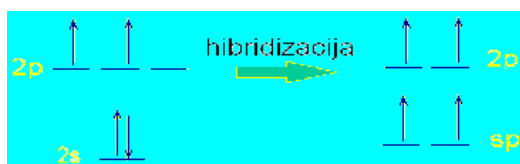
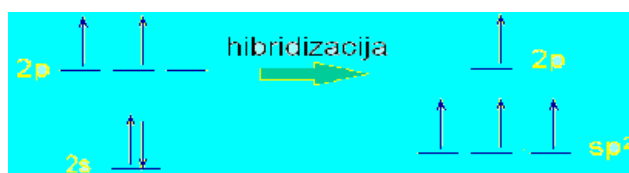
sp^3 hibridizacijom nastaju **4 jednake orbitale**, a da bi se minimizirala međusobna odbijanja elektrona koji popunjavaju te orbitale, **orbitale su usmjerene prema vrhovima tetraedra** pod međusobnim kutovima od **109.47°** .

Treba naglasiti da **nije moguće izolirati ugljikov atom s hibridnim sp^3 orbitalama**, nego su to virtualne atomske orbitale čija se svojstva mogu matematički izraziti i bit će opažena tek stvaranjem 4 jednostruke veze na ugljikovom atomu!

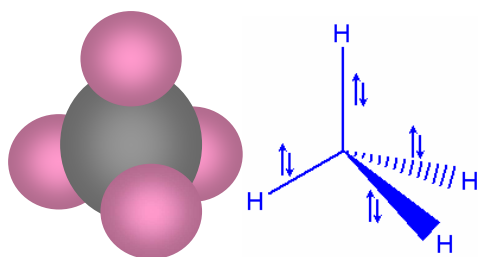
Na sljedećim slikama pokazan je ishod primjene **hibridizacije** (matematičkog formalizma) u stvaranju **jedne sp^3 hibridne atomske orbitale**, kao posljedice interferencije valnih funkcija (tj. prekrivanja ili miješanja) **$2s$ i $2p$** atomskih orbitala istog ugljikovog atoma.



Na sličan način možemo zamisliti nastajanje i drugih vrsta hibridnih atomskih orbitala ugljika. Na sljedećim slikama simbolički je pokazana **sp^2 i sp hibridizacija** ugljikovog atoma.

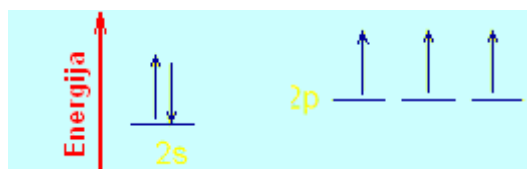


Atomske hibridne orbitale sudjeluju u stvaranju kovalentnih veza po istim pravilima kao i nehibridizirane orbitale koje fizičke postoje u atomima. Na slici je pokazan primjer nastajanja *metana* preklapanjem 4 sp^3 hibridne atomske orbitale ugljikovog atoma sa s orbitalama 4 vodikova atoma.



Može se pokazati da sp^3 hibridizacija također postoji u spojevima dušika (**amonijak** \equiv NH_3) i kisika (**voda** \equiv H_2O).

Dušik spada u **Va** skupinu periodnog sustava, redni broj mu je **7**, a elektronska konfiguracija mu je $1s^2 2s^2 2p^3$. U valentnoj ljusci dušika je **5** elektrona od čega su dva sparena u $2s$ orbitali a u p orbitalama valentne ljuske ima **3** nesparena elektrona (Hundovo pravilo).

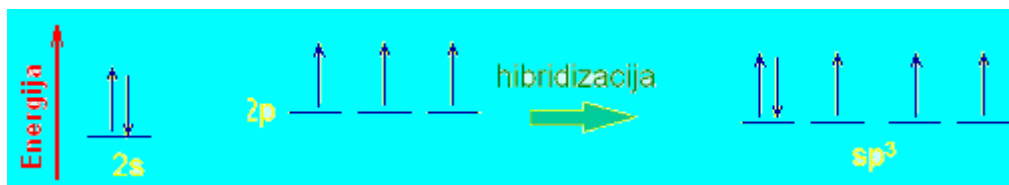


To mu omogućava stvaranje **3** kovalentne veze *bez hibridizacije*, odnosno stvaranje **3** zajednička elektronska para s nesparenim elektronima na vodikovim atomima. Za stvaranje molekule NH_3 nisu potrebne 4 nego **3** veze s atomima vodika pa bi njeno stvaranje bilo moguće i bez hibridizacije dušikovih atomskih orbitala. *Kako onda znamo da u amonijaku dušik stvara **4** sp^3 hibridne orbitale?*

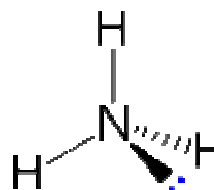
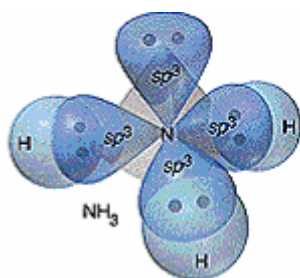
Kad bi se vodikovi atomi vezali na dušikove p orbitale, kutovi među vezama morali bi iznositi $\sim 90^\circ$.

Međutim, kao što smo to već vidjeli, i sp^2 hibridizacija daje **3** jednake veze ali su one smjštene u ravnini gdje su elektroni zajedničkih elektronskih parova u vezama međusobno razmaknutiji (120°), a to smanjuje njihovo odbijanje.

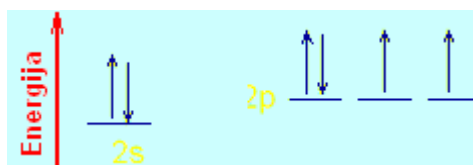
Stvarno određeni kutovi u molekulama amonijaka bliski su onima u tetraedru, tj. vodikovi atomi smješteni su uglove baze gotovo pravilnog tetraedra (pod 109° prema vrhu tetraedra) pa zaključujemo da su u vezu uključene sp^3 hibridne orbitale.



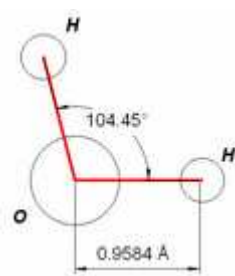
Postavlja se pitanje *zašto bor u spojevima pravi sp^2 a dušik sp^3 hibridizaciju?* Elektronska konfiguracija bora pokazuje da on u valentnoj ljusci ima 3 elektrona te su svi oni uključeni u (vezne) zajedničke elektronske parove. Elektronska konfiguracija dušika pokazuje da osim 3 elektrona koja sudjeluju u stvaranju veza, dušik ima još 2 valentna elektrona koja čine slobodni elektronski par. Slobodni elektronski par se odbija od zajedničkih elektronskih parova u četvrti ugao tetraedra, a to odbijanje je jače nego od zajedničkog elektronskog para u metanu. Elektronska struktura sp^3 hibrida je energijski povoljnija od sp^2 hibrida zbog toga jer je slobodni elektronski par u tetraedru položen prema veznim elektronskim parovima pod kutom od 109° , dok je u sp^2 hibridu položen pod 90° .



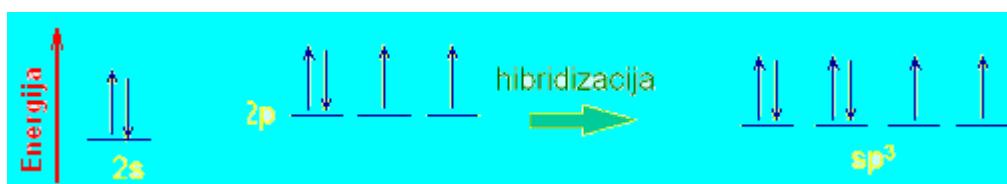
- Kisik spada u **VIa** skupinu periodnog sustava, atomski broj mu je **8**, a njegova elektronska konfiguracija je $1s^2 2s^2 2p^4$. U valentnoj ljusci ima **6** elektrona od čega su dva sparena u $2s$ orbitali, dva su sparena u $2p_x$ orbitali a u $2p_y$ i $2p_z$ orbitalama nalazi se po jedan nespareni elektron (Hundovo pravilo).



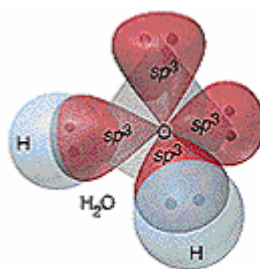
- Dakle, atom kisika je **dvovalentan** i može vezati dva vodikova atoma čineći molekulu vode! Međutim, iznenađujuće svojstvo vode je da kut između O-H veza iznosi 105° a ne $\sim 90^\circ$ što bismo očekivali ako su vodikovi atomi vezani na p orbitale koje su međusobno usmjerene pod pravim kutom.



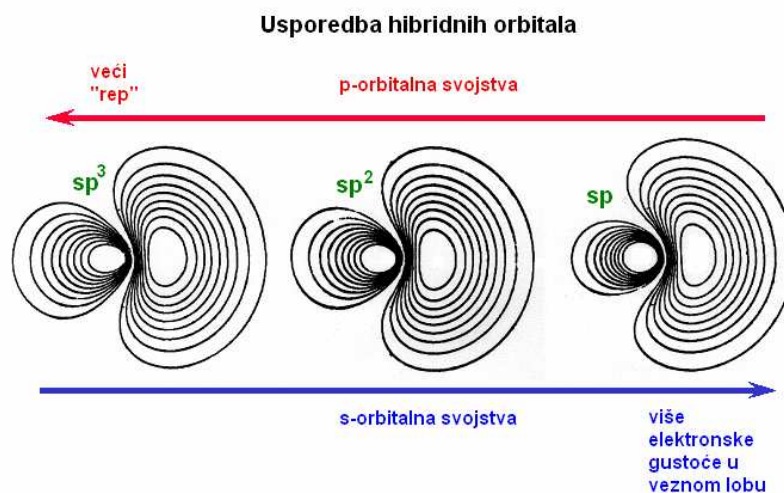
- Eksperimentalno određeni kut u H_2O vrlo je blizak kutu što ga zatvaraju veze u tetraedarskoj geometriji. Ona je svojstvena sp^3 hibridizaciji koja se za kisikove atomske orbitale može se shematski pokazati na sljedeći način:



- Dva slobodna i dva zajednička elektronska para će se međusobno najmanje odbijati u tetraedarskoj geometriji sp^3 hibrida.



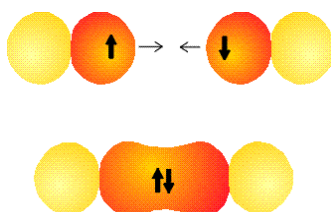
- Na sljedećoj slici su pokazani matematički izračuni raspodjela vjerojatnoće nalaženja elektrona u prostoru oko atomske jezgre za sp^3 , sp^2 i sp hibridne atomske orbitale.



Od sp^3 prema sp hibridizaciji raste s -karakter hibridne orbitale pa vezni lob postaje sve **bogatiji elektronskom gustoćom** što se odražava jačanjem veze.

σ veza

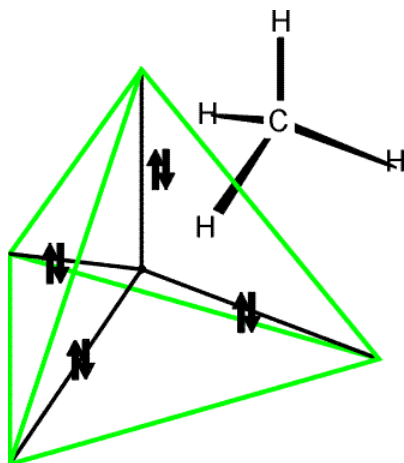
Preklapanjem atomskih orbitala odgovarajuće simetrije, položenih uzduž vezne osi kao što je pokazano za dvije p orbitale na sljedećoj slici, nastaje sigma veza.



Nastajanje σ veze orbitalnim prekrivanjem dvije kolinearne p orbitale i spinsko sparivanje elektrona.

Glavno svojstvo σ veze je jačanje elektronske gustoće između jezgara.

Svaka od 4 ugljikove sp^3 atomske orbitale stvara σ vezu preklapanjem s vodikovom $1s$ atomskom orbitalom smještenom u kutu tetraedra.

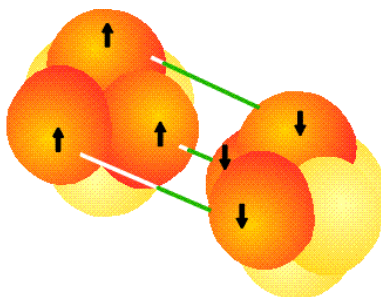


σ veza i hibridne orbitale

π veza

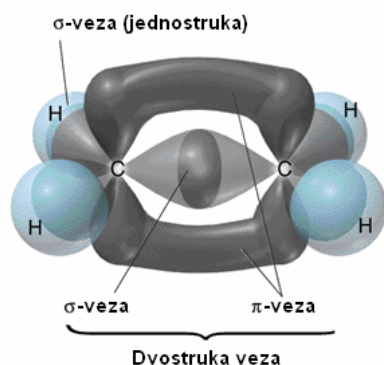
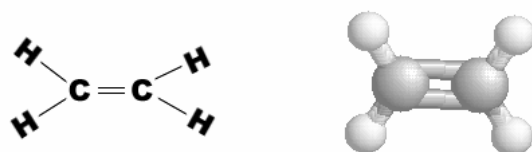
π veza nastaje prekrivanjem atomskih orbitala odgovarajuće simetrije, plošno smještenih u odnosu na veznu os. Zbog toga π veza nastane tek nakon što stvorena σ veza dovoljno privuče vezane atome da se omogući preklapanje plošno smještenih orbitala. π veza je uvijek sastavnica višestruke veze i uvijek je slabija od σ veze kojom su povezani isti atomi.

Nastajanje π veze u molekuli dušika pokazano je na sljedećoj slici.



Struktura veza u molekuli N_2 , koje se sastoje σ i dvije π veze. Elektronska gustoća je centrosimetrična oko međuatomske osi.

Višestrukost veza u **ugljkovim spojevima** pokazana je na sljedećim slikama.

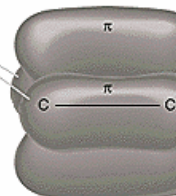


σ -veza



Dva loba
jedne
 π -veze

Dva loba
jedne
 π -veze



Trostruka veza

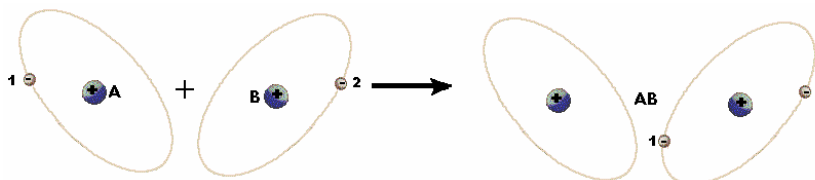
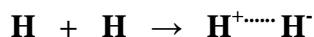
VIŠESTRUKOST I JAKOST C-C VEZA

vrsta veze	uključene orbitale	duljina veze	vezna energija (kJ/mol)	mjerena molekula
C-C	sp^3-sp^3	1.54 Å	368	CH_3-CH_3
C=C	sp^2-sp^2 p-p	1.34 Å	607	$\text{CH}_2=\text{CH}_2$
C≡C	$sp-sp$ 2p-p	1.21 Å	828	$\text{HC}\equiv\text{CH}$

↓
s-orbitalna svojstva

Stvaranje veze u molekuli H_2

Vezivanje dva atoma vodika možemo zamisliti kao prelazak elektrona s jednog vodikovog atoma na drugi pri čemu bi nastali vodikov kation i anion.



Oni bi se međusobno mogli privlačiti kulonskim silama naboja suprotnog predznaka i tako tvoriti stabilnu česticu. Međutim, istražimo li privlačne sile između stvorenih H^+ i H^- iona i ravnotežnu energiju, ustanovit ćemo da je za **sve međuatomske razmake** energija iona veća od energije potpuno razdvojenih vodikovih atom. Iz toga možemo zaključiti da veza između vodikovih atoma ne može biti ionska.

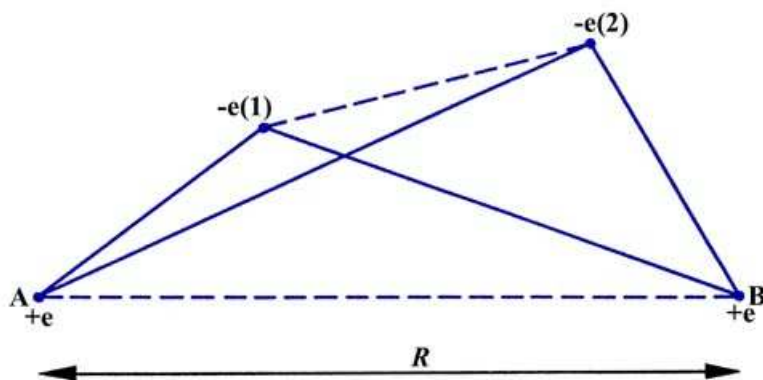
Prema tome, veza u molekuli vodika, koja nastaje prekrivanjem valnih funkcija elektrona na vodikovim atomima u interakciji koju opisujemo kao međudjelovanje **izmjene**, je klasični primjer *kovalentnog* vezivanja.

Kad su dva atoma beskonačno udaljena (R je jako velik) jedine potencijalne interakcije jesu: privlačenje jezgre A i elektrona (1), te jezgre B i elektrona (2).

Približe li se na udaljenost kada atomi **počinju djelovati** jedan na drugog, ali još ne tvore molekulu, valna funkcija koja opisuje takvo stanje je:

$$\Psi = \Psi_{A(1)}\Psi_{B(2)}$$

Kad R postane usporediv s promjerom vodikovog atoma moguće su i druge interakcije: jezgra A privlači i elektron (2) a odbija jezgru B, jezgra B privlači i elektron (1) i odbija jezgru A, a elektroni (1) i (2) se međusobno odbijaju.



Mogući trenutačni položaj elektrona i jezgara u molekuli H_2 . Isprekidane crte predstavljaju odbijajuće elektrostatske sile a pune crte privlačeće.

Sile privlačenja će **nadladati** sile odbijanja samo ako postoji velika vjerojatnost da **oba elektrona** budu **u prostoru između jezgara**. Tada ih jako privlače **obje** jezgre (u atomima samo jedna).

Valna funkcija koja opisuje takvo stanje je:

$$\Psi = \Psi_{A(1)}\Psi_{B(2)} + \Psi_{A(2)}\Psi_{B(1)}$$

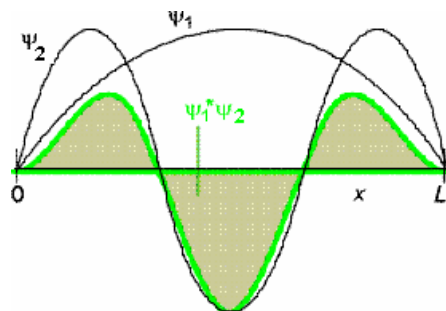
Kvantnomehanički računa daje **manju** uprosječenu potencijalnu energiju takvog sustava nego razdvojenih atoma. Kvantna mehanika predviđa **veliku vjerojatnost** nalaženja oba elektrona u prostoru između jezgara.

Zašto se povećava vjerojatnoća nalaženje elektrona između povezanih atoma?

Odgovor na to pitanje povezan je s predznakom elektronske valne funkcije. **Predznak valne funkcije nema fizičkog značenja** u smislu vjerojatnoće nalaženje elektrona (to daje Ψ^2), ali predznak postaje važan kada se **dvije valne funkcije** protežu kroz **isti prostor**.

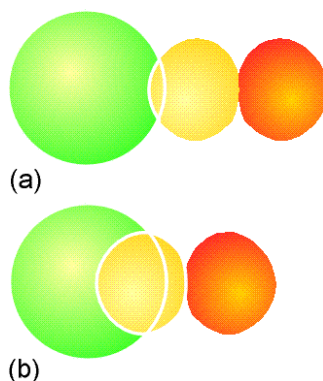
- **Konstruktivna interferencija** – u prostoru prekrivanja valne funkcije imaju isti predznak, amplituda raste i vjerojatnoća nalaženja elektrona raste.
- **Destruktivna inerferencija** - u prostoru prekrivanja valne funkcije imaju suprotan predznak, amplitude se poništavaju i vjerojatnoća nalaženja elektrona pada.

Mjera prekrivanja dviju valnih funkcija (ψ_1 i ψ_2) je **integral prekrivanja** $S = \int d\psi_1^* \psi_2 d\tau$. Na sljedećoj slici pokazano je preklapanje dviju elektronskih valnih funkcija, ψ_1 i ψ_2 , za koje integral orbitalnog prekrivanja, odnosno $\psi_1\psi_2$, iznosi **0**, tj. valne funkcije su **ortogonalne**.



Dvije funkcije su međusobno **ortogonalne** ako im je $S = 0$.

Integral orbitalnog prekrivanja (S) je mjera jakosti veze



(a) Kada su dva atoma udaljena prekrivanje njihovih orbitala je slabo i S je malen. (b) Kada su atomi bliže orbitale im se snažnije prekrivaju i vrijednost S se približava 1. Kada bi se atomi još više približili prekrivanje bi oslabilo zbog preklapanja s dijelom funkcije suprotnog predznaka.

Krivulja potencijalne energije molekule

Ovisnost potencijalne energije molekule o razmaku između atoma zovemo **krivulja potencijalne energije molekule**. Ona daje nekoliko zanimljivih podataka o molekuli od čega je najvažniji prosječni međuatomski razmak ili **duljina veze**, te energija disocijacije (raspada) molekule tj. **vezna energija**.

Mase atomskih jezgara su **>1000** puta veće od masa elektrona iz čega slijedi da se jezgre pomiču mnogo **sporije** nego elektroni! *Kretanje i položaj elektrona su uvjetovani položajem jezgara a ne brzinom kretanja jezgara.* Zbog toga se kretanje elektrona i jezgara može razmatrati **odvojeno**. Sve teorije molekularne strukture uključuju pojednostavljenje sustava (**Born-Oppenheimerova aproksimacija**) koje se može opisati na slijedeći način: jezgra je mnogo teža od elektrona pa se giba tako sporo da ju se može smatrati nepokretnom u odnosu na gibajuće elektrone (proračuni ukazuju da se atomske jezgre u molekuli H_2 pomaknu za

samo **1 pm** dok elektron prevali put od **1 nm**!). To znači da se može riješiti Schrödingerova jednačina za valnu funkciju samog elektrona pri različitim položajima jezgara.

Born-Oppenheimerova aproksimacija dozvoljava izabiranje određenih razmaka među atomima i rješavanje Schrödingerove jednačine za elektrone pri tom razmaku. Na taj se način može istražiti kako ovisi **potencijalna energija** molekule (atomske jezgre, tj atomi, miruju pa je **kinetička energija nula**) o međuatomskim razmacima i veznim kutovima u molekuli, te definirati **krivulju potencijalne energije molekule**. Istu krivulju može se provjeriti korištenjem eksperimentalno prikupljenih spektroskopskih podataka.

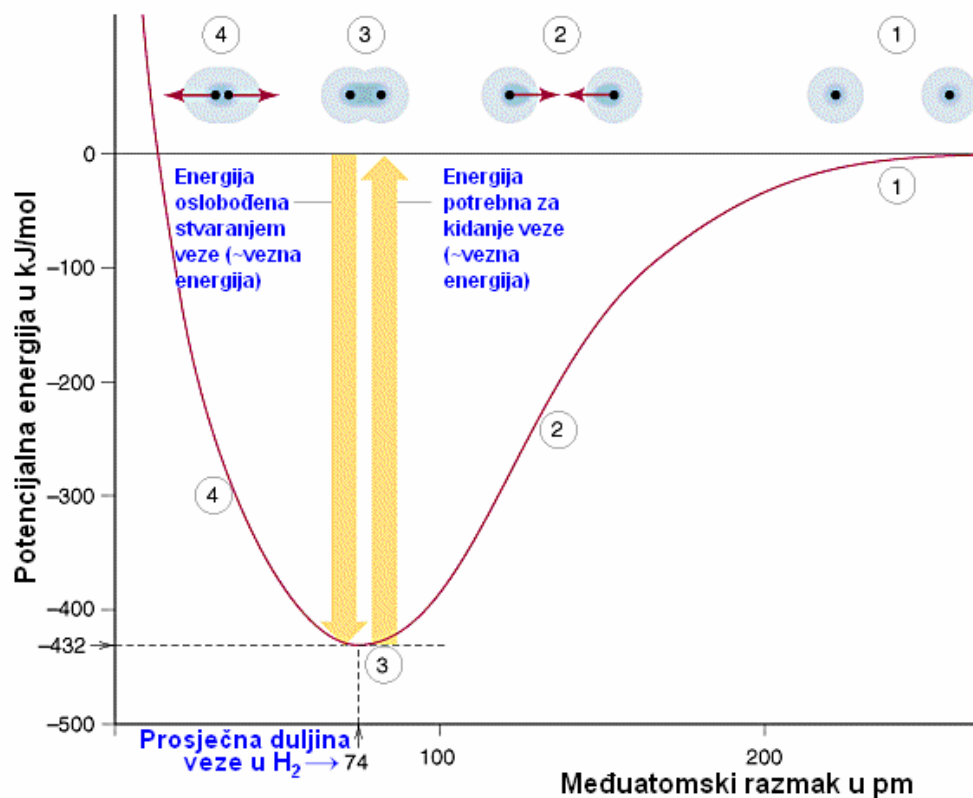
Za svaku pojedinu udaljenost jezgara moguće je izračunati:

1. valnu funkciju
2. raspodjelu elektronske gustoće
3. energiju

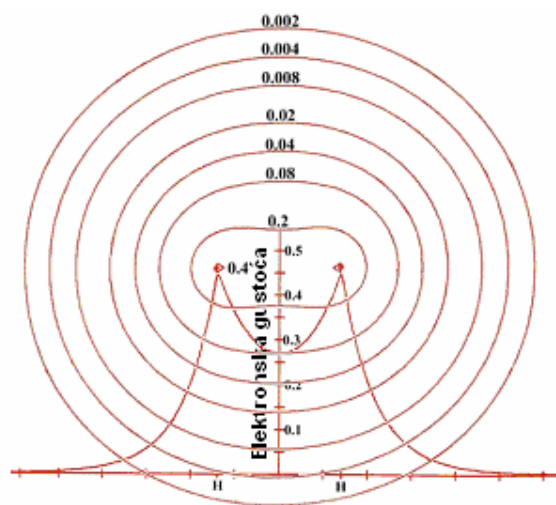
Osnovna karakteristika krivulje potencijalne energije molekule vodika je smanjenje energije približavanjem nevezanih vodikovih atoma do udaljenosti koju zovemo uprosječenom **duljinom veze**, nakon čega dolazi do naglog porasta energije zbog međusobnog odbijanja pozitivno nabijenih jezgara.

Visinu energijske barijere, od energije molekule H_2 u kojoj su atomi razmaknuti na uprosječenu duljinu veze pa do potpuno razdvojenih atoma, zovemo **energija veze**.

Na sljedećoj slici pokazana je krivulja potencijalne energije za dva atoma vodika pri njihovim različitim udaljenostima; od beskonačno udaljenih do potpuno združenih.



Elektronska energija u molekuli je **kvantizirana** kao i u atomima, ali **ne** postoji jednostavna izraz za njeno izračunavanje u smislu niza **kvantnih brojeva** kakvi postoje napr. za vodikov atom. Gibanje elektrona po energetske razinama određuje **valna funkcija** (i s njom povezana **molekulna orbitala**), koja određuje **raspodjelu elektronske gustoće u prostoru**. Raspodjela elektronske gustoće se prikazuje **konturnim mapama** na kojima krivulje povezuju prostor jednake elektronske gustoće.ⁱ

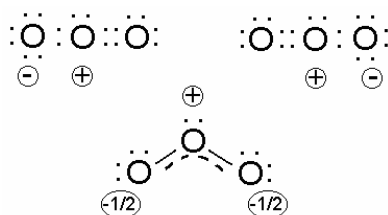


Konturna mapa raspodjele elektronske gustoće za H₂ u ravni jezgara.

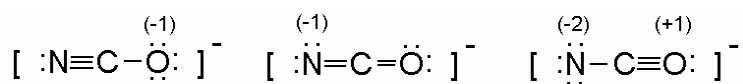
U molekuli kao i u atomu, **najveća** gustoća negativnog naboja nalazi se u prostoru **oko jezgara** ali i u prostoru **između jezgara**. Pri stvaranju molekule, elektronske gustoće atoma zajednički povezuju jezgre. Prostor uklopljen u **vanjsku** konturnu krivulju predstavlja **99%** elektronskog naboja molekule.

Rezonancija

Neke molekule ne mogu biti zadovoljavajuće prikazane Lewisovim strukturama. Napr., vrlo važan alotrop kisika, ozon, ima savijenu (nelinearnu) strukturu raznostraničnog trokuta. Jednostavna Lewisova teorija to ne može predvidjeti bez uvođenja rezonancije.



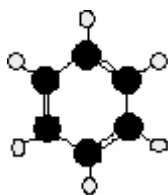
Na crtežu ozona pokazani su formalni naboji povezanih atoma ali se oni najčešće ne pokazuju na crtežima Lewisovih struktura. Ponekad formalni naboji mogu pomoći u odlučivanju relativne važnosti pojedine rezonantne strukture. Najvjerojatnija struktura ima najmanje formalne naboje atoma i ima najnegativniji naboj na najelektronegativnijem atomu. To se može zorno pokazati na cijanatom anionu.



Prva struktura ima najveću važnost jer je negativni naboj smješten na najelektronegativnijem (kisikovom) atomu, a uz to formalni naboj je samo -1.

Rezonantne molekule su stabilnije od onih u kojima je rezonancija nemoguća. Rezonantna stabilizacija benzena (*vide infra*) i njegovih analoga nazvana je i „**aromatskom**“ stabilizacijom.

Primjer molekule **benzena (C₆H₆)**:

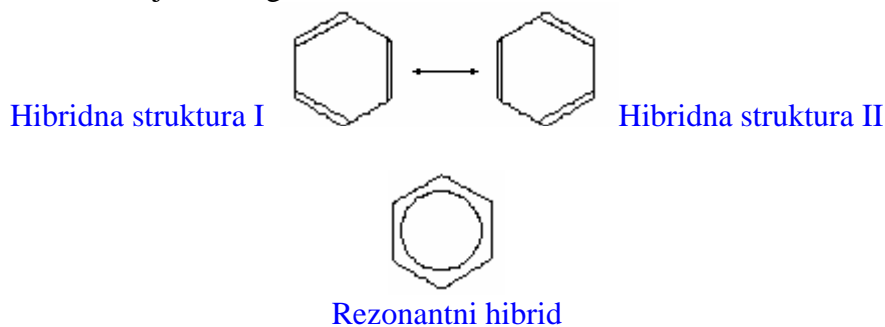


Eksperimentalno je utvrđeno da su sve C-C veze u benzenu **jednake** dužine i čvrstoće dok VB teorija predviđa **dvije** vrste C-C veza: jednostruku i dvostruku!!!

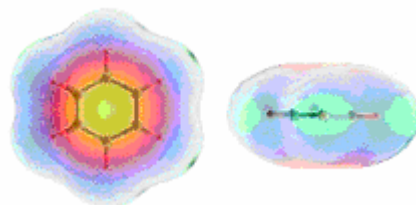
Opaženo se može objasniti **hibridnom strukturom** benzena kojom molekulu benzena predstavljamo hibridom svih mogućih **ponderiranih rezonantnih struktura**.

Rezonantne strukture neke tvari su sve moguće strukture koje predviđa Lewisova teorija koje se međusobno razlikuju položajem **elektrona** ali **ne atoma** u vezama.

Na slici su pokazane dvije od mogućih rezonantnih struktura benzena:

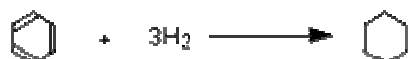


Hibridnost strukture molekule benzena se u literaturi najčešće naglašava predstavljanjem molekule benzena na način kako je pokazano u rezonantnom hibridu. U takvoj molekuli elektronska gustoća je **delokalizirana**, odnosno raspršena, preko svih 6 povezanih C-atoma kao što je to pokazano na sljedećoj slici molekule u dvije ravnine, u kojoj je narandžastocrvenom bojom označena najveća elektronska gustoća.

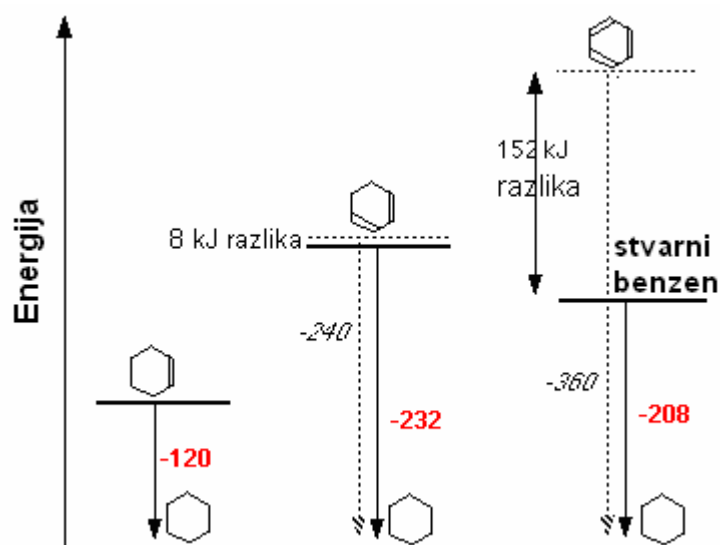


Rezonanti hibridi su **stabilniji** od spojeva u kojima rezonancija nije moguća, a što se može zorno pokazati na primjeru benzena.

Hidriranjem benzena (adicijom vodika na dvostruke veze) nastaje **cikloheksan (C₆H₁₂)** tj. zasićeni ciklički alkan.



Zbog stvaranja stabilnih C-H veza, cjelokupna reakcija popraćena je oslobađanjem **208** kJ/mol energije u obliku topline. Međutim, na temelju oslobođene topline od **120** kJ/mol, koja je izmjerena u hidriranju samo jedne dvostruke veze **cikloheksena (C₆H₁₀)**, očekivana toplina koja se oslobadja pri hidriranju tri dvostruke veze benzena morala bi iznositi **360**(= 3 × 120) kJ/mol. Razlika od **152** kJ/mol između izračunate i izmjerene topline reakcije može se pripisati **povećanoj stabilnosti rezonantnog hibrida** molekule benzena u odnosu na molekulu u kojoj bi dvostruke i jednostruke veze bile strogo locirane i naizmjenice se ponavljale.



Određenu stabilizaciju može se opaziti i u konjugiranom sustavu kakav je **cikloheksadien** (C_6H_8) ali je ona mnogo manja nego u benzenu.

Osim benzena postoje brojni drugi primjeri rezonancije a neki su ovdje pokazani.

1. Karboksilatni ion:

$$R-C \begin{array}{l} \text{O} \\ \parallel \\ \text{O}^- \end{array} \quad R-C \begin{array}{l} \text{O}^- \\ \parallel \\ \text{O} \end{array}$$
2. Ugljični dioksid:

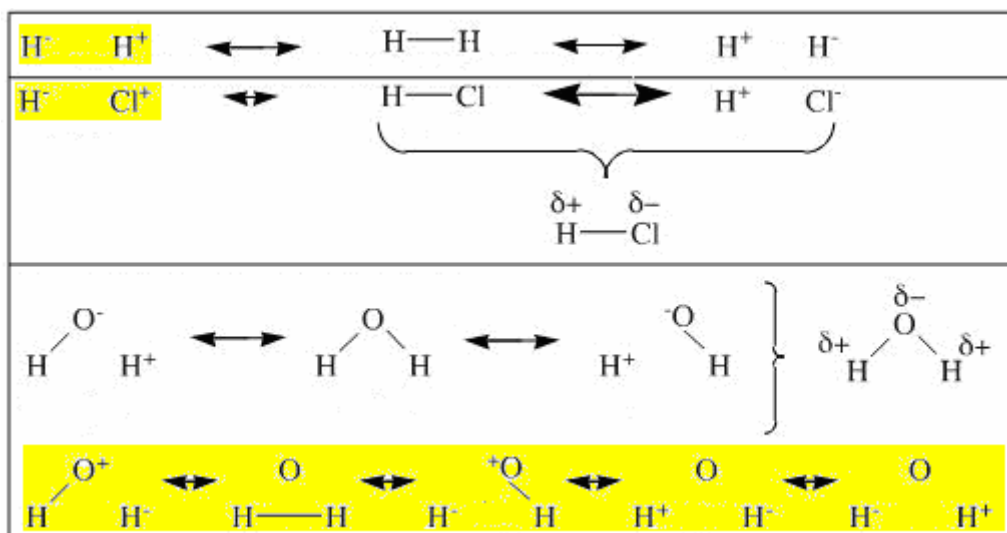
$$:\text{O}=\text{C}=\text{O}: \quad \text{:}\ddot{\text{O}}-\text{C}\equiv\text{O}^+ \quad \text{:}\text{O}\equiv\text{C}-\ddot{\text{O}}^-$$
3. Ugljični monoksid:

$$:\text{C}=\ddot{\text{O}}: \quad \text{:}\text{C}\equiv\text{O}^+ \quad \text{:}\text{C}-\ddot{\text{O}}^-$$
4. Dušični dioksid:

$$\begin{array}{c} \text{N}^+ \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{O} \quad \text{O} \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{N}^+ \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{O} \quad \text{O} \end{array}$$
5. Ozon:

$$\begin{array}{c} \text{O}^+ \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{O} \quad \text{O} \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{O}^+ \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{O} \quad \text{O} \end{array}$$

VB teorija je dosta uspješno uvela koncept „rezonancije“, zamisao koja se temelji na elektronegativnosti elemenata. I najjednostavnije molekule kao što je vodik (H_2), klorovodik (HCl) i voda (H_2O), mogu biti prikazane njihovim rezonantnim oblicima. Neki od tih oblika imaju veću važnost a neki su beznačajni pa će konačna struktura uvijek biti ponderirani prosjek svih mogućih rezonantnih oblika. Na sljedećoj slici **žutom** bojom su označeni rezonantni oblici navedenih molekula, čija je važnost u definiranju rezonantnih struktura potpuna **zanemariva**.



Teorija valentne veze je vrlo često korištena u obrazovanju jer daje lako razumljive strukture. Međutim, računska obrada orbitala je mnogo lakša bez uključivanja hibridizacije što u primjeni daje veliku prednost molekulno-orbitalnoj teoriji (**MOT**).

ⁱ Sljedeća slika pokazuje konturne mape elektronske gustoće za nepolarnu molekulu dušika i za polarnu molekulu litijevog fluorida.

