

KİMYASAL BAĞLAR

Aşağıda verilen özet bilginin ayrıntısını, ders kitabı olarak önerilen, Erdik ve Sarıkaya'nın "Temel Üniversitesi Kimyası" Kitabı'ndan okuyunuz.

KİMYASAL BAĞLAR

İki atom veya atom grubu arasında bir molekül oluşturmak üzere etkileşme, kimyasal bağ olarak tanımlanır. Moleküllerin gözlenen formüllerini açıklamak için kimyasal bağlanmayı bilmek gerekir. Bir kimyasal bağ, atomları veya atom gruplarını belli bir uzaklıkta ve bir arada tutmaya yetecek kuvvettir ve kimyasal bağlanma sonucu, atomlardan oluşan moleküller arasında da moleküller arası bağlanma kuvvetleri ortaya çıkar.

LEWIS SİMGELERİ

Atomlar, bağ oluşturmak üzere bir araya geldikleri zaman, çekirdeklerine en uzakta bulunan elektronlar etkileşirler. Dolayısıyla, bağlanma için, bir atomun en dış tabakasının elektronları önemlidir; bu tabakaya valans tabakası ve bu tabakanın elektronlarına valans elektronları denir. Lewis simgeleri, atomları göstermek için kullanılır ve sadece valans elektronları belirtilir. Lewis simgeleri, yalnız atomlar için değil atom iyonları için de kullanılır. Lewis simgeleri, moleküllerin yapılarını göstermek için de çok yararlıdır.

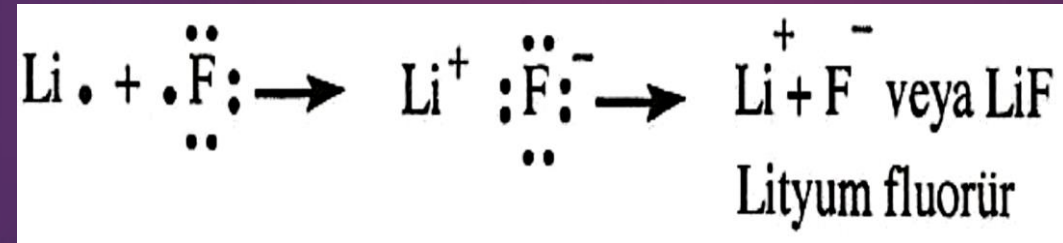
A Grupları elementlerinin Lewis simgeleri

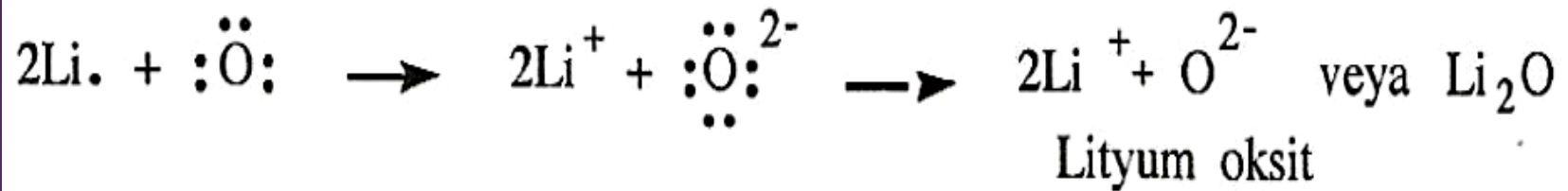
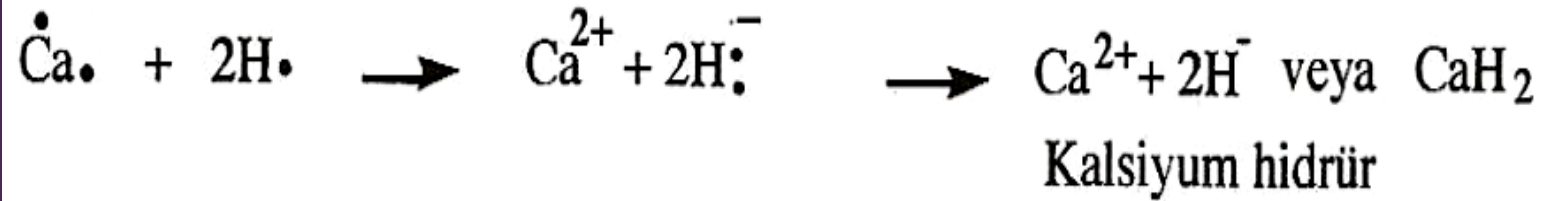
Grup	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
Sembol	$X \cdot$	$\cdot X \cdot$	$\cdot \overset{\cdot}{X} \cdot$	$\cdot \underset{\cdot}{X} \cdot$	$\cdot \overset{\cdot}{X} \cdot$	$\cdot \underset{\cdot}{X} \cdot$	$\cdot \overset{\cdot}{X} \cdot$

İYONİK BAĞ (ELEKTROVALENT BAĞ)

Kimyasal bağlar iki genel grupta toplanır: İyonik bağlar (elektrovalent bağlar) ve kovalent bağlar. İyonik bağ, bir atomun değerlik tabakasından bir veya birkaç elektronun, diğer bir atomun değerlik tabakasına geçmesiyle oluşur. İyonik bağ, zıt yüklü bu iyonlar arasındaki çekme sonucu oluşur. İyonik bağları içeren bileşikler iyonik bileşikler olarak bilinir.

Li ve F atomları etkileştikleri zaman, Li, değerlik tabakası olan 2s alt tabakasından bir elektron kaybederek Li⁺ iyonu haline geçer. Li tarafından verilen elektronu alan F, değerlik tabakasındaki elektron sayısını sekize çıkararak F⁻ iyonu haline geçer. Li⁺ ve F⁻ iyonları oluştuktan sonra birbirlerini çekerler ve bu çekme nedeniyle iyonik bağ oluşur. İyonik bağlar, iyonik katıların oluşmasına yol açar.





Atomların, iyonlar oluşturarak asal gaz elektron dizilişini almaları, *oktet kuralı* diye bilinen bir kuralı oluşturur.

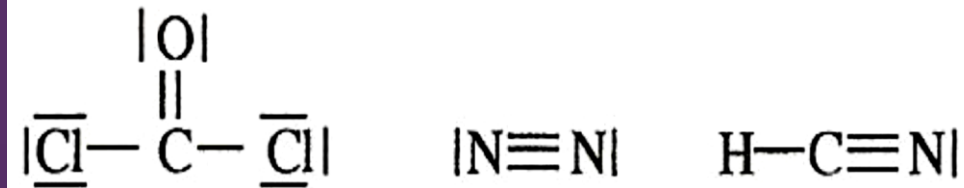
İyonik bağ oluşmasında etken yani yürütücü kuvvet, bileşik oluşturmak üzere iyon haline geçerek bağlanan atomların enerjilerinin azalmasıdır. Bununla beraber, reaksiyonu yürüten kuvvet zıt yüklü iyonların birbirini çekmesidir ve bu elektrostatik çekme esnasında açığa çıkan enerjiye *kristal enerjisi* denir.

KOVALENT BAĞ

Pek çok durumda, bir iyonik bileşiğin oluşması ile daha kararlı bir durum elde edilemez. Örneğin, bir katyonun oluşması için gerekli enerji (iyonlaşma enerjisi) bir anyonun oluşması sırasında salınan enerji ve iyonik bileşiğin oluşması sırasında salınan enerji (sırasıyla elektron ilgisi ve kristal enerjisi) toplamı ile karşılanamaz. Bu durumda bir *kovalent bağ* oluşur. Kovalent bağ, bir elektron çiftinin atomlar arasında ortaklaşa kullanılmasıyla oluşur.

İki atomlu moleküller halinde bulunan ametaller, H_2 , F_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2 , N_2 ve O_2 'dir.

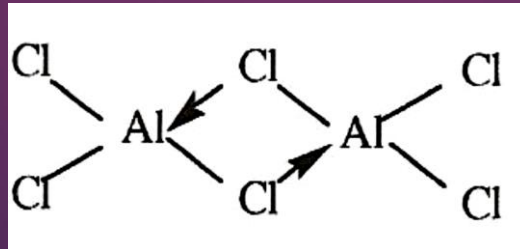
Bir atomun oluşturduğu kovalent bağların sayısına, yani çiftleştiği elektronların sayısına *kovalens (veya kovalens sayısı)* denir. İki atom, oktet kuralını ve kovalens gereksinimini sağlamak için bir çift yerine iki veya üç çift elektronu da ortaklaşa kullanabilirler. Bu yolla tek bağlar yerine çift ve üçlü bağlar oluşur.



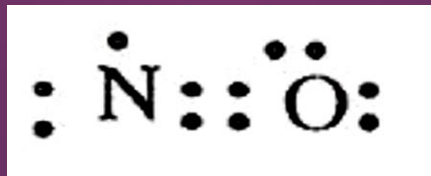
Oktet kuralının uygulanmasında ayrıcalıklı durumlar:

(i) Oktet boşluğu bulunan atomlar (dörtten az elektron ile çevrili atomlar):

Dörtten daha az elektronu bulunan bir atom, bunları kovalent bağ oluşturmak üzere ortaklaşa kullanırsa, okteti sağlanamayacaktır. Be(IIA Grubu) ve B(IIIA Grubu) tipik örneklerdir.

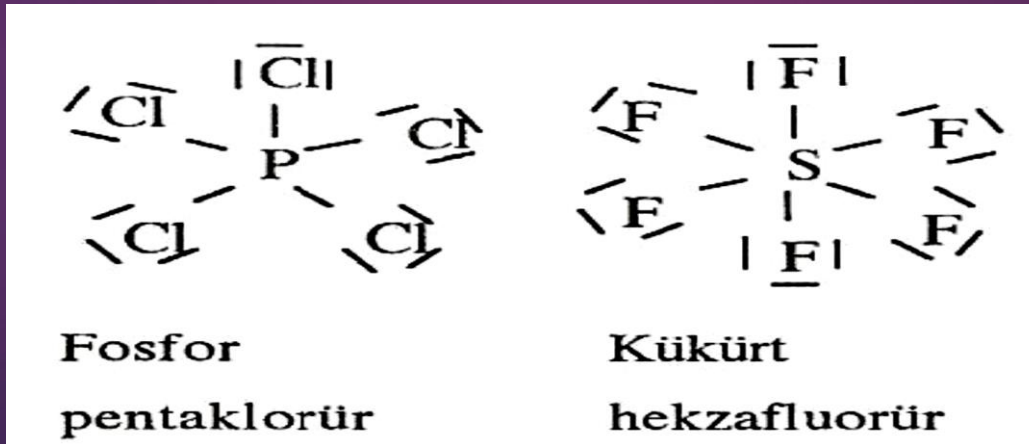


(ii) *Serbest radikaller:* Azot monoksit, NO, oktet kuralına uymayan bir diğer bileşiktir; görüldüğü gibi N, 7 elektron ile çevrilidir. Bir veya daha fazla çiftleşmemiş (ortaklanmamış) elektronu bulunan bileşikler, serbest radikaller olarak bilinir.



(iii) Oktet fazlası bulunan atomlar (sekizden fazla elektron ile çevrili atomlar):

Elektron oktetini, 2. Periyot elementleri tarafından aşılamaz, Fakat, 3.,4., 5. ve 6. Periyot elementleri, sekizden fazla elektron ile, çoğunlukla on elektron veya on iki elektron ile çevrili olabilirler. Çünkü, 2. periyotta değerlik tabakası sekiz elektron ile dolduğu halde ($ns^2 np^6$), 3. periyotta -d alt tabakasının varlığından dolayı- değerlik tabakası ($ns^2 np^6 nd^{10}$) onsekiz elektrona kadar doldurulabilir.



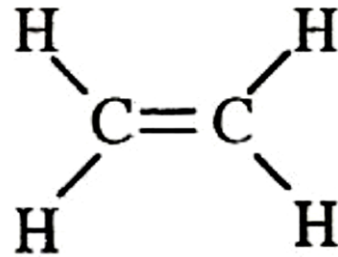
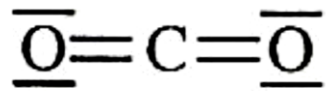
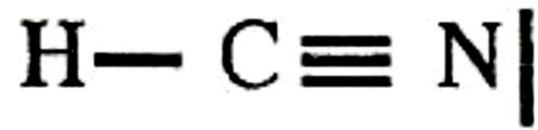
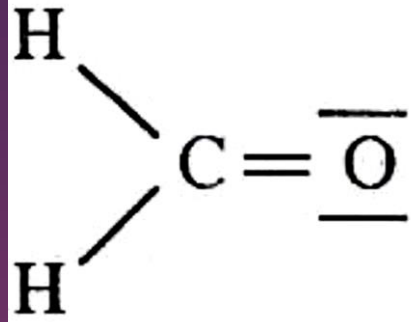
(iv) *Geçiş elementlerinin iyonları:* Bu iyonların çoğu, asal gazlarla aynı elektron dizilişinde değildirler.

LEWIS FORMÜLLERİ

Basit moleküllerin ve iyonların Lewis yapılarının yazılması için kurallar:

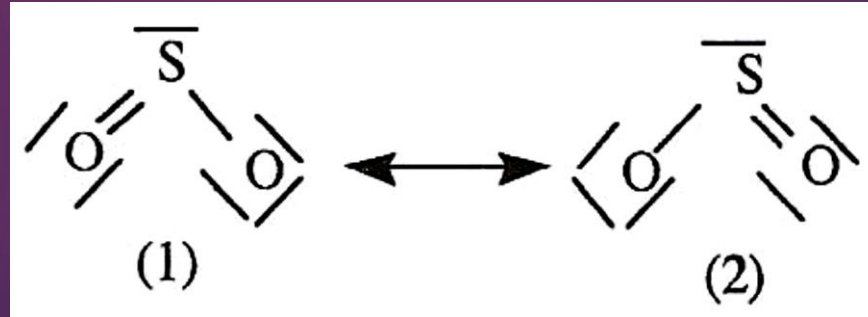
1. Molekül veya iyon için atomları birbirine tek bağ ile bağlayarak bir iskelet yapısı çiziniz.
2. Molekül veya iyon için toplam değerlik elektronları sayısını bulunuz.
3. 1. Basamakta yazılan iskelet yapıya geriye kalan elektronları, ortaklanmamış elektron çiftleri halinde oktet kuralını sağlayacak şekilde, önce merkezi atomun etrafındaki atomların etrafına ve sonra merkezi atomun etrafına yerleştiriniz.
4. Merkezi atom için oktet kuralı sağlanamıyorsa, diğer atomların etrafındaki elektron çiftlerini, merkezi atom ile etrafındaki atomların (halojen hariç) arasına yerleştiriniz.

Örnekler :



REZONANS

Çoğu zaman, bir molekül veya iyon için tek bir elektron-nokta formülü yeterli değildir, yani molekül veya iyon için tek bir Lewis yapısı yazılamaz. Örneğin, kükürt dioksit, SO_2 molekülü için aşağıdaki formüller yazılabilir:

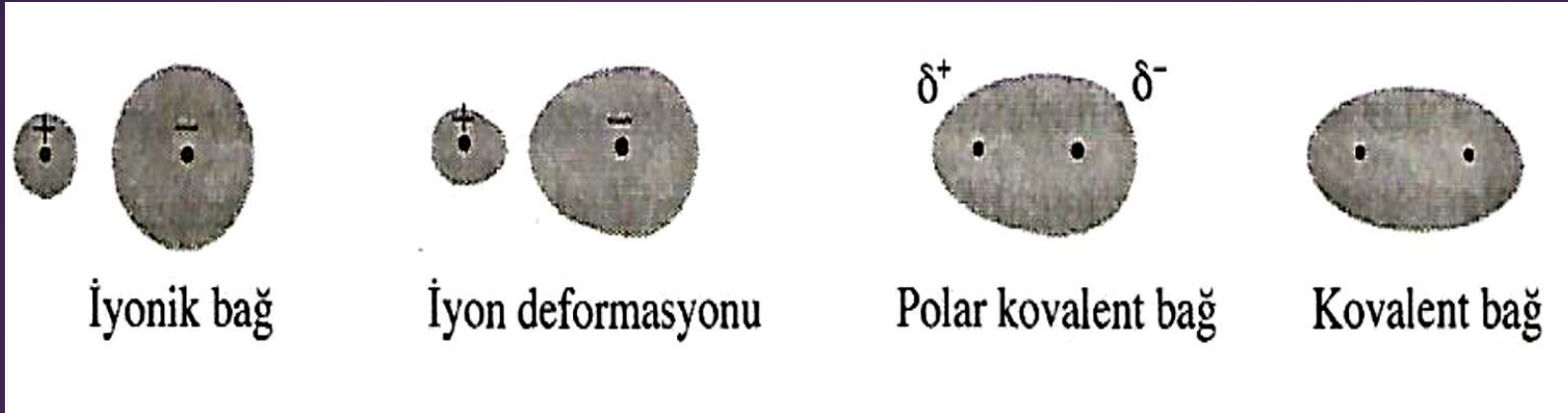


Bu Lewis formüllerinde S ve O atomlarının yerleri aynı olmakla beraber elektron çiftlerinin düzeni değişiktir. Bu durumda, molekülün yapısı için olanaklı ve kabul edilebilir bütün Lewis yapıları çizilerek aralarına çift başlı oklar konur ve bu yapılara **rezonans yapıları** denir.

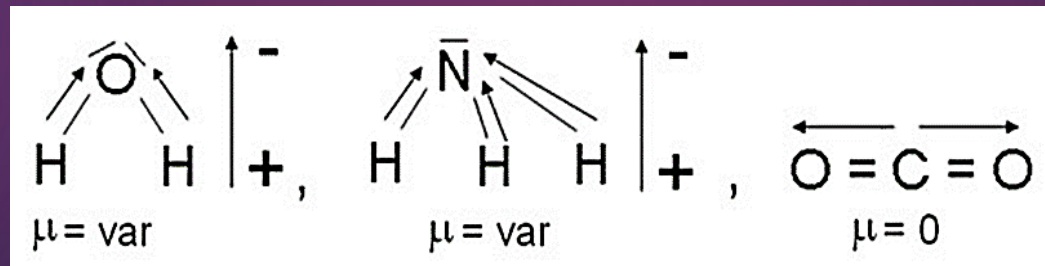
Molekül ise, Lewis yapılarının rezonans hibritidir. SO_2 'in yapısı ne (1) ne de (2) olup, ikisi arasında ve Lewis simgeleri ile kolayca doğru çizilemeyecek bir yapıdır.

BAĞIN POLARLIĞI, DİPOL MOMENT

Bağlarda, çoğunlukla, elektronlar bir atom tarafından daha kuvvetle çekilirler ve bağdaki elektron yoğunluğu atomlardan biri tarafına kayar. Bu özellik, bağın kısmi iyonik karakteri veya bağın polarlığı olarak tanımlanır. Örneğin, H-H ve Cl-Cl bağları tamamen kovalenttir; çünkü bağın elektronları atomlar arasında eşit paylaşılmıştır. Fakat H-Cl bağı ve H₃C-CCl₃ molekülünde C-C bağı tamamen kovalent veya tamamen iyonik değildir. H-Cl bağında Cl atomunun H atomundan daha fazla elektron çekici olduğu yani daha elektronegatif olduğu bilindiğine göre H atomunda kısmi bir pozitif yük ve Cl atomunda kısmi bir negatif yük bulunacaktır. Kısmi pozitif ve negatif yükler δ^+ ve δ^- ile gösterilir. H-Cl bağı, H ^{δ^+} - Cl ^{δ^-} şeklinde gösterilebilir ve bu tür bir bağ **polar kovalent bağ** olarak tanımlanır. H-H ve Cl-Cl bağları ise **apolar kovalenttir**.



Polar bir bağın, bağda elektron yüklerinin bulunmasından dolayı bir bağ ***dipol momenti*** (bağ momenti) vardır; yani bağ dipolar (iki kutuplu)'dır.



BAĞ ENERJİSİ, BAĞ UZUNLUĞU

Kovalent bağlı iki atomlu gaz halindeki bir molekülü nötral atomlarına ayırmak için verilmesi gerekli enerji, *bağ bozunma enerjisi (bağ enerjisi)* olarak tanımlanır. Bağın iyonik karakteri arttıkça bağ enerjisi artar.

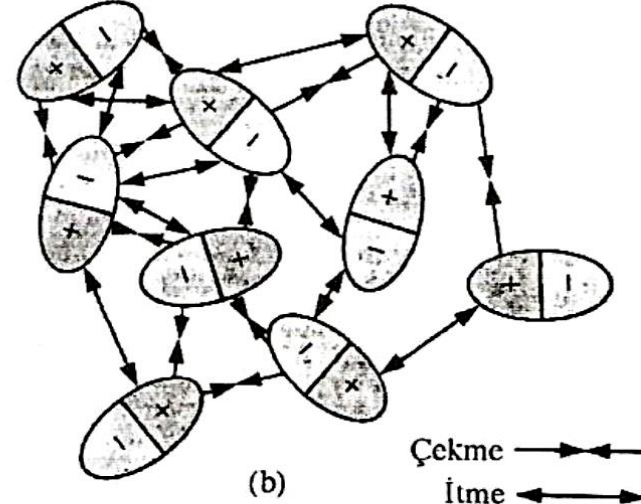
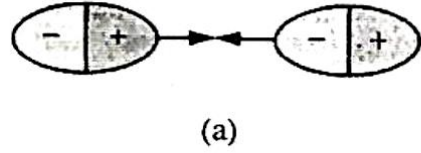
DİĞER BAGLAR. MOLEKÜLLER ARASI ETKİLEŞMELER

Moleküller arası çekim kuvvetleri, bir maddenin gaz, sıvı veya katı halde oluşunu belirlediği gibi kimyasal reaksiyonlarda da önemli rol oynarlar. Molekül içi etkileşmeler yani iyonik bağ ve kovalent bağ çok güçlü olduğu halde, moleküller arası ve atomlar arası etkileşmeler oldukça zayıftır. Moleküller arası etkileşimler üç türdür.

- Dipol-dipol kuvvetleri,
- London kuvvetleri ve
- Hidrojen bağıdır.

Dipol-Dipol Kuvvetleri

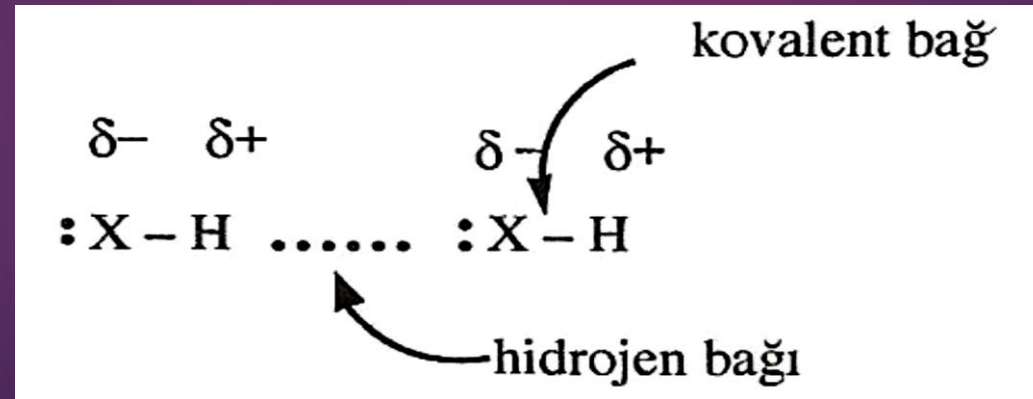
Dipol-dipol etkileşmeleri, polar moleküller arasında görülür.



Dipol-dipol etkileşmeleri. (a) İki polar molekül arasındaki etkileşme.
(b) Dipollerin sıvı fazda etkileşmesi.

Hidrojen Baęı

Bazı moleküller arasındaki çekim kuvvetleri, dipol-dipol etkileşmelerinden beklenenden daha yüksektir. Bu tür etkileşmeler, diğer kovalent baęlı hidrojenli bileşikler ile karşılaştırıldığı zaman erime ve kaynama noktaları çok daha yüksek olan NH_3 , H_2O ve HF 'de görülebilir.



London Kuvvetleri (Dispersiyon kuvvetleri)

London dağılım kuvvetlerinde ise moleküllerin sürekli negatif veya sürekli pozitif olan belirli bir kısmı yoktur. Bunun yerine, apolar molekül bir anlık kutuplanarak geçici bir dipol oluşturabilir. Geçici dipoller arasındaki çekme güçlü olmakla beraber oluşma süreleri kısa olduğundan London kuvvetleri moleküller arası en zayıf etkileşmelerdir.