

KİM-117 TEMEL KİMYA

Prof. Dr. Zeliha HAYVALI

Ankara Üniversitesi

Kimya Bölümü

Bu slaytlarda anlatılanlar sadece özet olup ayrıntılı bilgiler ve örnek çözümleri derste verilecektir.

BÖLÜM 6

KİMYASAL BAĞLAR

Molekül İçi

1. İyonik Bağ
2. Kovalent Bağ
 - i. Apolar Kovalent Bağ
 - ii. Polar Kovalent Bağ
 - iii. Koordine Kovalent Bağ
3. Metalik Bağ

Moleküller Arası (Van der Waals)

1. Hidrojen Bağları
2. İyon-Dipol Kuvvetleri
3. Dipol-Dipol Kuvvetleri
4. Dipol-İndüklenmiş Dipol
5. London Kuvvetleri

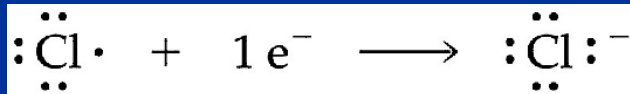
İYONİK BAĞ (ELEKTROVALENT BAĞ)

1. İyonik Bağlar: Bir atomun değerlik tabakasından bir veya birkaç elektronun, diğer atomun değerlik tabakasına geçmesi ile oluşur. Elektron kaybeden atom pozitif iyon (katyon) ve elektron alan atom negatif iyon (anyon) haline geçer.

- Sodyum elektron kaybeder ve Na^+ iyonu oluşur

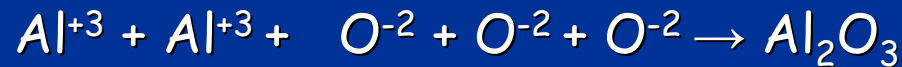


- Klor elektron kazanır ve Cl^- iyonu oluşur



- Böylelikle Na^+ Ne,
- Cl^- ise Ar elektron konfigürasyonuna ulaşmış olur.

İyonik Bağ (Örnekler)



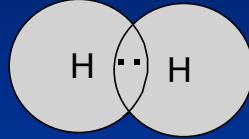
Metallerin iyonlaşma enerjileri düşüktür ve kolay elektron verirler.

Ametallerin ise elektron ilgileri büyüktür ve kolaylıkla elektron alırlar.

Bu nedenle metaller ve ametaller arasındaki bileşiklerin çoğu iyoniktir.

2. Kovalent Bağ

Kovalent bağ; bir elektron çiftinin atomlar arasında ortaklaşa kullanılması ile oluşur.



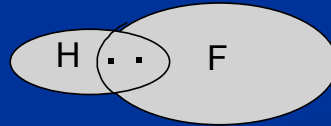
Bağlayıcı kuvvet, ortaklaşa kullanılan elektronlar ile pozitif atom çekirdekleri arasındaki çekme kuvvetinden kaynaklanır.

Apolar Kovalent Bağ: Aynı tür atomlar arasındaki bağıdır.



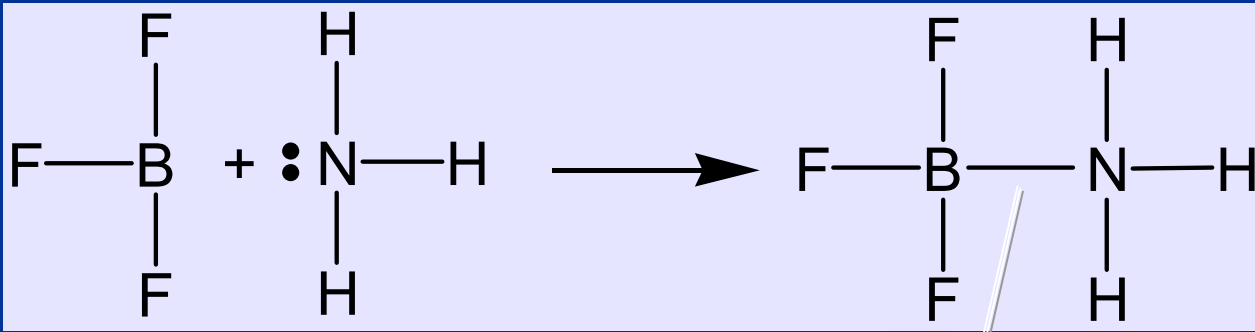
Apolar kovalent bağ olması için: $|X_a - X_b| = 0$ olmalıdır

Polar Kovalent Bağ: Elektronegatiflikleri farklı atomlar arasındaki bağıdır.



Polar kovalent bağ olması için: $|X_a - X_b| \neq 0$ olmalıdır

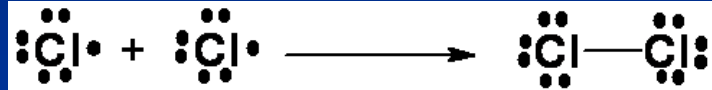
Koordine Kovalent Bağ: Kovalent bağı oluşturan elementlerin her ikisinde aynı atom tarafından sağlanmışsa oluşan bağdır.



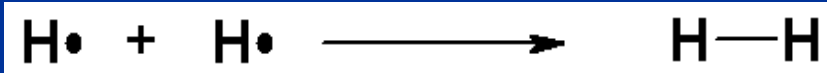
Koordine kovalent bağ

Oktet Kuralı

Kovalent bir molekülü oluşturan atomların etrafında sekiz elektron bulununcaya kadar elektronlarını ortaklaşa kullanmasıdır.



Sadece hidrojen için bu dublet kuralı olarak ifade edilir.



3. Metalik Baę: Metallerdeki negatif elektron denizi ile pozitif çekirdekler arasında oluřan ve oluřan bu elektrostatik çekme kuvvetleri metallerin bir arada kalmalarını saęlar.

Bu baęda kovalent ve iyonik baęlardaki gibi merkezi bir baę söz konusu deęildir.

Bu etkileřimde elektronlar metalin kristal yapısı boyunca yer deęiřtirirler.

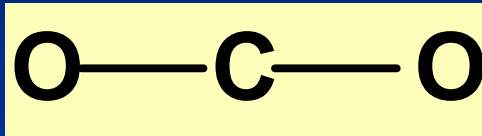
Lewis Formülleri

Kurallar:

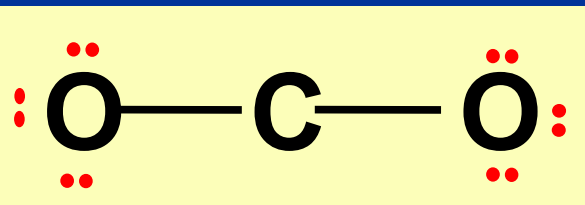
1. Molekülün toplam değerlik elektron sayısı hesaplanır.
2. Molekülün en basit tek bağı iskelet yapısı yazılır.
3. Genellikle, molekülde en elektropozitif atom, merkez atomu olarak seçilir.
4. İskelet yapısında tek bağı oluşturan elektronlar toplam değerlik elektron sayısından çıkarılır. Geri kalan değerlik elektronları atomların etrafına elektron çifti olarak yerleştirilir.
5. Toplam değerlik elektronları eksik ise, tek bağ yerine ikili veya üçlü bağlar yazılır.
6. Toplam değerlik elektronları fazla ise, merkez atomun etrafına yerleştirilir.

Karbon Dioksit (CO₂)

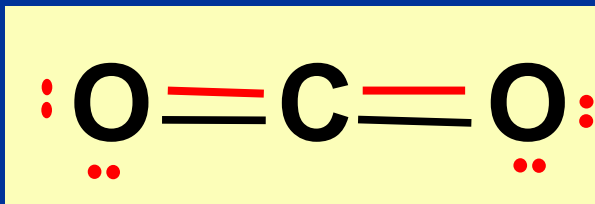
Değerlik elektronları : $4 + 2 \times 6 = 16 e^-$



4 elektron kullanılır geriye 12 elektron kalır.



C atomu mutlaka okteti sağlamak zorundadır.

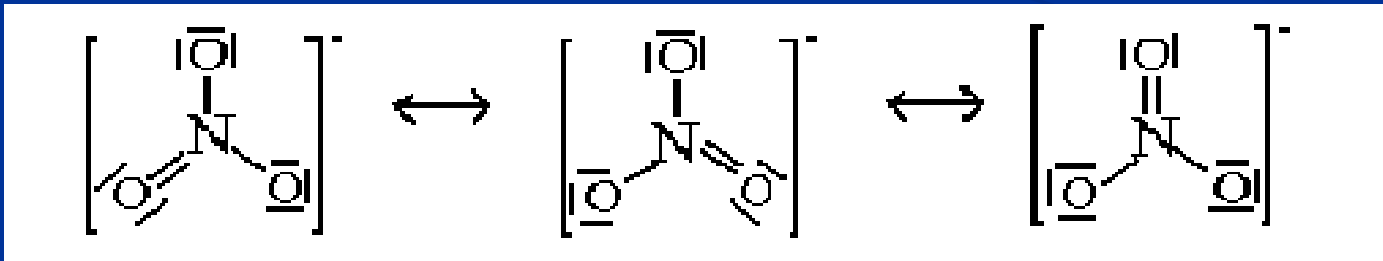
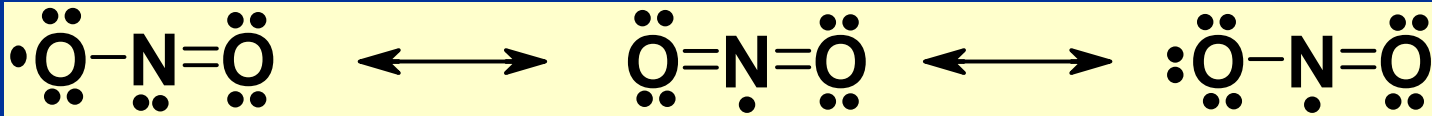


C ve O atomları arasına çift bağlar konarak, C atomunun okteti sağlanır.

REZONANS

Molekül veya iyon yapılarının hem oktet kuralını sağlayan ve hem de denel sonuçlara uygun birden fazla Lewis formülü ile gösterilebilmesi özelliğine rezonans denir.

Rezonans yapılarını göstermek için çift yönlü ok kullanılır.



Formal Yük

Formal yük: bağlarda elektron çiftlerinin atomlar tarafından nasıl paylaşıldığını belirtir.

Formal yük bulunurken bağ elektronlarının atomlar tarafından eşit paylaşıldığı, yani bağın polarlığı göz önüne alınmadan bağın her elektronunun bir atoma ait olduğu kabul edilir.

Formal yük hesabı en doğru Lewis formülünün bulunmasını sağlar.

Formal Yük = Değerlik Elektronları Sayısı (Grup numarası) - [Bağ yapmamış yani ortaklanmamış elektron sayısı + Kovalent bağların sayısı]

Bu formülü kısaca aşağıdaki şekilde de ifade etmek mümkündür.

Formal Yük = Grup Numarası - Bağ sayısı - Ortaklanmamış Elektron Sayısı

Molekül yapısının doğruluğuna karar verirken şunlara dikkat etmeliyiz;

- * Mutlak değer olarak toplamda en düşük formal yüke sahip olan yapı en olası yapıdır.
- * Elektronegativitesi yüksek olan atomların formal yüklerinin düşük, elektronegativitesi daha düşük atomların ise formal yüklerinin daha yüksek olması gerekir.
- * Moleküldeki aynı atomların aynı formal yüke sahip olmalarına dikkat edilir.

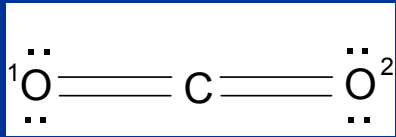
Diazot monoksit (N_2O)

$:\ddot{N} = N = \ddot{O}:$	$:N \equiv N - \ddot{O}:$	$:\ddot{N} - N \equiv O:$
<p>N: $5 - (4 + 2) = -1$ N: $5 - (0 + 4) = +1$ O: $6 - (4 + 2) = 0$</p>	<p>N: $5 - (2 + 3) = 0$ N: $5 - (0 + 4) = +1$ O: $6 - (6 + 1) = -1$</p>	<p>N: $5 - (6 + 1) = -2$ N: $5 - (0 + 4) = +1$ O: $6 - (2 + 3) = +1$</p>

Son yapı kabul edilemez. Oksijen daha elektronegatif olduğu halde N'un formal yükü daha düşüktür. İkinci yapı verilen kurallara göre daha olasıdır. Çünkü oksijen daha elektronegatiftir ve formal yükü daha düşük olmalıdır.

Örnek: CO_2 molekülünün formal yükünü hesaplayarak en geçerli Lewis nokta gösterimini öneriniz. (Atom numarası: C;6, O;8)

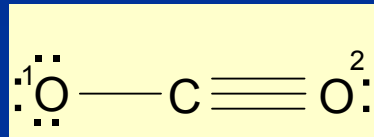
Öncelikle tahmin edilen Lewis nokta yapıları yazılır. Daha sonra bu Lewis yapılarının her biri için formal yükler hesaplanır. Yukarıda verilen kurallara uyan yapı, en uygun yapı olarak belirlenir.



$$\text{C} : 4 - 4 - 0 = 0$$

$$^1\text{O} : 6 - 2 - 4 = 0$$

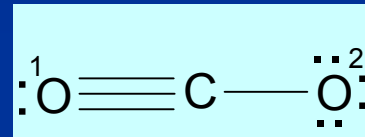
$$^2\text{O} : 6 - 2 - 4 = 0$$



$$^1\text{O} : 6 - 1 - 6 = -1$$

$$\text{C} : 4 - 4 - 0 = 0$$

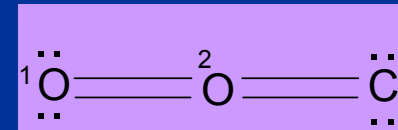
$$^2\text{O} : 6 - 3 - 2 = +1$$



$$^1\text{O} : 6 - 3 - 2 = +1$$

$$\text{C} : 4 - 4 - 0 = 0$$

$$^2\text{O} : 6 - 1 - 6 = -1$$



$$^1\text{O} : 6 - 2 - 4 = 0$$

$$^2\text{O} : 6 - 4 - 0 = +2$$

$$\text{C} : 4 - 2 - 4 = -2$$

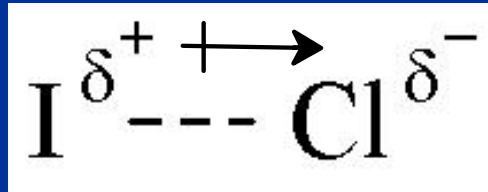
I. yapı yukarıda verilen kurallara uyarken, II., III. ve IV. yapılar uymamaktadır. Bu nedenle en olası Lewis nokta yapısı I numaralı yapıdır.

BAĞIN POLARLIĞI, DİPOL MOMENT

Bağlarda, genellikle elektronlar daha elektronegatif atom tarafından daha kuvvetle çekilirler ve bağdaki elektron yoğunluğu atomlardan biri tarafına kayar (kismi negatif) ve diğer atom biraz pozitif yük (kismi pozitif) kazanır.

Bu özellik **bağın kısmi iyonik karakteri** veya **bağın polarlığı** olarak tanımlanır.

Kismi pozitif ve negatif yükler δ^+ ve δ^- ile gösterilir.



Polar kovalent bağları içeren moleküller, **polar moleküller** ve apolar kovalent bağları içeren moleküller **apolar moleküller** olarak adlandırılır.

Bir kovalent bağla bağlı atomların elektronegatiflikleri ne kadar farklıysa bağ o kadar polardır ve atomlar üzerindeki kısmi yükler o kadar fazladır.

1. $|X_A - X_B| = 0$ ise Apolar kovalent bağ

2. $|X_A - X_B| > 1,7$ ise İyonik bağ

3. $|X_A - X_B| < 1,7$ ise polar kovalent bağ

A-B bağında $|X_A - X_B| > 1,7$ ise bağın kısmi iyonik karakterinin daha fazla olduğu söylenir.

Polar bir bađın, bir bađ dipol momentini (bađ momentini) vardır. Yani bađ kutupludur.

Bir bađın dipol momentini (μ):

$$\mu = qd$$

İki atomlu moleküller polar ise dipol momentlerinin sıfırdan farklıdır. Apolar kovalent ise dipol momentleri sıfırdır.

Bađın gözlenen (ölçülen) dipol momentinin, hesaplanan dipol momentine oranı, bađın kısmi iyonik karakterini bulmamızı sağlar.

Bağ dipol momenti bir vektör olduğuna göre, çok atomlu moleküller için molekül dipol momentini, bağ momentlerinin vektörel toplamına eşittir.



$$\mu = 0 \text{ D}$$



$$\mu = 0 \text{ D}$$



$$\mu = 0 \text{ D}$$

KİMYASAL BAĞLANMA KURAMLARI

DEĞERLİK BAĞI KURAMI

Değerlik bağı kuramı, iki atomun bağ oluşturmak üzere bir araya geldiği zaman uygun simetrideki atom orbitallerinin üstüste çakıştığını ve spinleri zıt bir çift elektronun bu yörüngeleri doldurarak bir kovalent bağ oluşturduğunu kabul eder.

Hibritleşme: Atom orbitallerinin karışıp kaynaşarak yeni melez orbitaller oluşturmasıdır.

Hibritleşme Türleri

Koordinasyon sayısı	Hibritleşme	Geometrik yapı	açılar
2	sp	Çizgisel	180°
3	sp^2	Üçgen düzlem	120°
4	sp^3	Tetrahedral	109.5°
4	dsp^2	kare düzlem	90°
5	dsp^3, sp^3d	Trigonal bipiramit	90° ve 120°
6	d^2sp^3, sp^3d^2	Oktahedral	90°

DEĞERLİK TABAKASI ELEKTRON ÇİFTLERİ İTMESİ KURAMI VE MOLEKÜL ŞEKİLLERİ

Değerlik tabakası elektron çiftleri itmesi (Valence Shell Electron Pair Repulsion) yani VSEPR kuramı molekül şekillerinin daha kolay bulmamızı sağlar.

Bu kuramda, hibritleşme türünün bilinmesine gerek yoktur ve moleküllerin Lewis formülleri yazılarak molekül şekilleri bulunabilir.

VSEPR Kurama göre; moleküllerde elektron çiftlerinin aralarında çekme en az olacak şekilde düzenlenir ve değerlik tabakası elektron çiftlerinin sayısına bağlı olarak molekül şekilleri ve geometrileri belirlenir.



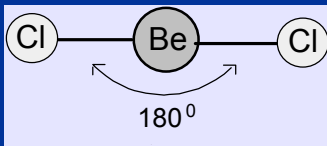
Merkezdeki atom "A"

Bağlanan ligantlar "X"

Ortaklanmamış elektron çiftleri "E"

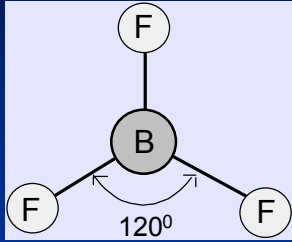
m+n toplamı merkez atom etrafındaki konum sayısını

AX_2 yapısı



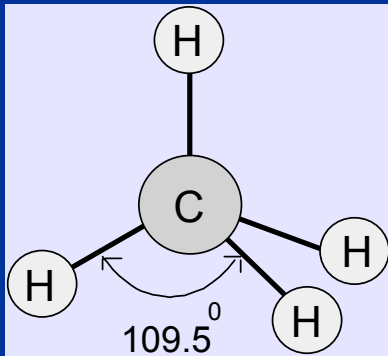
Çizgisel geometri

AX_3 ve AX_2E yapısı

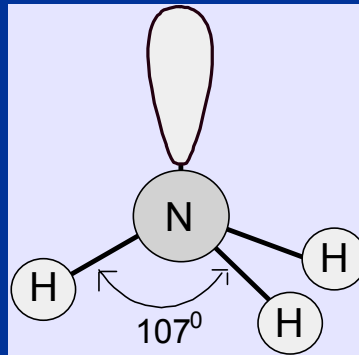


Üçgen düzlem

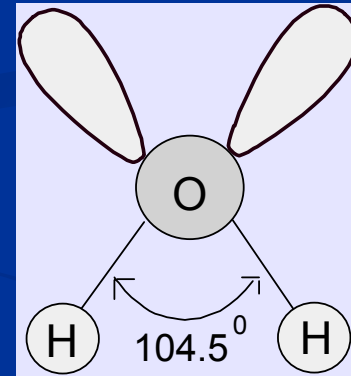
AX_4 , AX_3E ve AX_2E_2 yapısı



Metan
Tetrahedral

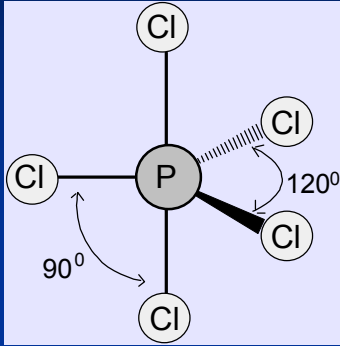


Amonyak
pramidal

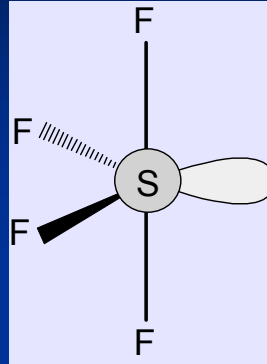


Su
V şekli

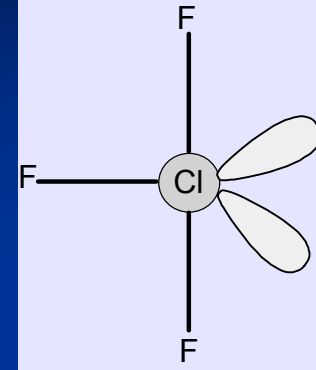
AX_5 , AX_4E , AX_3E_2 ve AX_2E_3 yapısı



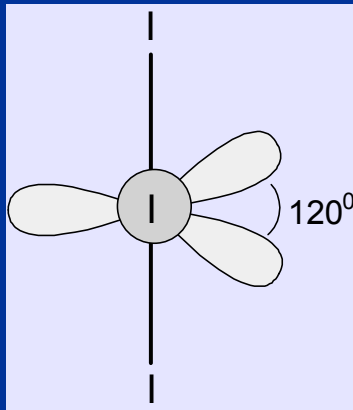
AX_5
Üçgen çift pramit



AX_4E
Bozulmuş üçgen çift pramit

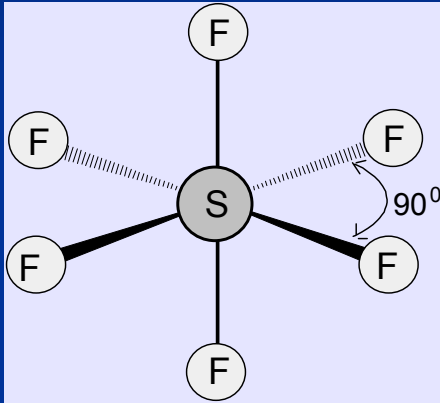


AX_3E_2
T-şekli

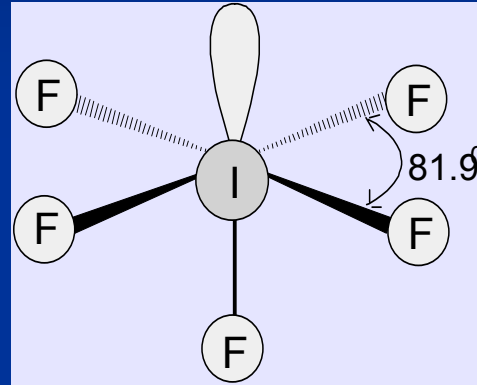


AX_2E_3
Çizgisel

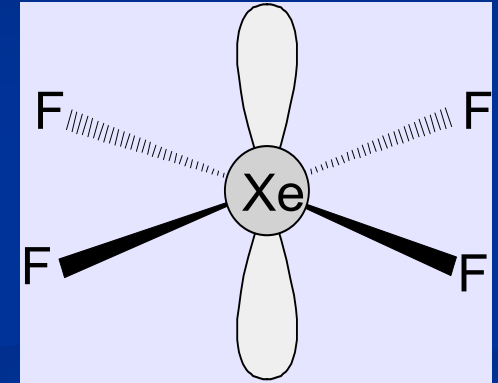
AX_6 , AX_5E ve AX_4E_2 yapısı



AX_6
Oktahedral



AX_5E
Kare pramit



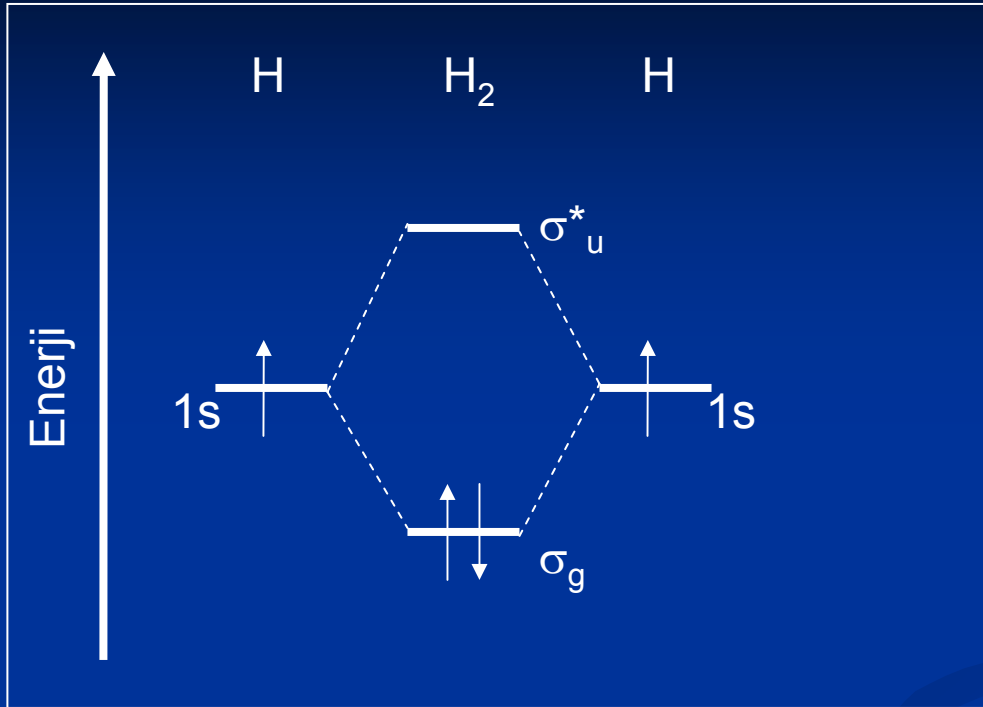
AX_4E_2
Kare düzlem

MOLEKÜL YÖRÜNGELERİ KURAMI

MOLEKÜL ORBİTALLERİ

1. Bağ Orbitalleri
2. Antibag (Karşıbag)
Orbitalleri
3. Bağ Yapmayan
Orbitaller

H₂ nin MO diyagramı



H: 1s¹

$$\text{Bağ derecesi} = \frac{\text{Bağ MO deki elektron sayısı} - \text{Karşıbağ MO elektron sayısı}}{2}$$

$$\text{H}_2 \text{ için Bağ Derecesi} = (2 - 0) / 2 = 1$$

DİĞER BAĞLAR, MOLEKÜLLER ARASI ETKİLEŞİMLER

Molekül içi etkileşimler yani iyonik ve kovalent bağ çok güçlü olduğu halde moleküller arası etkileşimler oldukça zayıftır.

Moleküller arası çekim kuvvetleri, bir maddenin gaz, sıvı veya katı halde oluşunu belirlediği gibi kimyasal reaksiyonlarda da önemli rol oynarlar.

***Dipol-dipol kuvvetleri**

***Hidrojen bağları**

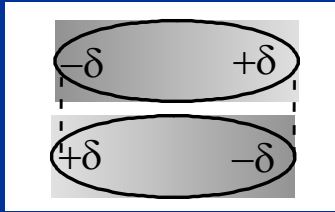
Dipol-dipol kuvvetleri

•Dipol-dipol kuvvetleri: Polar bir moleküldeki kısmi pozitif yüklü bölgesi ile diğer molekülün kısmi negatif yüklü bölgesini elektrostatik çekim kuvveti ile çekmesi sonucu ortaya çıkan kuvvette denir.

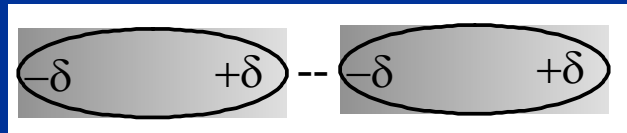
•Bu kuvvetler iyonik veya kovalent bağ ile karşılaştırıldığında oldukça zayıftır.

•Ortamdaki moleküllerin polarlığının artması ve moleküllerin birbirlerine yaklaşması dipol-dipol etkileşimin kuvvetinin artmasına neden olur.

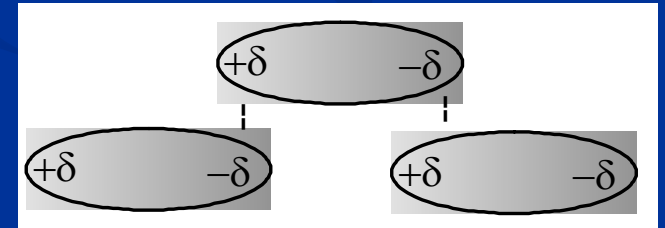
* Etilalkol ve suyun her oranda birbiri ile karışması bu kuvvetler sayesinde gerçekleşir.



Antiparalel etkileşim



Baş-son etkileşimi



Baş-son-antiparalel

LONDON KUVVETLERİ (DİSPERSİYON KUVVETLERİ)

Dispersion kuvvetleri apolar moleküller arasında oluşur.

Apolar moleküllerin kaynama noktaları çok düşüktür ve moleküller arası etkileşmeler dipol-dipol kuvvetlerinden daha zayıftır.

London kuvvetleri bir atom veya molekülde elektronların serbest hareketleri sonucu ortaya çıkar.

Geçici dipoller arasındaki çekme güçlü olmakla beraber oluşma süreleri kısa olduğu için London kuvvetleri moleküller arası en zayıf etkileşmelerdir.

London kuvvetleri, apolar moleküller arasındaki çekme kuvvetidir fakat polar moleküller arasında da diğer kuvvetlere (dipol-dipol ve hidrojen bağı) ek olarak London kuvvetleri bulunur.

O_2 , N_2 ve F_2 gibi bütün apolar moleküller ve hatta tek atomlu asal gazlar dahi sıvılaştırılabilirler.

Molekül kütlesi arttıkça molekül daha fazla kutuplanabilir.
Dolayısı ile molekül kütlesi arttıkça London kuvvetleri artar.

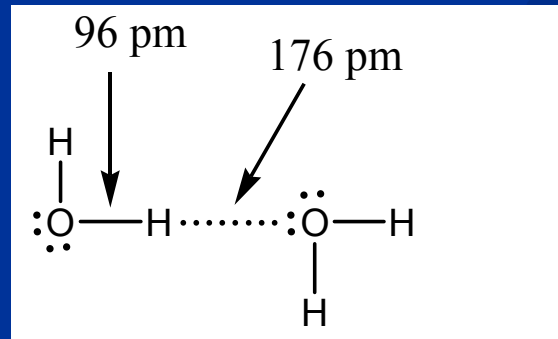
HİDROJEN BAĞI

H atomu elektronegativitesi yüksek bir atomla (F,O veya N) kovalent bağ ile bağlandığında, bağ elektronları elektronegativitesi büyük olan atom tarafından çekilir. Böylece bir kutuplaşma meydana gelir. Elektronsuz kalan ve kısmi pozitif yüklü olan hidrojen, elektronegativitesi yüksek komşu atom ile elektrostatik etkileşime girerek **bir tür köprü atom** haline gelir. İşte bu hidrojen, hidrojen bağı yapmıştır.

Bir molekülde kısmen pozitif yüklü H atomu ile başka bir moleküldeki kısmen negatif yüklü elektronegatif atom (N, O veya F) arasındaki çekim kuvvetine **hidrojen bağı** denir.

Bu bağı kovalent bağına göre daha uzun ve zayıf bir bağıdır.

Hidrojen bağı kovalent bağına göre daha uzun olduğu için ----- ile gösterilir.



Hidrojen bađı molek ller arası ekim kuvvetlerinden (van der Waals, dipol-dipol etkileşim) daha kuvvetlidir. Fakat iyonik ve kovalent bađdan daha g cs zdir.

Hidrojen bađları maddelerin kaynama noktalarının artmasına neden olur.  rneđin su dipol-dipol ve London kuvvetlerinin yanında hidrojen bađı yapmamış olsaydı kaynama noktası -80°C civarında ve gaz olurdu. Su molek llerinin hidrojen bađı yapması neticesinde sıvıdır ve kaynama noktası 100°C 'dir.