

Bölüm 11: Kimyasal Bağ

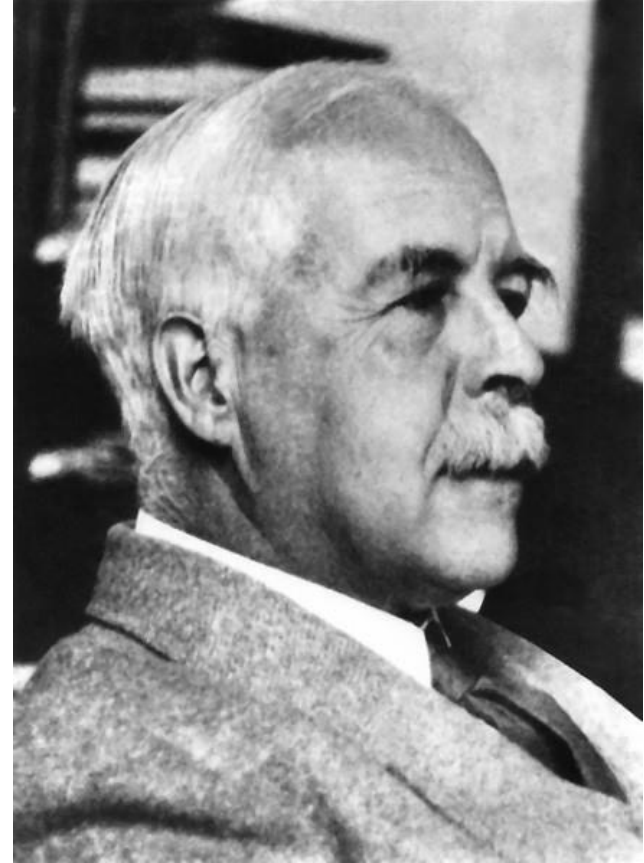
Temel Kavramlar

İçindekiler

- 11-1** Lewis Teorisi: Genel Bakış
- 11-2** Kovalent Bağlanma: Giriş
- 11-3** Polar Kovalent Bağlar
- 11-4** Lewis Yapılarının Yazılması
- 11-5** Rezonans
- 11-6** Oktet Kuralından Sapmalar
- 11-7** Moleküllerin Biçimleri
- 11-8** Bağ Derecesi ve Bağ Uzunlukları
- 11-9** Bağ Enerjileri

11-1 Lewis Teorisi: Genel Bakış

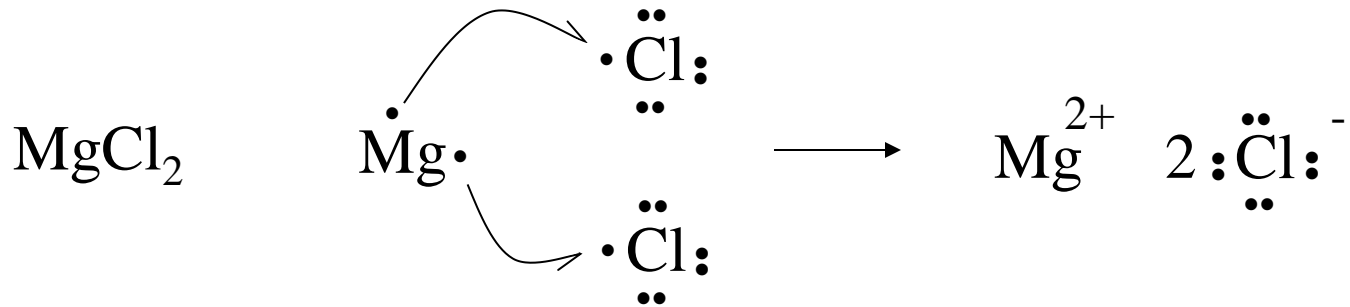
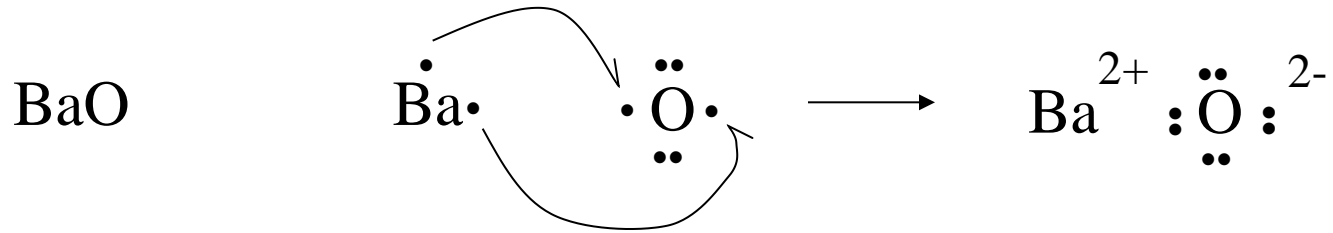
- Değerlik e^- 'ları kimyasal bağlanmada temel rol oynar.
- e^- transferi *iyonik bağlara* sebep olurlar.
- e^- 'ların paylaşılması *kovalent bağlara* sebep olur.
- e^- 'ların transferi ya da paylaşılması her atomun kararlı e^- dağılımına (soy gaz) sahip olması şeklinde olur.



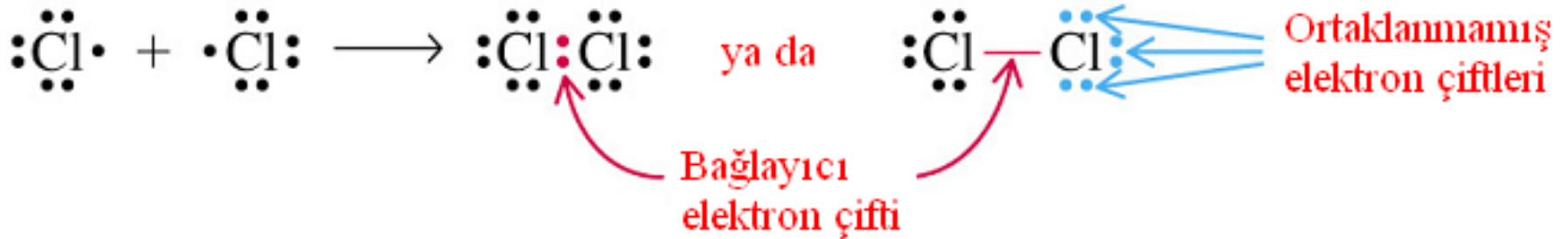
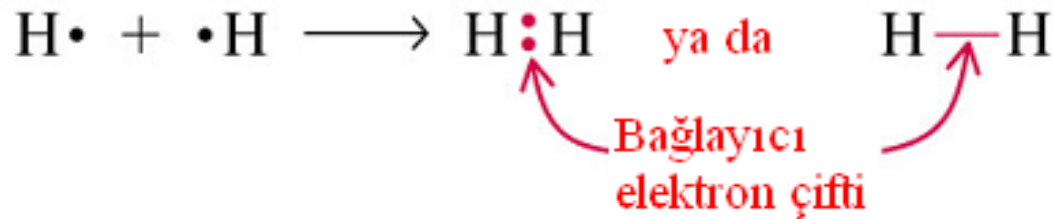
Gilbert Newton Lewis

İyonik Bileşiklerin Lewis Yapıları

İyonik Bileşiklerin Lewis Yapılarının Yazılması

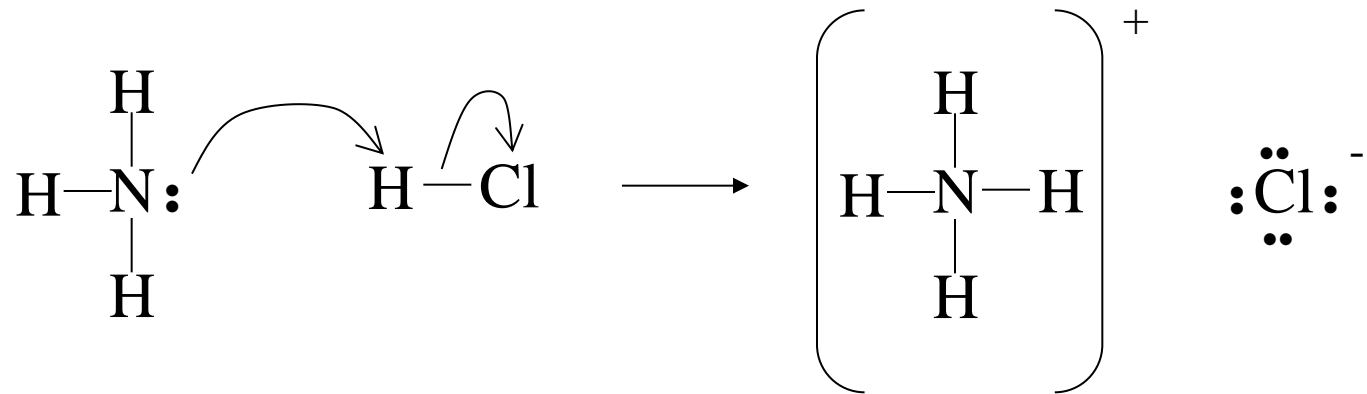


11-2 Kovalent Bağlanma

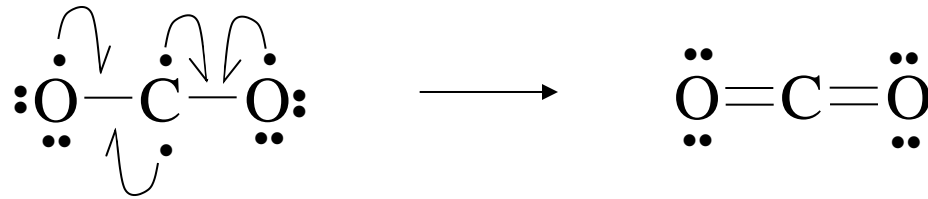
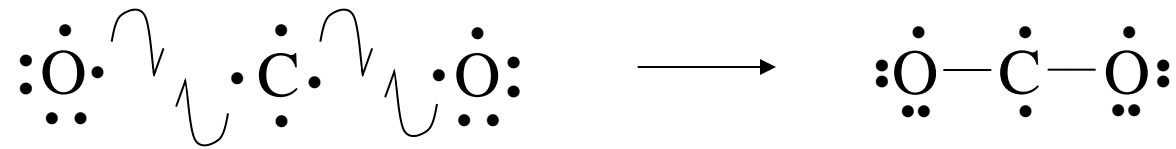


Koordine Kovalent Bağlar

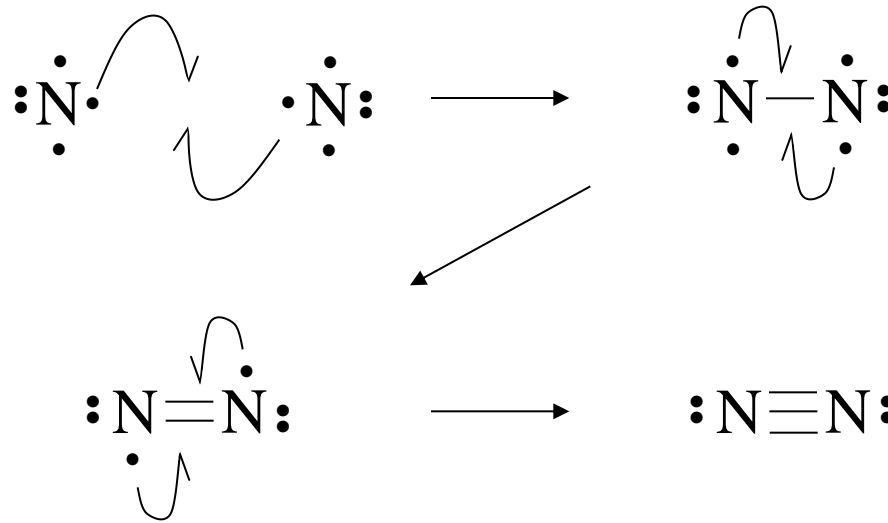
Amonyum iyonunun, NH_4^+ , oluşumu



Katlı Kovalent Bağlar

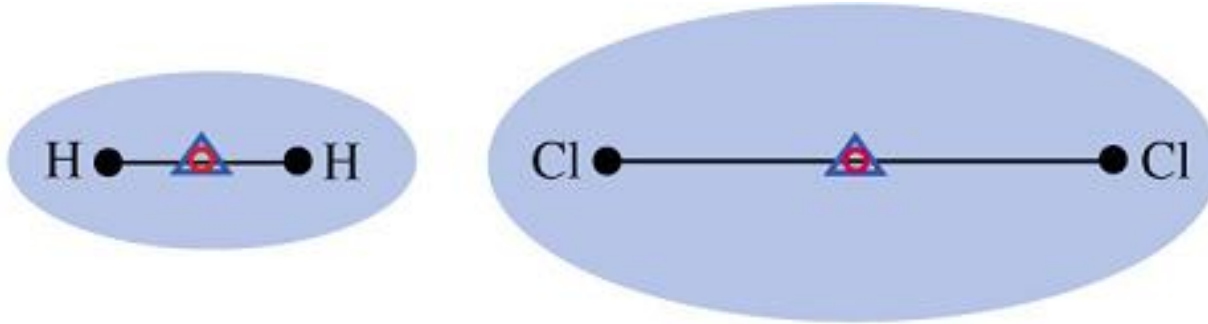


Katlı Kovalent Bağlar

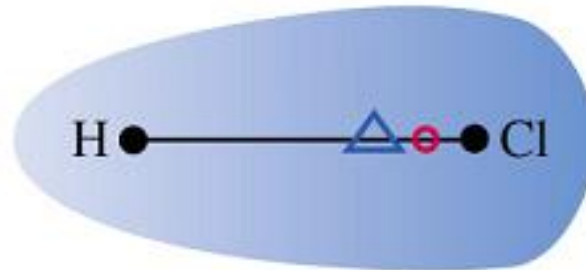


11-3 Polar Kovalent Bağlar

e⁻ların iki atom arasında eşit olmayan ortaklanmasıyla oluşan kovalent bağa *polar kovalent bağ* denir.

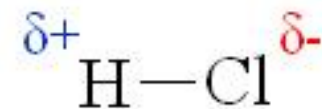


(a) Apolar kovalent bağlar



(b) Polar kovalent bağlar

- = Atom çekirdeği
- △ = Artı yük merkezi
- = Eksi yük merkezi



Elektronegatiflik

- *Elektronegatiflik* (EN) bir atomun bağlı olduğu diğer atomlardan elektron çekme kabiliyetidir. Elektronegatiflik, *iyonlaşma enerjisi* ($İE$) ve *elektron ilgisi* ($Eİ$) ile ilgilidir.
- Genel bir kural olarak, elektronegatiflikler yukarıdan aşağıya doğru *azalır*, bir periyotta soldan sağa doğru *artar*.



Örnek:H-Cl ya da H-O
bağlarından hangisi polardır?

$$EN_{\text{H}}:2,1 \quad EN_{\text{Cl}}:3,0 \quad EN_{\text{O}}:3,5$$

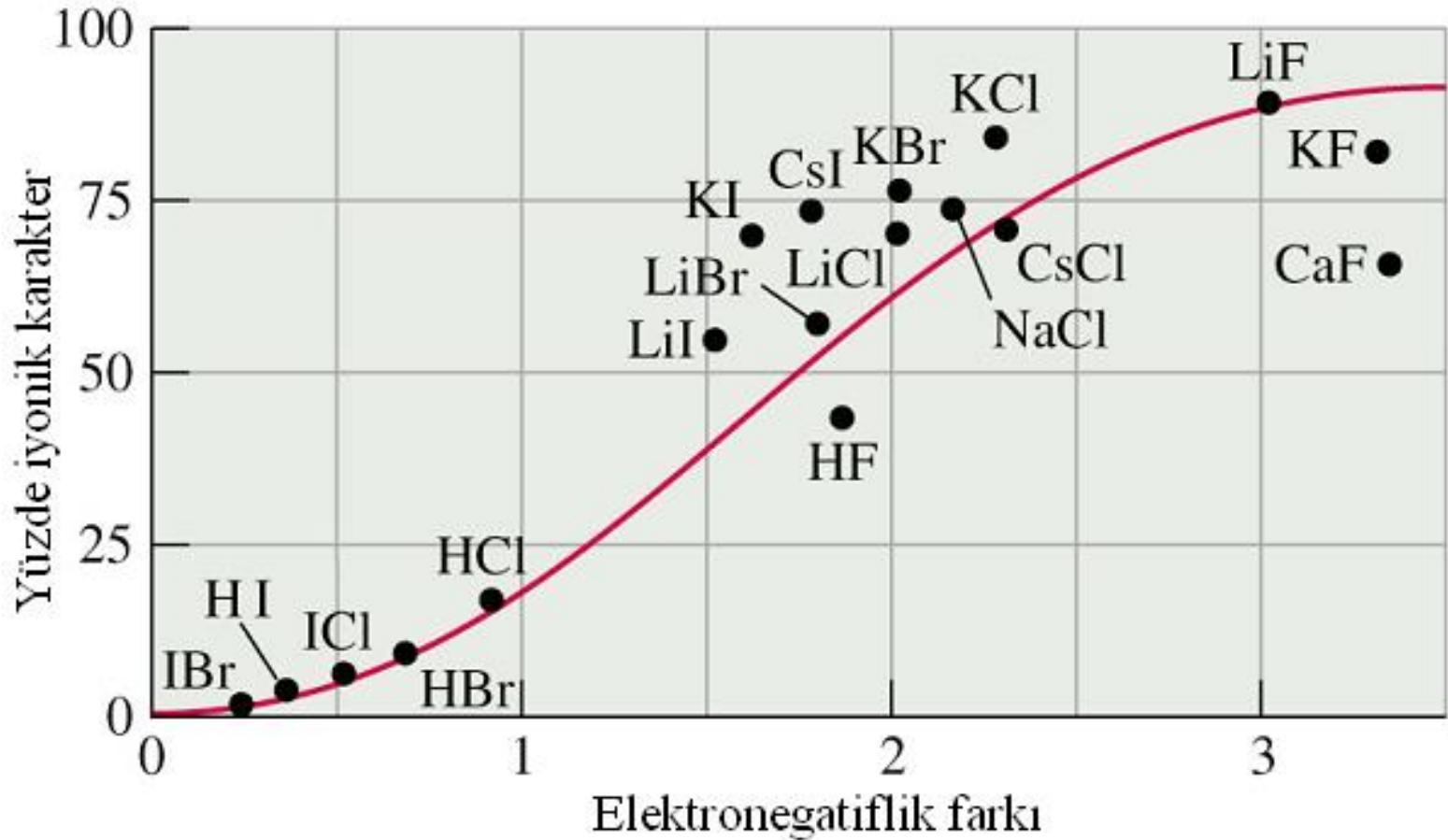
$$\text{HCl}=\Delta EN=3,0-2,1=0,9$$

$$\text{HO}=\Delta EN=3,5-2,1=1,4$$

Elektronegatiflik

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	
H 2.1																	
Li 1.0	Be 1.5											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	
Na 0.9	Mg 1.2											Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0	
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8	
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5	
Cs 0.8	Ba 0.9	La* 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.4	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2	
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac [†] 1.1	* Lantanitler : 1.1-1.3 † Aktinitler 1.3-1.5														

Yüzde İyonik Karakter

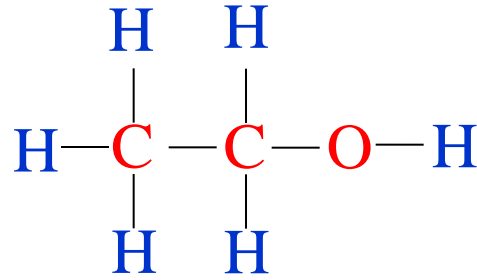


Lewis Yapılarının Yazılması

- Bir Lewis yapısında *bütün değerlik e⁻ları* gösterilmelidir.
- Bütün e⁻lar *genellikle* eşleşmiştir.
- *Genellikle* her atom en dış kabuğunda oktet e⁻larına ulaşır. Ancak ¹H'de dış kabuk e⁻ları iki olur.
- Bazen *katlı kovalent bağlara* (ikili veya üçlü bağlara) gerek duyulur. Katlı kovalent bağlar **C**, **N**, **O**, **P** ve **S** atomları tarafından daha kolaylıkla oluşturulur.

İskelet Yapıları

- *Merkez* ve *uç atomları* belirleyin.



- Hidrojen atomları her zaman uç atomlardır.
- Merkez atomları genellikle elektronegatiflikleri en düşük olanlardır.
- Karbon atomları her zaman merkez atomlardır.
- Moleküllerin ve çok atomlu iyonların genellikle toplu ve simetrik yapıları vardır.

Lewis Yapılarının Yazılmasında İzlenecek Yol

1. Yapıdaki değerlik e^- 'lerinin toplam sayısını belirleyiniz
2. Merkez atomu ve uç atomları belirleyiniz
3. Uygun bir iskelet yapısı çiziniz. İskelet yapısındaki atomları tekli kovalent bağlarla bağlayınız.
4. İskelet yapısındaki her bağ için toplam e^- sayısından $2e^-$ çıkarınız.
5. Geriye kalan değerlik e^- larıyla önce uç atomların oktetlerini tamamlayınız (H atomlarının dupletlerini). Sonra merkez atomların oktetlerini olabildiğince tamamlayınız. Eğer bütün atomların oktetlerini tamamlayacak kadar değerlik e^- u varsa bu yapı uygun bir Lewis yapısıdır.
6. Merkezi atomlardan birinin ya da daha fazlasının eksik oktetli kalmışsa 5. adımdan sonra uç atomların ortaklanmamış elektron çiftlerini katlı kovalent bağlar oluşturmak üzere merkezi atomlara kaydırınız. Bütün atomların oktetlerinin tamamlanmasına kadar bu işleme devam ediniz ve uygun Lewis yapısına ulaşınız.

Formal Yük

Lewis yapılarında kovalent bağların uçlarındaki atomların, bu bağların oluşumuna eşit elektron katkısı yapmadıkları durumlarda, bazı atomların üzerinde oluşan yükler formal yüklerdir.

Formal Yük= değerlik e⁻ sayısı – ortaklanmamış e⁻ sayısı - bağ sayısı

- *FY*'lerin toplamı *nötür molekül* için *sıfır* ve çok atomlu iyon için iyonun yüküne eşit olmalıdır.
- *FY*'ler olabildiğince en az olmalıdır.
- Çoğu elektronegatif atomlardaki *FY*'ler negatif; elektronegatiflikleri az olan atomlardaki *FY*'ler pozitiftir.
- Komşu atomlarda aynı işaretli *FY*'lerin bulunduğu yapılar olası değildir.

Örnek 11-6

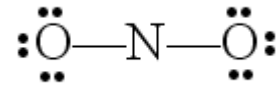
Çok Atomlu Bir İyon İçin Lewis Yapısının Yazılması

Nitronyum, NO_2^+ , iyonu için Lewis yapısını yazınız .

1. Basamak: Değerlik e^- toplam sayısı = $5 + 6 + 6 - 1 = 16 e^-$

2. Basamak: Merkez ve uç atomları belirleyin: O—N—O

3. Basamak: Atomları tekli kovalent bağlarla bağlayarak uygun bir iskelet yapısı yazınız:

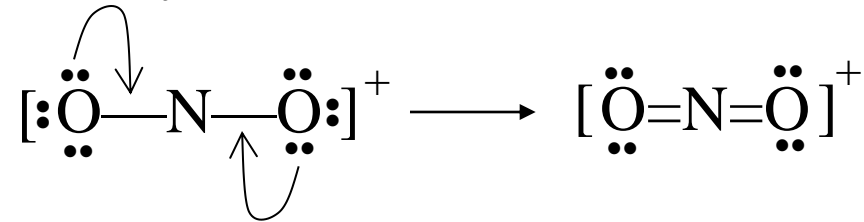


4. Basamak: İskelet yapısındaki her bir bağ için iki e^- çıkarınız:

$$16 - 4 - 12 = 0$$

Örnek 11-6

5. Basamak: Uç O atomlarının oktetlerini tamamlayınız ve merkez N atomunun oktetini mümkün olduğunca tamamlamaya çalışınız:

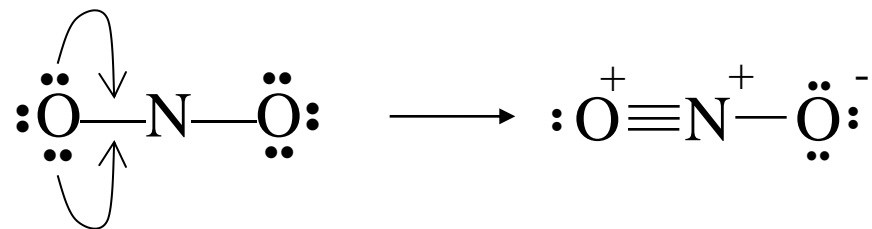


6. Basamak: Formal yükleri belirleyin:

$$\text{FY}(\text{O}) = 6 - 4 - \frac{1}{2} (4) = 0$$

$$\text{FY}(\text{N}) = 5 - 0 - \frac{1}{2} (8) = +1$$

Alternatif Lewis Yapıları



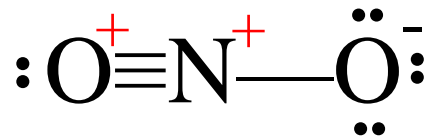
$$\text{FY}(\text{O}\equiv) = 6 - 2 - \frac{1}{2}(6) = +1$$

$$\text{FY}(\text{N}) = 5 - 0 - \frac{1}{2}(8) = +1$$

$$\text{FY}(\text{O}\text{---}) = 6 - 6 - \frac{1}{2}(2) = -1$$

Alternatif Lewis Yapıları

- *FY*'lerin toplamı *nötür molekül* için *sıfır* ve çok atomlu iyon için iyonun yüküne eşit olmalıdır.
- *FY*'ler olabildiğince en az olmalıdır.
- Çoğu elektronegatif atomlardaki *FY*'ler negatif; elektronegatiflikleri az olan atomlardaki *FY*'ler pozitiftir.
- Komşu atomlarda aynı işaretli *FY*'lerin bulunduğu yapılar olası değildir.

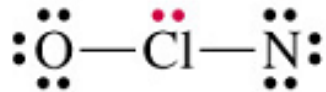
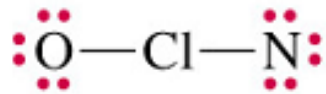


Örnek 11-7

Lewis Yapısının Yazılmasında Formal Yüklerin Kullanılması

Nitrozil klorür, NOCl, derişik nitrik ve hidroklorik asidin bir karışımı olan ve altını çözdüğü için altın suyu olarak da bilinen çözeltideki yükseltgenlerden biridir. Bu bileşik için en uygun Lewis yapısını yazınız.

(a)



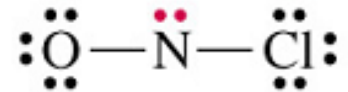
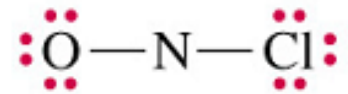
1. Dört elektronu yerleştiriniz

2. Oniki elektron daha yerleştiriniz

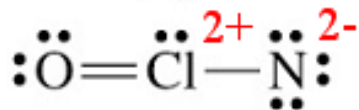
3. Son iki elektronu yerleştiriniz

4. Merkez atom üzerinde okteti tamamlayınız

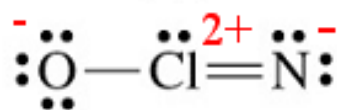
(b)



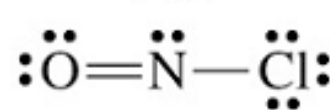
(a₁)



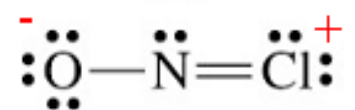
(a₂)



(b₁)

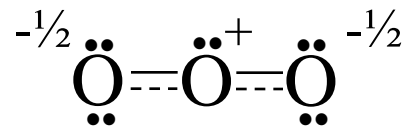
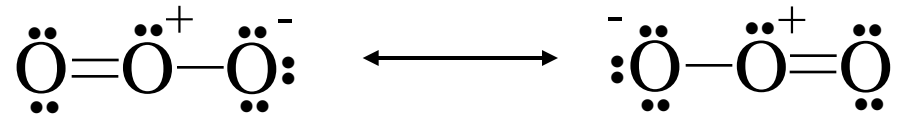


(b₂)



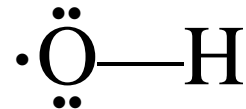
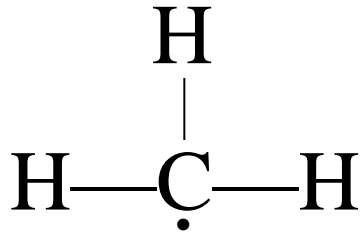
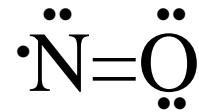
11-5 Rezonans

İki ya da daha fazla uygun Lewis yapısının yazılabildiği ancak doğru yapının yazılamadığı duruma rezonans denir.



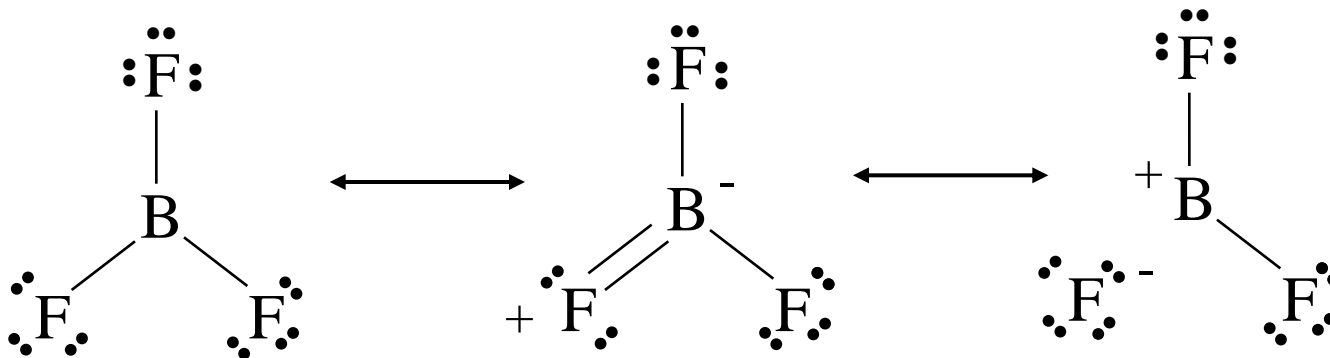
11-6 Oktet Kuralından Sapmalar

- Tek Sayılı e^- 'u Olan Yapılar



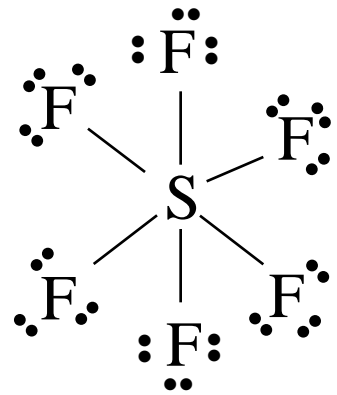
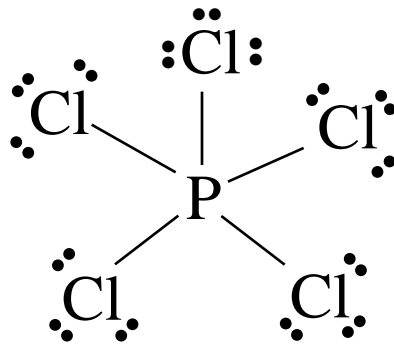
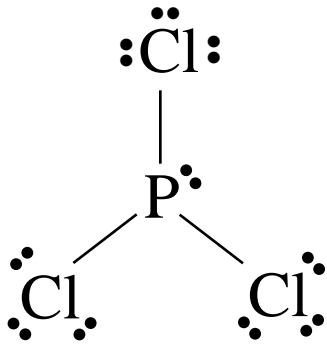
Oktet Kuralından Sapmalar

- Eksik Oktetler

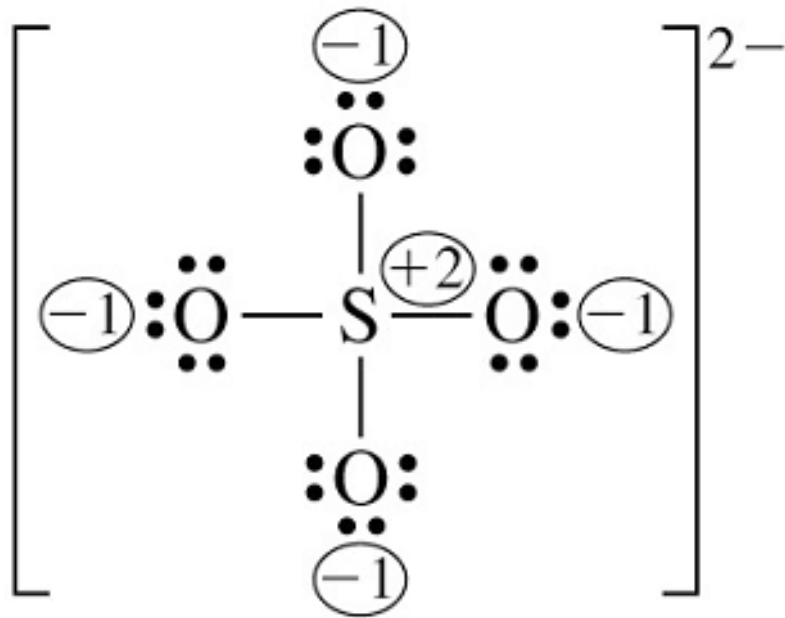


Oktet Kuralından Sapmalar

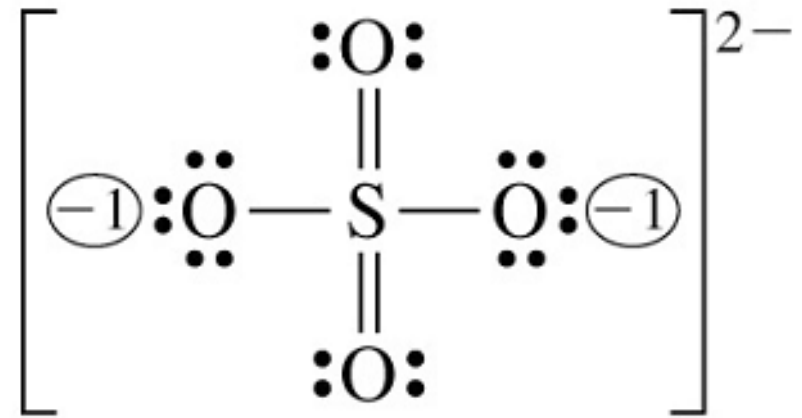
- Genişlemiş Değerlik Kabukları



Genişlemiş Değerlik Kabukları

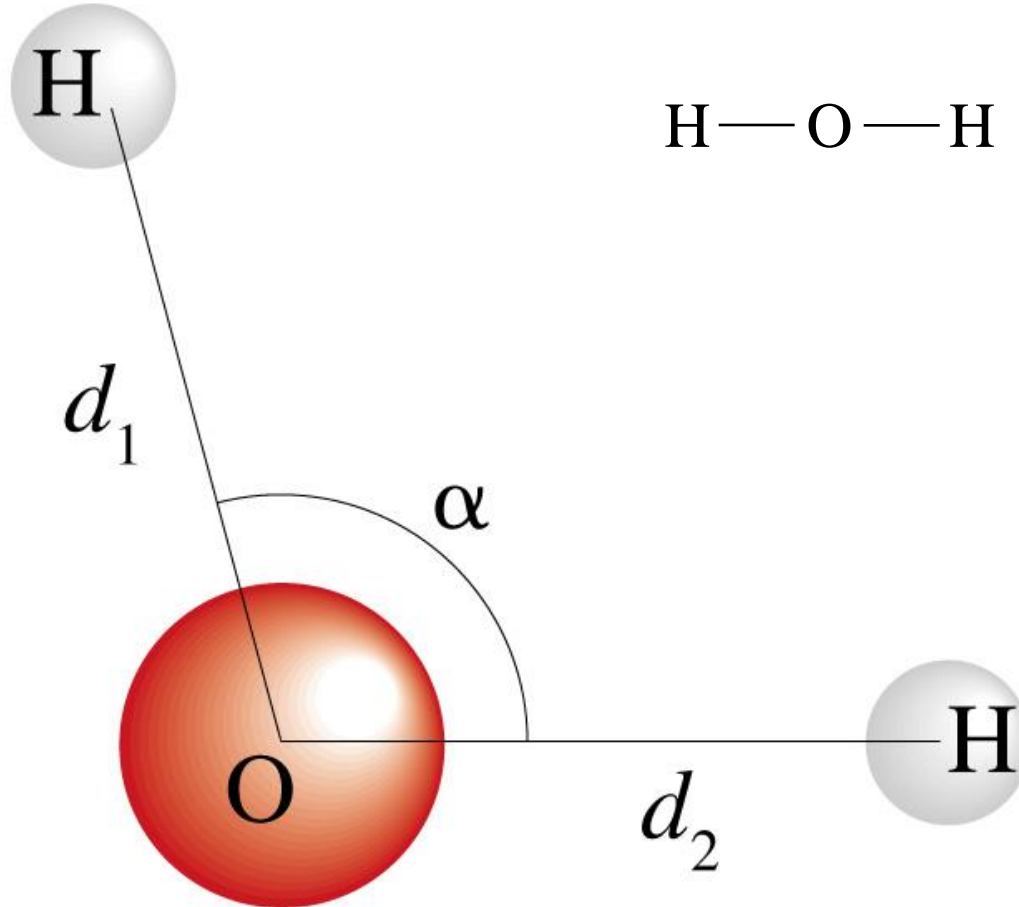


Normal oktet



Genişlemiş değerlik kabuğu

11-7 Moleküllerin Biçimleri



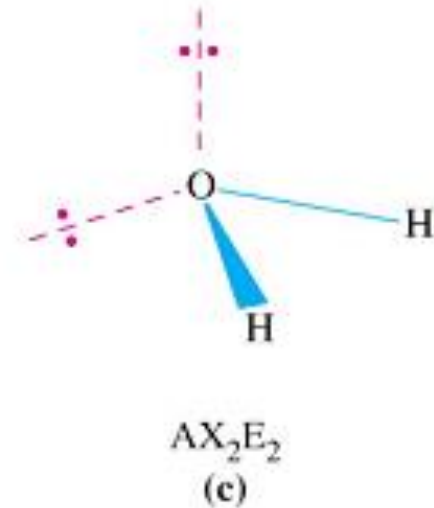
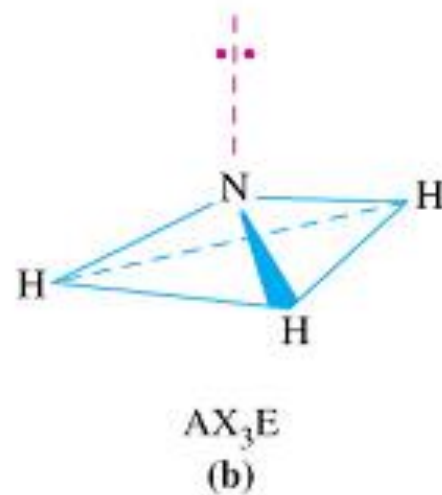
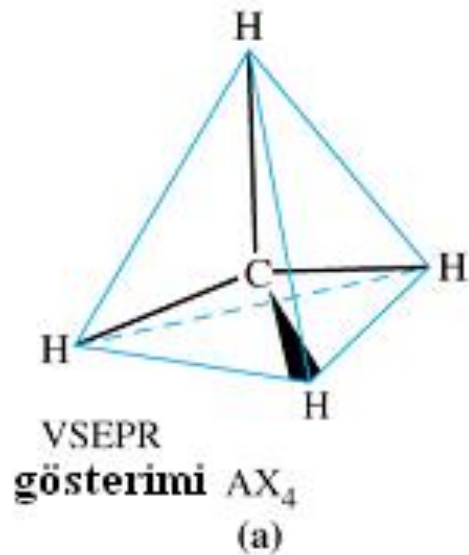
Bazı Terimler

- *Bağ Uzunlukları* – bağlanmış atomların çekirdekleri arasındaki uzaklıktır.
- *Bağ Açıları* – bağları gösteren komşu doğru çizgiler arasındaki açıdır.
- *VSEPR Teorisi* – İster kimyasal bağ (bağlayıcı çiftler), isterse ortaklanmamış (bağ yapmayan çift) halde olsun, e^- çiftleri birbirini iter. e^- çiftleri, atom etrafında itmeyi en aza indirecek şekilde yönlendirilir.
- *Elektron Grup Geometrisi* – e^- çiftlerinin dağılım geometrisi.
- *Molekül Geometrisi* – atom çekirdeklerinin oluşturduğu geometri.




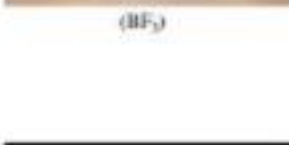








Elektron Grup Geometrileri

- 2 elektron grubu: Doğrusal
- 3 elektron grubu: Üçgen düzlem
- 4 elektron grubu: Dörtüzlü
- 5 elektron grubu: Üçgen bipiramit
- 6 elektron grubu: Sekizyüzlü


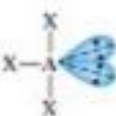



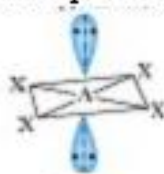
Metan, Amonyak ve Su



TABLO 11.1 Elektron Grubu Geometrisinin Bir Fonksiyonu Olarak molekül Geometrisi

Elektron grubu sayısı	Elektron grubu geometrisi	Ort. mam. elek. çif say.	VSEPR gös.	Mol. geo.	İdeal bağ açıl.	Öm	
2	doğrusal	0	AX_2	$X-A-X$ doğrusal	180°	$BeCl_2$	
3	üçgen düzlem	0	AX_3	$X-A-X$ üçgen düzlem	120°	BF_3	
	üçgen düzlem	1	AX_2E	 açısal	120°	SO_2	
4	dört yüzlü	0	AX_4	 dört yüzlü	109.5°	CH_4	
	dört yüzlü	1	AX_3E	 üçgen piramit	109.5°	NH_3	
	dört yüzlü	2	AX_2E_2	 açısal	109.5°	H_2O	
5	üçgen bipiramit	0	AX_5	 üçgen bipiramit	$90^\circ, 120^\circ$	PCl_5	

TABLO 11.1 Elektron Grubu Geometrisinin Bir Fonksiyonu Olarak Molekül Geometrisi

Elektron grubu sayısı	Elektron grubu geometrisi	Ort. mam. elek. çif say.	VSEPR gös.	Mol. geo.	İdeal bağ açıl.	Örn
	üçgen bipiramit	1	AX_5E^0		$90^\circ, 120^\circ$	SF_6
	üçgen bipiramit	2	AX_5E_1	tahteravalli 	90°	ClF_5
	üçgen bipiramit	3	AX_5E_2	T-şeklinde 	180°	XeF_2
6	sekizyüzlü	0	AX_6	doğrusal 	90°	SF_6
	sekizyüzlü	1	AX_6E	sekizyüzlü 	90°	BrF_5
	sekizyüzlü	2	AX_6E_2	kare piramit 	90°	XeF_4
				kare düzlem		



(SF_6)

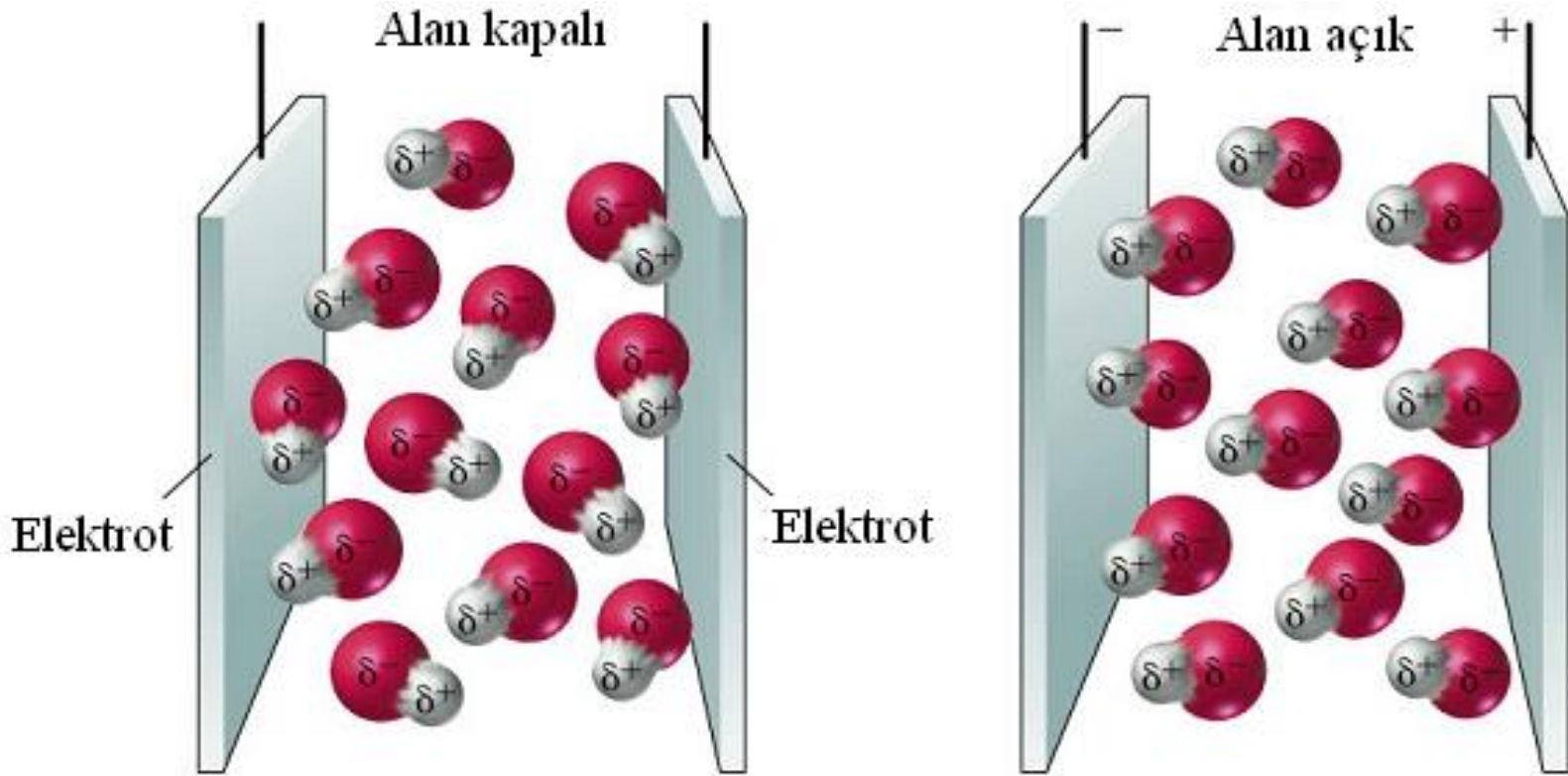
VSEPR Teorisinin Uygulanması

1. Molekül ya da çok atomlu iyonun uygun Lewis yapısını yazınız.
2. Merkez atom etrafındaki e^- gruplarının sayısını ve bunların *bağlayıcı* çift veya *ortaklanmamış* e^- grupları olduklarını belirleyiniz.
3. Merkez atom etrafındaki e^- grubu geometrisini doğrusal, üçgen düzlem, dörtyüzlü, üçgen bipiramit ya da sekizyüzlü olarak saptayınız.
4. Merkez atom etrafındaki diğer atom çekirdeklerinin oluşturduğu, molekül geometrisini çizelgeden belirleyiniz.

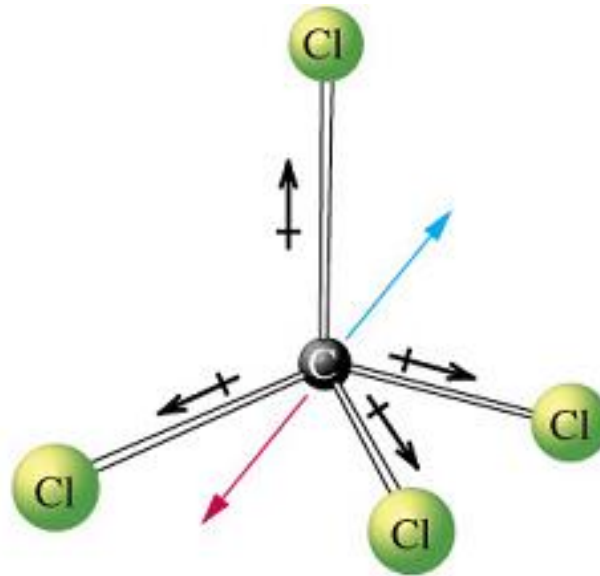
Dipol Moment

Dipol Moment: Polar bir kovalent bağda, yük dağılımındaki farklılığa *dipol moment*, μ , denir. Dipol moment, yük (δ) ve uzaklığın (d) çarpımıdır.

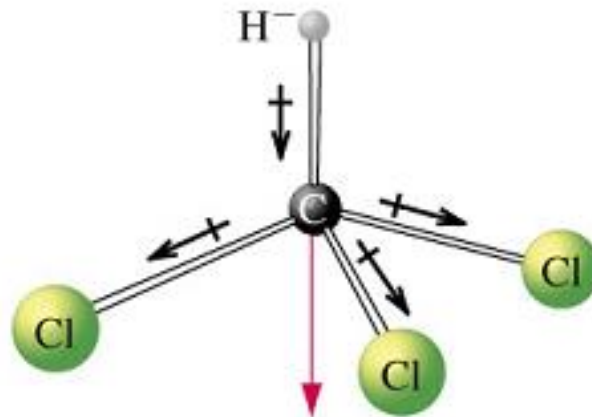
$$\mu = \delta d$$



Dipol Moment



(a) CCl_4 : apolar bir molekül



(b) CHCl_3 : polar bir molekül

11-8 Bağ Derecesi ve Bağ Uzunlukları

- **Bağ Derecesi:** Bağ derecesi arttıkça fazla e^- bulunacak ve bunlar da atomları daha sıkıca birarada tutacaktır.
 - Tekli bağ derecesi = 1
 - İkili bağ derecesi = 2
- **Bağ Uzunluğu:** Kovalent bağlı iki atomun merkezleri arasındaki uzaklıktır. İki atom arasındaki kovalent bağın uzunluğu yaklaşık olarak iki atomun kovalent yarıçaplarının toplamıdır.

Bağ Uzunluğu

TABLO 11.2 Bazı Ortalama Bağ Uzunlukları

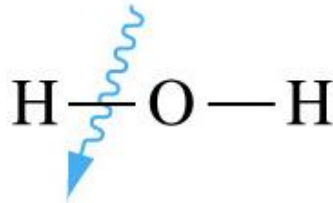
Bağ	Bağ uzunluğu, pm	Bağ	Bağ uzunluğu, pm	Bağ	Bağ uzunluğu, pm
H—H	74.14	C—C	154	N—N	145
H—C	110	C=C	134	N=N	123
H—N	100	C≡C	120	N≡N	109.8
H—O	97	C—N	147	N—O	136
H—S	132	C=N	128	N=O	120
H—F	91.7	C≡N	116	O—O	145
H—Cl	127.4	C—O	143	O=O	121
H—Br	141.4	C=O	120	F—F	143
H—I	160.9	C—Cl	178	Cl—Cl	199
				Br—Br	228
				I—I	266

11-9 Bağ Enerjileri

435.93 kJ/mol



498.7 kJ/mol



428.0 kJ/mol



Bağ Enerjileri

TABLO 11.3 Bazı Ortalama Bağ Enerjileri

Bağ	Bağ Enerjisi, kJ/mol	Bağ	Bağ Enerjisi, kJ/mol	Bağ	Bağ Enerjisi, kJ/mol
H—H	436	C—C	347	N—N	163
H—C	414	C=C	611	N=N	418
H—N	389	C≡C	837	N≡N	946
H—O	464	C—N	305	N—O	222
H—S	368	C=N	615	N=O	590
H—F	565	C≡N	891	O—O	142
H—Cl	431	C—O	360	O=O	498
H—Br	364	C=O	736 ^b	F—F	159
H—I	297	C—Cl	339	Cl—Cl	243
				Br—Br	193
				I—I	151