

5.111 Ders Özeti #13

Bugün için okuma: Bölüm 3.1 (3. veya 4. *Baskıda*) – Temel VSEPR Modeli, Bölüm 3.2 (3. ve 4. *Baskıda*) – Merkez Atomu üzerinde Yalın Çiftli Moleküller.

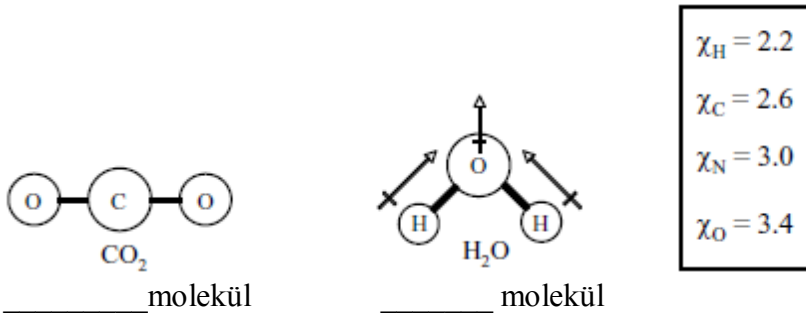
Ders #14 için okuma: Bölüm 3.8 (3. *Baskıda* 3.9) – Lewis Teorisinin Sınırları, Bölüm 3.9 (3. *Baskıda* 3.10) – Molekül Orbitaleri, Bölüm 3.10 (3. *Baskıda* 3.11) –İki Atomlu Moleküllerin Elektron Dizilişi, Bölüm 3.11 (3. *Baskıda* 3.12) – Farklı Çekirdekli İki Atomlu Moleküllerde Bağlanma.

- Konular:**
- I. Polar kovalent bağlar ve polar moleküller (Ders #12 den devam)
 - II. Molekül şekilleri: VSEPR teorisi
 - A. Yalın çiftsiz moleküller
 - B. Yalın çiftli moleküller

I. POLAR KOVALENT BAĞLAR/POLAR MOLEKÜLLER (Ders #12'den devam)

Polar kovalent bir bağ, elektronegatiflikleri (χ) farklı iki atom arasında elektronların eşit olmayan paylaşımı ile oluşur. Genellikle, iki atom arasındaki χ farkı _____ > ve < _____ (Pauling skalasında) ise polar kovalent bağ olarak kabul edilir.

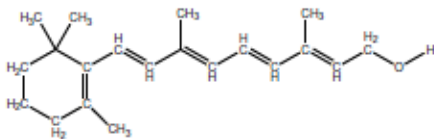
Polar moleküller sıfırdan farklı net dipol momente sahiptir.



Büyük organik moleküllerde ve biyomoleküllerde, protein gibi, molekül içinde çok sayıda polar grup olduğu bilinmektedir.

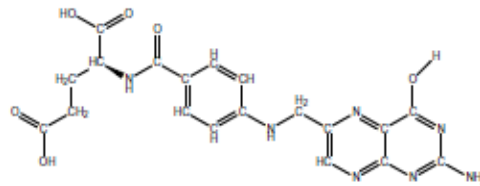
Örneğin, A vitamini ile B9 vitaminini karşılaştıralım.

Hangi vitamin daha çok sayıda polar bağ içerir? Vitamin _____



Vitamin A

_____ çözüdür



Vitamin B9 (_____)

_____ çözüdür

II. MOLEKÜL ŞEKİLLERİ: DEĞERLİK KABUĞU ELEKTRON ÇİFTİ İTME (VSEPR) TEORİSİ

Moleküllerin şekli (_____) erime noktası, kaynama noktası ve reaktivlik gibi fiziksel ve kimyasal özelliklere etki eder.

Molekül şekli, özellikle biyolojik sistemlerde önemlidir; örneğin, bir molekül enzimin aktif merkezine tam olarak uymalıdır.

VSEPR Teorisi molekül geometrisini yüksek doğrulukta öngörmede kullanılabilir. Teori, Lewis yapısına ve ilkesine dayanır. Yani,

- Değerlik elektron çiftleri birbirlerini _____.
- Merkez atom etrafındaki geometri, elektron itmesini en aza indirecek şekildedir.

VSEPR terimleri (terminolojisi):

A = _____ atom

X = _____ atom

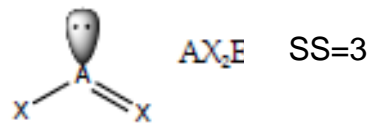
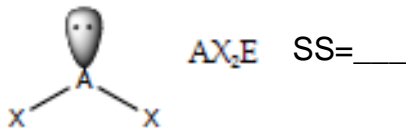
E = yalnız çift

VSEPR modeli için genel kurallar:

- Geometrinin öngörülmesinde _____ sayı (SS) kullanılır.

$$SS = (\text{merkez atoma bağlanmış atom sayısı}) + (\text{merkez atom üzerindeki yalnız çift sayısı})$$


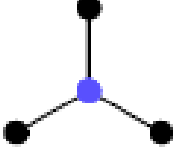
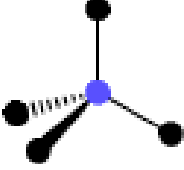
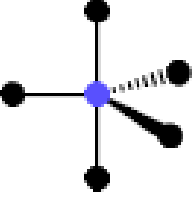
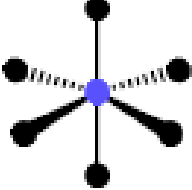
Not: elektron-çifti itmesi düşünüldüğünde, ikili ve üçlü bağ tek bağmış gibi düşünülebilir. Bu yaklaşım nitel amaçlar için geçerlidir.



Bu şu anlama gelir, merkez atoma bağlı _____ sayısı önemlidir, bağ türü değil.


- Bir molekül iki veya daha fazla rezonans yapısına sahipse, VSEPR modeli bunlardan herhangi birine uygulanır.
- Bir molekülde birden fazla merkez atom varsa, her bir merkez atom etrafındaki bağlanma birbirinden bağımsız olarak düşünülür.

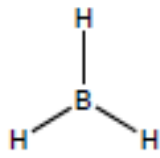
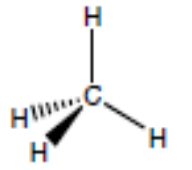
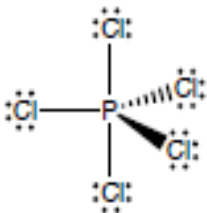

A. Yalın çift içermeyen moleküller

Formül tipi	SS	Molekül Şekilleri	Geometri	Bağ açısı
AX_2	2		Doğrusal	_____
AX_3	3		Düzlem üçgen	_____
AX_4	4		Dört yüzlü	_____
AX_5	5		Üçgen çift piramit	_____
AX_6	6		Sekiz yüzlü	_____

Not: Kağıt düzleminin arkasına doğru olan bağlar kesikli çizgilerle, kağıt düzleminin önüne doğru olan bağlar kalın çizgilerle gösterilmiştir.

Yalın çift içermeyen moleküllere ait örnekler:

	Formül tipi	SS	Lewis yapısı	Geometri	Bağ açısı
CO_2	AX_2	2		Doğrusal	_____

	Formül tipi	SS	Lewis Yapısı	Geometri	Bağ açısı
BH ₃	AX ₃	3		_____	_____
CH ₄	AX ₄	4		_____	_____
PCl ₅	AX ₅	5		_____	_____
SF ₆	AX ₆	6		_____	_____

B. Yalın çiftli içeren moleküller

Yalın çift varsa, ilave detaylar dikkate alınmalıdır.

Bir bağı oluşturan iki atomun çekirdeklerinin uyguladığı çekim kuvveti, elektronları bağlarda-ufak bir hacimde- tutar. Bu elektronların “uzayda kapladığı alan” yalın çiftlerden daha azdır. Yani,

- bağlardaki elektronlar uzayda daha _____ yer kaplar.
- yalın çift elektronları daha çok yer kaplar, bu nedenle daha _____ itme gösterir.

Böylece, VSEPR e göre, itme şu sıraya göre azalır:

Yalın çift/yalın-çift > yalın-çift /bağ-çifti > bağ-çifti / bağ-çifti

İtmesi

itmesi

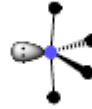
itmesi

VSEPR teorisine dayanarak şekillerin rasyonelleştirilmesi

- AX_4E molekülleri, tahterevalli (veya bozulmuş dörtyüzlü) şekline sahiptir. Eksen konumundaki yalın çift ____ tane bağ elektron çiftini kuvvetle iter, buna karşılık ekvator konumundaki yalın çift sadece ____ tanesini iter.

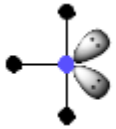


Eksen konumundaki yalın çift



ekvator konumundaki yalın çift

- AX_3E_2 molekülleri bir ____ sahiptir. Yalın çiftler, üç tane ekvator konumundan ikisine yerleşir ve yalın çift elektronları için birbirinden en uzak konum budur.



AX_3E_2 SS=5



AX_2E_3 SN = 6

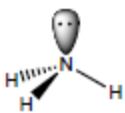
- AX_4E_2 molekülleri kare düzlemdir. İki yalın çiftin birbirinden en uzak konumu, merkez atomun zıt köşelerinde bulunmaları halidir.

SS=6

- Yalın çift içeren moleküllerde, atomlar arasındaki bağ açıları, yalın çift içermeyen eşdeğer SS yapılarına nazaran daha ____ olma eğilimindedir.

Örnek: NH_3

SS = 4 bağ açısı 106.7° dir, halbuki CH_4 ' de bağ açısı 109.5° dir.

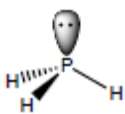






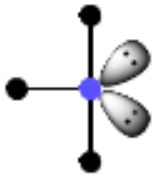
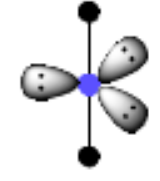

- Atomik büyüklük, periyodik çizelgede grup boyunca _____. Bu nedenle, yalın-çiftler grup boyunca daha geniş yer kaplarlar ve yalnızca bağ elektronları içeren eşdeğer SS yapılarına nazaran, bağ atomları arasındaki açı daha da küçülme eğilimindedir.



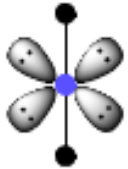
Örnek: PH_3 'ü NH_3 ile mukayese edin.

SS = 4 bağ açısı _____ $^\circ$ dir.

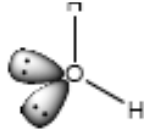
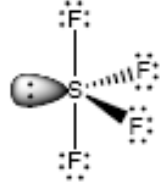
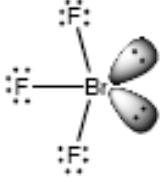
Halbuki CH_4 'de bağ açısı 109.5° , NH_3 'de 106.7° dir.

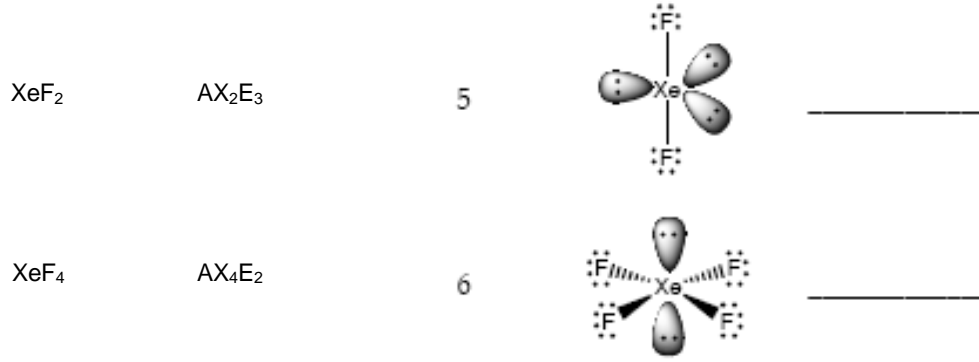


Formül tipi	SS	Molekül şekli	Geometri	Bağ açısı
AX_2E	3		Açısal	_____
AX_3E	4		Üçgen piramit	_____
AX_2E_2	4		Açısal	_____
AX_4E	5		Tahterevalli	_____ _____
AX_3E_2	5		T şekli	_____
AX_2E_3	5		_____	_____
AX_5E	6		Kare piramit	_____

AX_4E_2	6		Kare düzlem	_____
AX_3E_3	6		T şekli	_____
AX_2E_4	6		_____	_____

Yalnız çifti içeren moleküllere ait örnekler

	Formül tipi	SS	Lewis Yapısı	Geometri
H_2O	_____	4		_____
SF_4	_____	5		_____
BrF_3	AX_3E_2	5		_____



VSEPR in amacı, merkez atom etrafında molekül geometrilerine ait pek çok olası önermeler (veya rasyonelleştirmeler) yapmaktır. Yanlış önermeler az sayıda mevcuttur.

Ancak, VSEPR bağların enerjileri hakkında veya çoklu bağların yapıyı nasıl etkilediği ile ilgili bilgi vermez.