

## 5.111 Ders Özeti #14

**Bugün 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.

**Ders #15 için okuma:** Bölümler 3.4, 3.5, 3.6 ve 3.7 (3.baskıda, Bölümler 3.4, 3.5, 3.6, 3.7 ve 3.8) – Değerlik Bağı Teorisi.

### Konular: Molekül Orbital Teorisi

#### I. Bağ ve karşıbağ orbitaleri

#### II. Aynı çekirdekli ikiatomlu moleküller

##### A. s orbitallerinden oluşan MO leri içeren moleküller

##### B. s ve p orbitallerinden oluşan MO leri içeren moleküller

#### III. Farklı çekirdekli ikiatomlu moleküller

## MOLEKÜL ORBİTAL (MO) TEORİSİ

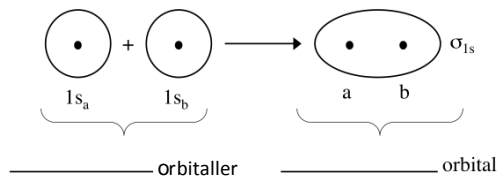
MO teorisinde, değerlik elektronları bütün molekül üzerinde \_\_\_\_\_dir. Lewis ve değerlik bağı modelinde olduğu gibi, atomlar veya bağlar ile hareket alanı kısıtlanmış **değildir**.

### I. BAĞ VE KARŞIBAĞ ORBİTALLERİ

İki atomlu moleküllerin molekül orbitaleri (\_\_\_\_\_) atom orbitalerinin birbirine katılması (**eklenmesi**) ile oluşur.

Molekül orbitali oluşturmak için atom orbitalerinin doğrusal bileşimi (LCAO).

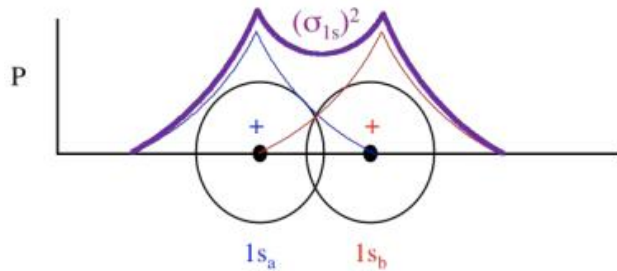
#### Bağ orbitaleri



$\sigma$ : bağ eksenini etrafında silindirik simetrik molekül orbitali (bağ ekseninde düğüm düzlemi yok).

$$\text{_____} + \text{_____} = \text{_____} \equiv \text{Bağ MO}$$

$\sigma_{1s}$  bir dalga fonksiyonudur.



Atomik dalga fonksiyonlarında olduğu gibi, moleküler dalga fonksiyonlarında da olasılık yoğunluğu (P) önemli bir fiziksel büyüklüktür.

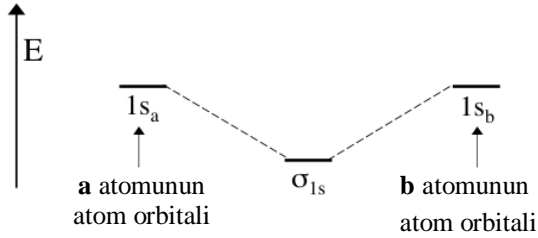
$$P \propto (\text{---})^2 = (\text{---} + \text{---})^2 = (1s_a)^2 + (1s_b)^2 + \boxed{2(1s_a)(1s_b)}$$

**Girişim terimi** 1

Çapraz-terim, iki dalga fonksiyonu arasındaki \_\_\_\_\_ girişimi temsil eder.

Sonuç, bir \_\_\_\_\_ orbitalidir: çekirdekler arasında daha yüksek olasılık yoğunluğu.

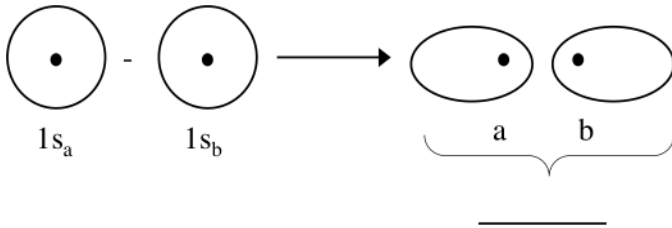
Bağ orbitallerinin etkileşim enerjisi. Atom orbitalleri ile mukayese edilirse enerji \_\_\_\_\_.



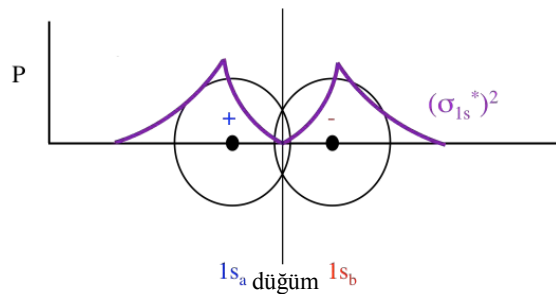
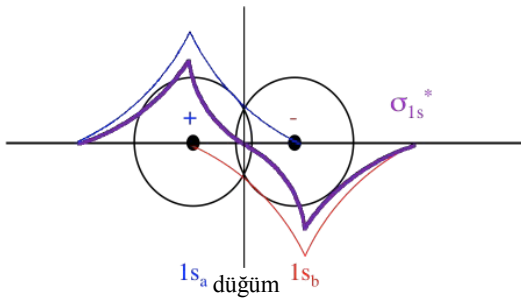
Molekül, kendisini oluşturan atomlardan daha kararlıdır.

### Karşıbağ orbitalleri

Elektronlar dalga olduğu için, yokedici girişim de oluşabilir.



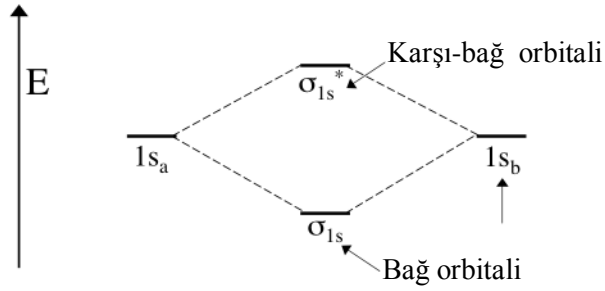
\_\_\_\_\_ - \_\_\_\_\_ = \_\_\_\_\_  $\equiv$  karşıbağ molekül orbitali.



Olasılık yoğunluğu  $P \propto (\text{---})^2 = (\text{---})^2 = (1s_a)^2 + (1s_b)^2 - \boxed{2(1s_a)(1s_b)}$   
girişim terimi

Çapraz-terim, iki dalga fonksiyonu arasında \_\_\_\_\_ girişimi temsil eder. Sonuç, çekirdekler arasında daha düşük olasılık yoğunluğudur, bir **karşıbağ** orbitali.

Karşıbağ orbitalleri için **enerji etkileşimi**. Atom orbitalleri ile mukayese edilirse enerji \_\_\_\_\_!



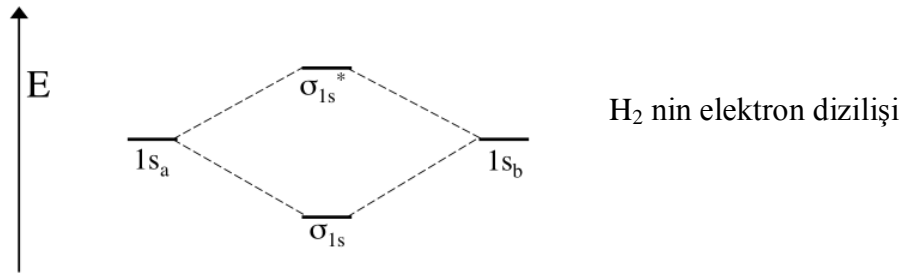
$\sigma_{1s}^*$ , bir \_\_\_\_\_ orbitalidir.

- Çekirdekler arasında daha az elektron yoğunluğu bulunur. Bu nedenle çekirdekler arasındaki itme büyüktür.
- Bağa tam zıt etki oluşturur. Karşıbağ, bağ-yapmayan orbital \_\_\_\_\_ dir.
- Karşıbağ orbitalindeki enerji yükselmesi, bağ orbitalindeki enerji düşmesi ile yaklaşık olarak aynı miktardadır.

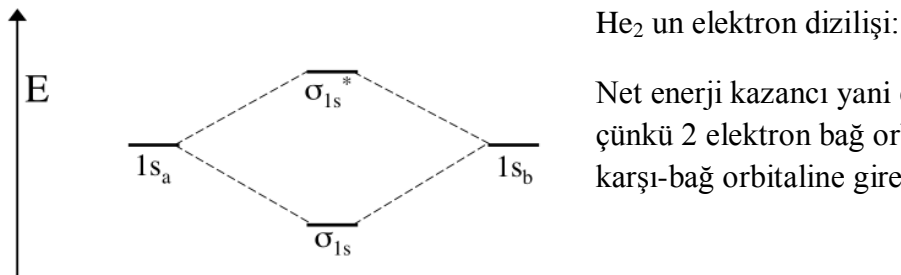
## II. AYNI ÇEKİRDEKLİ İKİ ATOMLU MOLEKÜLLER

### A. s orbitallerinden oluşan MO'leri içeren moleküller

$H_2$ 'nin MO diyagramı:  $H_2$  molekülünde, her iki elektron  $\sigma_{1s}$  orbitalinde bulunur.



$He_2$ 'nin MO diyagramı:

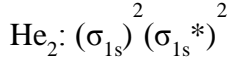


$He_2$  un elektron dizilişi:

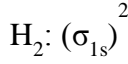
Net enerji kazancı yani enerji düşmesi yoktur, çünkü 2 elektron bağ orbitaline 2 elektron da karşı-bağ orbitaline girer.

MO teorisi He<sub>2</sub> nin mevcut \_\_\_\_\_ öngörür çünkü net enerji kazancı yoktur.

$$\text{BAĞ DERECESESİ} = \frac{1}{2} (\text{toplam bağ elektron sayısı} - \text{toplam karşıbağ elektron sayısı})$$



Bağ derecesi = \_\_\_\_\_ bağ



Bağ derecesi = \_\_\_\_\_ bağ

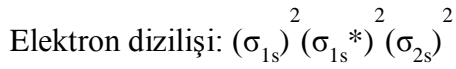
Gerçek: He<sub>2</sub> mevcuttur. 1993 de keşfedilmiştir. Bilinen en zayıf kimyasal bağıdır.

$$\text{He}_2 \text{ için } \Delta E_d = 0.01 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{H}_2 \text{ için } \Delta E_d = 432 \text{ kJ/mol}$$

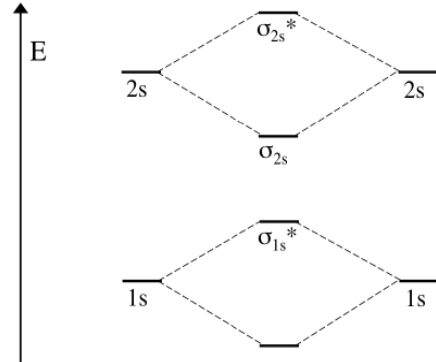
2s orbitali için LCAO ile oluşan MO leri, 1s ile oluşana benzer.

Li<sub>2</sub>



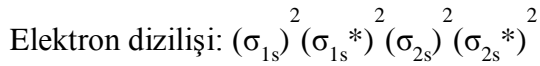
Bağ derecesi :  $\frac{1}{2} ( \quad ) =$

$$\Delta E_d = \text{_____ kJ/mol}$$



Not: Bağ derecesi bütün elektronlar veya sadece değerlik elektronları dikkate alınarak hesaplanabilir.

Be<sub>2</sub>



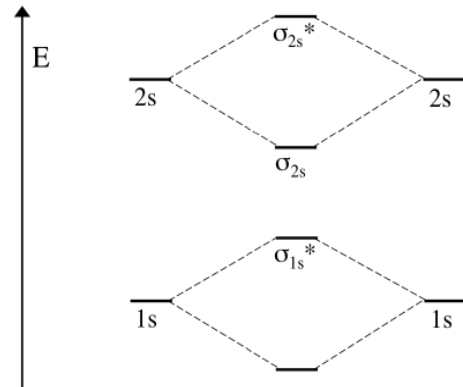
Bağ derecesi (bütün elektronları sayın):

$$\frac{1}{2} ( \quad ) =$$

Bağ derecesi (sadece değerlik e<sup>-</sup> larını sayın):

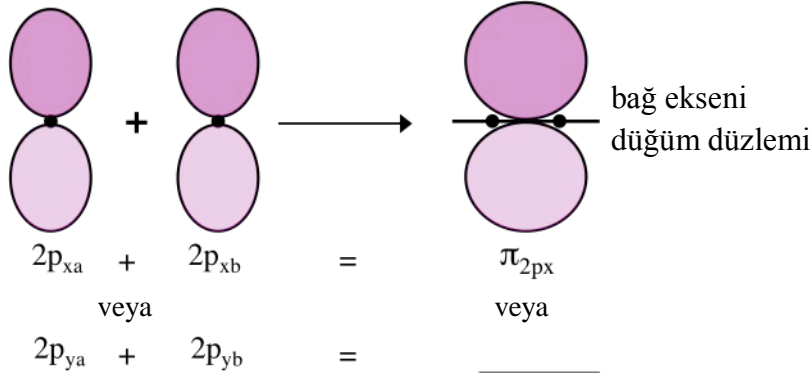
$$\frac{1}{2} ( \quad ) =$$

$$\Delta E_d = \text{_____ kJ/mol} - \text{çok zayıf}$$



## B. s ve p orbitallerinden oluşan MO leri içeren moleküller

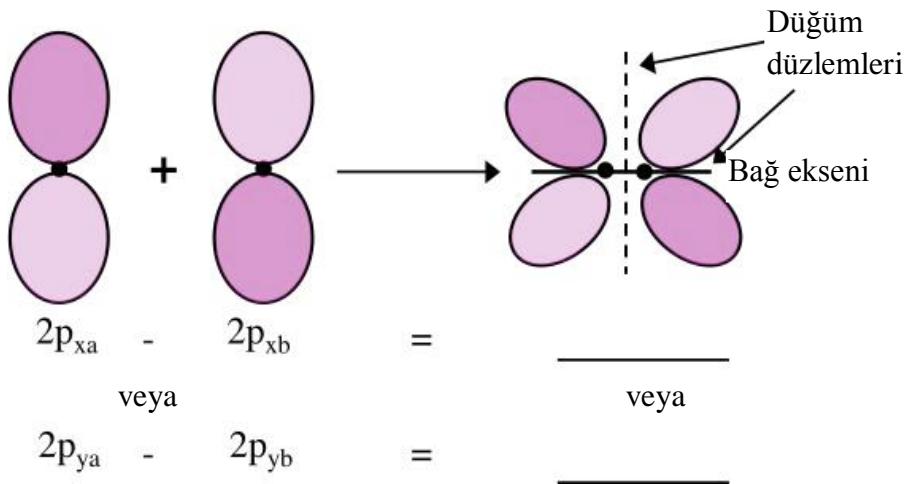
### $2p_x$ ve $2p_y$ nin LCAO ile oluşan MO leri



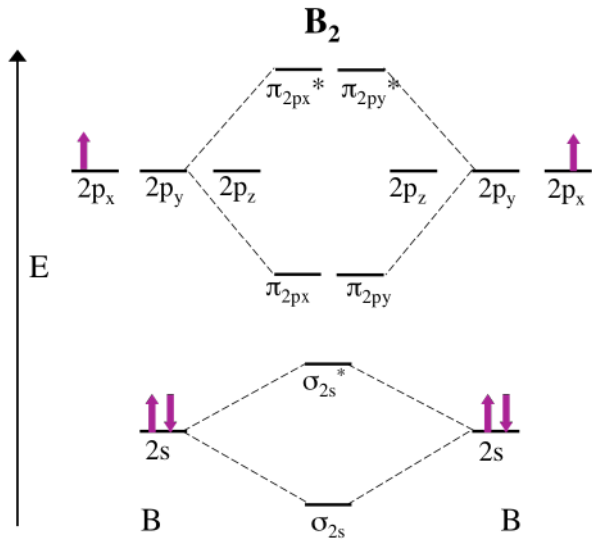
$\pi$ -orbitali: \_\_\_\_\_ ekseninden geçen düğüm düzlemi içeren molekül dalga fonksiyonu (molekül orbitali)

Olasılık yoğunluğu,  $P \propto (\text{_____})^2 = (\text{_____} + \text{_____})^2 = (2p_{xa})^2 + (2p_{xb})^2 + \boxed{2(2p_{xa})(2p_{xb})}$   
 \_\_\_\_\_ girişim terimi

### $2p_x$ ve $2p_y$ nin LCAO ile oluşan karşıbağ MO'leri



$2p_x$  ve  $2p_y$  orbitallerinin yıkıcı girişiminden oluşan  $\pi^*$ -orbitalleri

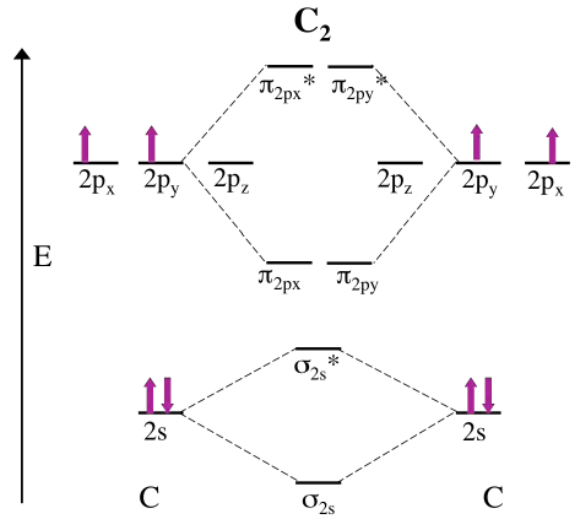


değerlik elektron dizilişi:

Bağ derecesi =  $\frac{1}{2} (4 - 2) = \underline{\hspace{2cm}}$

C<sub>2</sub> için  $\Delta E_d = 599 \text{ kJ/mol}$ , burada B.D. = 2

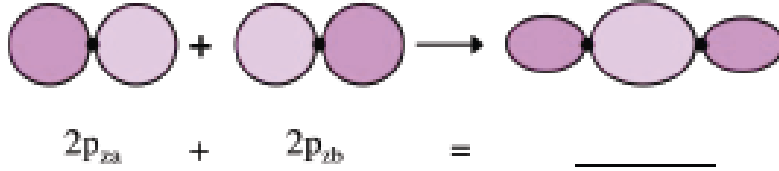
B<sub>2</sub> için  $\Delta E_d = 289 \text{ kJ/mol}$ , burada B.D. = 1



değerlik elektron dizilişi:

Bağ derecesi =  $\frac{1}{2} (6 - 2) = \underline{\hspace{2cm}}$

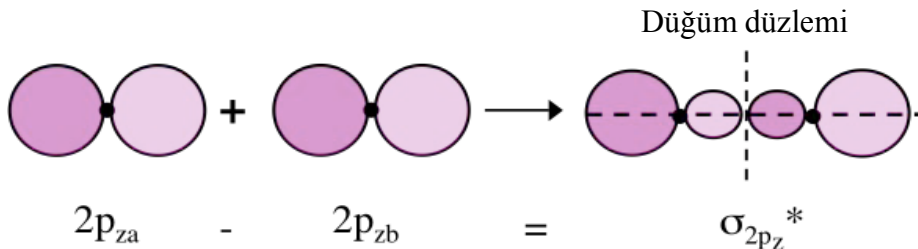
**2p<sub>z</sub> nin LCAO ile oluşturulan bağ MO'leri**



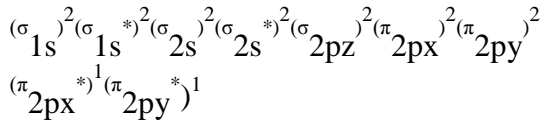
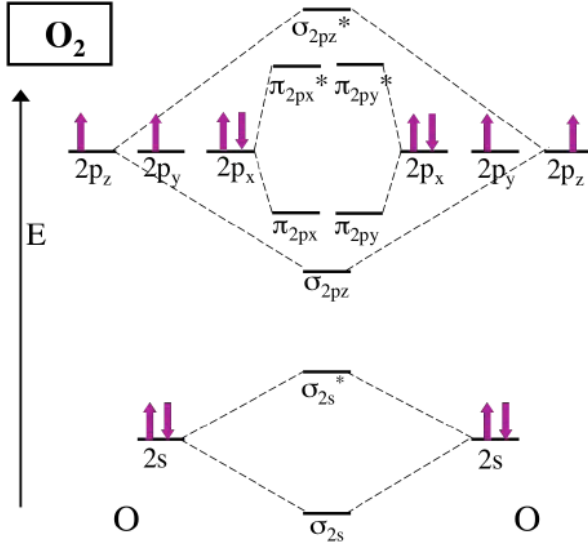
Yapıcı girişim

$\sigma$ : bağ eksenini boyunca düğüm düzlemi olmayan MO

**2p<sub>z</sub> ' nin LCAO ile oluşturulan karşıbağ MO' leri**

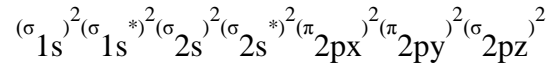
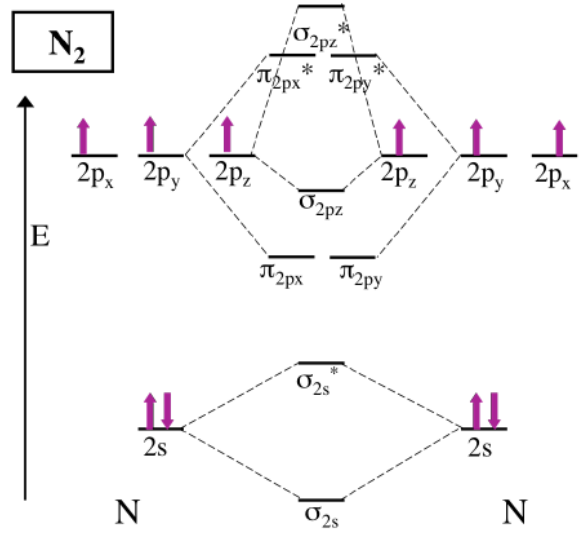


Yok edici girişim



B.D. =  $\Delta E_d = 494 \text{ kJ/mol}$

O<sub>2</sub> \_\_\_\_\_ dir! İki eşleşmemiş elektron.



B.D. =  $\Delta E_d = 941 \text{ kJ/mol}$

Not:  $\pi_{2p}$  orbitalleri ile mukayese edildiğinde  $\sigma_{2pz}$  orbitallerinin bağıl enerjileri, atomların Z değerine bağlıdır.  $Z \geq 8$  ise  $\sigma_{2pz}$  orbitalinin enerjisi düşüktür.