

5.111 Ders Özeti #15

Bugün için okuma: Bölüm 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.

Ders #16 için okuma: Bölümler 6.13, 6.15, 6.16, 6.17, 6.18, ve 6.20 (3. Baskıda Bölümler 6.14, 6.16, 6.17, 6.18, 6.19, ve 6.21) – Kimyasal Değişimin Entalpisi.

Ödev: Problem seti #5 (Cumaya kadar, 17 Ekim öğleden sonra)

Konular: Değerlik Bağı teorisi ve melezleşme

I. Sigma ve pi bağları

II. Atom orbitallerinin melezleşmesi

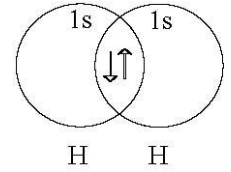
A. sp^3 melezleşmesi

B. sp^2 melezleşmesi

C. sp melezleşmesi

DEĞERLİK BAĞI TEORİSİ VE MELEZLEŞME

Değerlik bağı teorisinde, bağlar atom orbitallerindeki eşleşmemiş elektronların eşleşmesi ile oluşur.



I. SİGMA VE Pİ BAĞLARI

σ (sigma) bağı: bağ ekseninde ____ düğüm düzlemine sahip silindirik simetrik bağ.

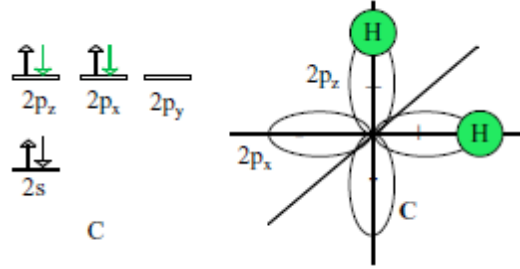
π (pi) bağı: e^- yoğunluğu bağ ekseninin iki yanındaki loplarda bulunan bağ.

pi bağının bağ ekseninde ____ tane düğüm düzlemi bulunur.

Çoklu bağları değerlik bağı teorisine göre tanımlayabiliriz.

- tekli bağ: _____ bağı
- ikili bağ: bir σ -bağı artı bir _____ bağı
- üçlü bağ: bir σ -bağı artı _____ π -bağı

Değerlik bağı teorisi uygulandığında metan bağları için aşağıdaki öngörüler yapılabilir.

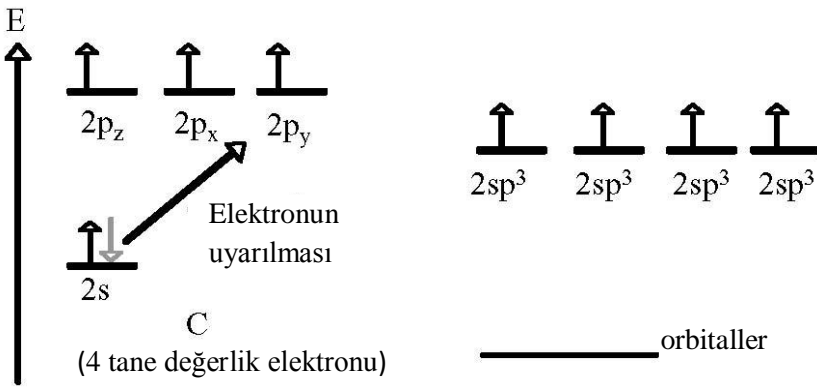


Bu modele göre, C sadece iki H atomuna _____° lik H-C-H bağı ile bağlanabilir. Metan için gözlenen bu DEĞİLDİR!

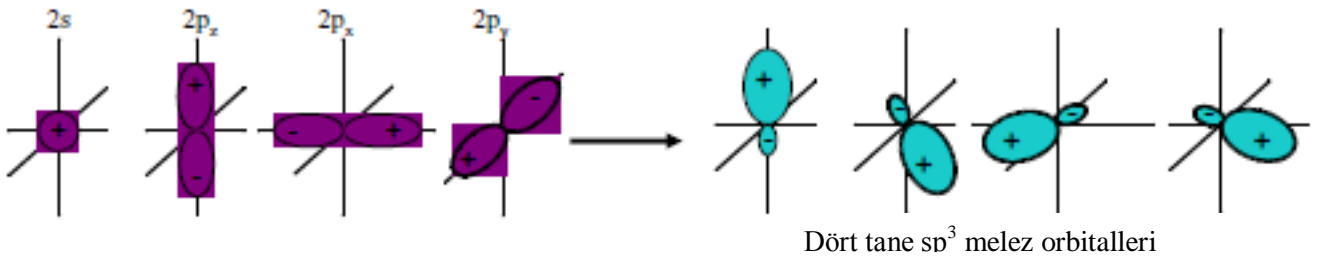
II. ATOM ORBİTALLERİNİN MELEZLEŞMESİ

A. sp^3 melezleşmesi

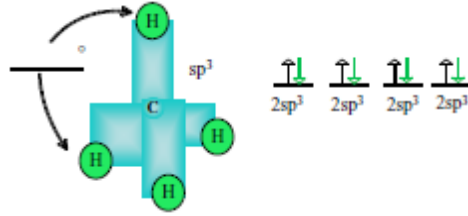
Bir karbon atomu, 2s elektronlarından biri boş 2p orbitaline _____ sonra bağ yapabilecek dört tane eşleşmemiş elektrona sahip olur.



sp^3 melez orbitalleri, eşdeğer ve eşenerjili (dejenere) dir. Onların sadece uzaydaki _____ farklıdır.

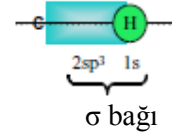


Karbon atomunda, her bir sp^3 orbitali bir elektron içerir ve toplam dört bağ yapabilir.



Başlangıçta elektronun uyarılması için gereken enerjiyi ne sağlar?

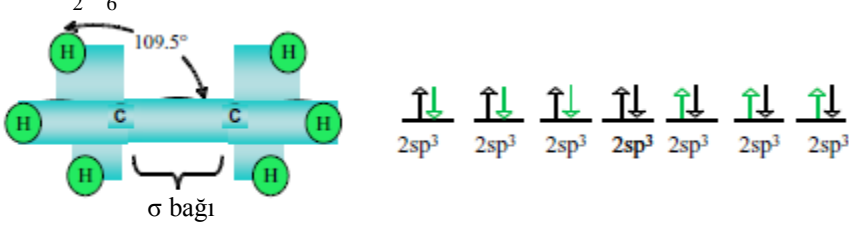
_____!



Her bir bağ, bağ tipine (σ veya π) ve atomik orbital bileşimine göre isimlendirilir.

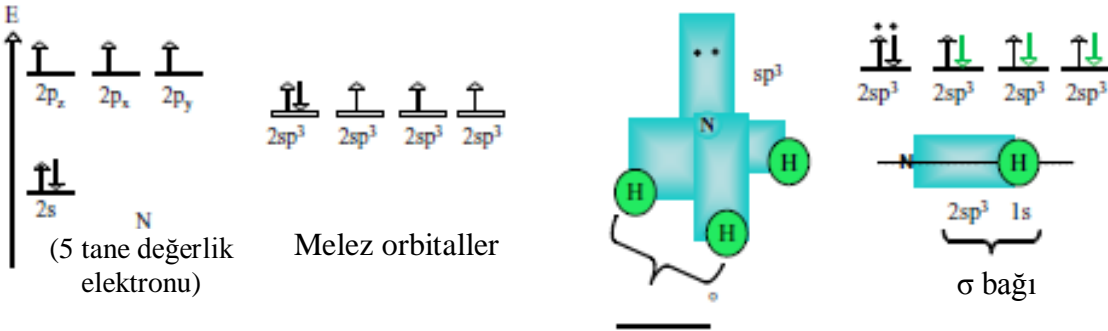
___ (C___ H___)

Etan C_2H_6 molekülünü düşünün.



Etanda _____ ve _____ olmak üzere 2 bağ türü mevcuttur:

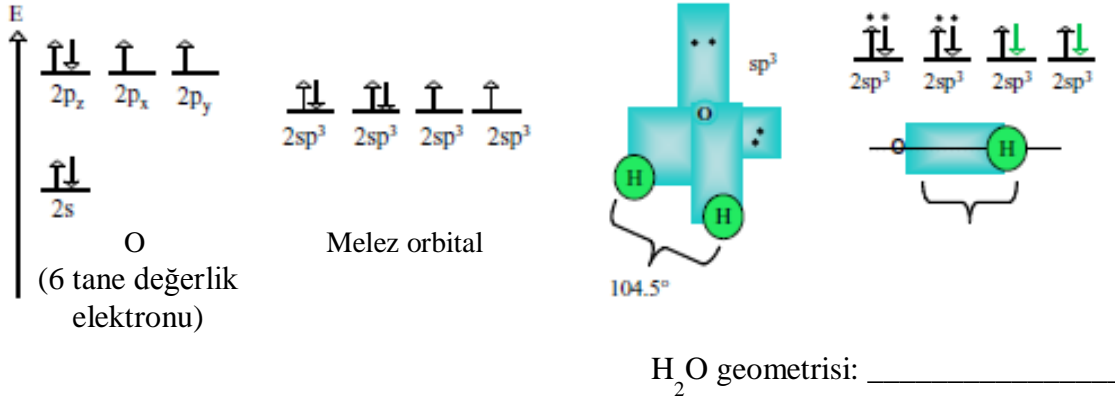
Azot: Azot atomunda elektron uyarılması _____. Çünkü uyarılma, bağ yapacak eşleşmemiş elektron sayısını arttırmaz.



N-H bağ tanımı: _____

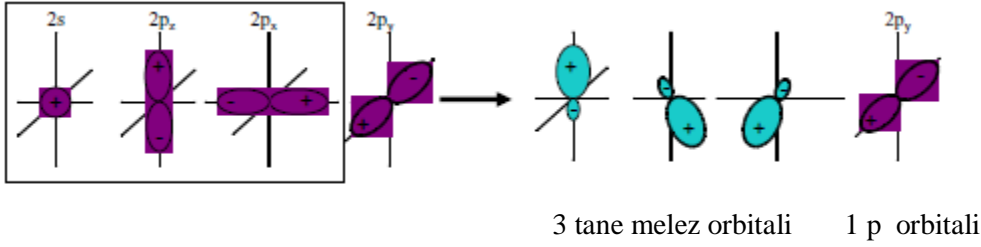
N-atom geometrisi: _____

Oksijen: Elektron uyarılması olmaz.

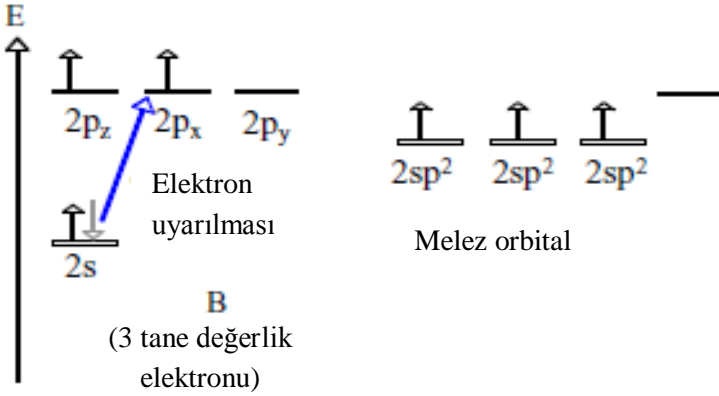


B. sp^2 melezleşmesi

sp^2 melez orbitalleri, bir s-orbitali ve iki p-orbitalinin birleşmesi ile oluşur.

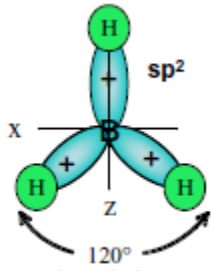


Bor: Bir tane 2s-elektronu boş 2-p orbitaline uyarıldıktan sonra, 3 tane eşleşmemiş elektron elde edilir.

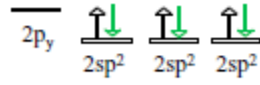


s-orbitali ve iki p-orbitali melezleşerek _____ tane sp^2 orbitali oluşturur.

Üç tane sp^2 -orbitali elektron itmesini azaltmak için _____ geometri oluşturur.

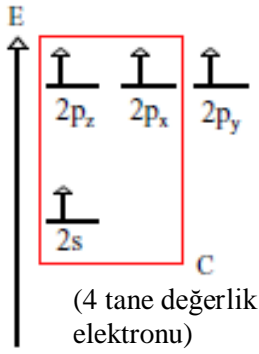


Düzlem Üçgen

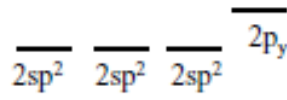


σ (, H1s)

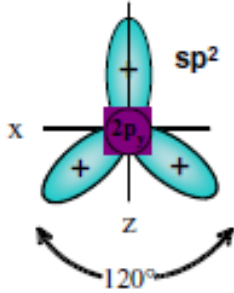
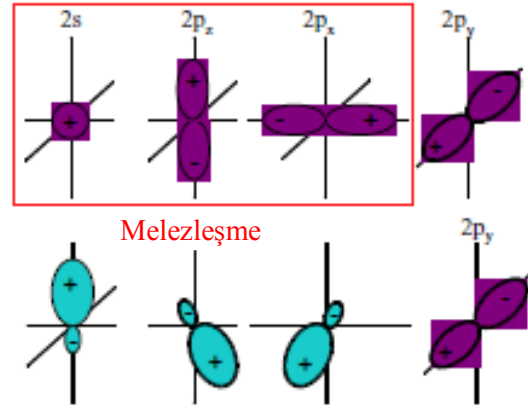
Karbon: karbon atomu sp^2 melez orbitalleri de oluşturur.



(4 tane değerlik elektronu)

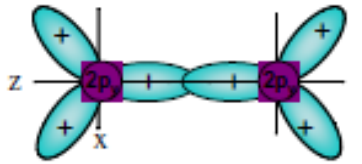


Melez orbital



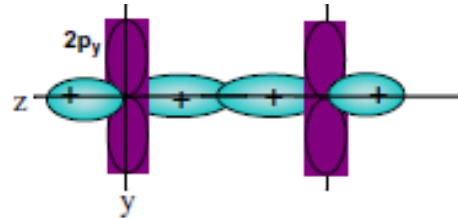
Düzlem üçgen

Etilen (C_2H_4) bir tane C-C ikili bağına sahiptir; yani bir _____bağı ve bir _____bağı.



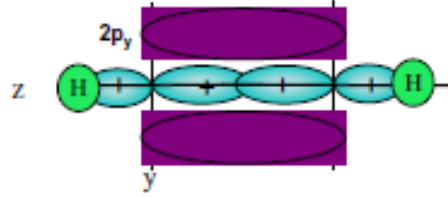
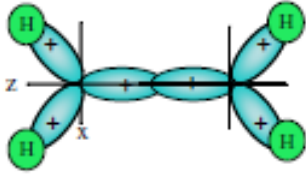
y-ekseninden bakış

σ (_____, _____)



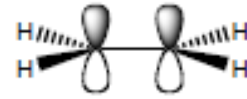
x-ekseninden bakış

π (_____, _____)

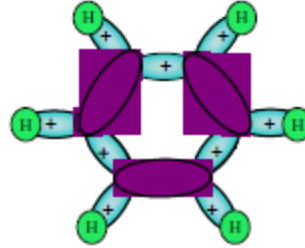
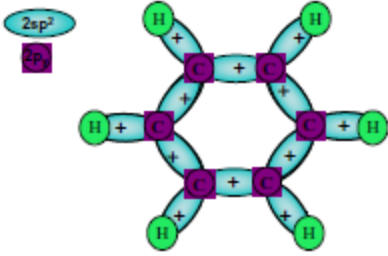


C-C ikili bağına ilaveten, dört tane C-H bağı : σ (_____, _____)

Not: Moleküller çift bağ etrafında dönemez. Dönme pi bağının kırılmasını gerektirir.

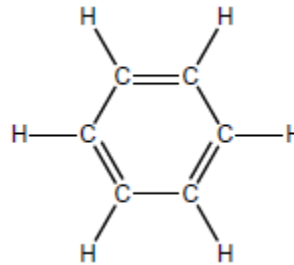
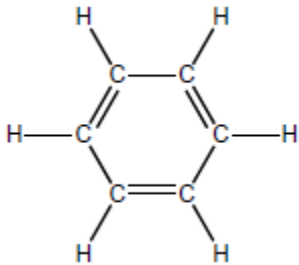


Benzen (C_6H_6)



_____ $\sigma(C2sp^2, C2sp^2)$ bağları _____ $\pi(C2p_y, C2p_y)$ bağları

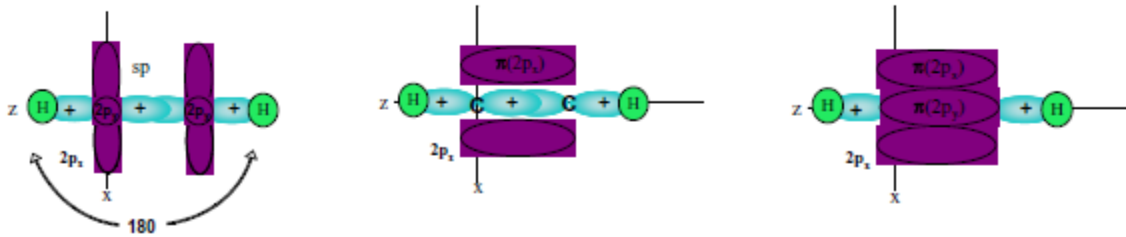
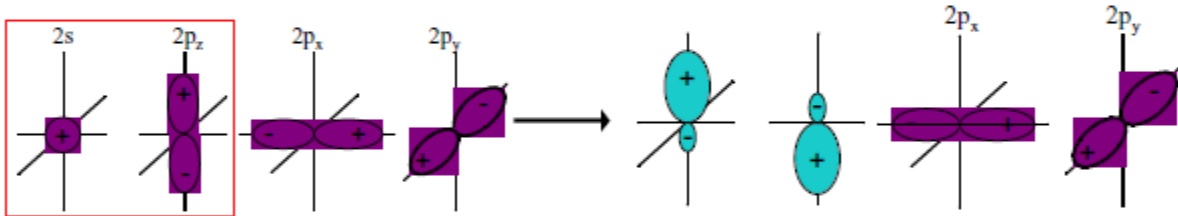
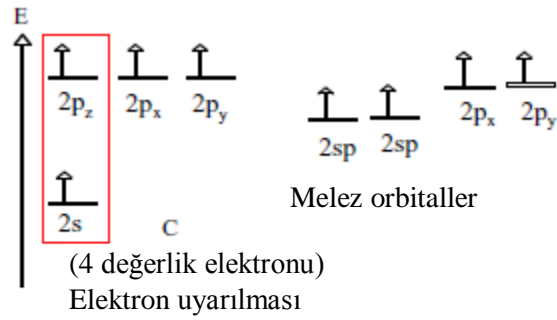
_____ $\sigma(C2sp^2, H1s)$ bağları



Gerçekte, 6 tane pi-elektronu, benzen molekülündeki altı karbon atomu üzerinde _____ dir. Her bir C-C bağı _____ bağıdır.

C. sp melezleşmesi

sp melez orbitalleri , bir s-orbitali ve bir p-orbitalinin bileşiminden oluşmuştur.



σ (_____ , _____) π (_____ , _____) π (_____ , _____)