

## 5.111 Ders Özeti #16

**Bugün 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 Değişim Entalpisi.

**Ders #17 için okuma:** Bölüm 7.1 – İstemli Değişme, Bölümler 7.2 ve 7.8 Entropi, Bölümler 7.12, 7.13, + 7.15 – Serbest Enerji. (Bölüm numaraları 3. ve 4. Baskıda aynıdır.)

---

**Konular: I. Değerlik bağı teorisi ve melezleşme** (Ders #15 den devam)

Karmaşık moleküllerde melezleşme tayini

### II. Kimyasal tepkimelerin enerjisi ve entalpisi

A. Bağ enerjisi/ bağ entalpisi

B. Oluşum ısısı

---

## I. DEĞERLİK BAĞI TEORİSİ VE MELEZLEŞME (Ders #15 den devam)

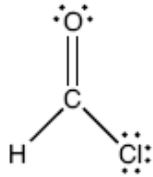
### KARMAŞIK MOLEKÜLLERDE MELEZLEŞMENİN UYGULANMASI

Bir molekülde istenilen bir atomun melezleşmesini belirlemek için,

( bağlı atom sayısı toplamı ) + ( yalın çift sayısı toplamı ) = melez orbitallerin sayısı

2 melez orbital- \_\_\_\_\_ ,      3 melez orbital - \_\_\_\_\_ ,      4 melez orbital-  $sp^3$

İstisna: tekli-bağlanmış \_\_\_\_\_ atomlar. Bu dersin amacı için, tekli-bağlanmış, terminal atomları MELEZLEŞTİRMEYİN.



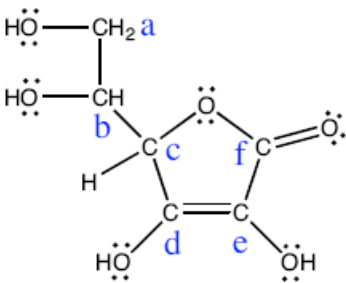
C-H:  $\sigma(C2sp^2, H1s)$

C-Cl:  $\sigma(C2sp^2, Cl)$

C-O:  $\sigma(C2sp^2, O)$

$\pi(C2p_y, O)$

Örnek: askorbik asit (vitamin C)



Her bir C atomunun geometrisini ve melezleşmesini belirleyin.

C<sub>a</sub>:

C<sub>b</sub>:

C<sub>c</sub>:

C<sub>d</sub>:

C<sub>e</sub>:

C<sub>f</sub>:

Aşağıdaki bağların melezleşmesini veya atom orbitallerinin isimlerini ve simetrisini belirleyin.

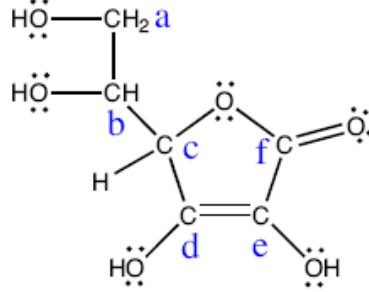
**b** Karbon bağları:

$C_b-H$ :

$C_b-C_a$ :  $\sigma(C2sp^3, C2sp^3)$

$C_b-C_c$ :  $\sigma(C2sp^3, C2sp^3)$

$C_b-O$ :



**d** Karbon bağları:

$C_d-O$ :

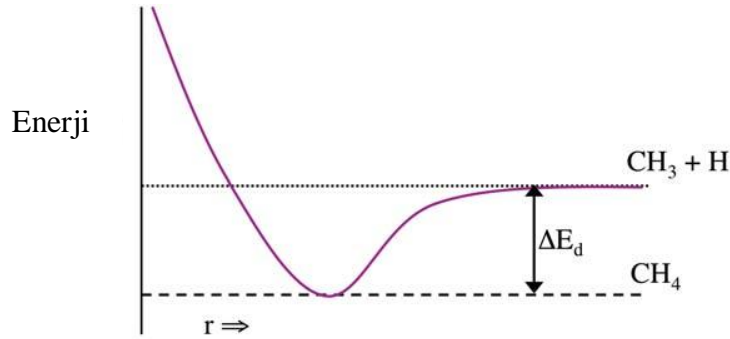
$C_d-C_c$ :  $\sigma(C2sp^2, C2sp^3)$

$C_d-C_e$ :

## II. KİMYASAL TEPKİMELERİN ENERJİLERİ VE ENTALPİLERİ

### A. BAĞ ENERJİSİ/ BAĞ ENTALPİSİ

Bağ (ayrışma) enerjisi,  $\Delta E_d$ , bir bağı kırmak için gereken enerjidir.



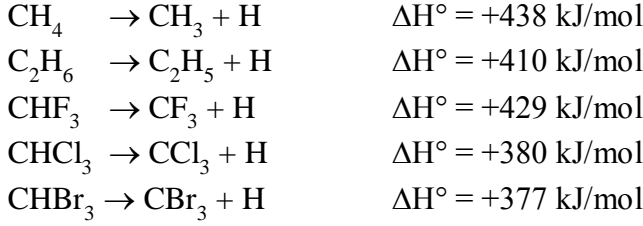
$\Delta H$ , bağ \_\_\_\_\_, bağın kırılması esnasındaki (sabit basınçta) ısı değişimidir.

$$\Delta H = \Delta E + \Delta(PV)$$

Gazlar için,  $\Delta H$  &  $\Delta E$  değerleri % \_\_\_\_\_ kadar farklıdır. Katı ve sıvılar için, ihmal edilebilir bir fark vardır.

$\Delta H^\circ =$  \_\_\_\_\_ bağ entalpisidir. Gazlarda, reaktif ve ürünler 1 bar basınç altında ve standart hallerinde (saf halde) dir.

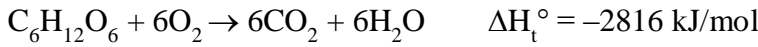
C—H bağları için bağ entalpisi (tüm gazlarda)



$\Delta H^\circ$  pozitifdir – \_\_\_\_\_

Yukarıdaki C-H bağ entalpileri, C-H bağları için verilen ortalama değerin (\_\_\_\_\_ kJ/mol) %8'i içindedir. (metin içinde Tablo 6.8' e bakınız.)

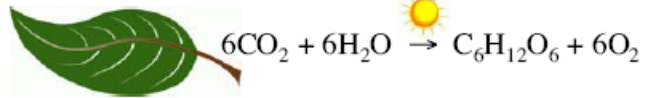
Bağ entalpilerinin önemi nedir? Ürün ve reaktifin bağ entalpileri arasındaki fark, tepkimenin tahmini entalpisini verir.



### Glükozun yükseltgenmesi

**Bitkiler karbon dioksit ve suyu, şeker(glüköz) ve oksijene dönüştürür.**

- Bu işlem enerji gerektirir.
- Glüköz molekülünde depolanmış enerjiyi almak için bitkileri yeriz.



Depolanmış enerjiyi kullanmak için, glüközü yükseltger, tepkimeyi tersine çeviririz



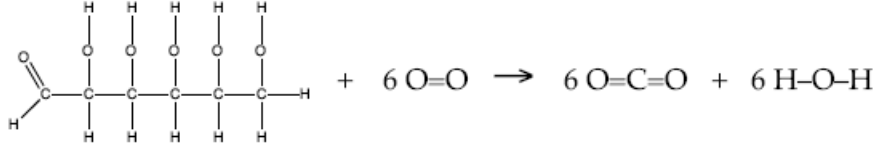
Bu enerjiyi ATP şeklinde depolarız.

Glüközün yükseltgenmesindeki  $:\Delta H_t^\circ$  ı hesaplamak (veya herhangi bir tepkime için):

$$\begin{array}{c} \text{Bağ entalpileri} \\ \downarrow \quad \downarrow \\ \Delta H_t^\circ = \Sigma \Delta H_i - \Sigma \Delta H_j \\ \text{Reaktifteki} \quad \text{Üründeki} \\ \text{i. bağ} \quad \quad \text{j. bağ} \end{array}$$

Ürünlerdeki bağlar, reaktiflerdekinden kuvvetli ise,  $\Delta H$ , \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_ ) dir.

Reaktiflerdeki bağlar, ürünlerdekinden kuvveti ise,  $\Delta H$ , \_\_\_\_\_ (endotermik) dir.



$$\underbrace{[\_(\text{C-H}) + \_(\text{O-H}) + \_(\text{C-O}) + \_(\text{C-C}) + \_(\text{C=O}) + \_(\text{O=O})]}_{\text{Kırılan bağlar (reaktifler)}} - \underbrace{[\_(\text{C=O}) + \_(\text{OH})]}_{\text{Oluşan bağlar (ürünler)}}$$

$$\Delta H_i = \text{_____ kJ/mol} \qquad \Delta H_j = \text{_____ kJ/mol}$$

$$\Delta H_t^{\circ} \text{ hesaplanmış} = 12,452 \text{ kJ/mol} - 15,192 \text{ kJ/mol} = \text{_____ kJ/mol } \text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$$

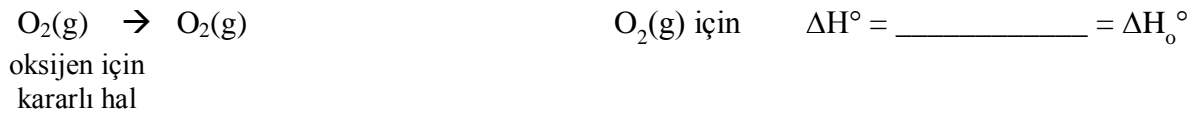
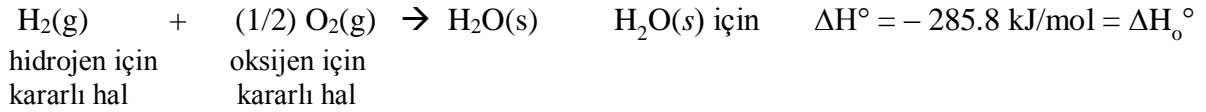
$$\Delta H_t^{\circ} \text{ deneysel} = -2,816 \text{ kJ/mol}$$

% 3 uyumlu, ortalama bağ entalpisi için oldukça iyi.

### B. OLUŞUM ISISI, $\Delta H_o^{\circ}$

Daha iyi bir yaklaşım için...oluşum ısısını kullanın —  $\Delta H_o^{\circ}$

$\Delta H_o^{\circ} = \Delta H_t^{\circ}$  1 mol bileşiğin, standart şartlarda ( 298.15 K de 1 bar) saf elementlerinin en kararlı hallerinden oluşması esnasındaki entalpi değişimi



Bir elementin en kararlı halindeki oluşum ısısı \_\_\_\_\_ dir.



$\Delta H_f^\circ$  değerlerini kullanarak glüközün yükseltgenmesi (veya herhangi bir tepkime) için  $\Delta H_t^\circ$  değerini hesaplayabiliriz.

$$\Delta H_t^\circ = \Sigma \Delta H_o^\circ ( \text{_____} ) - \Sigma \Delta H_o^\circ ( \text{_____} )$$

$$\Delta H_t^\circ =$$

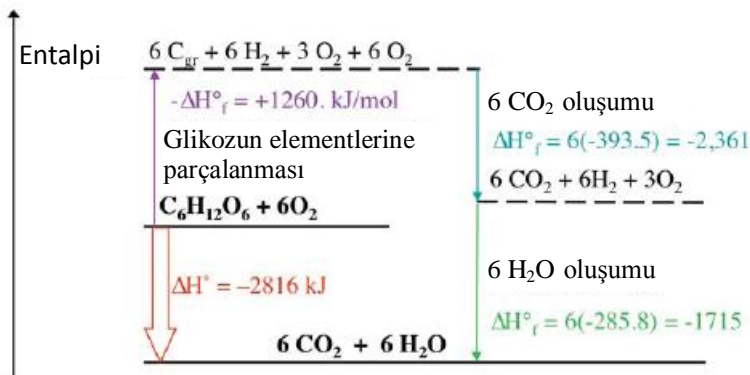
$$\Delta H_t^\circ =$$

$$\Delta H_t^\circ = \text{_____} \text{ kJ/mol}$$

Deneysel değerle aynı, çünkü  $\Delta H_o^\circ$  bir bileşik için spesifiktir. Bileşiklerin  $\Delta H_o^\circ$  çizelgesi, olası tepkimelerin  $\Delta H$  çizelgesi veya olası moleküllerdeki her bağın bağ entalpileri çizelgesi ile mukayese edilirse, daha küçüktür !

Entalpi bir “HAL FONKSİYONU” dur, yani  $\Delta H$  yoldan \_\_\_\_\_ dir.

**Hess Kanunu:** Başka bir kimyasal eşitlik elde etmek için, iki veya daha fazla kimyasal eşitlik toplanırsa, bunlara karşılık gelen \_\_\_\_\_ değerleri de toplanmalıdır.



Glikoz yükseltgenmesi için  $\Delta H^\circ$  (tüm değerler kJ dür)

