

22 PH3 deki bağ açısı nedir? Clicker sorusu için 10 s daha. VSPER geometrisi üzerinde bir tane daha deneme şansı veriyor. Çünkü Çarşamba günü çok ayrıntılı işleyemedik. Çok iyi. Başarı oranı %77. Çok iyi iş çıkardınız. Şimdi hızlıca nasıl olduğunu görelim.

PH3 (fosfin) molekülündeki P atomunun değerlik  $\epsilon$  nu 5 dir, 3 tanede H den gelir. Toplam 8  $\epsilon$ . Hepsinin dolu kabuk oluşturması için kaç  $\epsilon$  gerekir?

14. Bunu 8 den çıkaralım, geriye 6 bağ  $\epsilon$  nu kalır. Bunun için iskelet yapısına 3 bağ koyalım. 1,2,3. Üzerinde 1 tane de YÇ  $\epsilon$  nu kalır. Bu PH3 ün Lewis yapısıdır. Bu bağların hepsi bağ  $\epsilon$  nu veya YÇ olsaydı, bağ açısı 109.5 olurdu. Fakat, burada 1 tane YÇ olduğundan diğer bağ  $\epsilon$  larını iter ve bağ açısı daralır.

Bugünün ders notlarına geçelim. Bugün MOT hakkında konuşmayı bitireceğiz. Daha sonra büyük moleküllerdeki, iki atomlu moleküllerden çok daha büyük moleküllerdeki bağları konuşmaya başlayacağız. Sonra VBT ve melezleşme hakkında konuşmaya devam edeceğiz. 159 Önünüzde ders notlarınızı hala yok. Bu nedenle sadece dinleyin, sonra hepsini alabilirsiniz. Ders notlarınızı postaladım, bugün elinize geçecek. 210 Bu nedenle, bu günkü ders biraz seminer gibi geçecek. Şimdi bugünkü dersimize başlayalım ve MOT hakkında konuşmaya başlayalım.

Nerede kalmıştık? 225 Şimdiye kadar aynı çekirdekli iki atomlu moleküllerin MOT ile açıklanmasını tartışmıştık. Moleküldeki bütün atomlar aynıydı. Bugün farklı çekirdekli iki atomlu moleküllere ait bir örnek vererek bu konuyu kapatacağız. Bir molekülü oluşturan iki farklı atomu..

247 Fakat önce, biraz hatırlatma yapmak istiyorum, MOT den bahsedecek olursak, bu teoride  $\epsilon$  lar dalga gibi davranır, MO oluşturmak için AO ler birleşerek hem yapıcı hem de yok edici girişimler oluştururlar. 303 Şunu unutmamalısınız. İki tane 2s orbitalini birleştirdiğinizde, eğer yapıcı girişim olursa, bağ orbitali elde edersiniz. Oluşan bağ orbitalinin enerjisi onu oluşturan AO lerinin enerjisinden daha düşük olacaktır. Bu orbitale sigma2s orbitali adı verilir.

Bunun tam aksine, yok edici girişimi olursa, sigma 2s\* orbitalini elde edersiniz, buradaki yıldız neyi gösterir? Evet, karşı bağ orbitalini simgeler. Karşı bağ orbitalinin enerjisi, onu oluşturan AO lerinin enerjisinden daha yüksek olacaktır.

OK, Bu MO leri daha önceden göstermiştik. Şimdi daha karmaşık moleküllere geçelim. Bunu yapmak için, bu gün size değerlik bağı teorisinden bahsedeceğim. Orbitalerde melezleşme kavramını anlatacağım. 356 DBT nin arkasındaki fikri anlamak oldukça kolaydır. DBT sinde, eşleşmemiş  $\epsilon$  lar eşleşerek bağları oluşturur. Bu teoriyi, en basit örnek olan H<sub>2</sub> molekülüne düşünelim. H<sub>2</sub> molekülünü oluşturan her bir H atomunun 1s orbitalinde 1 tane eşleşmemiş  $\epsilon$  bulunur. Bunlar bir araya gelip birleşerek H<sub>2</sub> molekülü oluştururlar. Böylece iki orbital bir araya gelir ve bu orbitaller üzerindeki  $\epsilon$  lar eşleşir.

MOT de, bağ orbitallerini isimlendirirken bunların simetrik özellikleri esas alınır. DBT de, bağlar üzerinde odaklanıyoruz, fakat bu size çok tanıdık gelecektir, çünkü burada konuşmak

isteyeceğimiz iki tip bağ vardır. Bunlar sigma ve pi bağlarıdır ve daha önce gördüğümüz sigma ve pi orbitaline çok benzerler.

Buradaki ilk şekilde, sigma bağı görüyorsunuz. Sigma bağı, iki orbitalin çekirdekler arasındaki eksen üzerinde bir araya gelip birleşmesi ile oluşur. Sigma bağı, bağ ekseninde etrafında silindirik simetriktir. Bu bağda bağ ekseninde hiç düğüm düzlemi bulunmaz ve bu oldukça önemli bir noktadır.

515 pi bağı düşünürsek bunun tam tersi olur. Pi bağı, bağ ekseninin altında ve üstünde  $\epsilon$  yoğunluğuna sahiptir. Aynı zamanda bağ ekseninde bir tane düğüm düzlemi bulunur. Burada bir hatırlatma yapayım. Bağ eksenini daima z eksenini olarak seçilmelidir.

538 Pi bağları burada görüldüğü gibidir. Pi bağı anlamadıysanız, ama hepimizin anladığını biliyorum, buradaki şekline bakın, burada bir tane pi bağı görülmektedir, Pi bağında iki bağ yoktur, çünkü burada p orbitallerinin iki lobu yan yana örtüşmüştür. Unutmayın, p orbitalinde ekseninin altında ve üstünde  $\epsilon$  yoğunluğu bulunur. Bunlar yan yana gelip örtüşlerinde buradakine benzer tek bir bağ meydana gelir.

603 şimdi bunları tekli bağlar, ikili bağlar, üçlü bağlar gibi nasıl sınıflandıracığımızı düşünelim, çünkü sigma bağı veya pi bağı yerine, bunları daha çok kullanıyoruz.

Önce tekli bağlara bakalım, burada bazı molekül modelleri göstereceğim. Tekli bağları konuşacak olursak, iki orbital çekirdek eksenleri üzerinde örtüşür. Elimde gördüğünüz örnekte bir tane bağ vardır. Bu sizce hangi bağıdır? Sigma mı yoksa pi bağı mı?

evet, sigma bağı. Burada orbitallerin z ekseninde örtüşüğünü görüyoruz. Tam tersine, ikili bağı konuşacak olursak, bunlardan biri sigma bağı diğeri pi bağıdır. *Özür dilerim Bu seti sınıfa gelmeden önceden düzenlemeyi düşünüyordum, ama bugün yapamadım.* Elimdeki örneğe bir bakalım, çekirdekler arasında görülen sigma bağıdır, ayrıca pi bağı da mevcuttur, çünkü bu atomların her birinin p orbitalinde  $\epsilon$  lar bulunur. Bu  $\epsilon$  yoğunlukları bağ ekseninin üzerinde ve altında örtüşürler. Bu pi bağının tanımıdır, ikili bağda hem sigma hem de pi bağı bulunur.

Şimdi de üçlü bağa geçelim. Bu bağda gene çekirdekler arasındaki eksen üzerinde bir sigma bağı vardır, kaç tane pi bağının olmasını beklersiniz? 2, çok iyi. Evet iki tane pi bağı göreceğiz. İlkinde,  $\epsilon$  yoğunluğu bağ ekseninin üzerinde ve altında bulunur, burada  $\epsilon$  yoğunluğu göreceğiz. İkinci pi bağı ilkine diktir, ikinci pi bağında  $\epsilon$  yoğunluğu bağ ekseninin önünde ve arkasında bulunur. Bu şekilde çevirebiliriz—bu bir pi bağı, bu diğeri pi bağıdır ve birbiri ile etkileşirler.

753 hepsi bu kadar, DBT sine göre düşünecek olursak, en basit açıklama budur. Şimdi bu teoriyi moleküller üzerinde uygulamaya çalışalım. Şimdi örnek olarak bir molekül vereceğim. Aslında VBTeorisi, pek çok molekül için bu düzeyde yeterli olmasına rağmen, vereceğim molekül, VBT ile izah edilemez. Şimdi metan molekülünü inceleyelim. Diğer faktörleri dikkate almadan bu moleküle bir bakalım. Bu model üzerinde biraz değişiklik yapabiliriz. Sanırım, çok atomlu bir molekül olan, metan molekülüne bakacak olursak, burada yapacağımız şeyi bulacağız.

828 şimdi DBT ni uygulayarak, metan, CH<sub>4</sub> molekülünü düşünelim. Bizim basit DBT ni uygularsak, metan molekülünde C atomunun eşleşmemiş  $\sigma$  ları ile H atomlarının  $\sigma$  nın eşleşerek bağ oluşturmasını bekleriz. Halbuki burada, gördüğünüz gibi, C atomu üzerinde iki tane eşleşmemiş  $\sigma$  bulunmaktadır. Çünkü 2s orbitalindeki  $\sigma$  lar eşleşmiştir. Geriye bağ yapabilecek sadece 2 $\sigma$  kalmıştır. Burada bir problem var gibi görünmektedir, çünkü gerçekte metan molekülünde 4 değerlik  $\sigma$  olduğunu biliyoruz. Burada ise bağ yapabilecek sadece iki değerlik  $\sigma$  nu vardır ve 2 H atomu ile sadece iki bağ yapabilir. 911 eğer böyle olsaydı, buradaki eşleşmiş  $\sigma$  çifti ile kararlı yapı CH<sub>2</sub> olurdu, CH<sub>4</sub> değil. Buradaki bağ açısını öngörebiliriz. Bu modele göre HCH bağ açısı kaç derece olmalıdır?

Bir kez daha. Karışık cevaplar veriyorsunuz. Bu modele göre bağ açısının 90 derece olması gerekir. Peki CH<sub>4</sub> molekülünde bağların kaç derece olmasını bekleriz? 109.5 çünkü dört değerliklidir, burada tartıştığımız ise 2 değerliklidir ve bu iki p orbitali birbirine diktir. Bu nedenle öngörülen açı 90 derece olmalıdır. **Bu tamamen yanlıştır.** Bu resimlerin hepsi yanlıştır. Eğer ders notlarınız varsa üzerini karalayınız. Bunu evde de yapabilirsiniz. Buradaki açıklamada biraz değişiklik yapmamız gerekir. Burada başka bir faktörün dikkate alınması gerekir. Eğer burada dört bağ oluşturacak olsak, karbon atomu üzerinde dört tane eşleşmemiş  $\sigma$  nun bulunması gerekir.

$\sigma$  uyarılması ve AO lerinin melezleşmesi kavramlarını kullanarak bu durumu açıklayabiliriz. Bunun yolu budur. Bunun ne anlama geldiğine bir bakalım. 1033 C atomunu ele aldığımızda, 2s orbitalinde bulunan 2 $\sigma$  dan birini 2p orbitaline uyarabiliriz. Böyle yaparak, 4 tane eşleşmemiş  $\sigma$  elde etmiş oluruz.

Buna bakacak olursanız, size çok akıllıca gelmeyebilir. Çünkü, daha düşük enerjili bir s  $\sigma$  nu, daha yüksek enerjili bir p orbitaline geçmiştir, evet bu bir gerçektir ve enerji ister,  $\sigma$  daha yüksek enerjili bir konuma çıkacaktır. Ama, düşünebileceğiniz gibi, bu enerji çok fazla değildir. 1111 Çünkü, 2s orbitalinde, eşleşmiş olarak durmakta olan  $\sigma$  nu, p orbitaline uyardığımızda artık eşleşmemi olacaktır, 2s orbitalinde de tek  $\sigma$  kalacaktır ve  $\sigma$ - $\sigma$  itmeleri en az düzeye inecektir, ama yine de uyarılma için enerji gerekecektir. Bir  $\sigma$  nu uyararak için gereken enerjinin nereden geleceğini düşünmemiz gerekir, birkaç dakika sonra göstereceğim.

Bunu olacağını farz edelim, şimdi elimizde 4 tane eşleşmemiş  $\sigma$  var. Bu çok iyi, ama ihtiyacımız olan resim hala yeterli değil, çünkü, aslında, bu  $\sigma$  lar eşit enerjili orbitallerde değildir-- biri 2s orbitalinde diğer 3 tanesi 2p orbitalinde bulunmaktadır.

1143 Orbitalleri konuşurken, dalga fonksiyonlarını konuşuruz. Bu atom orbitallerinin, hibrit (veya melez orbitaller) oluşturması için, dalga fonksiyonlarının yapıcı girişim veya yok edici girişimi oluşturması gerekir. Biraz ilerleyelim, s ve p orbitallerini melezleştirelim, böylece özgün AO lerinden melez orbitallerine geçeriz. Bu melez orbitallerin enerjisi birbirine eşittir, melez orbitallerinin enerjisi s orbitalinden daha yüksek, p orbitalinden daha düşüktür. Bu durum mantıklıdır, çünkü s ve p orbitalleri birleşmiştir. 1226 Bu melez orbitaller, hangi orbitallerin bileşiminden oluşuyorsa, onu açık olarak gösterecek özel isimler alırlar. Buradaki sp<sup>3</sup> orbitalidir. Çünkü 1 tane s ve 3 tane p orbitalinin bileşiminden meydana gelmiştir.

Melez orbitallerinin isimlendirilmelerinde hiç hata yapılmaz, çünkü çok basit ve bilgi vericidir. Bir s ve 3p varsa buna  $sp^3$  deriz. Kimyada isimlendirmeler her zaman çok anlamlı değildir, fakat buradaki isimlendirme çok mantıklıdır, bunu vurgulamakta yarar görüyorum.

Şimdi metanın durumunu düşünelim, burada melez orbitalleri vardır. Bir şey daha söylemek istiyorum. Bu orbitallerin hem enerjileri hem de şekilleri birbirine eşittir, sadece bir şeyleri farklıdır o da uzaydaki yönelmeleri dir. Aslında, önce bu orbitallerin nasıl oluştuğuna bakalım. Tekrar ediyorum. 1 tane s, 3 tane p AO birleşerek,  $sp^3$  melez orbitallerini oluşturur. Bu orbitaller melezleştiğinde, 4 tane melez orbital elde edilir. (yeşil renkte gösterilmektedir). Fark ettiğiniz gibi şekilleri aynıdır, ama yönelmeleri farklıdır.

Aslında bu melez orbitaller, 4 tane AO nin doğrusal bileşimidir. Burada ne olduğunu resimlere göstermek zordur, fakat bu melez orbitallerin nasıl oluştuğunu anlayabiliriz. En azından 2s ve 2pz orbitallerini birleştirmeye çalışalım. Şüphesiz hepsini bir araya getirmek çok daha zor olacaktır.1343Fakat, yine de şekiller hakkında bir fikir verebilir. S orbitali ile p orbitalinin üst lobunu birleştirdiğimizde, yapıcı girişim olacaktır, çünkü ikisi de aynı işaretlidir, bu nedenle yapıcı girişimin oluştuğu melez orbitalin üst lobu daha büyük olacaktır.

S orbitali ile p orbitalinin alt lobunu mukayese ederseniz, işaretlerinin farklı olduğunu görürsünüz, burada yokedicili girişim oluşur.  $sp^3$  melez orbitalinin arka tarafında küçülmüş bir lob görebilirsiniz.  $sp^3$  melez orbitallerinin hepsinde bir tane çok büyük , bir tane de çok küçük bir lob vardır. Çoğu kez, daha iyi görünmesi için insanlar sadece büyük lobları çizer, ama diğer tarafta bir tane daha küçük lob vardır.

1428  $sp^3$  melez orbitallerinde, dört tane AO bir eksen üzerinde birleştirelim,  $sp^3$  karbon atomlarında olan şey budur. Bu durumda buradaki açı hakkında ne söyleyebiliriz?

Doğru. Burada gözlememiz gereken açı 109.5 derece olmalıdır. şimdi biraz da bağlara bakalım. Eş enerjili 4 tane melez orbital vardır, her birinde 1 tane e bulunur. Her birine bağlamak üzere 4 tane H atomu getiririz, bu H atomlarında bir tane eşleşmemiş elektron bulunur. Böylece dört bağ oluşur.

Daha önceden bahsettiğim gibi, 2s deki bir e nu 2p orbitaline uyarmak için gereken enerjinin neden geldiği düşünecek olursak, bu enerji bağ oluşumundan sağlanır. Bağ oluşumundan oldukça büyük miktarda enerji açığa çıkar, bunun bir kısmı e nu uyarmak için harcanır.

DBT de bu bağları nasıl tanımlayacağımızı düşünelim. Bir bağı oluşturan orbitalleri tanımlarsanız bağı da tanımlamış olursunuz, aynı zamanda bağı simetrisini de tanımlamış olursunuz. Burada olmasını beklediğimiz hangi bağıdır? Sigma bağı mı, pi bağı mı?

Karışık cevaplar işitiyorum. Doğru cevap sigma bağı olacaktır, çünkü  $sp^3$  melez orbitalinin bir lobu, H atomunun 1s orbitali ile çekirdekler arasındaki eksen boyunca birleşir. Her zaman, iki orbital bağı eksen üzerinde bir araya gelip birleşirse, sigma bağı meydana gelir. Şimdi de oluşan bu sigma bağı isimlendirelim. Bunun için bu bağı oluşturan atom veya melez orbitallerini isimlendirmemiz gerekir, buradaki sigma  $C2sp^3$  orbitali ile  $H1s$  orbitali.

1627 Şimdi biraz daha karmaşık moleküller hakkında konuşalım. Metanda sadece 1 tane merkez atom vardır. Birden çok merkez atom içeren moleküllere hakkında da konuşabiliriz. etan molekülüne bir bakalım.  $C_2H_6$ .  $sp^3$  melezleşmesi yapmış C atomunun bir tane melez orbitalini alalım. Burada C atomunun eksen doğrultusunda hareket ettiğini görmektesiniz. Bu loblardan birini z eksenini seçelim ve bu bağ eksenini olsun. Buradaki açı hala  $109.5$  derecedir ve hala bağ yapabilecek 4 tane eşleşmemiş  $\epsilon$  na sahiptir. Z eksenini doğrultusundaki lobu başka bir C atomunun  $sp^3$  melez orbitali ile eşleştirelim. Böylece bir tane bağ meydana gelir ve bu sigma bağıdır.

Bu bağ çekirdekler arasındaki bağ doğrultusundadır, yani z eksenini üzerindedir. Geride H ile bağ yapabilecek 6 tane değerlik  $\epsilon$  nu kalmıştır. Bu  $\epsilon$  ları 6 tane H atomu ile eşleştiririz. Etan molekülüne baktığımızda burada iki farklı sigma bağı oluşmuştur. Bir tanesi C-C bağı, diğeri C-H bağıdır.

Şimdi bu bağları nasıl yazacağımıza bir bakalım. TAHTA Etan molekülünü yazalım. Önce C-C arasındaki sigma bağını tanımlayalım. Önce C yazalım. Buradaki C nun melezleşmesi nedir?

OK. Tekrar başlayalım. Buradaki C nun melezleşmesi nedir?  $2sp^3$  dür, ve ikinci C da aynıdır, yani  $2sp^3$ ). Buradaki ilk bağ tipi budur. İkinci bağ C ve H arasındadır. Bu sigma mı pi bağı mı?

Güzel. Sigma bağı. C için tekrar aynıını yazalım.  $2sp^3$ , H için ne yazalım?  $1s$ . Çünkü sadece  $1s$   $\epsilon$  nu var. böylece etanı tanımlamış olduk.

1847 Sadece C atomlarını değil, diğer atomları da tarif ederken melezleşme kavramını kullanabiliriz. Mesela azot atomunu konuşabiliriz. Burada görüldüğü gibi N atomu 5 tane değerlik  $\epsilon$  na sahiptir. Buradaki  $2s$   $\epsilon$  larının  $2p$  orbitaline uyarılmasını beklermisiniz?

Hayır. İyi. N atomunda elektron uyarılmasına gerek yoktur. Çünkü uyarılma ile eşleşmemiş  $\epsilon$  sayısı artmaz. Uyarılsa dahi yine 3 tane eşleşmemiş  $\epsilon$  na sahip olunur. Bu orbitallerle melezleşme yapılabilir ve 4 tane melez orbitali elde edilir, bunlar  $sp^3$  melez orbitalleridir.

Şimdi N atomuna bir bakalım. Bağ yapabilecek 3 tane değerlik  $\epsilon$  na sahiptir. Çünkü N atomu üzerinde bir tane YÇ var. yani, 4 tane melez orbitalinden biri doludur. Şimdi 3 tane H atomunu geri kalan melez orbitallerine koyalım. Böylece amonyak molekülünü elde etmiş oluruz. Şimdi tıkkayıcı\_sorusuna geçelim.  $NH_3$  molekülünde H-N-H bağ açısının ne olabileceğini söyleyin—HNH bağ açısı nedir? Molekülün şeklini tahtaya çiziyim—bunu ders notlarınıza koyar mısınız, ders notlarınıza bakmanız gerekmez.

Bu soruya çok hızlı cevap verebilirsiniz. Son 10 saniye. OK, çok iyi. Hızlı düşünmenize rağmen, çoğunuz doğru cevaplamış. gördüğümüz gibi, amonyakta, HNH açısı  $109.5$  den küçüktür, gerçek açı  $107$  derecedir. Çünkü YÇ  $\epsilon$  ları bağ  $\epsilon$  larını iter. *Diğer bir clicker sorusu.*  $NH_3$  molekülünün şekli nedir?

Son 10 saniye. Buna hızlı cevap verilebilir. Çok iyi. B.O:%70, daha yüksek olmasını beklerdik. evet, şekli gerçekten üçgen piramit tir. Şeklini hemen hatırlamanız gerekirdi.

Burada şekli hemen bulamıyorsanız, bunları çalışmanız ve öğrenmeniz gerekir. Burada yapı üçgen piramittir, çünkü 3 tane atom merkez atoma bağlanmıştır ve merkez atom üzerinde bir tane YÇ é ları vardır. Bu yapıya üçgen piramit adı verilir.

Şimdi ders notlarımıza geri dönelim. En son NH bağıni nasıl isimlendireceğimizde kalmıştık. Tekrar edelim. Bunu simetrisine göre isimlendiririz. Bu sigma bağıdır,-- Hayır. OK., burada N yerine C yazılmış, aslında N olmalıydı ( N2sp3, H1s) dir.2209 bunları yazmadığınız için endişe etmiyorum, ders notlarınızı postalamadan önce bunu düzeltirim.kimse bilmeyecek. Açık ders malzemeleri hariç.

2219. Şimdi oksijendeki melezleşmeye bir bakalım. Oksijen atomunda da benzer bir durum vardır. é nun uyarılmasına gerek yoktur. çünkü 2 tane YÇ é nu vardır. é nun uyarılması bir farklılık yaratmayacaktır. Buradaki orbitallerin hepsi melezleşmeye katılır, sp3 melezleşmesi olur ve 4 tane melez orbitali elde edilir. 2 tane orbital YÇ é ları ile doludur, geriye bağı yapabilecek 2 tane eşleşmemiş é kalmıştır.

Şimdi H<sub>2</sub>O molekülünü düşünelim. Bu oksijen için en basit örnektir. Burada 2 H atomu gelir ve H atomlarının é ları melez orbitalindeki tek é lar ile eşleşir. Böylece dört orbitalde dolmuş olur. Buradaki açının ne olmasını beklersiniz? Amonyaktaki açı ile karşılaştırırsınız ne beklersiniz? daha büyük veya daha küçük?

Çok iyi. Evet, daha küçük, 109.5 den çok daha düşük, çünkü burada iki tane YÇ var, 2 tane YÇ in itmesi çok daha fazla olacaktır. Bu nedenle dağlar birbirine daha çok yaklaşacaktır. H-O-H açısı deneysel olarak 104.5 derecedir. Şimdi de OH bağıni isimlendirelim. sigma bağı (O2sp3, H1s). Bu molekülün geometrisi ise açısız olacaktır.

Bu da sp3 melezleşmesidir, bu oluşturabileceğimiz yegane melezleşme değildir, başkaları da vardır. 4 tane orbitali birleştirmek yerine, 3 tane orbitali birleştirecek, bu durumda sp3 melezleşmesi meydana gelir.

Sp2 melezleşmesinde, bir tane s orbitali ile 2 tane de p orbitali birleşir. Bunun sonucunda 3 tane melez orbitali elde edilir. P orbitallerinden bir tanesi melezleşmeye katılmaz. Bunun sonucunda bir tane boş p orbitali ve 3 tane sp2 melez orbitali oluşur.

Şimdi buna ait bir örneğe bakalım. Merkez atom olarak Boru seçelim. Borun üç tane değerlik é nu vardır. Bor atomunda é nun uyarılmasını bekler misiniz?

Evet, kesinlikle vardır. 2s orbitalindeki 1é, boş 2p orbitaline uyarılır. Böylece bağı yapabilecek 3 tane eşleşmemiş é elde edilir. Bunları melezleştirirsek, 3 tane melez orbitali elde ederiz. Bunların isimlendirilmesi yine çok basit ve bilgi vericidir, 1 tane s ve iki tane p orbitalinden oluştuğu için, adı sp2 olur. Geride kalan py orbitali niçin melezleşmeye katılmadı diye düşünebilirsiniz. Aslında o orbitalde é yoktur. Boş orbitallerin enerjisinin yüksek olup olmaması bizi ilgilendirmez. Bizi sadece içinde é bulunan orbitaller ilgilendirir. Eğer 4 orbitali birleştirecek, oluşan melez orbitallerdeki p katkısı daha fazla olacaktır, buna bağıli olarak melez orbitallerin enerjisi daha yüksek olur. Bu nedenle p orbitallerinin birini melezleştirmeye dahil etmezsek, enerjisi düşecektir. Çünkü oluşan sp2 melez orbitalinde s

karacterinin katkısı 1/3, p karakterinin katkısı 2/3 dür, halbuki  $sp^3$  de p karakterinin katkısı  $\frac{3}{4}$  dür.

Sonuçta B merkez atomu  $sp^2$  melezi oluşturur. Şimdi de bağlarda neler olduğunu düşünelim. Üç tane bağın birbirinden en uzak olduğu durum, üçgen düzlem geometrisidir. Elimde  $BH_3$  molekülünün bir modeli bulunmaktadır, buna bir bakalım. bütün  $\epsilon$  lar bağlarda bulunmaktadır. Yapı düzlemseldir, bağ açısı  $120^\circ$  dir ve bağlar birbirinden mümkün olduğu kadar en uzak konumdadır.

Burada boş bir p orbitalinin olduğunu unutmayın, boş p orbitali molekül düzlemine diktir, p orbitali buradadır ve üzerinde  $\epsilon$  yoktur. Bu nedenle bağ  $\epsilon$  larını birbirinden mümkün olduğu kadar uzaklaştırırken dikkate almamıza gerek yoktur.

Burada oluşan geometri düzlem üçgen dir. Gördüğünüz gibi B atomunun bağ yapacak 3  $\epsilon$  nu vardır. Buna 3H atomu ilave ederek kararlı bir yapı oluştururuz. Bildiğiniz gibi Bor, Lewis yapısı kurallarındaki istisnalardan biriydi. Oktet boşluğu vardı. Oktet kuralına uymadığı halde kararlıydı. Bu yapı etrafındaki 6 elektron ile nasıl kararlı olduğunu açıklar.

Şimdi buradaki BH bağlarına bir bakalım. bu sigma bağıdır, burada Borun  $2sp^2$  melez orbitalleri ile H in 1s orbitalleri örtüşmektedir.  $Sp^2$  melezleşmesine bir örnek daha verelim. C atomunda ne oluyor bir bakalım. C atomunda ne olduğunu düşünecek olursak, C nun 2s  $\epsilon$  larından biri 2p orbitaline uyarılır. Burada bir tane s orbitali ile 2 tane p orbitali melezleşmeye katılır. Böylece üzerlerinde 1 $\epsilon$  bulunan 3 tane melez orbitali elde edilir. Bor atomunun tersine, burada melezleşmeye katılmayan p orbitalinde 1 $\epsilon$  bulunur.

C atomu etrafındaki geometri düşünecek olursak, üçgen düzlem olacaktır. Bağ açısı  $120^\circ$  derece olacaktır. Çünkü üç tane melez orbitali vardır. Burada ne olduğuna bir bakalım. C C çift bağı düşünürken, etilende olduğu gibi,  $C_2H_4$ , bir tane ikili bağ vardır. Bir molekülde ikili bağ varsa, mutlaka bir tane sigma bağı bir tane de pi bağı olması gerekir. etilende ki pi bağı oluşturması için, bir tane p orbitaline ihtiyaç vardır ve burada bir tane p orbitalinin melezleşmeye katılmaması çok mantıklıdır. Buradaki resimde üstte  $sp^2$  melez orbitallerini üstten görüyorsunuz, aşağıda melezleşmeye katılmamış  $p_y$  orbitalini yandan görüyorsunuz. Bu, biraz önceki bor modelindeki yapıya çok benzer.  $Sp^2$  hibriti oluşturmuş iki C atomu, z eksenine doğrultusunda birbirine yaklaşırsa, melez orbitallerinden ikisi birleşerek C-C sigma bağı oluşturur.

Bunun nasıl olduğunu üstteki resimde görüyorsunuz. Şimdi elimdeki modelde görelim. 2918 bir elimde  $sp^2$  c atomu, diğer elimde  $sp^2$  karbon atomu vardır, bunları birleştirdiğimizde, önce sigma bağı oluşacaktır. Burada görmekteyiz. Şimdi ekrana bakalım. Ekranda pembe renkte gördüğünüz p orbitalidir. Burada atomların yan yana gelişini görüyorsunuz. (ELİ İLE GÖSTERİYOR) *Bunlar p orbitalidir, bunlar ise H atomlarıdır.*

2953 Ekranda 4 tane C-H bağı görmekteyiz. Bu C C bağı nasıl tarif edeceğimizi düşünebiliriz. İlk durumda, buradaki ilk bağ kutu içinde gösterilmektedir. Bu bağın simetrisi nedir? Sigma mı pi mi? evet, sigma bağı. iki orbital bağ eksenine üzerinde birleşmektedir. **Bu**

nedenle sigma bağı deriz. İki tane sp<sup>2</sup> melez C atomu arasında oluşmuştur, bu nedenle adı sigma(C2sp<sup>2</sup>, C2sp<sup>2</sup>) dir.

3026 buradaki ikinci bağ hakkında ne düşünüyorsunuz? 2 tane p orbitalinin etkileşmesi ile oluşmuştur. Sigma mı pi mi? evet, pi bağı. Buradaki ikinci bağ sigma bağıdır. Bu bağın adı, pi (C2py, C2py) dir. Tekrar ediyorum. Bunlar p orbitalleridir, melez orbitalleri değildir. Bunların oluşturacağı bağ pi bağıdır. çünkü iki p orbitali arasında oluşmaktadır. İki tane 2py orbitalleri arasında oluşacaktır. Unutmayın, 2py orbitalleri, pi bağı oluşturmak için melezleşmeye katılmamıştı.

Bu iki karbon bağına ilaveten, dört tane daha C-H bağı vardır. *değerlik bağı teorisine göre Etilendeki C-H bağının simetrisini belirleyiniz. 10 saniye daha.* Çok iyi, çoğunuz yapmış. Ders notlarına geri dönelim ve bunu gözden geçirelim.

C-H bağına göre, bu sigma bağıdır— konuştuğumuz atomlar ne olursa olsun, atomları bağladığımızda, bağ eksenini yeniden tanımlamalıyız-- Bağ eksenini boyunca karbon atomunun 2sp<sup>2</sup> melez orbitali ile H atomunun 1s orbitali örtüşerek meydana gelir. Bunlar etilen molekülündeki 3 farklı bağ tipidir.

Şimdi bahsetmek istediğim bir şey gerçekten çok önemlidir, iki atom arasında ikili bağ varsa, molekül içinde bu iki atom arasında ne olur sorusunu cevabı şudur: atomları birbirine göre bu bağ etrafında döndüremezsiniz. Bunun neden olduğunu düşünelim. Bir molekülde, iki atom arasında tekli bağ varsa, isterseniz molekülü bu bağ etrafında döndürebilirsiniz, atomları belli bir yerde durmaz. Fakat ikili bağ varsa, sigma bağına ilaveten burada bir de pi bağı vardır demektir.

Bu durumda bağ ekseninin altında ve üzerinde é yoğunluğu bulunur. Eğer atomu daha önce yaptığım gibi çevirmeye çalışırsam, pi bağı kırılacaktır. Çünkü é yoğunluğunun örtüşebilmesi için C atomlarının aynı hizada durması gerekir. pi bağı etrafında bir dönme uygulayabilmeniz için, pi bağını kırmanız gerekecektir. Bunun için ikili bağ döndüremezsiniz ve bu nedenle pi bağı içeren moleküller esnek değildir.

Bu oldukça önemlidir. Çünkü, çok büyük bir molekülde, çift bağ görürseniz, bir tarafında farklı atomlar, diğer tarafında farklı atomlar bulunabilir. Bir konformasyona karşı diğer konformasyona baktığımızda bunların şekillerinin birbirinden oldukça farklı olduğunu görebilirsiniz. pi bağı molekülün belli bir konformasyonda kilitlenmesini sağlar, ki bu çok önemlidir. Bir konformasyondan diğerine geçmek için bir kimyasal tepkime gerekir. Bir konformasyondan diğerine geçtiğinizde, kimyasal, fiziksel ve biyolojik özellikler tamamen değişir. Şunu aklınızdan hiç çıkarmayın. Bir yerde çift bağ varsa, pi bağı da var demektir ve bu bağ etrafında dönme yapamazsınız.

3357 Şimdi ikili bağ içeren daha karmaşık bir örnek üzerinde düşünelim. Bunun için benzen molekülü ilginç bir örnektir. Sanırım geçen hafta uygulama saatinde benzen hakkında biraz konuşmuş olmanız gerekir. Benzen molekülü bir halkadır ve 6 tane C ve 6 tane H atomundan yapılmıştır. şimdi ekranda benzen molekülü oluşturalım. Burada 4 tane C atomu ile başlayacağız, ikisini sonra ilave edeceğiz.



Başlamak için, iki tane etilen veya eten molekülü alırız. Burada mavi renkli olanlar  $2sp^2$  melez orbitalleridir, bunları her bir C atomunda görmektesiniz. Melez orbitallerinden biri diğer C atomuna bağlanmıştır. Şimdi geride kalan iki C atomunda geldiğini düşünelim. Bu durumda, gelen karbon atomlarının iki tane melez orbitali diğer C atomlarına bağlanmakta ve bir halka oluşturmaktadır. Böylece, her C atomu için geride bir tane melez orbital kalır. 6 tane H atomunu düşünecek olursak, Hidrojenin 1s orbitalindeki  $\epsilon$  C atomunun melez orbitalleri ile bağ oluşturur.

Bu moleküldeki bağları düşünelim, 6 tane (C  $2sp^2$ , C  $2p^2$ ) sigma bağı vardır. Ayrıca (C $2sp^2$ , H1s) sigma bağı mevcuttur. Bunlar kaç tane dir? Evet, 6 tane. 6 tane C-H bağı vardır. Benzendeki iki bağ türü bunlardır, bahsetmediğimiz bir bağ türü daha kaldı. Benzen molekülünde ayrıca pi bağları veya ikili bağları vardır ve burada  $2p_y$  atom orbitalleri arasında oluşur.

Burada bir tanesini görmektesiniz, bu C nun p orbitali ile diğer C nun p orbitali arasında oluşmaktadır. Şimdi clicker sorusu soralım: *benzen molekülünde kaç tane pi bağının olmasını beklersiniz?* 10 s daha.

3617 çok iyi, çoğunuz yapmış. Evet 3 pi bağı bekleriz. Bazılarınız 6 tane olduğunu düşünmüş. Şimdi niçin 3 tane olduğunu görelim. 2 tane  $2p_y$  orbitali arasında 1 tane pi bağı meydana gelir. Buradaki iki C atomu arasında bir tane pi bağı varsa, şunlar arasında da olabilir mi? hayır. Olamaz. 6 tane  $2p_y$  orbitalimiz olduğuna göre 3 tane pi bağımız olmalıdır. Resimde moleküldeki 3 pi bağını görmektesiniz. Bu benzenin sahip olduğu konfigürasyonlarından sadece biri. Şimdide diğerini görmektesiniz, bu oluşabilecek diğer pi bağlarını göstermektedir. Burada molekülü kendi etrafında döndürüp diğer yapıyı elde etmedik, bunu yapmanın bir nedeni yok.

Şimdi bunun yapısını en basit şekilde gösterelim. Bunlar benzenin iki muhtemel şeklidir. Gerçek yapı ise bu ikisinin kombinasyonudur. Bu rezonanstır. Bunlar, rezonans yapılarıdır. Aslında bu 3 pi bağı 6 tane C atomu üzerinde delokalizedir.

Şimdi CC arasındaki bağları düşünelim. Ne tür bir bağ olmasını beklersiniz? Bu bağın bağ derecesi sizce nedir? Evet, 1.5 bağ. Çünkü tek bağ ile ikili bağ arasındadır. Şüphesiz bunlar rezonans yapılarıdır. O halde köseli parantez içine alınmalı ve aralarına çift başlı ok konmalıdır. Böylece molekülün rezonans halleri olduğunu gösterilmiş olur.

3757. şimdi hızlıca son melez tipine geçelim ve bunun hakkında konuşalım. Bu  $sp$  melezleşmesidir.  $sp$  melezleşmesi bir s ile bir p orbitalinin birleşmesi ile meydana gelir. Bunları C atomu üzerinde görelim. Bunları C atomunda melezleştirdiğimizde, 2 tane melez orbitali elde edilir, geride iki tane p orbitali kalır. Her birinde de birer  $\epsilon$  bulunur. Bir de şekline bakalım. İşte iki tane atom orbitali birleşerek iki tane melez orbitali meydana gelir, artı geride kalan iki tane p orbitali görülmektedir.

Buna örnek olarak asetilen molekülünü verebiliriz. Burada iki tane C atomu arasında üçlü bağ vardır. C atomlarının her biri, diğer C atomuna ve bir tane H atomuna bağlanmıştır. Bu moleküle bakmak biraz zordur. Aslında burada iki melez orbitali vardır ve mavi renkte

gösterilmiştir. Sonra bir tane p orbitali vardır ve düşey düzlemde görülmektedir, diğer p orbitali xz düzleminin önünde ve arkasındadır, burada görünmemektedir.

İki C atomu arasındaki z bağ eksenini düşünecek olursak, bu sp melez orbitallerinin örtüşüğünü resmedebiliriz, ayrıca H atomlarının bağlanmasını gösterebiliriz. Asetilen molekülündeki bağ açıları nedir? Bu günün en kolay sorusu, bunlar arasındaki bağ açısı nedir? Evet 180 derece.

Şimdi oluşan bağı düşünecek olursak,-- *Asistanlar şimdi geldi, isterseniz dağıtmaya başlayabilirsiniz, ama dersin bitmesine 2 dakika kaldı. Böylece çıkarken kaos yaşanmaz.* Onlar ders notlarını sessizce dağıtırken, buradaki bağın ne olduğunu düşünelim. Bu kutu içindeki bağ, pi bağı mı yoksa sigma bağı mıdır? Evet sigma bağı. Sigma(C 2sp,C2sp) bağı. İki tane sp bağı birleşmiştir.

Şimdi de ilk pi bağını düşünelim bu bağ ekseninin üzerinde ve altında bulunur. Bu pi bağı mı yoksa sigma bağı mıdır? Evet, pi bağı, yani pi(C2px, C2px) bağı, çünkü x ekseninde bağlanmışlardır.

Buradaki son bağ CC bağıdır. Bu son p orbitalidir ve bir araya gelerek ikinci pi bağını oluşturur. Bu bağ pi (C2py, C2py) bağıdır. İki pi bağı birbirine diktir.

Bu günlük bu kadar. ders notlarınızı alıncaya kadar sınıfta oturun. Bir şeyden bahsetmek istiyorum, 5. Problem setiniz bugün postalandı. Pazartesi günü ders yok. Salı günü uygulama dersi olacak. bu problem setleri için size çok yardımcı olacaktır. Uygulamaya gitmeyi unutmayın. İyi haftasonları.