

Kimyasal Bağlar

Dr. Öğr. Üyesi Akar KARAKOÇ

- Lewis Yapısı
- Dublet-Oktet Kuralı
- a) Kimyasal Bağlanma (Birincil Bağlanma)
 1. İyonik Bağlanma
 2. Kovalent Bağlanma
 - Polar Kovalent Bağ
 - Apolar Kovalent Bağ
 - Koordine Kovalent Bağ
 3. Metalik bağ (elektron denizi modeli)
- b) Bağ enerjisi
- c) Moleküller Arası Etkileşimler (İkincil Bağlanma)

KİMYASAL BAĞLAR

- Bileşiğin en küçük parçası olan ve en az iki atomun birleşmesinden meydana gelen kararlı yapı moleküldür.
- Moleküldeki atomları bir arada tutan kuvvet ise **kimyasal bağ**lardır.

Kimyasal Bağ		
Atomları birarada tutan kuvvetlere kimyasal bağ denir		
İyonik bağ	Kovalent bağ	Metalik bağ
	<i>Polar Kovalent bağ</i>	
	<i>Apolar Kovalent bağ</i>	
	<i>Koordine Kovalent bağ</i>	

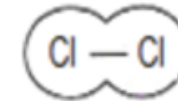
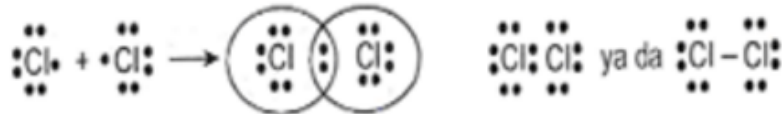
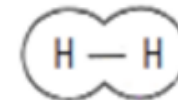
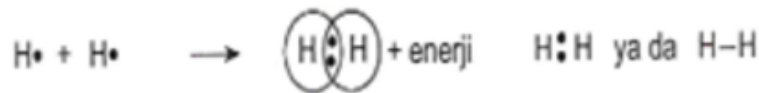
Atomların en dış enerji düzeyinde bulunan elektronlarına "**valans (değerlik) elektronları**" adı verilir.

- Kimyasal bağlanma için atomun valans (dış yörünge) elektronları önemlidir.
- Atomlar arası e- transferi sonucu **iyonik bağ** oluşur
- e- ların ortaklaşa kullanımını sonucu **kovalent bağ** oluşur.
- Atomlar kararlı yapıya ulaşmak için için soy gazların elektron dizilişine sahip olma eğilimindedirler (**dublet-oktet kuralı**)

Atomların valans elektron sayısı aynı zamanda periyodik cetveldeki grup numaralarını da belirler

Dublet ve Oktet Kuralı

ÖRNEK: H_2 ve Cl_2 moleküllerinin oluşumu;



Apolar kovalent bağ

Hidrojen gibi son yörüngesindeki elektron sayısını 2 ye tamamlayarak He'a benzeme olayına dublet kuralı denir. Klor gibi son yörüngesindeki elektron sayısını 8'e tamamlayarak diğer soygazlara benzeme olayına da okted kuralı denir.

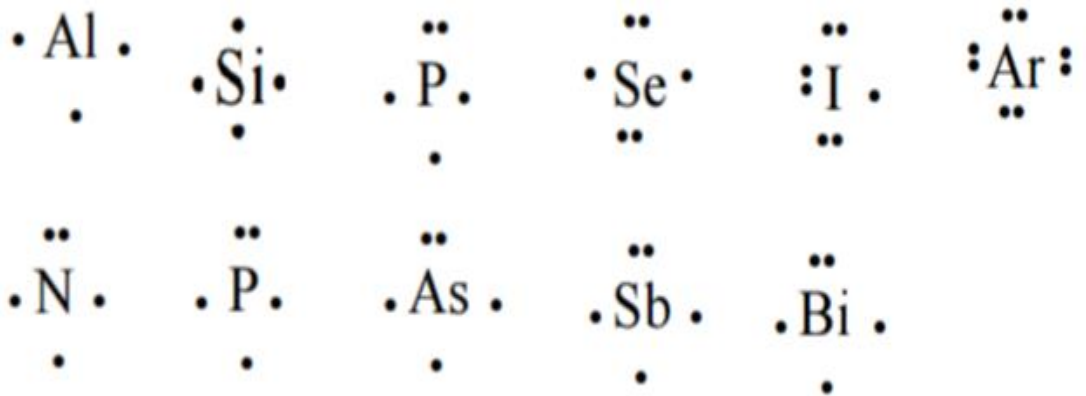
LEWİS YAPISI

- Atom yapısında, atom çekirdeği ile etrafında bulunan elektronlar arasındaki elektrostatik çekim kuvveti büyük önem taşır. Bu çekim kuvveti elektronlar çekirdekten uzaklaştıkça azalır.
- Dış seviyede bulunan elektronlar çekirdek tarafından en az çekilen elektronlardır. Bu nedenle, kimyasal bağlanmada etkin olan elektronlar dış seviye elektronlarıdır.
- Anlatım kolaylığı sağlamak için LEWİS sembolleri oluşturmuştur.
- Bir element sembolünün etrafında valans (değerlik) elektrolarının nokta şeklinde belirtilmesiyle "**Lewis sembolü (yapısı)**" oluşur.

İkinci periyot elementlerinde grup numarası ile valans elektron sayısı arasındaki ilişki

Grup	1	2	3	4	5	6	7	8
Valans Elektron Sayısı	1	2	3	4	5	6	7	8
Birleşme Kapasitesi	1	2	3	4	3	2	1	0
Lewis Yapısı	$\cdot \text{Li}$	$\cdot \text{Be} \cdot$	$\cdot \ddot{\text{B}} \cdot$	$:\text{C}:$	$:\ddot{\text{N}}:$	$:\ddot{\text{O}}:$	$:\ddot{\text{F}}:$	$:\ddot{\text{Ne}}:$

5A Grubu



Baş Grup Elementleri

Baş Grup Elementleri

Periyodik Çizelge

IA 1		Geçiş Metalleri										VIIIA 18					
1 H	IIA 2											IIIA 13	IVA 14	VA 15	VIA 16	VIIA 17	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	IIIB 3	IVB 4	VB 5	VIB 6	VII B 7	VIII B 8 9 10			IB 11	IIB 12	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	*57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	§89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112	113	114	115	116		

İç Geçiş Metalleri

*Lantanit serisi	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
§Aktinit serisi	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr



Metaller



Yarı metaller

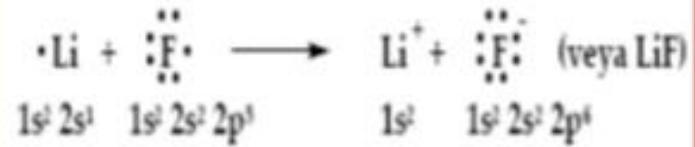
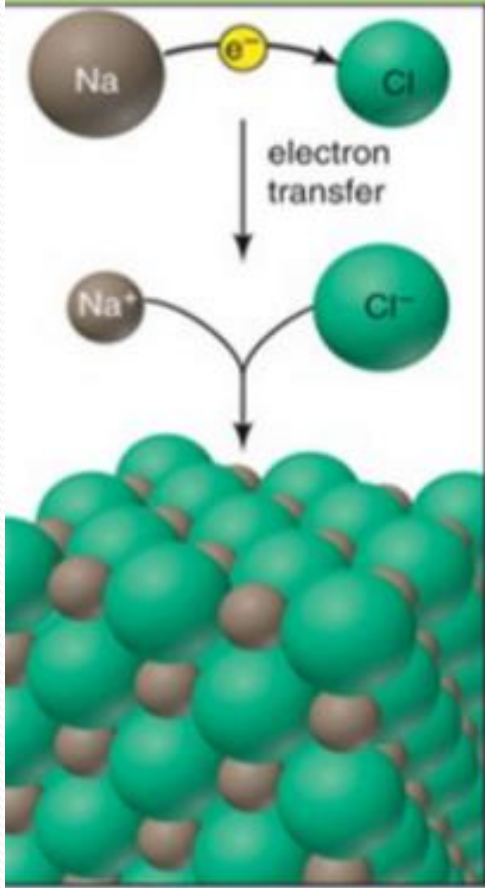


Ametaller

İYONİK BAĞ

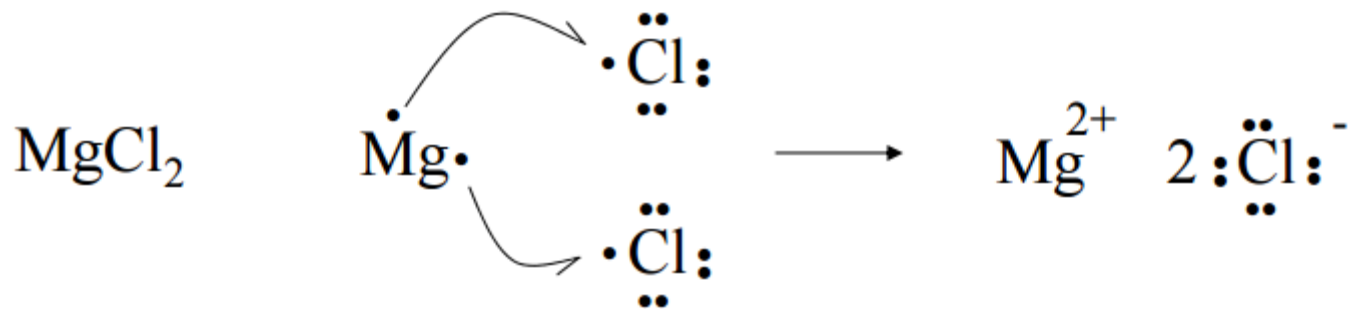
- **İyonik bağlar**, metallerle ametaller arasında meydana gelen elektron alış verişine dayalı bağlardır.
- Metaller elektron vererek (+) yüklü iyon, ametaller elektron alarak (-) yüklü iyon oluştururlar. Bu zıt yüklü iki iyonun birbirlerini coulomb çekim kuvveti ile çekmesinden iyonik bağ oluşur.
- NaCl bileşiğinde Na atomunun iyonlaşma enerjisi küçük olduğundan 1 tane değerlik elektronunu vererek (+1) yüklü iyon, klor ise Na atomunun verdiği elektronu alarak (-1) yüklü iyon oluşturur. Bu iki iyonun birbirini coulomb çekim kuvveti ile çekmesi sonucu NaCl bileşiği oluşur ve meydana gelen bağ iyonik bağdır.
- iyonik bağ oluşurken metal ve ametal ne kadar aktifse bağ o kadar sağlam olur.

İyonik Bağ



Metaller Elektron vererek (+) , Ametaller de elektron alarak (–) yükle yüklenirler. Bu şekilde (+) ve (–) yükler arasında oluşan elektro statik çekime **İyonik Bağlar** denir. İyonik bağ bu temelden yola çıkılarak **kasyonlar ve anyonlar** arasındaki **kuvvetli elektro statik çekim** olarak genelleştirilir.

Lewis yapısına göre İyonik Bileşikler



İyonik bileşikler

- Suda çözünürler
- Yüksek kaynama noktasına sahiptirler - iyonlar arası çekim kuvveti yüksektir
- İyonik bileşikler katı halde elektriği iletmez.
- Eritilmiş halleri veya sulu çözeltileri elektriği iletir.

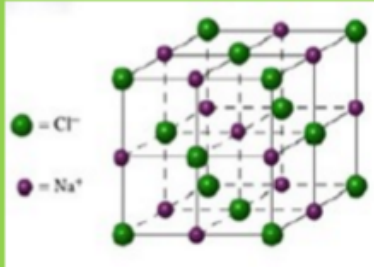
İyonik Bağların Sağlamlığı

Bileşik	Erime Noktası (°C)
NaF	993
NaCl	801
NaBr	750
NaI	662

NaF, NaCl, NaBr ve NaI iyonik bileşiklerinden hangisinde iyonik bağın daha sağlam olduğunu anlayabilmek için bileşiklerin erime noktalarını karşılaştırabiliriz.

Bu bileşiklerde aynı Na^+ ile bağ yapan F^- , Cl^- , Br^- ve I^- ün iyon yarıçapı arttıkça erime noktasının azaldığını gözlemleyebiliriz.

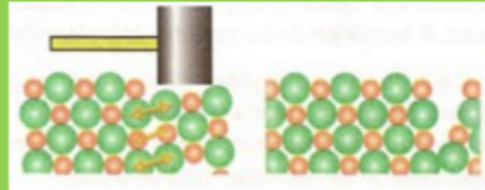
3.2.2 İyonik Bağlı Bileşiklerin Özellikleri



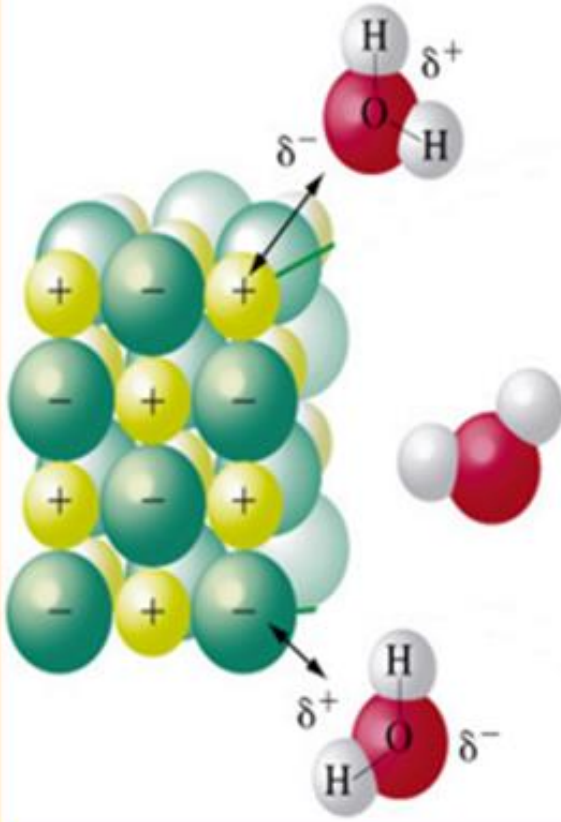
İyonik bileşiklerde zıt yüklü iyonlar arasındaki çekim kuvveti (iyonik bağ), iyonik bağlı bileşiklerin;

- sertlik,
- erime noktası
- çözünürlük gibi özelliklerini belirler.

İyonik katılara darbe uygulandığında aynı yüklü iyonlar yan yana gelmeye zorlanır. Aynı yükler birbirini ittiğinden iyonik katı kırılır ve şekil verilemez.



3.2.2 İyonik Bağlı Bileşiklerin Özellikleri

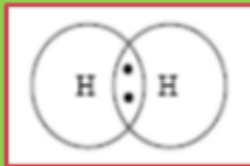
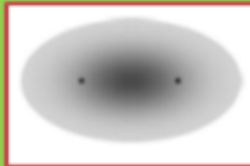
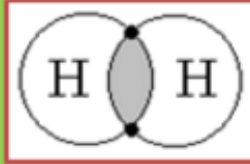
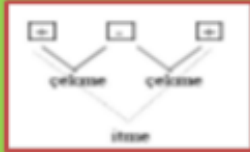


- İyonik katıların büyük bir kısmı suda çözünür.
- İyonik bağlı bileşikler katı haldeyken **elektronlar** serbest hareket etmediğinden elektriği iletmez.
- Ancak iyonik katılar, suda çözündüğünde iyonlar su molekülleri tarafından sarılarak birbirinden ayrılır ve serbest hareket eder hale gelir. Bu serbest hareketli iyonlar çözeltinin elektriği iletmesini sağlar.
- İyonik yapılu maddelerin çözeltilerine elektriği ileten (elektrolit) çözelti denir.
- İyonik katılar eritildiği zaman da **elektronlar** serbest duruma gelir. Böylece iyonik katıların sıvı halleri de elektriği iletir.

KOVALENT BAĞ

- Ametallerin (C, N, P, S, O, H, F, Cl, Br, I) kendi aralarında **elektron ortaklığı** ile oluşturdukları bağıdır.
- Örnek olarak hidrojen molekülündeki bağı incelersek;
- Hidrojenin atom numarası 1 olduğundan, 1 tane elektronu vardır. Bu elektron 1s orbitalinde bulunmaktadır. İki hidrojen atomundaki birer elektronun etkileşmesinden H_2 molekülü oluşur, aradaki bağ kovalent bağıdır. Hidrojen molekülü $H\bullet \bullet H$ veya $H-H$ şeklinde gösterilir.

3.2.3 Kovalent Bağların Oluşumu ve Orbital Örtüşmesi



Aynı halde bulunan iki ametal atomu birbirine yaklaştığında çekirdekleri arasında elektron yoğunluğu artar. Artan elektron yoğunluğu, negatif bir yük olup pozitif yüklü çekirdekleri çeker. Sonuç olarak çekirdekler arasında elektron yoğunluğunun artması kimyasal bağı oluşturur. İki atom tarafından iki veya daha fazla elektronun ortaklaşa kullanılması ile **kovalent bağ** oluşur. İki atom arasında gerçekleşen kovalent bağı göstermek için paylaşılan elektron çifti, tek bir çizgi ile gösterilir. (H-H, H-HCl, H-Br gibi) Kimyasal bağları çizgilerle ifade etmek bize gösterim kolaylığı sağlar. Ancak hiçbir kimyasal bağ türünde bizim gündelik hayatta algıladığımız biçimiyle bir bağlanma gerçekleşmez. Kimyasal bağ dediğinde algılamamız gereken elektrostatik çekim kuvvetidir.

Birbirine yaklaşan H atomları arasında da çekme kuvvetleri baskın olduğu için güçlü bir etkileşim (kimyasal bağ) oluşur.

- Aynı cins ametal atomları arasında oluşan kovalent bağ **apolar**, farklı cins ametal atomları arasında oluşan kovalent bağ **polar**dır.
H₂ molekülündeki H – H bağı apolar, HCl molekülündeki H – Cl bağı polardır.



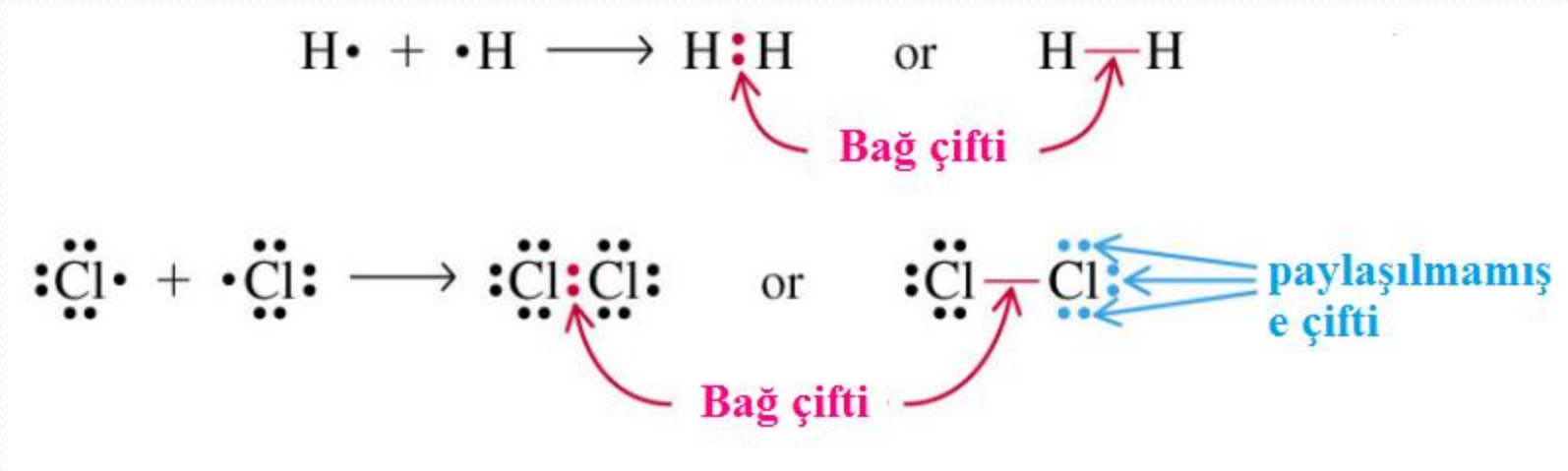
Polar kovalent



A Polar kovalent

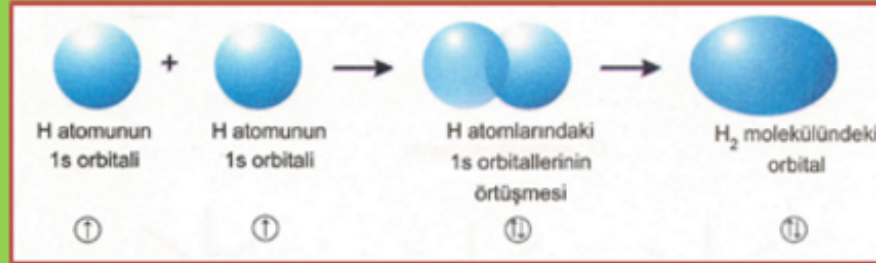
Halat çekme oyununda, fiziksel olarak güçlü olan taraf halatı kendine doğru daha fazla çeker. Bu oyunda karşılıklı tarafları atom; ortadaki halatı elektron olarak düşünebiliriz. Kovalent bağı oluşturan farklı türdeki atomlar ortaklaşa kullanılan elektronları eşit kuvvetle çekemez. Elektronegatiflikleri farklı atomlar arasında oluşan kovalent bağlarda elektronegatifliği yüksek olan atom (kısmi negatif); elektronegatifliği düşük olan atom ise (kısmi pozitif) yükü yüklenir. Bu nedenle çoğu molekül pozitif ve negatif olmak üzere iki kutuplu (dipol) yapıya sahiptir.

Lewis yapısına göre kovalent bağ



paylaşılmamış elektron çiftleri=bağ yapmamış elektron çiftleri=lone pairs (LP)

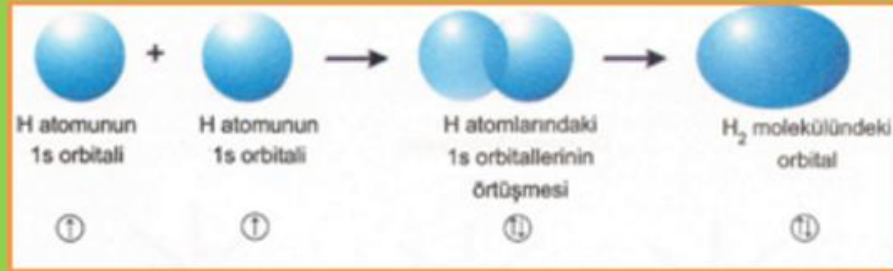
Orbitallerin Örtüşmesi



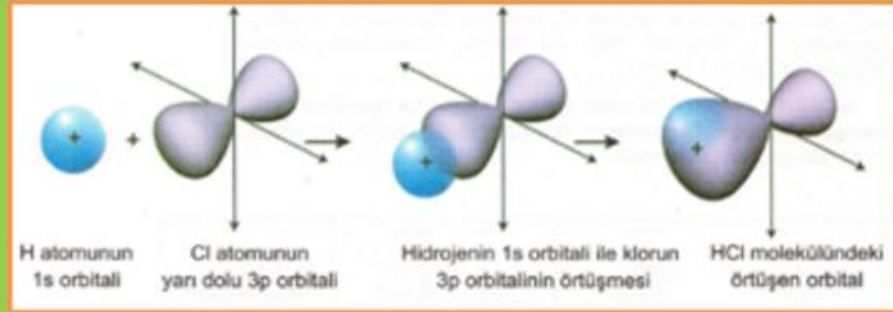
Hidrojen atomlarının elektron bulutları birbirini iterek atomların birbirine yaklaşmasına mani olur. Fakat bu itme kuvvetini yenecek hızda iki hidrojen atomu çarpışır ve yarı dolu 1s orbitalleri **örtüşürler** ve iki çekirdek arasında elektron yoğunluğu artar. Çekirdekler arasındaki yoğun elektron bulutu çekirdekleri belirli mesafede bir arada tutar. Bu olaya **orbitallerin örtüşmesi** denir.

Kısaca kovalent bağ, yarı dolu orbitallerin örtüşmesi sonucu meydana gelir.

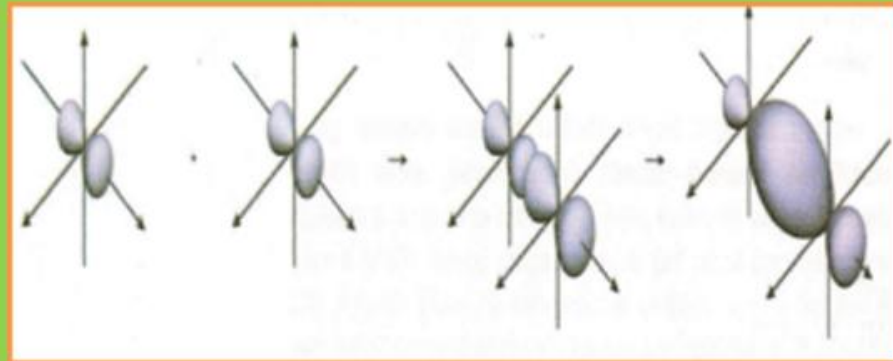
s-s Örtüşmesi



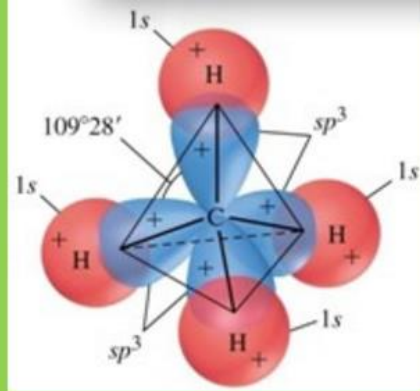
s-p Örtüşmesi



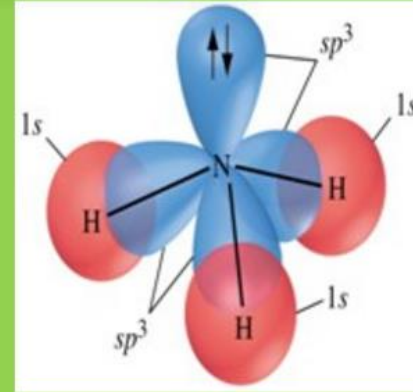
p-p Örtüşmesi



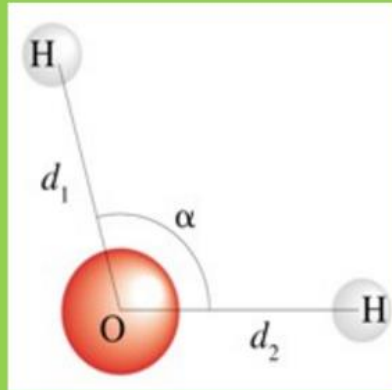
CH₄
molekülünün
yapısı



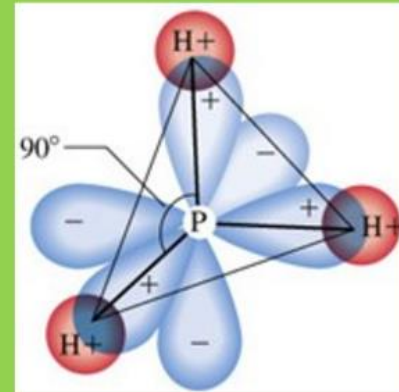
NH₃
molekülünün
yapısı

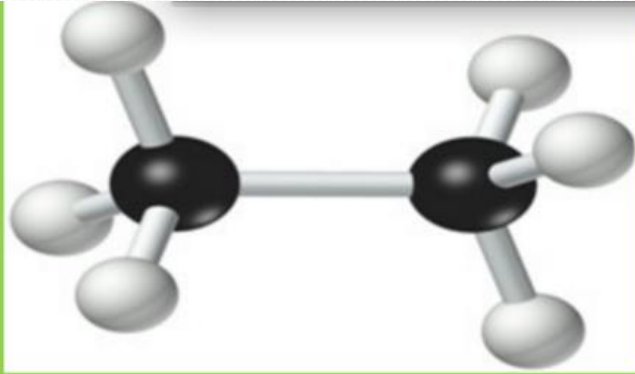


H₂O
molekülünün
yapısı

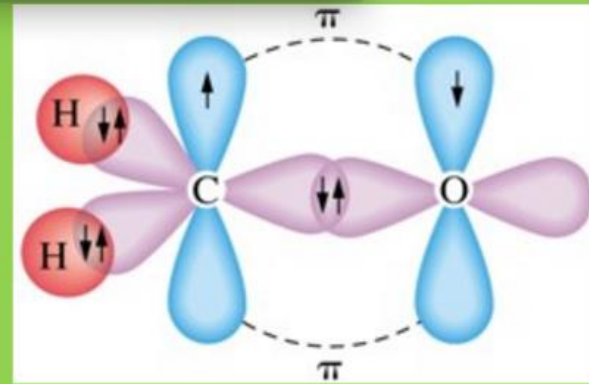


PH₃
molekülünün
yapısı

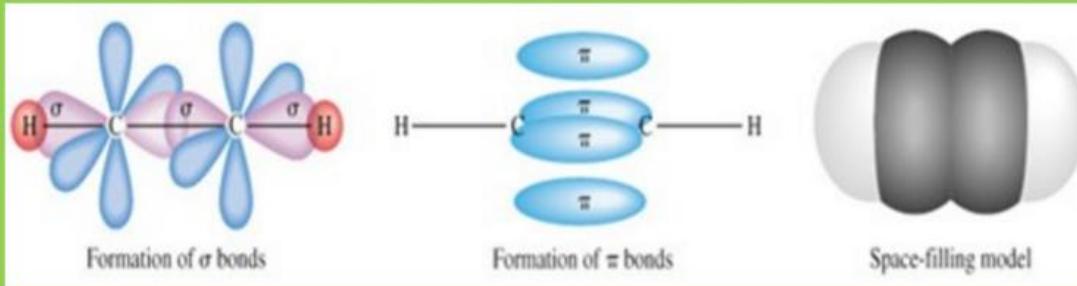




C₂H₆ molekülünün yapısı



C₂H₄ molekülünün yapısı



C₂H₂ molekülünün yapısı

Kovalent Bileşikler

- En temel yapıtaşları moleküllerdir
- Erime ve kaynama noktaları düşüktür
- Elektrik akımını iletmezler
- Çoğu suda çözünmez

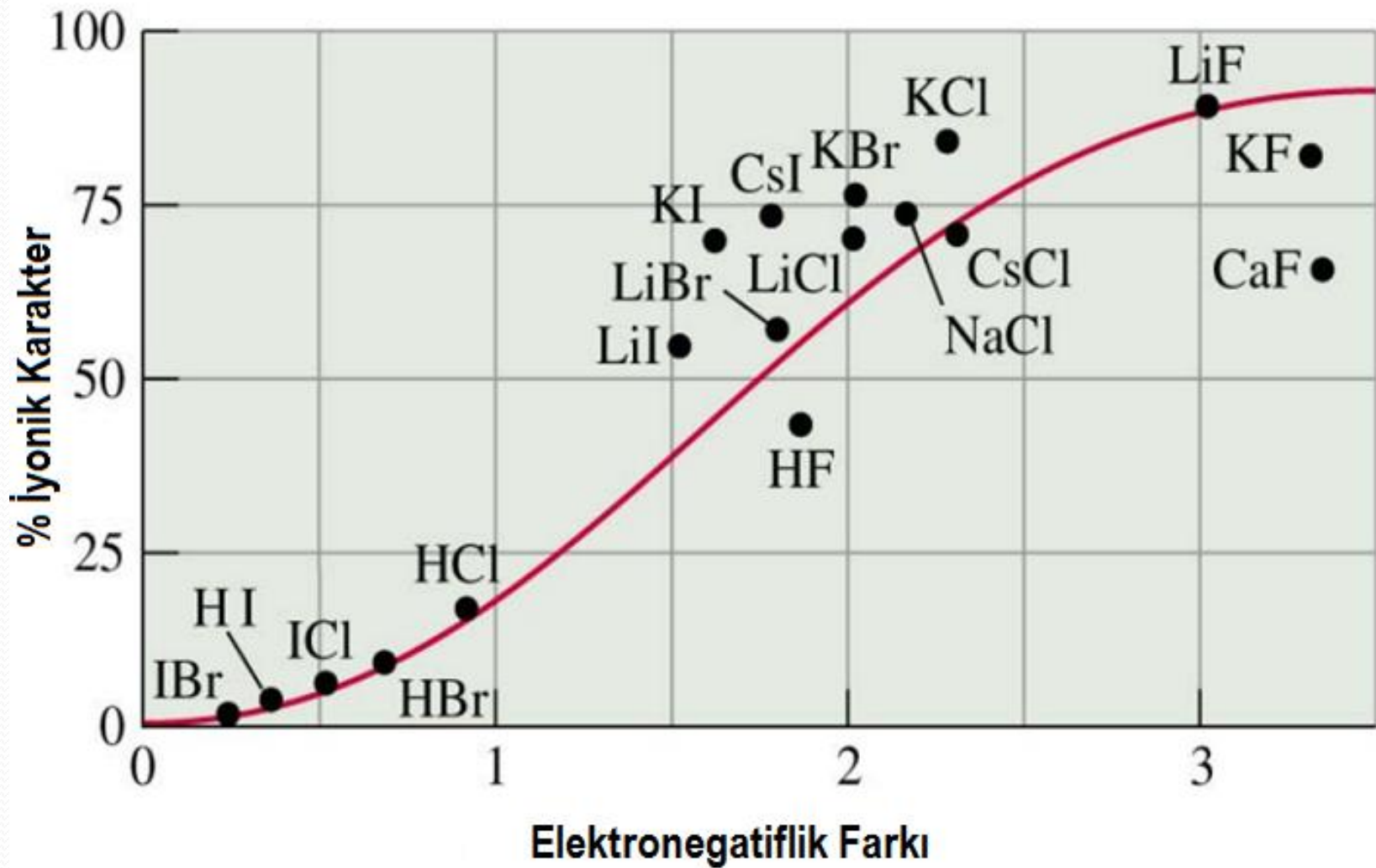
Elektronegatiflik ve Bağ Çeşidi

(Kimyasal Bağların İyonik-Kovalent Karakteri)

- Bağı oluşturan atomların bağ orbitallerindeki elektronları çekme kuvvetine **elektronegativite** denir. En elektronegatif atom Flor olup elektronegatifliği 4.0 olarak kabul edilmiştir.
- Atomlar arasındaki elektronegativite farkı 0 ise, bağ apolar kovalenttir.
- Atomlar arasındaki elektronegativite farkı 0 ile 2.0 arasında ise, bağ polar kovalenttir,
- Atomlar elektronegativite arasındaki farkı 2.0 den büyük ise, bağ iyoniktir.

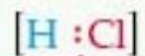
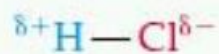
Bileşik	F ₂	HF	LiF
Elektronegativite farkı	$4.0 - 4.0 = 0$	$4.0 - 2.1 = 1.9$	$4.0 - 1.0 = 3.0$
Bağ tipi	Apolar kovalent	Polar kovalent	İyonik

CIF₇



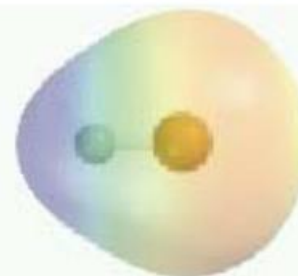


A nonpolar covalent bond

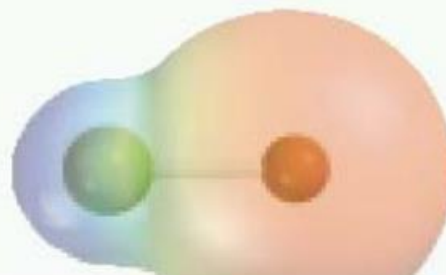


A polar covalent bond.

The bonding electrons are attracted more strongly by Cl than by H.

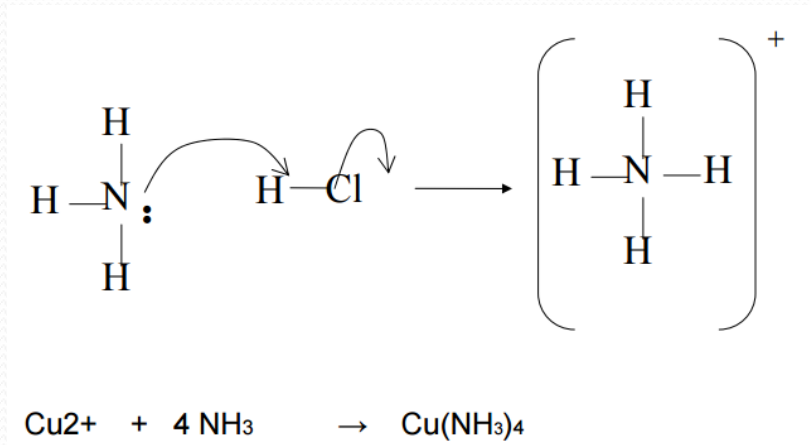


An ionic bond

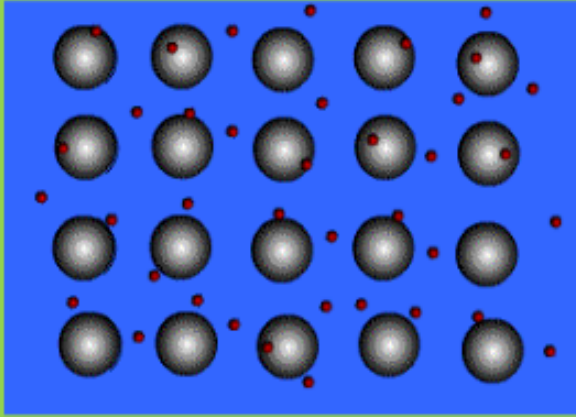


Koordine Kovalent Bağ

- Bir kimyasal bağda, bağı oluşturan elektronların her ikisi birden aynı atom tarafından veriliyorsa bu tür bağlar **koordine kovalent (koordinasyon) bağ** olarak adlandırılır.
- Bu tür bileşiklere de **kompleks** denir.



Metalik Baę



Metalik Baę: Metal atomlarını katı ve sıvı fazda bir arada tutan kuvvete denir. **Metalik baę,** metallerde bulunan az sayıda değerlik elektronunun görece çok sayıda olan boş değerlik orbitallerinde serbest hareket etmeleri sonunda oluşur.

Ancak dięer kimyasal baęlarda olduęu gibi metal elektron vermez. **Metalik baę,** meallerin elektron vermeye yatkın olmaları sebebiyle, metal elektronun komşu metalin boş orbitaline geçmesiyle oluştuęu var sayılır. Ancak bu elektronlar zayıfta olsa komşu atomun çekirdeğinin çekim alanına gireler fakat elektron alış veriş i yada ortaklaş a kullanılması gerçekleşmez. Deęerlik elektronları kristal içerisinde her yöne hareket etme imkanına sahiptir ve atoma deęil kristalin bütününe aittir.

Formal Yük

- **Formal Yük**, atomun valans elektronları ile, bağ sayısı ve bağ yapmayan elektronları arasındaki farktır.

$$FY = (\text{valans elektron sayısı}) - (\text{bağ sayısı} + \text{paylaşılmamış e sayısı})$$

Atomun değerlik (valans) elektronlarının sayısı = grup no,
bağ sayısı = $\frac{1}{2}(\text{bağ elektronları sayısı})$

- Nötr bir moleküldeki formal yüklerin toplamı 0 eşittir.
- poliatomik bir iyon için toplam formal yük iyonun yüküne eşit olur.
- Molekülde negatif yükler daha elektronegatif atomlar üzerinde olmalıdır.
- Atomlar genelde formal yüke sahip olmama veya mümkün olan en düşük formal yüke sahip olma eğilimindedir.



- Aşağıdaki moleküller veya iyonlar için Lewis yapılarını yazıp herbir türün formal yükünü hesaplayınız
- CO_2 , NO_3^- , NH_4^+ , HNO_3 , C_2H_4 , SO_4^{2-} , PCl_5 , SF_6 , NO , SOCl_2 , ICl_4

Lewis Yapısı Yazma

- İlk olarak molekülü oluşturan atomların toplam valans elektronları hesaplanır.
- Tahmini bir iskelet yapı çizilir **merkez atomla** (Merkez atom genelde en düşük elektronegativiteye sahip olan diğer atomların kendisi ile bağ yaptıkları atomdur) çevre atomlar (merkez atoma bağlanan atomlar, H gibi) arasına tekli bağ çizilir.
- Çevre atomların etrafına oktet kuralına uygun olarak elektronlar yerleştirilir.
- Toplam valans elektron sayısından fazla kalan elektronlar ile merkez atomun oktetini tamamlanır.
- Eğer merkez atomun oktetini tamamlayacak kadar elektron artmaz ise, merkez atomla çevre atomlar arası çoklu bağ eklenir. Karbon, Azot, Oksijen ve Kükürt atomları çoklu bağ yapma eğilimindedir.

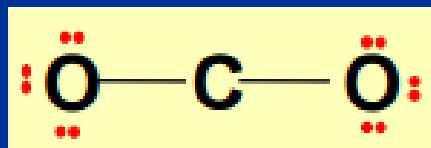
Karbon Dioksit, CO₂

$$V : 4 + 2 \times 6 = 16 e^-$$



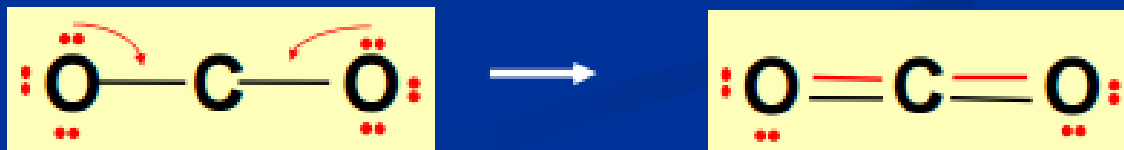
12 elektron geri kalır.

Geri kalan elektronlar dış atomlar üzerine konur.



C atomu oktetini sağlamaz.

C ve O atomları arasında çift bağlar konarak, C atomunun oktetini sağlanır.



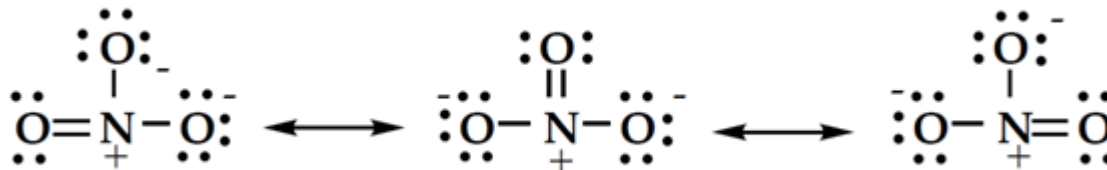
CO₂ molekülünde Oksijen ve karbon atomlarının formal yükleri şöyle bulunur:

$$\text{FYO} = 6 - (4 + 2) = 0$$

$$\text{FYC} = 4 - (0 + 4) = 0$$

Rezonans

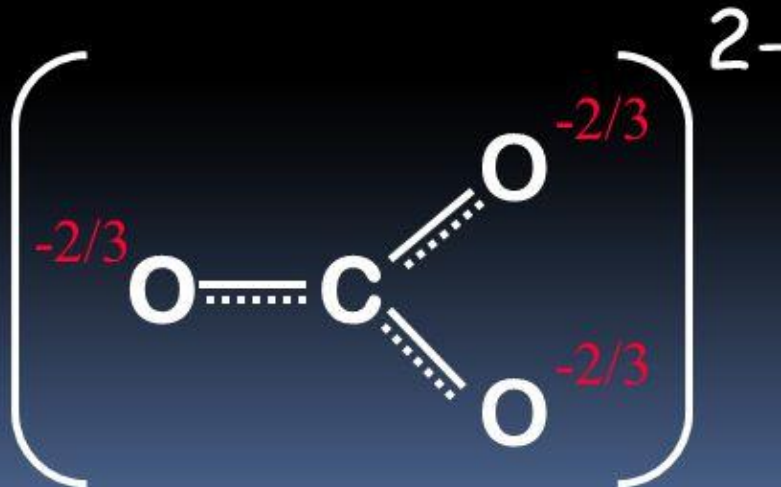
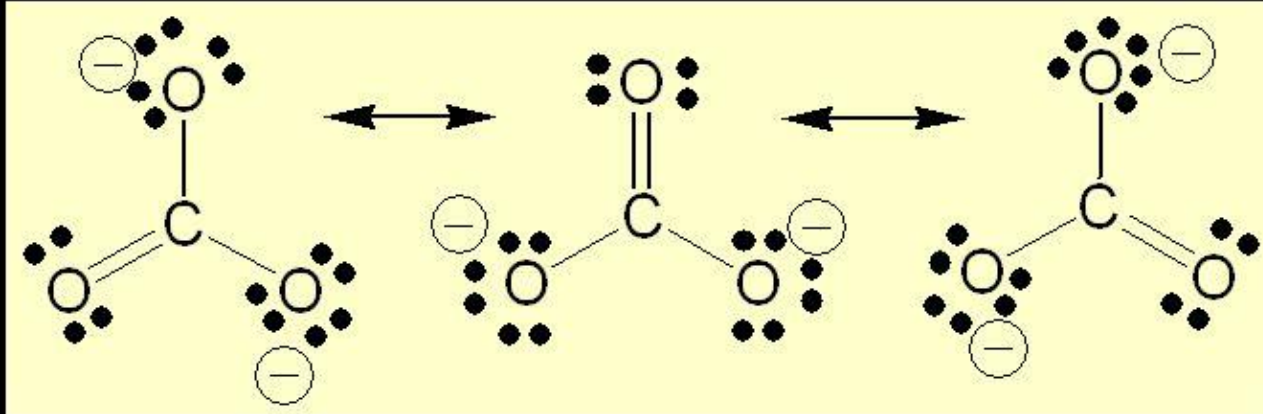
- Bazen tek bir Lewis yapısı kesin bir şekilde molekülün doğru yapısını temsil etmez ve bir molekül için elektronların farklı dağıldığı birden fazla Lewis yapısı yazılabilir.
- Elektronların farklı dağılabileceği yapılar birbirinin **rezonansı** olarak adlandırılır.





C=O 1.22 Å
C—O 1.43 Å

kısa
uzun

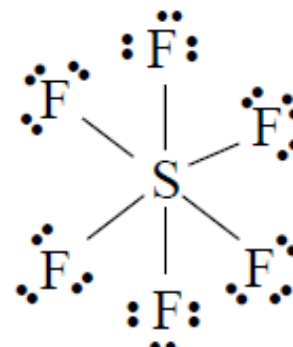
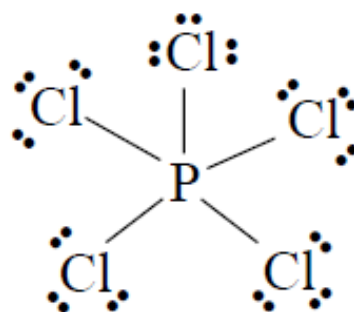
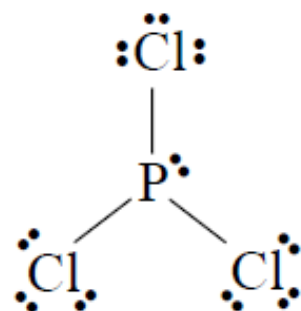
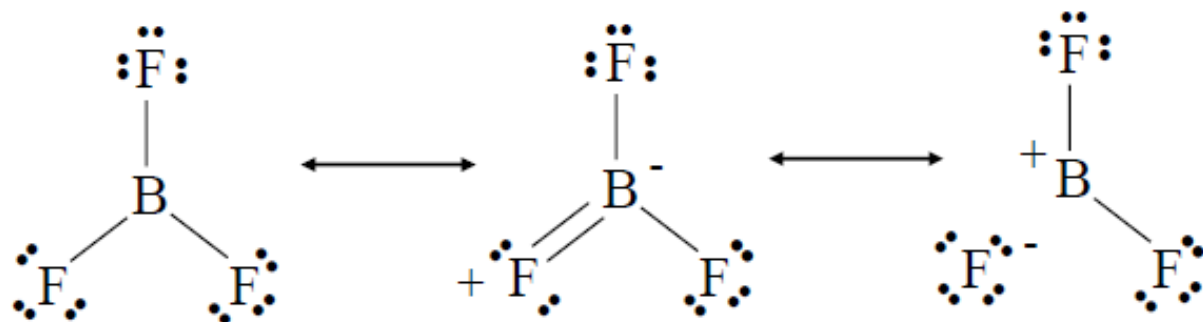
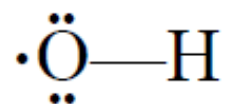
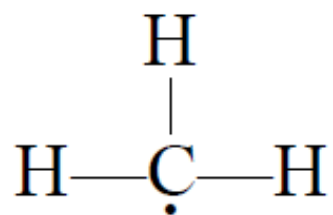


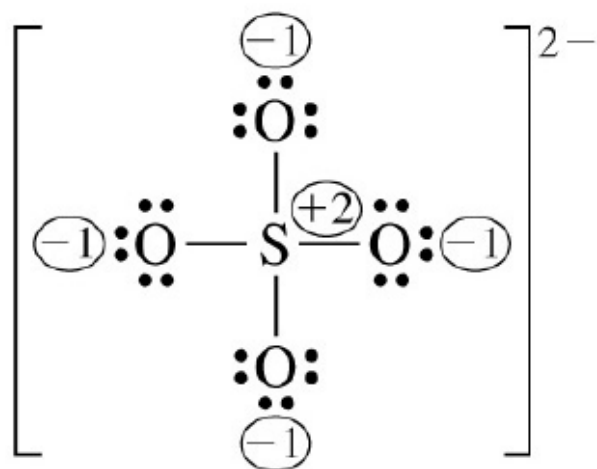
Bütün bağ uzunlukları eşit
ve
1.30 Å

$$\text{Bond Order} = \frac{2 + 1 + 1}{3 \text{ structures}} = 1\frac{1}{3}$$

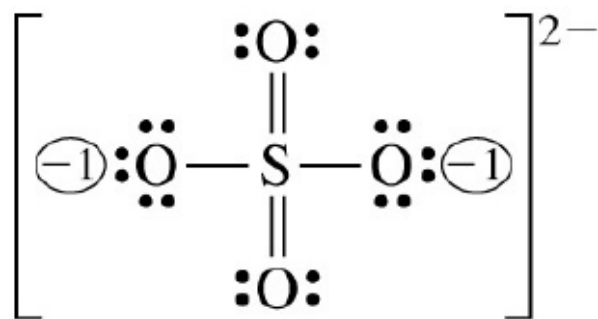
oktet kuralında istisnalar

- Tekli sayıda elektron içeren türler (radikaller), $\text{NO}\cdot$
- Tamamlanamayan oktetler , BF_3
- Okteti aşan türler , PCl_5 , SF_6





Normal octet



Expanded valence
shell

Dipol moment ve molekül yapısı

Bazı durumlarda molekül içindeki bağlar polar olmakla beraber molekül apolar özellik gösterebilir. Molekülün polar veya apolar olması yük dağılımına göre açıklanır.

- Molekülün şekli
- Bağların polaritesi

Polar Molekül (dipol)

Moleküldeki artı yük merkezi ile eksi yük merkezi dengede değildir. Bir tarafı eksi diğer tarafı artı yük özelliği gösterir

Apolar molekül

Molekülün uçlarında yük taşımayan

Veya uç kısımlarında aynı işaretli yük olan moleküller

soru CH_4 , CH_3Cl moleküllerinin polaritelerini açıklayınız