

MOLEKÜL GEOMETRİSİ

VSEPR Kuramı

Molekül geometrilerinin tahmin edilmesinde kullanılan VSEPR Kuramı elektron çiftlerinin birbirini itmesi ilkesinden yararlanır.

VSEPR'e (Değerlik Katmanlı Elektron Çifti İtme Kuramı) göre:

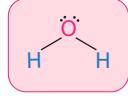
Bağ elektronları ile bağa katılmayan elektron çiftleri birbirine itme uygulayarak atomların en uzak konumlarda bulunmasını sağlar. Böylece itme en az düzeye iner ve molekül geometrisi ortaya çıkar.

Moleküllerin VSEPR gösteriminde,

A: Merkez atomu,

X: Merkez atoma bağlı atom ya da atom gruplarını,

E: Merkez atomun çevresindeki ortaklanmamış elektron çiftlerini gösterir.

H₂O molekülünün Lewis yapısı ve VSEPR gösterimini inceleyelim:

O: Merkez atom (A)

H: Merkez atoma bağlı çevre atom (X)

(••): Merkez atomdaki ortaklanmamış e⁻ çifti

Merkez atoma 2 tane H bağlı olduğundan X₂ olarak gösterilir. Merkez atomda ortaklanmamış 2 tane e⁻ çifti olduğundan E₂ şeklinde gösterilir. Buna göre, H₂O molekülünün VSEPR gösterimi yandaki gibi olur.

AX₂E₂H₂O'nun VSEPR gösterimi

2. PERİYOT ELEMENTLERİNİN HİBRİTLEŞMESİ

2. periyotta yer alan Be, B, C, N, O elementlerinin H atomuyla yaptığı bileşiklerin molekül geometrileri ve hibritleşmeleri incelenecektir.

BeH ₂	sp 180° AX ₂	BH ₃	sp ² 120° AX ₃	CH ₄	sp ³ 109,5° AX ₄	NH ₃	sp ³ 107° AX ₃ E	H ₂ O	sp ³ 104,5° AX ₂ E ₂
------------------	-------------------------------	-----------------	--	-----------------	--	-----------------	--	------------------	---

BeH₂ Molekülü

Molekülde merkez atom berilyumdur. Atom numarası 4 olan berilyum elementinin elektron dizilimi aşağıdaki gibidir.

${}_4\text{Be}: 1s^2 2s^2 2p_x^0 2p_y^0 2p_z^0$

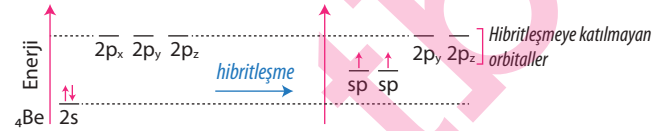


Berilyumun 2s ve 2p orbitalleri, bağ yapabilmek için 2s'den 2p'ye bir elektron vererek hibritleşir ve sp hibrit orbitallerini oluşturur.

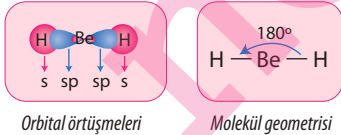
${}_4\text{Be}: 1s^2 2(sp)^1 2(sp)^1 2p_y^0 2p_z^0$



Be atomunun sp hibrit orbitallerinin enerji seviyeleri aşağıda gibidir.



sp hibrit orbitalleri BeH₂ molekülünde sigma bağlarını oluşturur. Molekülün geometrisi ve orbital örtüşmeleri aşağıdaki gibidir.



Merkez atomu: Be
Hibritleşme: sp
Molekül geometrisi: Doğrusal
Bağ açısı: 180°
Orbitalerin örtüşme türü: sp-s
VSEPR gösterimi: AX₂
Molekülün polarlığı: Apolar

BH₃ Molekülü

Molekülde merkez atom bordur. Atom numarası 5 olan bor elementinin elektron dizilimi aşağıdaki gibidir.

${}_5\text{B}: 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^0 2p_z^0$

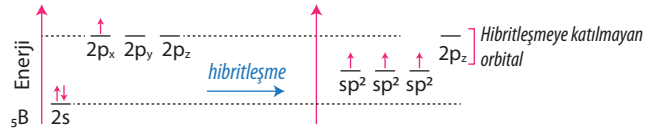


Bor atomu 3 bağ yapmak için hibritleşerek sp² hibrit orbitallerini oluşturur.

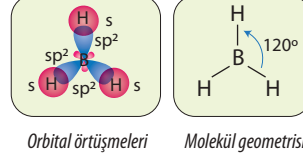
${}_5\text{B}: 1s^2 2(sp^2)^1 2(sp^2)^1 2(sp^2)^1 2p_z^0$



B atomunun sp² hibrit orbitallerinin enerji seviyeleri aşağıda gibidir.



Bor atomunun sp² hibrit orbitalleri ve hidrojenin s orbitalleri uç uca örtüşerek 3 tane sigma bağı oluşturur.



Merkez atomu: B
Hibritleşme: sp²
Geometri: Düzlem üçgen
Bağ açısı: 120°
Orbitalerin örtüşme türü: sp²-s
VSEPR gösterimi: AX₃
Molekülün polarlığı: Apolar

CH₄ Molekülü

Molekülde merkez atom karbondur. Atom numarası 6 olan karbon elementinin elektron dizilimi aşağıdaki gibidir.

${}_6\text{C}: 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$

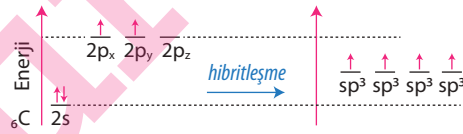


Karbon atomu 4 bağ yapabilmek için hibritleşerek sp³ hibrit orbitallerini oluşturur.

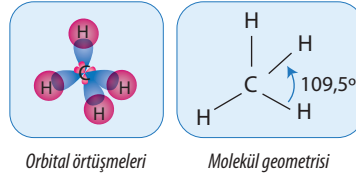
${}_6\text{C}: 1s^2 2(sp^3)^1 2(sp^3)^1 2(sp^3)^1 2(sp^3)^1$



C atomunun sp³ hibrit orbitallerinin enerji seviyeleri aşağıda gibidir.



Karbon atomunun sp³ hibrit orbitalleri ile hidrojenin s orbitalleri uç uca örtüşerek 4 sigma bağı oluşturur.



Merkez atomu: C
Hibritleşme: sp³
Geometri: Düzgün dörtyüzlü
Bağ açısı: 109,5°
Orbitalerin örtüşme türü: sp³-s
VSEPR gösterimi: AX₄
Molekülün polarlığı: Apolar

NH₃ Molekülü

Molekülde merkez atom azottur. Atom numarası 7 olan azot elementinin elektron dizilimi aşağıdaki gibidir.

${}_7\text{N}: 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$

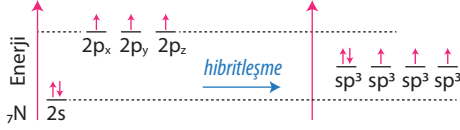


Azot atomunda 2s ve 2p orbitalleri hibritleşerek sp³ hibrit orbitallerini oluşturur.

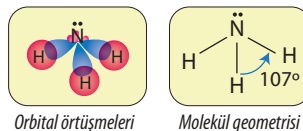
${}_7\text{N}: 1s^2 2(sp^3)^1 2(sp^3)^1 2(sp^3)^1 2(sp^3)^1$



N atomunun sp³ hibrit orbitallerinin enerji seviyeleri aşağıda gibidir.



Azot atomunun sp³ hibrit orbitalleri ile hidrojenin s orbitalleri uç uca örtüşerek 3 sigma bağı oluşturur.



Merkez atomu: N
Hibritleşme: sp³
Geometri: Üçgen piramit
Bağ açısı: 107°
Orbitalerin örtüşme türü: sp³-s
VSEPR gösterimi: AX₃E
Molekülün polarlığı: Polar