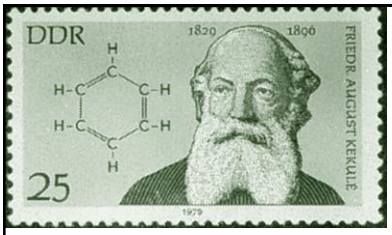
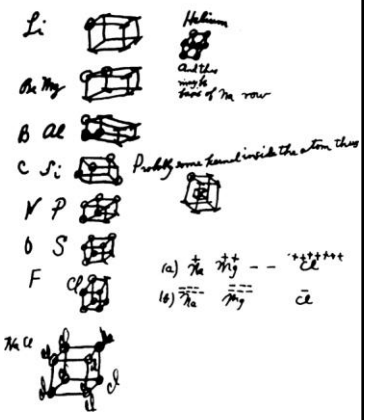


Chemical Bonding I: Basic Concepts

Chapter 9



Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

الکترون های ظرفیتی، الکترون های بیرونی ترین لایه یک اتم هستند که در پیوند شیمیایی مشارکت می کنند.

Group	e^- configuration	# of valence e^-
1A	ns^1	
2A	ns^2	
3A	ns^2np^1	
4A	ns^2np^2	
5A	ns^2np^3	
6A	ns^2np^4	
7A	ns^2np^5	

2

نماد الکترون–نقطه ای لوئیس برای نشان دادن عناصر و گازهای نجیب

1 1A	2 2A	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8	9 8B	10	11 1B	12 2B	13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A
·H																	He:
·Li	·Be·											·B·	·C·	·N·	·O·	:F·	:Ne:
·Na	·Mg·											·Al·	·Si·	·P·	·S·	:Cl·	:Ar:
·K	·Ca·											·Ga·	·Ge·	·As·	·Se·	:Br·	:Kr:
·Rb	·Sr·											·In·	·Sn·	·Sb·	·Te·	:I·	:Xe:
·Cs	·Ba·											·Tl·	·Pb·	·Bi·	·Po·	:At·	:Rn:
·Fr	·Ra·																

3

پیوند یونی

نیروی الکتروستاتیکی که یون ها را در یک ترکیب یونی در کنار یکدیگر نگه می دارد.

$$\cdot Li + :\ddot{F}\cdot \longrightarrow$$

$$\cdot Li \longrightarrow Li^+ + e^-$$

$$e^- + :\ddot{F}\cdot \longrightarrow :\ddot{F}:^-$$

$$Li^+ + :\ddot{F}:^- \longrightarrow Li^+:\ddot{F}:^-$$

4

انرژی شبکه

انرژی شبکه (U): مقدار انرژی لازم برای جدا کردن کامل یک مول از یک ترکیب یونی جامد به یون های گازی آن است.

$$E = k\frac{Q_+Q_-}{r}$$

E انرژی پتانسیل

Q_+ بار روی کاتیون

Q_- بار روی آنیون

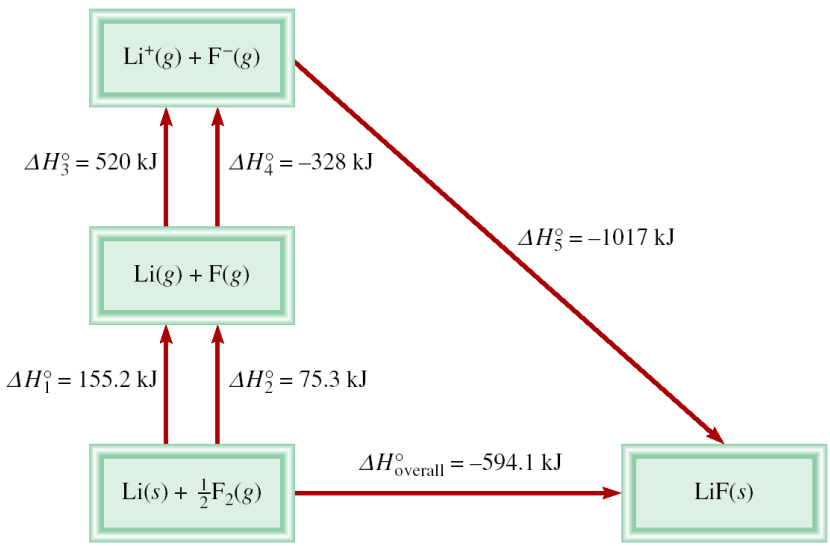
r فاصله بین یون ها

Lattice energy increases as ***Q increases*** and/or as ***r decreases***.

Compound	Lattice Energy (kJ/mol)
MgF_2	2957
MgO	3938
LiF	1036
LiCl	853

5

چرخه بورن–هابر برای مشخص کردن انرژی شبکه



$$\Delta H^o_{overall} = \Delta H^o_1 + \Delta H^o_2 + \Delta H^o_3 + \Delta H^o_4 + \Delta H^o_5$$

6

TABLE 9.1 Lattice Energies and Melting Points of Some Alkali Metal and Alkaline Earth Metal Halides and Oxides

Compound	Lattice Energy (kJ/mol)	Melting Point (°C)
LiF	1017	845
LiCl	828	610
LiBr	787	550
LiI	732	450
NaCl	788	801
NaBr	736	750
NaI	686	662
KCl	699	772
KBr	689	735
KI	632	680
$MgCl_2$	2527	714
Na_2O	2570	Sub*
MgO	3890	2800

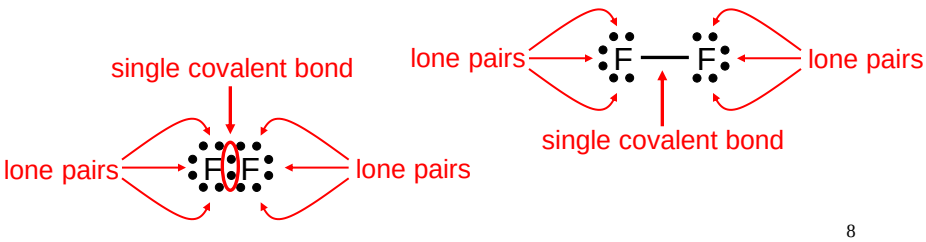
*Na_2O sublimes at 1275°C.

7

پیوند کووالانسی، یک پیوند شیمیایی است که در آن دو یا تعداد بیشتری الکترون توسط دو اتم به اشتراک گذاشته شده است.

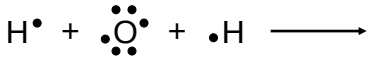
Why should two atoms share electrons?

Lewis structure of F_2

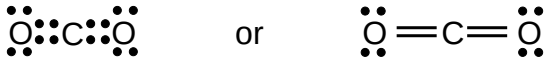


8

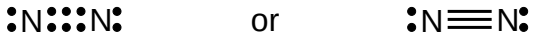
Lewis structure of water



Double bond – two atoms share two pairs of electrons



Triple bond – two atoms share three pairs of electrons



9

طول پیوند کووالانسی

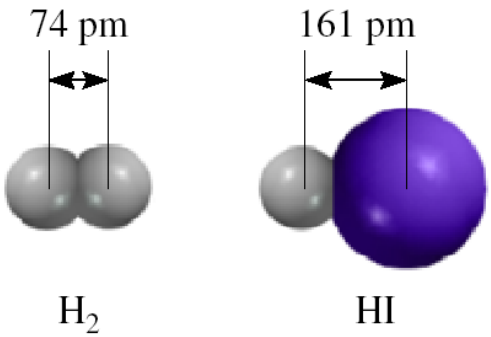


TABLE 9.2
Average Bond Lengths of Some Common Single, Double, and Triple Bonds

Bond Type	Bond Length (pm)
C—H	107
C—O	143
C═O	121
C—C	154
C═C	133
C≡C	120
C—N	143
C═N	138
C≡N	116
N—O	136
N═O	122
O—H	96

طول پیوند

Triple bond < Double Bond < Single Bond

10

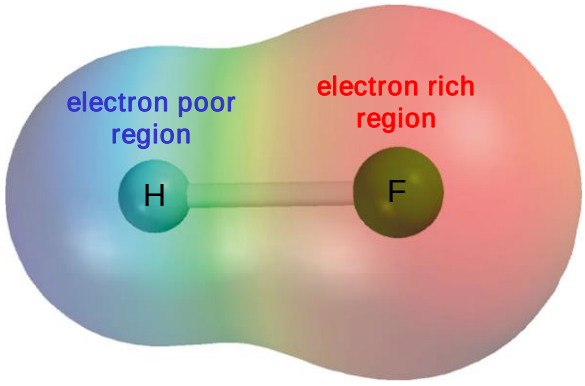
TABLE 9.3 Comparison of Some General Properties of an Ionic Compound and a Covalent Compound

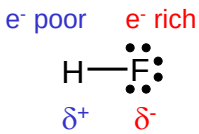
Property	NaCl	CCl_4
Appearance	White solid	Colorless liquid
Melting point (°C)	801	−23
Molar heat of fusion* (kJ/mol)	30.2	2.5
Boiling point (°C)	1413	76.5
Molar heat of vaporization* (kJ/mol)	600	30
Density (g/cm^3)	2.17	1.59
Solubility in water	High	Very low
Electrical conductivity		
Solid	Poor	Poor
Liquid	Good	Poor

*Molar heat of fusion and molar heat of vaporization are the amounts of heat needed to melt 1 mole of the solid and to vaporize 1 mole of the liquid, respectively.

11

پیوند کووالانسی قطبی یا پیوند قطبی، یک پیوند کووالانسی با چگالی الکترونی بیشتر در اطراف یکی از اتم ها است.





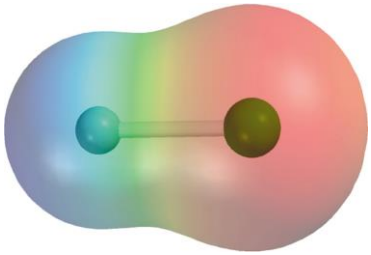
12

الکترونگاتیوی، میزان توانایی نسبی یک اتم در یک مولکول برای جذب جفت الکترون پیوندی به سوی خود است.

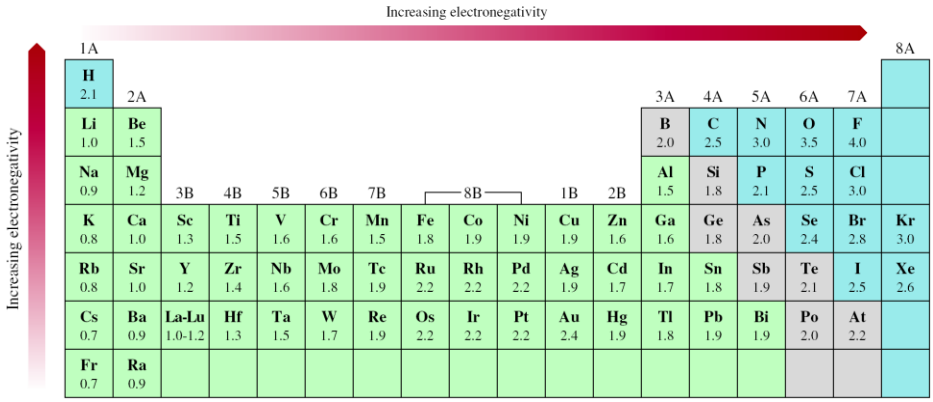
Electron Affinity - measurable, Cl is highest

$$X_{(g)} + e^- \longrightarrow X^-_{(g)}$$

Electronegativity - relative, F is highest

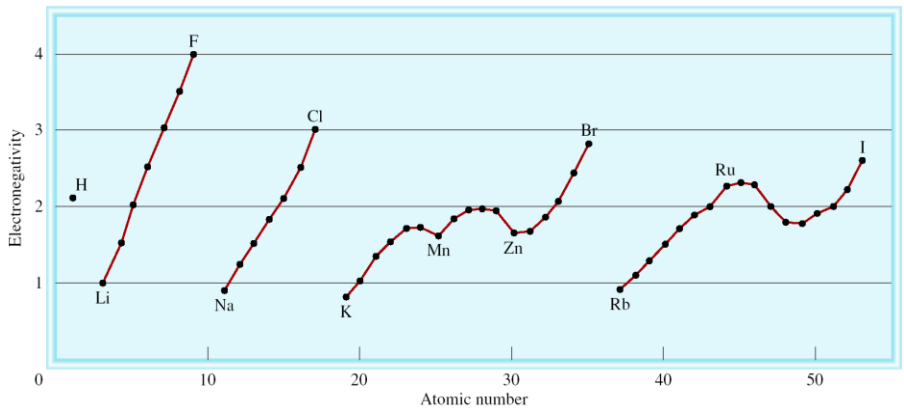


The Electronegativities of Common Elements



14

تغییر الکترونگاتیوی با عدد اتمی



15

Section 8.2

Electronegativity

Exercise

Arrange the following bonds from most to least polar:

a) N–F O–F C–F

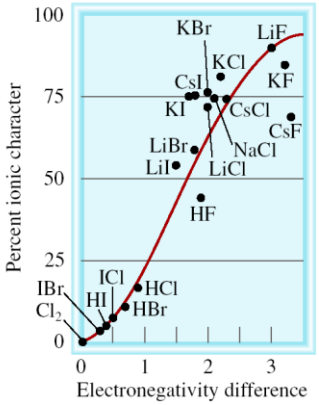
b) C–F N–O Si–F

c) Cl–Cl B–Cl S–Cl

Return to TOC

16

طبقه بندی پیوندها توسط تفاوت در الکترونگاتیوی



Difference	Bond Type
0	Covalent
≥ 2	Ionic
0 < and <2	Polar Covalent

افزایش تفاوت در الکترونگاتیوی

Covalent → Polar Covalent → Ionic

share e^- — partial transfer of e^- — transfer e^-

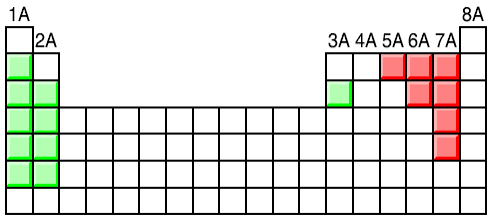
17

Classify the following bonds as ionic, polar covalent, or covalent: The bond in CsCl; the bond in H_2S; and the NN bond in H_2NNH_2.

Cs – 0.7 Cl – 3.0

H – 2.1 S – 2.5

N – 3.0 N – 3.0



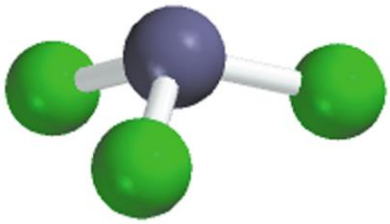
18

رسم ساختار لوئیس

1. ساختار اسکلتی ترکیب را که نشان می دهد چه اتم هایی با یکدیگر پیوند داده اند را رسم کنید. اتم دارای کمترین الکترونگاتیویته را در مرکز قرار دهید.
2. تعداد کل الکترون های ظرفیتی را حساب کنید. به ازای هر بار منفی ۱ الکترون اضافه کنید. به ازای هر بار مثبت یک الکترون کم کنید.
3. برای همه اتم ها بجز **هیدروژن**، هشت الکترون قرار دهید.
4. اگر ساختار شامل الکترون های بیشتری از تعداد کل الکترون های ظرفیتی است، پیوند دوگانه و سه گانه برای اتم مرکزی مورد نیاز است.

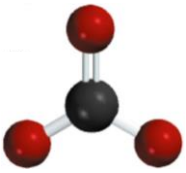
19

Write the Lewis structure of nitrogen trifluoride (NF_3).



20

Write the Lewis structure of the carbonate ion (CO_3^{2-}).



21

Section 8.10

Lewis Structures

Concept Check

Draw a Lewis structure for each of the following molecules:

NH_3

CO_2

CCl_4

Return to TOC

Copyright © Cengage Learning. All rights reserved

22

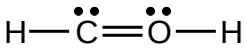
دو ساختار اسکلتی ممکن برای برای فرمالدهید (CH_2O):

بار قراردادی یک اتم، تفاوت بین تعداد الکترون های ظرفیتی یک اتم در حالت آزاد و تعداد الکترون های اختصاص داده شده به اتم در ساختار لوئیس است.

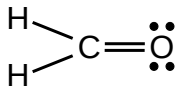
$$\text{بار قرار دادی یک اتم در ساختار لوئیس} = \text{تعداد الکترون های ظرفیتی اتم در حالت آزاد} - \text{تعداد کل الکترون های ناپیوندی} - \frac{1}{2}\left(\text{تعداد کل الکترون های پیوندی}\right)$$

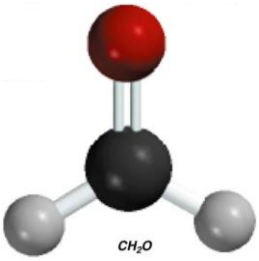
جمع بار قراردادی اتم ها در یک مولکول یا یون، باید برابر با بار یون یا مولکول باشد.

23



24



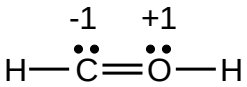


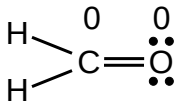
25

بار قراردادی و ساختار لوئیس

1. برای مولکول های خنثی، ساختار لوئیسی که بار قراردادی بر روی اتم های آن وجود ندارد نسبت به ساختاری که دارای بار قراردادی است، ارجح می باشد.
2. ساختار لوئیس با بار قراردادی کوچک نسبت به ساختاری با بار قراردادی بزرگ احتمال بیشتری دارد.
3. در ساختارهای لوئیس دارای بار قراردادی مشابه، ساختاری صحیح است که در آن بار منفی بر روی اتم الکترونگاتیوتر باشد.

Which is the most likely Lewis structure for CH_2O?





26

Section 8.12

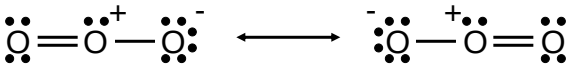
Resonance

Concept Check

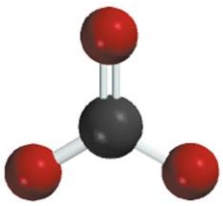
Consider the Lewis structure for $POCl_3$. Assign the formal charge for each atom in the molecule.

Return to TOC

Copyright © Cengage Learning. All rights reserved



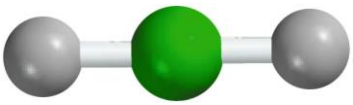
What are the resonance structures of the carbonate (CO_3^{2-}) ion?



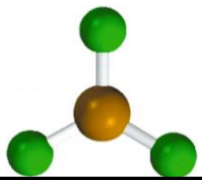
استثناهای قاعده هشت تایی

هشت تایی های کامل نشده

BeH_2



BF_3



29

استثناهای قاعده هشت تایی

مولکول با الکترون های فرد

NO

بیش از هشت الکترون (اتم مرکز ی با عدد کوانتوم اصلی بزرگتر از ۲) $(n > 2)$

SF_6

30

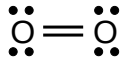
تغییر آنتالپی مورد نیاز برای شکستن یک مول از مولکول های گازی یک پیوند خاص را **آنتالپی پیوند** گویند.

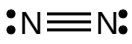
Bond Enthalpy

$H_{2\,(g)} \longrightarrow H_{(g)} + H_{(g)} \quad \Delta H^0 = 436.4\ kJ$

$Cl_{2\,(g)} \longrightarrow Cl_{(g)} + Cl_{(g)} \quad \Delta H^0 = 242.7\ kJ$

$HCl_{(g)} \longrightarrow H_{(g)} + Cl_{(g)} \quad \Delta H^0 = 431.9\ kJ$

$O_{2\,(g)} \longrightarrow O_{(g)} + O_{(g)} \quad \Delta H^0 = 498.7\ kJ$ 

$N_{2\,(g)} \longrightarrow N_{(g)} + N_{(g)} \quad \Delta H^0 = 941.4\ kJ$ 

31

میانگین آنتالپی پیوند در مولکول های چند اتمی

$H_2O_{(g)} \longrightarrow H_{(g)} + OH_{(g)} \quad \Delta H^0 = 502\ kJ$

$OH_{(g)} \longrightarrow H_{(g)} + O_{(g)} \quad \Delta H^0 = 427\ kJ$

$$\text{Average OH bond enthalpy} = \frac{502 + 427}{2} = 464\ kJ$$

TABLE 9.4 Some Bond Enthalpies of Diatomic Molecules* and Average Bond Enthalpies for Bonds in Polyatomic Molecules

Bond	Bond Enthalpy (kJ/mol)	Bond	Bond Enthalpy (kJ/mol)
H—H	436.4	C—S	255
H—N	393	C═S	477
H—O	460	N—N	193
H—S	368	N═N	418
H—P	326	N≡N	941.4
H—F	568.2	N—O	176
H—Cl	431.9	N═O	607
H—Br	366.1	O—O	142
H—I	298.3	O═O	498.7
C—H	414	O—P	502
C—C	347	O═S	469
C═C	620	P—P	197
C≡C	812	P═P	489
C—N	276	S—S	268
C═N	615	S═S	352
C≡N	891	F—F	156.9
C—O	351	Cl—Cl	242.7
C═O†	745	Br—Br	192.5
C—P	263	I—I	151.0

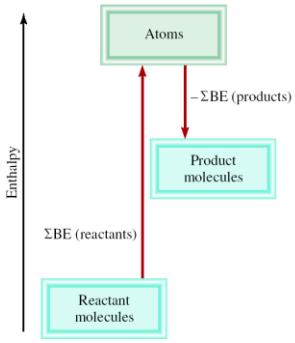
*Bond enthalpies for diatomic molecules (in color) have more significant figures than bond enthalpies for bonds in polyatomic molecules because the bond enthalpies of diatomic molecules are directly measurable quantities and not averaged over many compounds.

†The C═O bond enthalpy in CO_2 is 799 kJ/mol.

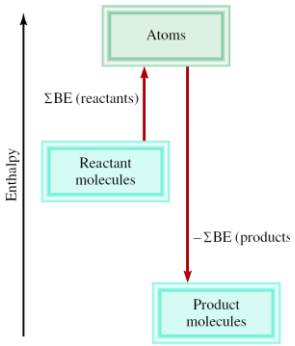
32

تغییرات آنتالپی در واکنش ها و آنتالپی پیوند ها (BE)

تصور کنید که در یک واکنش ابتدا تمام پیوندها در واکنش دهنده ها شکسته می شود و سپس تمام پیوندها در محصولات تشکیل می شود:



گرماگیر



گرمازا

33

با استفاده از آنتالپی های پیوند، تغییرات آنتالپی را برای واکنش زیر محاسبه کنید

$$H_{2\,(g)} + F_{2\,(g)} \longrightarrow 2HF_{\,(g)}$$

34