



## KUANTUM KİMYASI FİNAL SINAVI

26.06.2017

NO :

AD SOYAD :

İMZA

| SORU NO | 1 | 2 | 3 | 4 | Toplam |
|---------|---|---|---|---|--------|
| PUAN    |   |   |   |   |        |

- 10 A luk tek boyutlu kutudaki bulunan elektronun 2. enerji seviyesindeki sahip olacağı enerji büyüklüğünü hesaplayınız. Bu elektrona eşlik eden dalganın kutu içindeki değişimini gösteriniz.
- Hückel Molekül Orbital yaklaşımını kullanarak siklobütadien, , molekülü için enerji seviyelerini hesaplayarak  $\pi$ -elektronlarını bu orbitallere uygun şekilde dağıtınız.
- Denge bağ uzunluğu 1.27 A olan HCl molekülünün ilk 2 dönme enerji seviyesi için molekülün dönme enerjisini, dönme frekansını, dalgaboyunu ve dalga sayısını hesaplayınız.
- 880 N m<sup>-1</sup> bağ kuvvetine sahip HF molekülünün titreşim frekansını ve dalga sayısını hesaplayınız?

Planck Sabiti :  $6.626 \times 10^{-34}$  J s. , Boltzmann Sabiti :  $1.3807 \times 10^{-23}$  J K<sup>-1</sup>  
Elektronun kütlesi =  $9.1 \times 10^{-31}$  kg  
C = 299292458 ms<sup>-1</sup>  
Watt = 1 J s<sup>-1</sup>  
1.0 eV =  $1.6 \times 10^{-19}$  J  
1 akb =  $1.67377 \times 10^{-27}$  kg.  
 $m_H$  : 1.008 g mol<sup>-1</sup>.  
 $m_F$  : 18.998 g mol<sup>-1</sup>.

*SINAV SÜRESİ 90 DAKİKADIR.*

*BAŞARILAR.*

## ÇÖZÜM 1:

Tek boyutlu kutudaki taneciğin enerjisi  $n = 1, 2, 3, \dots$  gibi tamsayılar olmak üzere;

$$E = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}$$

eşitliğinden hesaplanabilir.

$$E_2 = \frac{(6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2 (2)^2}{8(9.100 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.000 \times 10^{-9} \text{ m})^2} = 2.412 \times 10^{-19} \text{ J}.$$

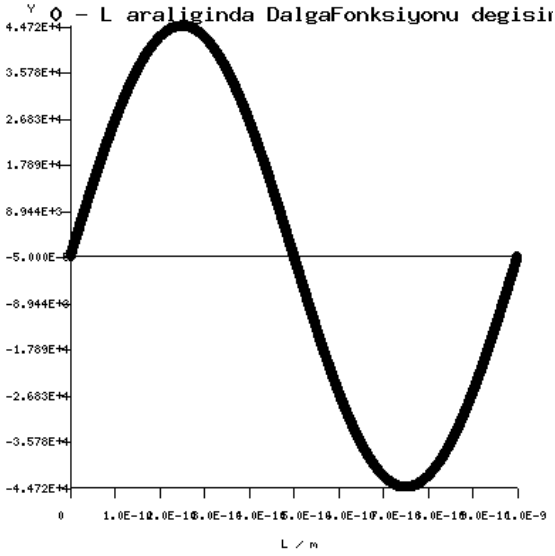
Dalga fonksiyonu ;

$$\Psi_n = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}\chi\right)$$

olduğundan 2 . enerjisi seviye için ;

$$\Psi_2 = \left(\frac{2}{(1.000 \times 10^{-9} \text{ m})}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{(2)\pi}{(1.000 \times 10^{-9} \text{ m})}\chi\right)$$

$\chi$  e 0 ile L arasında değerler verilerek aşağıdaki grafik elde edilebilir.



## ÇÖZÜM 2:

02. Hückel molekül orbital yaklaşımına göre siklobütadien,  $\square$ , molekülü için seküler determinat

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 & \beta \\ \beta & \alpha - E & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha - E & \beta \\ \beta & 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0 \quad \begin{vmatrix} \frac{\alpha-E}{\beta} & 1 & 0 & 1 \\ 1 & \frac{\alpha-E}{\beta} & 1 & 0 \\ 0 & 1 & \frac{\alpha-E}{\beta} & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \frac{\alpha-E}{\beta} \end{vmatrix} = 0 \quad \frac{\alpha-E}{\beta} = X \text{ olursa; } \begin{vmatrix} X & 1 & 0 & 1 \\ 1 & X & 1 & 0 \\ 0 & 1 & X & 1 \\ 1 & 0 & 1 & X \end{vmatrix} = 0$$

olarak elde edilir. Bu determinattan;

$$X \begin{vmatrix} X & 1 & 0 \\ 1 & X & 1 \\ 0 & 1 & X \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & X & 1 \\ 1 & 1 & X \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & X & 1 \\ 0 & 1 & X \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 0$$

$$X^2 \begin{vmatrix} X & 1 \\ 1 & X \end{vmatrix} - X \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 0 & X \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} X & 1 \\ 1 & X \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & X \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & X \\ 0 & 1 \end{vmatrix} + X \begin{vmatrix} 0 & X \\ 1 & 1 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = 0$$

$$X^4 - X^2 - X^2 - X^2 + 1 - 1 - 1 - X^2 + 1 = 0$$

$$X^4 - 4X^2 = 0$$

$$X^2(X^2 - 4) = 0$$

$$X^2 = 0 \text{ ve } X^2 = 4$$

$$X = 0, \quad X = 0, \quad X = +2, \quad X = -2$$

$$E_4 = \alpha - 2\beta \quad (\text{Antibağ orbitali})$$

$$E_2 = \alpha, E_3 = \alpha \quad (\text{nonbonding orbitali ayrıca dejenere enerji seviyeleri})$$

$$E_1 = \alpha + 2\beta \quad (\text{bağ orbitali})$$

4 p elektronundan ikisi en düşük enerjili orbital  $E_1$  enerji seviyesine, diğer iki elektronda  $E_2$  ve  $E_3$  orbitallerine tek olarak gireceklerdir.

### ÇÖZÜM 3:

03. Denge bağ uzunluğu 1.27 Å olan HCl molekülünün ilk 2 dönme enerji seviyesi için molekülün dönme enerjisini, dönme frekansını, dalgaboyunu ve dalga sayısını hesaplayınız.

Dönme hareketi yapan bir molekülün dönme enerjisi

$$E = \frac{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2}{2I} (L+1)L$$

$$E = \frac{h^2}{8\pi^2 I} (L+1)L$$

eşitliğinden hesaplanabilir. Eylemsizlik momenti  $I = \mu R_e^2$

olduğundan

$$E = \frac{h^2}{8\pi^2 \mu R_e^2} (L+1)L$$

olarak yazılabilir. HCl molekülü için;

$$\frac{1}{\mu_{HCl}} = \frac{1}{\mu_H} + \frac{1}{\mu_{Cl}}$$

$$\frac{1}{\mu_{HCl}} = \frac{6.022140857 \times 10^{+23}}{1.008 \times 10^{-3} \text{ kg}} + \frac{6.022140857 \times 10^{+23}}{3.545 \times 10^{-2} \text{ kg}}$$

$$\mu_{HCl} = 1.628 \times 10^{-27} \text{ kg.}$$

$$Sabit = \frac{h^2}{8\pi^2 \mu R_e^2}$$

$$Sabit = \frac{(6.626 \times 10^{-34} \text{ J. s.})^2}{8\pi^2 (1.628 \times 10^{-27} \text{ kg.})(1.270 \times 10^{-10})^2} = 2.118 \times 10^{-22} \text{ J.}$$

HCl molekülü için

$$E = (2.118 \times 10^{-22} \text{ J.})(L+1)L$$

olarak hesaplanabilir. Dönme frekansı ise;

$$E = h\nu = (2.118 \times 10^{-22} \text{ J.})(L+1)L$$

olduğundan dönme frekansı kuantum sayılarına bağlı olarak;

$$\nu = (3.196 \times 10^{+11} \text{ s}^{-1})(L+1)L$$

şeklinde hesaplanabilir. Bu dönme frekanslarına karşı gelecek dalgaboyu ise;

$$\lambda = \frac{2.998 \times 10^8 \text{ m. s}^{-1}}{(3.196 \times 10^{11})} \cdot \frac{1}{(L+1)L}$$

olduğundan;

$$\lambda = (9.380 \times 10^{-4} \text{ m.}) \frac{1}{(L+1)L}$$

dir. Dalga Sayısı ise;

$$\nu = \frac{1}{\lambda} = (10.66 \text{ cm}^{-1})(L+1)L$$

olarak hesaplanabilir.

| HCl molekülünün dönme hareketi için ilk 2 enerji seviyesinde enerji seviyeleri, dönme frekansları, dalgaboyları ve dalga sayıları |                         |                         |                        |                                   |
|---|-------------------------|-------------------------|------------------------|-----------------------------------|
| J   | E (J.)                  | $\nu$ (Hz)              | $\lambda$ (cm.)        | Dalga Sayısı ( $\text{cm}^{-1}$ ) |
| 0   | $0.000 \times 10^{+0}$  | $0.000 \times 10^{+0}$  | 0                      | 0                                 |
| 1   | $4.236 \times 10^{-22}$ | $6.392 \times 10^{+11}$ | $4.690 \times 10^{-2}$ | 21.32                             |

04. Titreşim hareketi yapan bir molekülün titreşim frekansı

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

eşitliğinden hesaplanabilir.

HF molekülünün indirgenmiş kütlesi;

$$\frac{1}{\mu_{HF}} = \frac{1}{\mu_H} + \frac{1}{\mu_F}$$

$$\frac{1}{\mu_{HF}} = \frac{6.022140857 \times 10^{+23}}{1.008 \times 10^{-3} \text{ kg}} + \frac{6.022140857 \times 10^{+23}}{1.900 \times 10^{-2} \text{ kg}}$$

$$\mu_{HF} = 1.589 \times 10^{-27} \text{ kg.}$$

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{880 \text{ Nm}^{-1}}{(1.589 \times 10^{-27} \text{ kg})}}$$

$$\nu = 1.184 \times 10^{+14} \text{ Hz.}$$

Yayılan radyasyonun dalgaboyu

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

$$\lambda = \frac{2.998 \times 10^8 \text{ m. s}^{-1}}{1.184 \times 10^{+14} \text{ Hz.}}$$

$$\lambda = 2.532 \times 10^{-6} \text{ m.} = 25320 \text{ Å}$$

Dalga sayısı ise;

$$\nu = \frac{1}{\lambda}$$

olduğundan;

$$\nu = \frac{1}{2.532 \times 10^{-6} \text{ m.}} = 3949.45 \text{ cm}^{-1}$$

olarak hesaplanabilir.