

## 5.111 Ders Özeti #8

**Bugün için okuma:** Bölüm 1.12 (3. Baskıda 1.11) – Orbital Enerjileri ( çok-elektronlu atomlar), Bölüm 1.13 (3. Baskıda 1.12) – Katyapı İlkesi.

**Ders #9 için okuma:** Bölüm 1.14 (3. Baskıda 1.13) – Elektronik Yapı ve Periyodik Çizelge, Bölüm 1.15, 1.16, 1.17, 1.18, ve 1.20 (3. Baskıda 1.14, 1.15, 1.16, 1.17, ve 1.19) –Atom Özelliklerinde Periyodiklik.

**Ödev:** Problem seti #3 (Ders #10 a kadar).

---

**Konular:** Çok-elektronlu atomlar

- I. Çok elektronlu atomlar için Dalga fonksiyonları
  - II. Bağlanma enerjileri
  - III. Elektron dizilişleri (Aufbau ilkesi)
- 

## I. ÇOK ELEKTRONLU ATOMLAR İÇİN DALGA FONKSİYONLARI

(Z=2 veya daha yüksek atomları tanımlar)

Schrödinger eşitliği, sadece 1-elektronlu atomlar için değil, bütün atomların elektronik yapısını doğru olarak tanımlar.

$$\text{Hidrojen (1 } \hat{e}\text{): } \hat{H}\Psi(r\theta\phi) = E\Psi(r\theta\phi)$$

$$\text{Helyum (2 } \hat{e}\text{): } \hat{H}\Psi(r_1\theta_1\phi_1r_2\theta_2\phi_2) = E\Psi(r_1\theta_1\phi_1r_2\theta_2\phi_2)$$

$$\text{Lityum (3 } \hat{e}\text{): } \hat{H}\Psi(r_1\theta_1\phi_1r_2\theta_2\phi_2r_3\theta_3\phi_3) = E\Psi(r_1\theta_1\phi_1r_2\theta_2\phi_2r_3\theta_3\phi_3)$$

Eşitlik çok daha karmaşık hale gelir. **Yaklaşım** gereklidir!

**Hartree orbitalleri:** Çok elektronlu atomların  $\Psi$  fonksiyonunu, 1-elektronlu  $\Psi$ s lerin çarpımları olarak yazdığımızı farz edelim.

$$\text{Helyum: } \Psi(r_1\theta_1\phi_1r_2\theta_2\phi_2) = \underbrace{\Psi(r_1\theta_1\phi_1)}_{\Psi_{100-1/2}} \cdot \underbrace{\Psi(r_2\theta_2\phi_2)}_{\Psi_{100-1/2}}$$

$1s(1) \quad \quad \quad 1s(2)$

$$\text{Lityum: } \Psi(r_1\theta_1\phi_1r_2\theta_2\phi_2r_3\theta_3\phi_3) = \underbrace{\Psi(r_1\theta_1\phi_1)}_{1s(1)} \cdot \underbrace{\Psi(r_2\theta_2\phi_2)}_{\quad} \cdot \underbrace{\Psi(r_3\theta_3\phi_3)}_{\quad}$$

**Elektron dizilişi** elektron dalga fonksiyonlarının kısa gösterimidir.

H	$1s^1$		
He	$1s^2$		
Li	$1s^22s^1$		
Be	_____	B	_____

## ÇOK ELEKTRONLU DALGA FONKSİYONLARI H-ATOMU DALGA FONKSİYONLARI İLE NASIL KARŞILAŞTIRILIR?

Örnek olarak Ar atomunu düşünelim:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

H atom dalga fonksiyonları ile benzerlikler:

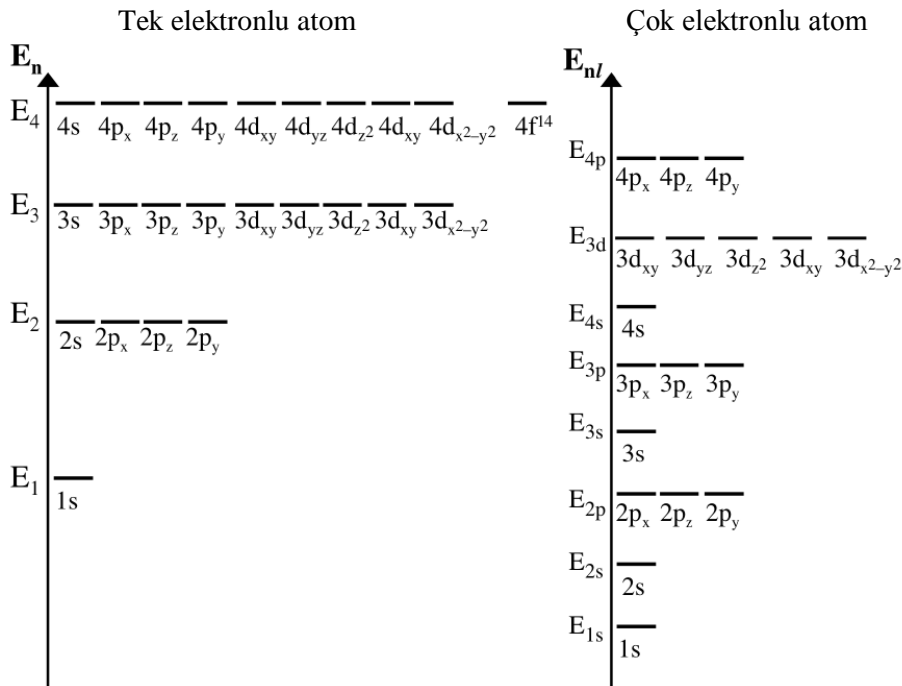
- Elde edilen her orbitalin şekli H 1-é orbitaline karşılık gelen orbitalin şekline **benzer**.
- **Düğüm yapısı aynıdır** (Düğümler,  $\Psi'$  nin r,  $\theta$  ve  $\Phi$  değerlerinin,  $\Psi^2 = 0$  olduğu yerlerde oluşur).

H atom dalga fonksiyonları ile farklılıklar:

- Çok-elektronlu orbital, kendisine karşılık gelen hidrojen atom orbitalinden daha \_\_\_\_\_ dır.  
Niçin? Z büyüdükçe, çekirdek tarafından daha kuvvetli çekilir (Ar için Z=18, H için Z=1).
- Çok-elektronlu atomlarda, orbital enerjisi hem kabuk (n) hem de alt kabuğa (l) bağlıdır.

## II. ÇOK-ELEKTRONLU ATOMLAR İÇİN BAĞLANMA ENERJİLERİ

Çok-elektronlu atomlarda her orbitalin enerjisi, kendisine karşılık gelen hidrojen atomundaki orbitalin enerjisinden daha (\_\_\_\_\_) dır.



Çok-elektronlu atomlarda, orbital enerjisinin azalması,  $Z'$  nin artmasından kaynaklanır— orbitaller çekirdek tarafından daha kuvvetli çekilir.

Baş kuantum numarası,  $n$ , artık çok-elektronlu atomların orbital enerjilerini belirleyen tek bir faktör değildir. **Enerji, şimdi  $n$  ve \_\_\_\_\_ ye bağlıdır.**

$$E_n = -IE_n = -\frac{Z^2 R_H}{n^2} \qquad E_{n,l} = -IE_{n,l} = -\frac{(Z_{\text{eff}}^{n,l})^2 R_H}{n^2}$$

\_\_\_\_\_ elektronlu atomlar için

\_\_\_\_\_ elektronlu atomlar için

Burada  $Z_{\text{etk}}$   $n, l$  konumunda elektronun hissettiği etkin çekirdek yüküdür.

Çekirdek için  $Z_{\text{etk}}$  değeri  $Z$  ile aynı \_\_\_\_\_ dir.  $Z_{\text{etk}}$ , \_\_\_\_\_ dolay  $Z$  den farklıdır.

### Perdeleme ve $Z_{\text{etk}}$

Perdeleme etkisini göstermek için, He atomu ( $Z = 2$ ) için mümkün olan iki ekstrem (aşırı uç) perdeleme durumunu düşünelim.

DURUM A: elektron #1 çekirdekten çok uzaktır, elektron #2 çekirdeğe çok yakındır.



He çekirdeği ( yük = \_\_\_\_\_ )

- Elektron #2, elektron #1 tarafından hissedilen yükün bir parçasını etkisiz hale getirir.
- Elektron #1' in hissettiği ortalama yük  $Z_{\text{etk}} = \_\_\_\_\_\_$  dir.  $Z_{\text{etk}} = +2e$  değildir.
- Elektron #1' in enerjisi, 1 elektronlu H atomunki kadardır.

$$E_{e-\#1} = \_\_\_\_\_\_ e-\#1 = -\frac{(Z_{\text{etk}})^2 R_H}{n^2} = \_\_\_\_\_\_ = \_\_\_\_\_\_ J$$

DURUM B: elektron #1 çekirdeğe yakındır; elektron #2 çekirdekten uzaktır.



He çekirdeği ( yük = +2é )

- elektron #1, ortalama yükü  $Z_{\text{etk}} = \underline{\hspace{2cm}}$  kadar hisseder.
- elektron #1 in enerjisi  $\underline{\hspace{2cm}}$  (1 elektronlu) iyonunki kadardır.

$$E_{e\text{-}\#1} = -\dot{E}_{e\text{-}\#1} = -\frac{(Z_{\text{et}})^2 R_H}{n^2} = \underline{\hspace{2cm}} = \underline{\hspace{2cm}} \text{ J}$$

Durum A:  $Z_{\text{etk}} = 1, \quad \dot{E}_{\text{He}} = 2.18 \times 10^{-18} \text{ J} \quad \text{perdeleme } \underline{\hspace{2cm}}$

Durum B:  $Z_{\text{etk}} = 2, \quad \dot{E}_{\text{He}} = 8.72 \times 10^{-18} \text{ J} \quad \text{perdeleme } \underline{\hspace{2cm}}$

Deneyssel olarak belirlenen  $\dot{E}_{\text{He}}$ :

$$\text{Deneyssel } \dot{E}_{\text{He}} = 3.94 \times 10^{-18} \text{ J}$$

Bu nedenle gerçek perdeleme, toplam perdeleme ile perdelememe arasında bir yeredir.

$$\dot{E} = -\frac{(Z_{\text{et}})^2 R_H}{n^2} \quad R_H = 2.180 \times 10^{-18} \text{ J}$$

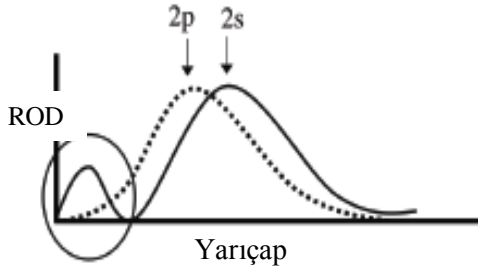
$$Z_{\text{etk}} = \left[ \underline{\hspace{2cm}} \right] = \left[ \underline{\hspace{2cm}} \right] = \underline{\hspace{2cm}}$$

**Deneyssel olarak tayin edilmiş  $\dot{E}$ ' den yola çıkarak  $Z_{\text{etk}}$  değerini hesaplayabiliriz:**

Not: Hesapladığımız  $Z_{\text{etk}}$  değeri makul bir değerdir. Çünkü  $\underline{\hspace{2cm}}$  (toplam perdeleme) ve  $\underline{\hspace{2cm}}$  (perdelememe) arasında bir değerdir.

**Niçin  $E_{2s} < E_{2p}$  (daha negatif) dir? ve  $E_{3s} < E_{3p} < E_{3d}$  dir?**

Belli bir n kabuğunda, daha düşük l değerine sahip orbitaldeki elektronların  $\underline{\hspace{2cm}}$  daha fazladır, çekirdeğe daha çok yaklaşır (l arttıkça  $r_{e0}$  azalsa bile!).



Aynı n değeri için, bu şu anlama gelir:

- s-elektronları, p elektronlarından daha \_\_\_\_\_ perdelenir.
- p-elektronları, \_\_\_\_\_ elektronlarından daha az perdelenir.

Niçin, Li atomunun elektron dizilişi  $1s^2 2s^1$  dir de,  $1s^2 2p^1$  değildir?

s-orbitali daha az perdelenir. ROD ortalamasının üzerinde olduğundan \_\_\_\_\_ < \_\_\_\_\_ dir. Çünkü  $E_{nl} = - (Z_{\text{etk}})^2 R_H / n^2$ ,  $E_{2s}$  \_\_\_\_\_  $E_{2p}$

### III. ELEKTRON DİZİLİŞLERİ

Elektron dizilişi hangi orbitallerin dolu olduğunu belirterek, atomun elektronik yapısını tanımlar. Bu çok yararlı bir gösterimdir, çünkü elektron yapısı, bir atomun kimyasal özelliklerini ve reaktifliğini belirler.

Bir atomun elektron dizilişini nasıl belirleriz?

#### AUFBAU (KATYAPI) İLKESİ

Bir elektron, en düşük enerjili konumdan ( \_\_\_\_\_ ve \_\_\_\_\_ bağılıdır) başlayarak yüksek enerjili orbitallere doğru doldurulur:

1) Pauli dışlama ilkesi

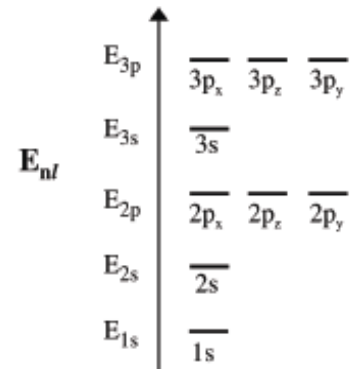
2) Hund kuralı: elektronlar aynı enerjili bir konuma girdiğinde, ilk elektron herhangi bir konuma yerleşebilir, (ikinci elektron girmeden önce). İkinci elektron girdiğinde spinler \_\_\_\_\_ olur.

Bunu O ( $Z = 8$ ) için deneyelim.

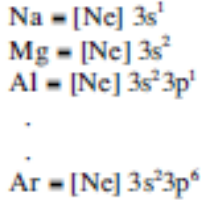
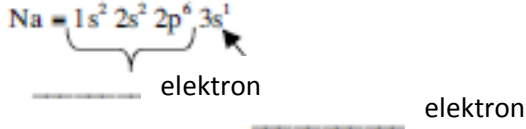
Elektron dizilişi: \_\_\_\_\_

( $m_l$  belirleme): \_\_\_\_\_

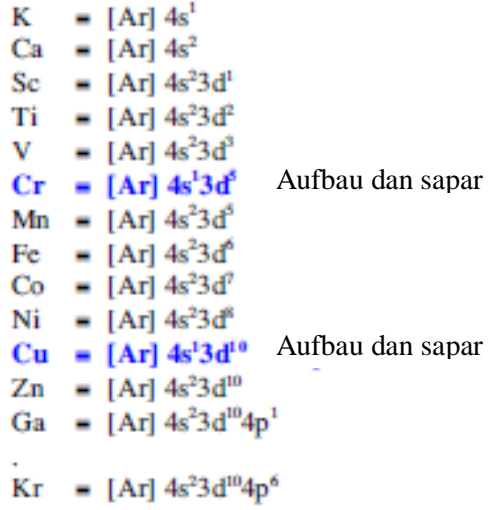
$m_l$  gösterimini, özel olarak sorulursa yazmanız gerekir.



Üçüncü Periyot: Na– Ar arası



F Dördüncü periyot: K – Kr arası

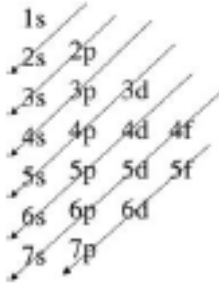


Aufbau ilkesinin istisnaları: dolu (\_\_\_\_) ve yarı-dolu (\_\_\_\_) d-orbitalleri, teorinin önerdiğinden daha düşük enerjiye sahiptir.

**İç (kor) elektronlar:** iç kabuktaki orbitaller asal gaz elektron dizilişine sahiptir.

**Değerlik elektronları:** en dış kabuktaki elektronlar. Genel olarak – önce değerlik elektronları uyarılır. Kimyasal tepkimelere değerlik elektronları katılır.

Beşinci periyot: Rb' den Xe' a kadar. 4. Periyottaki Cr ve Cu' daki sapma Mo ve Ag atomlarında da görülür. *Diğer sapmaların ve etkilerin yorumu zordur.*



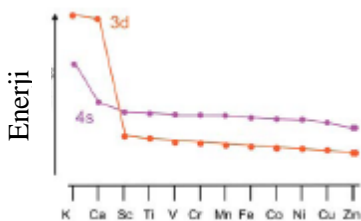
Elektron dizilişi için hatırlatma: çaprazlama.

Bu çizelgeyi kullanarak, orbitalleri soldan sağa doğru artan enerjilerine göre doğru bir biçimde sıralayabiliriz.

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p

**İYONLARIN ELEKTRON DİZİLİŞİ - NÖTRAL ATOMLAR GİBİ DEĞİLDİR!!!**

d orbitali dolduktan sonra, buna karşılık gelen s orbitalinin enerjisi düşer.



Ti ve  $Ti^{2+}$  yi düşünün.

Ti = [Ar] $4s^2 3d^2$  fakat gerçekte Ti = [Ar]\_\_\_\_\_

$Ti^{2+}$  = [Ar]\_\_\_\_\_