

SeH2 nin geometrisini ve baę açılarını belirleyin. Not: Se, 6 deęerlik e na sahiptir.

Bu hızlı tıklama sorusu deęildir: Cevaplarınızı ve çözümlerinizi yazmanız gerekir. Henüz tıklatmadıysanız veya cevaplarınızı deęiřtirmek isterseniz, aklınızda bulunsun, bu soruyu cevaplamadan önce, Lewis yapılarını yazmanız gerekir.

100 Clicker sorusuna son cevaplarını veriniz. Derse daha yeni gelenler için, bu kliker sorusuna cevap vermek için ihtiyacınız olan düşünme süresine sahip olamayabilirsiniz, çünkü soru Lewis yapısı ile ilgilidir, bu kısmı geçeceęiz. burada 30 saniye veya daha uzun bir süreden beri bulunanlar, doęru cevabı verebileceksiniz.

OK, Bugünkü soruya verilen cevaplar biraz karışık olmuş gibi görünüyor. Lewis yapısının çizmek için yeterli süresi olmayanlar ellerini kaldırsın. Bu durum bazı şeyleri açıklıyor. Bu soruya cevap vermek için işlemlerinizi bitirin. %31 ini doęru cevap vermiş. Bu aradığımız bir yüzde deęil. Bu soruya bir bakalım.

Pazartesi günü, geometrileri gözden geçirmiřtik. Lewis yapısının ne olduğunu bildikten sonra geometrinin kendisini belirlemek oldukça basittir. Ama unutmayın. Doğrudan moleküle bakarak, Lewis yapısının ne olduğunu bilemezsiniz. Önce ihtiyacımız olan şey, deęerlik e larını düşünmektir. Burada Selenyum hidrür sorulmuş. Selenyumun deęerlik e nun 6 olduğunu vermişim. 6 + her bir hidrojen 1 tane, toplam 8 dir. Lewis yapısında 8 deęerlik e nu olduğunu bulduk. Dolu kabuęa sahip olmak için kaç tane e gerekir?

12, evet doęru. $8 + 4 = 12$ dolu kabuk için gereken e sayısı. Buna göre $12 - 8 = 4$ yapıdaki baę e nu sayısı. Şimdi hızlıca iskelet yapısını çizeceęim. İki tane H atomu var, işte SeH2. 4 baę e nu koyduk, geriye kaç baę e nu kaldı? 4 . Bunları oktetini tamamlaması için Se üzerine koyuyorum. 1 2 3 4.

Bu Lewis yapıımızdır. Niçin doğrusal olmadığını umarım görmüşsünüzdür. Doğrusal olmuş olsaydı, ki % 32 niz böyle olduğunu düşünmüş, Lewis yapısı üzerinde hiç YÇ olmaması gerekirdi. Ama bu yapıda öyle deęildir. Bu yapıda 2 tane YÇ vardır. Bunları da bir baę gibi düşünecek olursak, burada açılar 109.5 olmalıdır . Ama geometri açısaldır, çünkü sadece baęlara bakıyoruz. Geometriyi belirlerken Lewis yapısındaki YÇ ler dikkate alınmaz, fakat bu YÇ ler açığa etki eder. Buradaki açı aslında 109.5 den küçüktür. Çünkü YÇ ler baęları mümkün olduğunca uzaęa iter.

Bu şekilde düşünürseniz, hepinizin aklına yatıyor mu? Çok iyi. Ok. Biraz sonra buna benzer başka bir clicker sorusu sorulacak. Geometrinin belirlenmesi ve buna benzer sorular oldukça basit görünür. Ama ilk adımı unutmamalısınız, önce Lewis yapısını yazmanız sonra geometrinin adını belirlemelisiniz. Eęer hala hazır deęilseniz, problem setinizde pratik yapmanız için oldukça fazla seçenek var.

Bugünkü ders notlarına geçmeden önce, bir şeyden bahsetmek istiyorum. Bu sabah, Kimyada Nobel ödüü alan bilimadamlarının ismi açıklandı. Genel anlamda, bilim adına oldukça heyecan verici bir hafta. Çünkü her gün başka bir nobel ödülünü işitiyoruz. Şimdi biraz durun ve dinlemeye başlayın.

Bugün MOT yi anlatmaya başlayacağız, ama önce başka bir şeyden söz etmek istiyorum, belki duymamışsınızdır, Bu sabah Nobel kimya ödülü kazanan bilimadamları açıklandı ve Nobel ödülü üç farklı kimyacıya gitti. Japon kimyacı Osamu Shimomura, Kolumbiya' dan Martin Chalfie (çalfi), ve San Diego' dan (Robert Chen). Yeşil floresan proteinleri – ki bunlara GFP de denir- keşfettikleri ve/veya kullandıkları için bu sabah Nobel ödülü bu üç kimyacı arasında paylaştırıldı.

GFP adını daha önce kaç kişi duydu? Ooo, çok iyi. Bazılarınız daha önce işitmiş, bilmeyenler için söylüyorum, içinde 238 tane amino asit bulunan bir proteindir, bu içinde 1000 lerce atom bulunduğu

anlamına gelir. Bu protein floresans özelliği gösterir. Bu protein ilk kez Shimomura tarafından keşfedilmiş ve deniz anasından izole edilmiştir. Shimomura bu çalışmayı aslında 60 larda 70 lerde yapmıştı. Şüphesiz pek çok kişi deniz anasının floresans özelliğini fark etmiştir, ama o bu protein izole etmiş ve floresans özelliği bu proteinin neden olduğunu ispat etmişti.

Bunu uygulama bakımından düşünecek olursak, bunların niçin heyecan verici olduğunu anlarız, bu floresan proteinler diğerlerinden çok daha eğlencelidir, çünkü bunlar floresan özellik gösteriyorlar. Buna biyoloji yönünden düşünecek olursak, niçin heyecan verici olduğunu anlarız, bu proteinleri çalıştığımız diğer proteinlere bağlayabiliyorsunuz, böylece çalışma esnasında neler olup bittiğini izleyebilirsiniz.

Mesela, kanser hücrelerindeki bazı proteinler ile ilgileniyorsanız, bunlara GFP leri bağlayabilirsiniz. hücrenin içinde nerede bulunduğunu izleyebilirsiniz, floresans özelliği sayesinde hangi proteinlerle etkileştiğini belirlemek için kullanabilirsiniz. Mesela bir kanser hücrelerini belirlemek için veya bunun gibi pek çok şey için kullanılabilir ve floresans özelliği sayesinde neler olup bittiğini izleyebilirsiniz. Bu kadar ilgi çekme nedeni budur. Burada proteinin yapısını görmekteyiz, bu proteinin şerit diyagramıdır. Bu şeritler doğal amino asitlerdir. Bunları DNA ların içinde kodlayabileceğimiz anlamına gelir. Endişe etmenize gerek yok, hücrenin içine girmeyeceğim. Bu DNA ları mutasyona uğratabileceğimiz anlamına gelir, moleküler biyolojide bunu yapmak çok bilgi vericidir. Böylece ilgilendiğiniz bir proteini etiketleyebilirsiniz.

Söylediğim gibi, önce keşfedildi ve deniz anasından izole edildi. Bu kısım Shimomura tarafından gerçekleştirildi—bunun yararlı bir araç haline gelmeye başlamasının ilk adımıydı. Çok seneler sonra, 1994 de Columbia Üniv. den Dr. Martin Chalfie, DNA yı aldı ve bunu farklı organizmalara yerleştirdi. Etiketli DNA yı ilk kez E.coli bakterisine koydu ve bunun bir resmini yayınladı. Bu gördüğünüz, 1994 de yayınlanmış bir dergiden alınmış resimdir. E. Coli ,GFP sayesinde yeşil renkli görünmektedir. Bu ilk uygulama, bundan sonrakiler kadar ilgi çekmemiştir. Bilim adamları daha sonra diğer organizmalara da yerleştirdiler-- Ekranda sinekleri görebilirsiniz, GFP ile yeşil yeşil parlayan transgenik farelere bakabilirsiniz. Şüphesiz bunlar yararlı uygulamalar değil, ama bir şeyi ispat ediyor. Çalışmalar için GFP leri her tür organizmaya koyabileceğinizi gösteriyor.

San Diego Univ. Den Robert Chen in keşfinden sonra bu alan çok hızlı ilerledi. Robert Chen bir proteinin nasıl floresans yaptığını çözdü, bu floresansa neyin sebep olduğunu buldu. Bu anlaşıldıktan sonra, hem kendisi hem de diğer bilim adamları gerçek proteinler üzerinde değişiklikler yaparak floresans proteinlerin özelliklerinde ince ayarlar yapmayı başardılar. Mesela şimdilerde, her renkte, yani gökkuşağı renklerinde floresans protein oluşturulmakta ve kullanılmaktadır. Eminim, bunu hayal edebilirsiniz. Mesela eğer isterseniz bir proteini yeşil, bir proteini mavi, 1 proteini sarı olarak işaretleyebilirsiniz, böylece oldukça karmaşık biyolojik işlemleri izleyebilirsiniz.

823 günlük haberlerde kimyacıların yer alması oldukça nadirdir. Bugünlerde, bilimsel dergilerde değil normal gazetelerde kimya ile ilgili bazı şeyler okuyabilirsiniz, New York Times veya Boston Globe gazetelerinde bunların nasıl tarif edildiklerini okuyun, oldukça eğlencelidir.

Bahsetmek istediğim bir şey daha var. Burada hala devam ediyor mu bilmiyorum ama Boston bilimler müzesinde yıl sonuna kadar süren bir denizanası sergisi var. Ve hepiniz ücretsiz girebilirsiniz. Parlayan denizanasalarını görmek çok hoş. Onları izlerken floresans proteinleri düşünülürsünüz. Boş vaktiniz varsa kaçırmayın derim.

9o3 Bugünün ders notlarına bakalım. Bugün MOT hakkında konuşacağız. Bu başlayacağımız yeni bir konu.

912 Şimdiye kadar, molekül içindeki bağları tanımlarken ağırlıklı olarak Lewis yapılarını kullandık. Lewis yapıları çok faydalıdır, kimyada her zaman kullanırız. Çok yararlıdır çünkü öncelikle çizmek kolaydır-- özellikle kurallara uygun olarak yazarsanız, çok kolay çizebilirsiniz. Ancak ancak % 90 oranında başarılı olursunuz. Molekül içindeki bağlanmayı her zaman doğru bir şekilde öngöremez. Bunun nedeni, aslında, Lewis yapıları QM ne dayanmaz.

Diğer taraftan MOT, QM ne dayanır. Özel olarak, MO teorisi, molekül içindeki dalga fonksiyonlarının QM tanımıdır. Molekül içindeki dalga fonksiyonlarından bahsetmek, biraz karışık gelebilir, fakat unutmayın, şimdiye kadar atomlardaki dalga fonksiyonları hakkında çok konuştu, bunları nasıl tanımlayacağımızı biliyoruz, atom orbitallerindeki dalga fonksiyonlarının ne anlama geldiğini biliyoruz. Molekül içindeki dalga fonksiyonları ile aynı şeydir-- molekül dalga fonksiyonları tam olarak molekül orbitalleri anlamına gelir.

Bugünkü dersimize, iki tür MO ni konuşarak başlayacağız. Bağ orbitalleri ve karşıbağ orbitallerini anlatacağız. Sonra, moleküldeki bağlanmaları açıklamak için MO teorisini kullanacağız. Önce homonükleer diatomik moleküllerden başlayacağız. Diatomik kelimesi iki atomlu anlamına gelir. Homonükleer, ise aynı çekirdekli demektir. Bundan sonra heteronükleer diatomik (yani farklı çekirdekli iki atomlu) moleküllere ait örneklere geçeceğiz.

Bağ kavramını MOT göre yorumlamak önemlidir, çünkü MOT si QM ni temel alır. MOT de iki atomlu moleküllerden sonrası oldukça karmaşık olmaya başlar. Bu derste MOT kapsamını iki atomlu molekülle sınırlayacağız. Cuma günü çok atomlu moleküldeki bağlanma için farklı bir yaklaşımı kullanacağız.

1108 Önce MOT hakkında bir şey söylemek istiyorum. Lewis yapılarından çok farklıdır. MOT de, değerlik ϵ ları bütün molekül üzerinde delokalizedir, yani molekül üzerinde yayılmıştır. Lewis yapısını anlatırken, ϵ ları iki atom arasına, yani belli bir bağa yerleştiririz. Halbuki, MOT de ϵ lar bütün molekül üzerinde dağılmıştır, belli bir atomun üzerinde veya belli bağlarda bulunmazlar.

Buna karşılık, MOT de bağ orbitalleri veya karşıbağ orbitalleri kavramı vardır. Bir şeyi tekrarlamak istiyorum. Molekül orbitalleri aynı zamanda dalga fonksiyonlarıdır. Dalga fonksiyonları ve orbital aynı şeydir. MO ler atom orbitallerinin veya dalga fonksiyonlarının bileşiminden meydana gelir. Diğer bir deyişle, MO ler, AO lerinin bir kombinasyonudur. İki farklı atomun, atom orbitalleri bir araya gelip birleşerek yeni bir MO oluştururlar.

Bundan bahsetmemin nedeni şudur. Daha önce dalga fonksiyonlarından, bunların yapıcı girişimlerinden ve yok edici girişimlerinden bahsetmiştik. İki farklı atomun orbitalleri birleşerek hem yapıcı girişim hem de yok edici girişim oluşturabilir. Şimdi bunlara bir göz atalım. Önce yapıcı girişimden başlayalım. Bir şeyi farklı bir biçimde tekrar söylemek istiyorum. MO ler, AO lerinin doğrusal kombinasyonudur, yani doğrusal bileşimidir.

Bağ orbitallerini anlatmaya devam edelim. En basit durum olarak, 1s orbitallerinin doğrusal kombinasyonuna bakalım. Mesela H atomunu inceleyelim., burada H atomu A görülmektedir. 1243 Atomun çekirdeği nokta şeklinde gösterilmiştir. Etrafındaki çember ise dalga fonksiyonunu göstermektedir. Bunun çember şeklinde gösterilmesi anlamlıdır. Bildiğiniz gibi, s orbitali küresel simetriktir. 1s dalga fonksiyonu için çemberin iyi bir yaklaşım olduğunu söyleyebiliriz.

Benzer şekilde, ikinci H atomunun çekirdeği ortada durmaktadır B atomunun 1s fonksiyonu etrafını çevrelemektedir. Bunlar atomik orbitallerdir. Molekül oluşturmak için, bu iki orbitali mümkün olduğu kadar yan yana getirmemiz gerekir 1316 Öyleki bunların çekirdekleri belli bir mesafede dururlar, bu

iki çekirdek arası uzaklık bağ uzunluğuna karşılık gelir. Sonuçta MO oluşur, çünkü bu iki atom orbitalini birbirine yaklaştırdığımızda, bunların dalga fonksiyonları yapıcı girişim oluşturur, böylece molekül orbitali meydana gelir, iki çekirdek arasında daha çok dalga fonksiyonu olur.

1339 Şimdi bu MO lini isimlendirelim, bunların isimleri AO lerin isimlerine benzer. Buna sigma 1s MO denir, iki tane 1s AO in bileşiminden oluştuğu için bu isim verilmiştir. Sigma ise MO in simetrisini belirtir. Sigma bağı, bağ eksenini etrafında silindirik simetriktir. Bu bağ eksenidir, iki çekirdek arasındaki eksen, bazen çekirdekler arası eksen de denir. 1409 [ELİ İLE GÖSTERİYOR] İki atom yan yana gelip bağ yaptığında, bağ eksenini, iki atom arasına uzanan bu eksenidir.

1415 Başka bir şey daha söylemek istiyorum, gördüğünüz sigma orbitalini daha sonra göstereceğim pi orbitali ile mukayese etmemiz daha mantıklı olur. sigma orbitalinde bağ eksenini doğrultusunda düğüm düzlemi yoktur. Eğer düğüm düzleminiz varsa, bu bölgede dalga fonksiyonu sıfıra eşit olur. sigma bağında bu bölgede df sıfır değildir. Aklımızda bulunsun, sigma orbitalinde bağ eksenini üzerinde düğüm düzlemi bulunmaz.

1443 Şimdi bu birleşimlere başka bir şekilde bakalım. Bu dalgaların bileşimini resmetmek bazen çok zordur. Bunları dalgaların genliğinin grafiği şeklinde düşünelim, Burada yapıcı bir girişimde dalgaların genliği görülmektedir. Tekrar edelim. Bir atomun dalga fonksiyonunun grafiğini düşünersek, çekirdeğin üzerindeki bir noktada dalga fonksiyonu en yüksek genliğe sahip olur. Şekilde görüldüğü gibi, çekirdekten uzaklaştıkça genlik de gittikçe azalır, ama hiçbir zaman sıfır olmaz. Bu A atomunun 1s orbitalinin grafiğidir. Benzer şekilde, B atomunun 1s orbitali için de çizebiliriz. Molekül dalga fonksiyonu için şunlar söylenebilir: burada iki dalga fonksiyonu bir araya gelerek yapıcı girişim oluşturacaktır, sonuçta bu iki dalga fonksiyonu toplanmış olacaktır.

Dalga fonksiyonlarını konuştuğumuzda bunun "orbital" anlamına geldiğini biliyoruz. Belki de en iyi yol, bu dalga fonksiyonlarının fiziksel yorumlarını düşünmektir. Bu fonksiyonların karesi neye eşit olacaktır? Olasılık yoğunluğu. Evet. olasılık yoğunluğu, bir molekülde ufak bir hacimde e ların bulunma olasılığıdır.

Şimdi dalga fonksiyonu yerine olasılık yoğunluğunu düşünelim. Olasılık yoğunluğunu dalga fonksiyonunun karesidir, ama burada konuştuğumuz atomik dalga fonksiyonlarının karesi değildir, molekül dalga fonksiyonlarının karesidir ve bu fonksiyona sigma 1s² adı verilir (koyu mavi çizgi ile gösterilmektedir).

Bunları ders notlarınıza geçirmeden önce, bu toplamın nasıl olduğunu sizin için tahtaya bir yazayım. 1620 TAHTA Bu iki dalga fonksiyonu birleştirdiğinizde, 1sA orbitali ile 1sB orbitalini toplamamız gerekir. Bu toplamın sonucunda molekül dalga fonksiyonu sigma 1s elde edilir. Buna MO adı verilir. Bunu ders notunuza yazabilirsiniz. Şimdi olasılığa da bir göz atalım.

Tekrar ediyorum, olasılık bu MO nin karesidir. Bu dalga fonksiyonunun karesidir. Şöyle yazılır, sigma 1s kare. Veya bunu iki parçaya ayırabiliriz, Bunu yapmamamız için bir sebep yok. Böylece $\sigma_{1s}^2 = (1s_A + 1s_B)^2$.

MO lini her bir AO nin dalga fonksiyonu cinsinden ifade etmiş olduk. Bu ifadeyi çözersek, birinci atomun olasılık yoğunluğu, sonra ikinci atomun olasılık yoğunluğu, ve buradaki son terim ise etkileşim terimine aittir. İlk durumda, iki fonksiyon toplandığında, bu yapıcı girişime ait olacaktır. Bu durumda, bu çapraz terim iki tane 1s atomik dalga fonksiyonu arasındaki yapıcı girişimi temsil eder. Tekrar ediyorum, buna bağ orbitali denir.

1742 Bunları bir de enerji terimlerine göre düşünürsek daha mantıklı olur. Bu sınıfta daha çok enerji diyagramlarını tartışacağız. Burada ne olduğunu grafik şeklinde göstermek çok iyi bir yoldur. Şimdi, AO lerini oluşturan molekül bağ orbitalleri ile mukayese ettiğimizde, etkileşim enerjilerinin ne olacağını düşünelim. Gözlenen şudur. AO lere göre mukayese edilirse bağ orbitallerinin enerjileri azalmaktadır. 1804 Burada iki H atomunun AO lerini görmekteyiz. Her birinde bir ϵ bulunmaktadır. Bildiğiniz gibi H atomunun 1s orbitalinde bir ϵ bulunmaktadır.

Şimdi de MO lerine bakalım. İki AO göre oluşan MO nin enerjisi daha düşüktür. AO deki bir ϵ için MO deki daha düşük enerjili bir orbitale geçmesi istenen bir durumdur. Şimdi bu ϵ leri MO line yerleştirelim. Sigma 1s MO line de şimdi iki tane ϵ bulunmaktadır.

MO diyagramlarını ne zaman çizerseniz, aklınızda bulunsun. AO de bulunan ϵ ların hepsini MO dekindeki orbitallere yerleştirmek zorundasınız. Burada her bir orbitalde 1 ϵ bulunmaktadır. O halde MO line toplam 2 tane ϵ yerleştirmeliyiz. Bu enerji diyagramına doğrudan bakarsanız, burada oluşan molekülün her bir atomdan daha kararlı olduğunu görebilirsiniz. Bu mantıklıdır, çünkü enerjisi daha azalmıştır, ϵ lar şimdi daha düşük enerjili orbitalde bulunur, bu bağ yapıcı molekül orbitali fikridir, yani bağ orbitalidir.

1915 Dalga fonksiyonlarını konuşmaya ve dalgaların özelliklerini anlatmaya devam edelim. Dalgalarda sadece yapıcı girişim yoktur, aynı zamanda yok edici girişimler de mevcuttur. Su dalgalarında veya ışık dalgalarında olduğu gibi orbitaller de yok edici girişimler yaparlar. Bunun neye benzediğini bir düşünelim.

Bu durumda, bir tane $1s_A$ ve bir tane $1s_B$ orbitali vardır. Bu durumda ikisini birbirinden çıkartırız. Burada, orta yerde daha fazla dalga fonksiyonu yerine, dalga fonksiyonlarının birbirini yok ettiğini ve sonunda tam ortada bir düğüm oluştuğunu görürüz. Bu orbitali de isimlendiririz ve buna $1s^*$ orbitali deriz. Buna aynı zamanda karşı bağ molekül orbitali de denir. Bağ orbitallerimiz vardı şimdi de karşı bağ orbitallerimiz oldu. TAHTA Karşı bağ orbitali şudur, $1s_A - 1s_B = \text{delta } 1s^*$. Buradaki yıldız sakın unutmayın. Yıldız, karşıbağ orbitali anlamına gelir.

Şimdi bu karşı bağ orbitalinin resimlerine bakalım ve karşıbağ orbitalini resim üzerinden düşünelim. Eksenler üzerine dalga fonksiyonlarını çizelim. Siyah hat bağ eksenini göstermektedir. Burada mavi çizgi $1s_A$ orbitalinin pozitif genliğini göstermektedir. Yok edici girişim belirtmek için $1s_B$ orbitalinin genliği zıt işaretli olarak çizilmiştir. Buradaki genliklerden biri artı diğeri eksi işaretlidir. Bunların orta yerde birbirini yok ettiği kolayca görülmektedir. Gerçek molekül orbitalinde, tam orta yerde dalga fonksiyonlarının birbirini tamamen yok ettiğini görürsünüz. Bu $1s^*$ molekül orbitalidir. Sigma $1s^*$ orbitali. İki çekirdeğin tam orta noktasında bir düğüm bulunur.

Bu grafiğe tekrar bakıp, fiziksel olarak veya olasılık yoğunluğuna göre yorumlamak istersek, bu dalga fonksiyonunun karesini almamız gerekir, burada sigma $1s^*$ orbitalinin karesini alırsak, genliklerin hepsi pozitif olacaktır, fakat tam orta yerde yine bir düğüm olduğunu görüyoruz. Genlik ortada yine sıfır olacaktır. Olasılık yoğunluğunu konuşacak olursak, sağda yazıldığı gibi $(\sigma 1s^*)^2$ olacaktır. Bunu $(1s_A - 1s_B)^2$ şeklinde yazabiliriz. Bu ifadenin karesini alırsak sağdaki terimleri elde ederiz. Yine, $(1s_A)^2$ ve $(1s_B)^2$ elde edilir, bundan sonra yok edici girişimin terimi gelmektedir. Gördüğümüz gibi bu terimin katsayısı eksidir, çünkü yok edici girişimi temsil etmektedir.

Şimdide etkileşimin enerjisini bir düşünelim. Yapıcı girişimleri konuştuğumuzda, çekirdekler arasında daha çok ϵ bulunurdu ve molekül orbitalinin enerjisi düşerdi ve bağ orbitali elde edilirdi. Fakat karşıbağ orbitalini düşünecek olursak enerjisi daha yüksek olacaktır, bu MO nin enerjisi AO lerinden daha yüksektir. Karşı bağ MO enerjisi 1s AO in enerjisinden daha yüksek olacaktır.

Bunun ne anlama geldiğini bir düşünelim. Önce, bir şeyi tekrar etmek istiyorum. Ne zaman bir yıldız görürseniz bu karşıbağ MO anlamına gelir, $\sigma 1s^*$ karşı bağ orbitalidir. Basitçe ne demek istediğim burada daha iyi görülmektedir. Negatif girişimde, çekirdekler arasındaki ϵ yoğunluğu, iki farklı atomdakine göre, daha azdır. Gördüğünüz gibi burada bağ olmaz, Bu bağ yapmayan orbitalden daha kötü bir durumdur. Bu karşı bağdır, çünkü karşı bağ orbitalinde çekirdekler arasında ϵ yoğunluğu bulunmaz. Bildiğimiz gibi, çekirdekler arasındaki ϵ lar iki çekirdeği bir arada tutmaya yarar ve bağ oluşturur.

Burada bir şeyin altını çizmek istiyorum. Grafikte görüldüğü gibi karşıbağ orbitalleri bağ orbitallerinin tam zıttında yer alır. MOT anlatmaya başlamadan önce bağ yapmayan orbitallerin bağ orbitallerinin zıttı olduğunu düşünmüş olabilirsiniz, fakat bağ orbitallerinin zıttı karşıbağ orbitalleridir, bağ yapmayan orbitaller değildir. 2330 Buradaki resme bir bakalım. Düşük enerjili olan bağ orbitalidir. 1s orbitali düzeyi bağ yapmayan orbitale karşılıklı gelir. Bağ yapmayan orbitalden daha yüksek enerjili olan ise karşıbağ orbitalidir. Başka bir şeyin daha vurgulamak istiyorum. Bağ orbitalinin enerjisi ne kadar düşerse, karşıbağ orbitalinin enerjisi de o kadar yükselir. Bu MO lerin grafiklerini ne zaman çizersem, bu enerji farklarını aynı tutmaya dikkat ederim. Aslında çizim konusunda çok iyi değilimdir. Karşı bağ orbitalini ne kadar yüksekte çizersek, bağ orbitalini de o kadar düşüğe çizmemiz gerekir. Enerjideki yükselme ve düşme miktarı aynıdır. *Bir sorunuz mu vardı?*

2416 Bunu istemezler. *Bu daha yüksek enerjili bir durumdur. Karşı bağ orbitalinin daha yüksek olmasını bekleyemeyiz. Moleküle bir bakalım. Eğer iki atom alırsak, bunları doldurmaya başlarsak, karşıbağ orbitalinin enerjisinin, bağ orbitalinin enerjisinden daha yüksek olduğu bir durumu, iki atomlu moleküllerde asla göremeyiz.*

Bu grafik, bunu öngörmemize yardım eder. mesela H₂ molekülünde bunu yapabiliriz, gördüğünüz gibi, bağ orbitalleri, karşı bağ orbitallerinden daha baskındır ve molekülü stabilize eder ve burada bir bağ vardır deriz. Bu çok güzel bir soru.

Şimdi devam edelim ve bazı gerçek atomlara bakalım ve bunların oluşturduğu gerçek molekülleri düşünelim. En basit örnek olarak H₂ molekülünü konuşalım. karşıbağ MO ini ilave ederek, bu molekülle ilgili tartışmayı bitirmek istiyorum. Size bir ipucu vereyim. MO diyagramını çizerken, ne zaman bağ orbitali çizerseniz, mutlaka karşı bağ orbitalini de çizmeniz gerekir. Elinizde onu doldurmaya yerecek kadar ϵ olmasa dahi, karşıbağ orbitali mevcut olacaktır. Bu nedenle MO diyagramında hem bağ orbitalini hem de karşı bağ orbitalini çizmek zorundasınız. Ekranda H atomu için tamamlanmış seti ders notlarınıza geçirdiğinizden emin olmanızı istiyorum.

Şimdi H molekülüne bakalım. Önce atomlardaki ϵ lar çizilir. Her bir H atomunda bir tane ϵ vardır. Bu H molekülünde toplam 2 ϵ olduğu anlamına gelir. Bunların ikisini de sigma 1s bağ orbitaline koyarız. Hiçbir şekilde karşı bağ orbitaline koymayınız. Bu şekilde yerleştirdiğimizde molekülün enerjisinin, atomların enerjisine göre daha düşük olduğunu görebiliriz.

2757 Şimdi de H₂ molekülünün ϵ dizilişini yazalım. Şimdiye kadar pek çok atomun ϵ dizilişini yazdık. Şimdi de aynı şeyi molekül için yapacağız. TAHTA H₂ molekülünü alalım. Bunun ϵ dizilişi oldukça kısa. Önce $\sigma 1s$ yazalım, sonra üzerine 2 koyalım. $(\sigma 1s)^2$. Bu H₂ molekülünün ϵ dizilişidir. Şimdi de başka bir örneğe geçelim. He₂ nin MO diyagramını çizelim. 2631 Burada benzer AO ler var her bir AO de 2 ϵ bulunmaktadır. Şimdi toplam 4 ϵ nu MO lerine yerleştirmemiz gerekecektir.

Bağ orbitalinde 2 ϵ olacaktır, çünkü AO lerine ϵ ları yerleştirirken uyguladığımız kurallar MO için de geçerlidir. Mesela Pauling dışarlama ilkesine göre her orbitale zıt spinli 2 ϵ konabilir. Sonra karşıbağ

orbitaline geçeriz ve buraya da 2é koyarız. Böylece 2é nun enerjisi düşük, 2é enerjisi yüksek olacaktır. Bu molekülü kararlı kılar mı?

hayır. Atomlarla mukayese edecek olursak, aynı enerji düzeyinde olacaktır. Molekül oluşurken ilave bir kararlılık enerjisi oluşmayacaktır. 2724 şimdi biraz daha ilerleyelim ve He2 için é dizilişini yazalım. TAHTA burada farklı orbitalleri doldururuz. Bu nedenle önce $(\sigma 1s)^2$ yazarız sonra $(\sigma 1s^*)^2$.

Bu iki é dizilişini mukayese edelim. Burada ne olduğunu bir düşünelim. 2é enerjisi azaltacak, 2é enerjisi yükseltecektir. Böylece He2 için net bir enerji kazancı olmayacaktır.

Burada bir tahminde bulunabiliriz. Şunu demek istiyorum, MOT He2 molekülünün mevcut olmadığını öngörmektedir, çünkü molekül oluşurken daha kararlı hale gelememektedir. 2815 Bu durumu bağ derecesi kavramını kullanarak ifade edebiliriz. Bağ derecesi eşittir $\frac{1}{2}(\text{bağ é ları sayısı toplamı} - \text{karşıbağ é sayısı toplamı})$. He2 için bağ derecesini hesap edersek 0 olduğunu görürüz. Bu bağ olmadığı anlamına gelir. Bağ derecesi 1 ise tek bağ, 1.5 ise bir tam ve bir yarım bağ, 2 ise çift bağ anlamına gelir. (Böylece devam eder).

Şimdi buradaki her iki molekül için bağ derecesini hesaplayalım. Bunun için é dizilişine bakmamız gerekir. He2 de bağ derecesi = $\frac{1}{2}(2-2) = 0$. Yani He2 de bağ yoktur. Şimdi H2 molekülüne bakalım. H nin bağ derecesi = $\frac{1}{2}(2-0) = 1$ dir. Bağ derecesini 1 bulduk. Buradaki bağ türü ne olabilir? Evet H2 de tekli bağ bekleriz.

Şimdi gerçeğe dönelim. 2928 He2 mevcuttur, fakat bilinen en zayıf kimyasal bağ dır, 1993 den beri varlığı bilinmesine rağmen, gerçekten, bu bir bileşik değildir. Bunun bir bağ olmadığına, ki doğada sıkça görebilirsiniz, sizi ikna edeceğim. Bu çok çok çok zayıf bir bağdır. Ayrışma enerjisi 0.01 kJ/mol dür. Bu değer mantıklıdır, çünkü molekül ile onu oluşturan atomlar arasında enerji farkı görmedik. MOT, basit düzeyde olmasına rağmen, burada kuvvetli bir bağ olmadığını öngörür. Burada gerçek bir bağ, kuvvetli bir bağ göremeyiz. Bunun tersine, H2 molekülündeki bağın ayrışma enerjisinin her yerde 432 kJ/ mol olduğu görülmüştür.

3015 Şimdi birazda MOT nin gücüne bakalım, bir molekülde hangi tür bağların olduğunu öngörmedeki gücüne veya bir bağ olup olmadığını öngörmedeki gücünü sınavalım. Şimdi başka bir örneğe bakalım. Li2 molekülünü ele alalım. Burada Li2 nin grafiğini görmektesiniz. Li molekülünde iki Li atomu bulunur. Her biri 3é na sahiptir. 3037 Li2 nin MO diyagramına hem 1s hem de 2s orbitallerini koymamız gerekir. MO diyagramında AO lerini çizirken, bunlara karşılık gelen MO leri de çizmeniz gerekir.

Bu şu anlama gelir: sigma 1s ve sigma 1s* ayrıca sigma 2s ve sigma 2s* MO orbitallerini koymamız gerekir. Burada bir şeye işaret etmek istiyorum. Burada gördüğünüz noktalı çizgiler MO lerin hangi AO lerinden oluştuğunu gösterir. 3105 Bir molekülde atom numaraları gittikçe büyürse, MO diyagramlarında bu noktalı çizgileri kullanmak, diyagramı daha anlaşılır hale getirir. Çünkü MO diyagramları gittikçe daha karmaşık hale gelir. Sınavlarda problemleri çözmek için MO diyagramlarını çizirken, bu noktalı çizgileri kullanmanız çok iyi olur. Bu hem sizin için hem de sınav kağıdını okuyanların MO lerin nereden geldiğini görmesi için yararlıdır.

3129 Li2 de MO lerine koymamız gereken toplam 6 é var demektir. Şimdi bunları doldurmaya başlayalım-- 2 tanesi $\sigma 1s$, 2 tanesi $\sigma 1s^*$, ve 2 tanesi $\sigma 2s$ orbitallerine yerleştirilir. H2 ve He2 de olduğu gibi, bunun bağ derecesini hesaplamamız gerekir. é dizilişini bilirsek bunu kolayca yapabiliriz, çizelgeye giderek bunu kolayca belirleyebiliriz, MO lerin isimleri enerji seviyelerinin üzerine yazılmıştır. **Biraz ilerleyelim. Bu molekülde bağ derecesinin ne olacağını düşünüyorsunuz?**

10 s daha. 3236 OK. Çok iyi. Geri dönelim ve kliker sorusunun cevabını hızlıca gözden geçirelim. Üçüncü şık doğrudur. Yani tek bağ vardır. Ders notlarınıza geri dönelim ve bunun ne anlama geldiğine bakalım. Tek bağ olduğu biliyoruz, çünkü $\frac{1}{2}(4-2) = 1$ bağdır. MOT Li molekülünde tek bağ olması gerektiğini öngörür. Referans kitaplarda, Li₂ nin deneysel ayrışma enerjisinin 105 kJ/mol olduğu görülmektedir.

Şimdi periyodik çizelgede MOT ni uygulayarak biraz daha ilerleyelim. Mesela, **Be₂ molekülü için** MO diyagramını oluşturalım. Be un her atomunda 4e bulunur. Bunları doldurmaya başlayalım. MO diyagramına toplam 8 tane e yerleştirmemiz gerekir. 2 tanesi sigma 1s, 2 tanesi sigma 1s*, 2 tanesi sigma 2s ve 2 tanesi sigma 2s*.

Şimdi de Be₂ molekülü için bağ derecesini hesaplayalım. 3400 Be₂ nin bağ derecesini hesaplamak için- e dizilişinin notlarınızda olup olmadığına bir bakın- OK evet notlarınızda var. O halde doğrudan bağ derecesini hesaplayalım. $\frac{1}{2}(4 \text{ tane bağ orbitalinde} - 4 \text{ tane karşı bağ orbitalinde}) = 0$.

3426 Burada bir saptama yapayım. Berilyumda bağ derecesini hesaplamak için molekülün bütün e larını kullanmak zorunda değilsiniz. Aslında, atom numarası 8 veya 10 olan atomlar ile molekül oluşturduğunuzda MO diyagramının tamamını çizmek zorunda değilsiniz. Söylemeye çalıştığım şey şu: bağ derecelerini hesaplarken sadece değerlik e larını kullanırsanız, daima aynı sonucu elde edersiniz. Şimdi bunu kendi kendimize ispatlayalım. sadece değerlik e larını kullanarak bağ derecesini hesaplayalım. Be atomunun değerlik e nu kaç tanedir? 2 . karşı bağda kaç e bulunur? 2 o halde $BD = \frac{1}{2}(2-2) = 0$, gördüğümüz gibi aynı çıktı. MOT göre Be₂ bağ yoktur, çünkü bağ derecesi 0 dir. Aslında bu bağ çok çok zayıftır, hatta olduğu bile söylenemez. Deneysel bağ ayrışma enerjisi 9 kJ/mol dür.

Şimdiye kadar sadece s orbitali içeren iki atomlu molekülleri gördük. Eminim p orbitali olduğunda ne yapacağımızı düşünüyorsunuz. Aslında aynı şeyi yapacağız. İki tane p atom orbitalinin doğrusal bileşimini alacağız. 3544 Sonra sigma veya pi MO lerini elde edeceğiz.

Önce, hem 2px hem de 2py orbitallerinin doğrusal birleşimine bir göz atalım. Bunların şekilleri aynıdır. Bunlar p orbitallerinin dalga fonksiyonlarının şekilleri veya orbitallerinin şekilleridir. Burada 2pxa orbitali 2pxb orbitali ile birleşir, veya yine şekilleri aynı olduğu için, 2pya orbitali ve 2pyb orbitali ile birleşir. Her iki durum için de önce yapıcı girişimi konuşalım. Bu iki orbital bir araya gelir bu bölgede dalga fonksiyonu artar, bu gördüğümüz yapıcı girişimdir.

Şimdi, bu MO lerini isimlendirelim. Buradaki düz çizgi bağ eksenini göstermektedir ve üzerinde bir tane düğüm düzlemi vardır. s orbitallerini birleştirdiğimizde, bunu daha önce görmemiştik. Bu orbitale pi MO adı verilir. Yada, px AO orbitalleri birleşiyorsa pi_{2px} MO ya da py AO birleşiyorsa pi_{2py} MO adı verilir.

Burada bir şeye işaret etmek istiyorum. 3656 Bunlara pi orbitalleri dememizin nedeni, bağ eksenini doğrultusunda düğüm düzlemine sahip olmaldan kaynaklanır. Pi Molekül orbitalleri bağ eksenini üzerinden geçen düğüm düzlem düzlemine sahiptir. Unutmayın, bu bizim bağ eksenimizdir, bu bölgede, bu düzlem üzerinde dalga fonksiyonunun sıfıra eşit olduğunu görmektesiniz. Bu düğüm düzlemidir. Bu nedenle sigma yerine pi orbitali adı verilir.

Şimdi de dalga fonksiyonunun karesini yani olasılık yoğunluğunu düşünelim. 2Px pi molekül orbitalini konuştuğumuzda, olasılık yoğunluğu (pi_{2px}) kare dir. Bunu AO lerinin toplamı şeklinde ifade edersek, dalga fonksiyonlarının karesini aldığımızda şunu elde ederiz. (pi_{2px})² =

$(2p_{xa} + 2p_{xb})^2$ veya bu ifadeyi açtığımızda $(2p_{xa})^2 + (2p_{xb})^2 +$ yine girişim terimi olan $2(2p_{xa})(2p_{xb})$ elde ederiz. Bu durumda, bu yapıcı girişim mi yoksa yok edici girişim midir?

Yapıcı girişim dir. Katsayısı pozitifdir. Burada dalga fonksiyonları toplanmaktadır ve merkezde fonksiyon daha da artmaktadır.

Yapıcı girişimi gördük. Şimdi de yok edici girişime bir bakalım. Burada renkleri zıt fazlı veya zıt işaretli $2p$ orbitallerinin dalga fonksiyonunu göstermek için değiştirdim. Bunların doğrusal bileşimini almak için zıt fazlı $2p_{xa}$ ve $2p_{xb}$ dalga fonksiyonlarını birbirinden çıkarmamız gerekir. Benzer şekilde, zıt fazlı $2p_{ya}$ ve $2p_{yb}$ dalga fonksiyonlarını da çıkarmak. Bu durumda tam noktadan geçen düşey düzlemde dalga fonksiyonları birbirini yok eder. Böylece iki tane düğüm düzlemine sahip oluruz. Bu karşı bağ orbitalidir. Bu durumda, çekirdekler arasındaki düşey düzlemde ϵ yoğunluğu sıfır olur.

Bu karşı bağ orbitalini π $2p_x^*$ şeklinde isimlendiririz, $2p_y$ AO lerinde oluşana da π $2p_y^*$ deriz. π^* orbitalleri iki tane p_x veya iki tane p_y orbitallerinin yok edici girişim sonucu elde edilir.

Şimdi bunları p orbitali içeren gerçek örnekler üzerinde görelim. Önce B_2 molekülüne bakalım. B atomunda kaç tane ϵ vardır? 5 tane. *Bazı ellerin yükseldiğini görüyorum.* Evet 5 ϵ nu var, ama burada sadece 3 ϵ nu kullanacağız. Bu ϵ lar neyi temsil eder? Evet. Değerlik ϵ larını temsil eder.

Bazen MO diyagramını çizmek için tüm ϵ ların dahil edilip edilmeyeceğini sorarsınız. Bazen özel olarak, “sadece değerlik ϵ larını dahil ediniz” diye söylenir. Bu durumda, iç orbitallerin tamamen dolu olduğunu kabul ederiz. Bu örnekte, yani B_2 molekülünde MO diyagramını çizerken sadece değerlik ϵ larını kullandık. her bir B atomu için 3 tane ϵ ilave ettik. Burada $2p_x$ ve $2p_y$ orbitallerinin birleştirilmiş şeklini görüyorsunuz. Oluşan π bağ MO lerinin enerjisi daha düşüktür. π karşı bağ MO lerinin enerjisi ise daha yüksektir. $2p_z$ orbitallerinin nerede olduğunuz sorabilirsiniz. Bunu biraz sonra göreceğiz. Şimdi önce, Be_2 molekül orbitallerini dolduralım, Bunun için aşağıdan başlarız. 2ϵ $\sigma 2s$ MO ne, 2ϵ $\sigma 2s^*$ MO ne, sonra π orbitallerine geçeriz, π_{2px} ve π_{2py} orbitallerine birer ϵ yerleştiririz. Daha önce söylediğim gibi, AO lerin doldurulmasındaki kurallar MO lerin doldurulmasında da geçerlidir.

Şimdi değerlik ϵ dizilişinin ne olacağına bir bakalım. Bunun için B_2 molekülünün değerlik elektron MO diyagramına bakalım. şimdi değerlik ϵ için ϵ dizilişini yazacağım.

$(\sigma 2s)^2(\sigma 2s^*)^2(\pi_{2px})^1(\pi_{2py})^1$. Bu B_2 için değerlik ϵ dizilişidir. B_2 için bağ derecesi nedir? Biliyorsanız söyleyin. 1. Buraya yazmayacağım, ama 1 dir. Bunun 1 olduğunu hesaplayabiliriz. $BD=1/2(4-2)=1$ dir.

Şimdi başka bir örneğe geçelim, C_2 molekülünü konuşalım. Sadece değerlik ϵ larını konuşalım. C atomunun 4 değerlik ϵ vardır. Şimdi C_2 nin MO diyagramını doldurmaya başlayalım. Molekül orbitallerine toplam 8 tane ϵ yerleştireceğiz. 2 taneyi $\sigma 2s$, 2 taneyi $\sigma 2s^*$ koyarız. Sonra π orbitallerine paralel spinli birer ϵ yerleştiririz. Böylece π_x ve π_y orbitallerinde

birer ϵ numuz olur. Elimizde 2 ϵ numuz kalır. Bununla π_x ve π_y orbitallerindeki ϵ ları eşleştiririz.

Şimdi C2 için değerlik ϵ dizilişini yazalım. *Bunları yazarak pratik yapmanızı istiyorum.*

Daima sigma başlamanız gerekir, sonra orbitalin numarası yazılır. $(\sigma 2s)^2(\sigma 2s^*)^2$. pi 2px de kaç tane ϵ var? 2. Ve pi 2py de 2 ϵ var- $(\pi_{2px})^2(\pi_{2py})^2$ - Şimdide bağ derecesinin ne olacağına bakalım. C2 için BD nedir? 2.

2? OK. 2,4,6 -2, böylece BD= $\frac{1}{2}(6-2)=2$ dir. C2 molekülünde çift bağ bekleriz. C2 için iki bağ, B2 için ise tek bağ öngörülür.

Bu iki bağın deneysel ayrışma enerjilerinin farklı olmasını bekleriz. B2 de tek bağ vardır ve bu bağı kırmak için gereken enerji 289 kJ/mol dür. C2 için iki bağa karşılık gelen ayrışma enerjisi 599 kJ/mol dür, ve kırmak için daha çok enerji gerekir.

Genel olarak gördüğümüz şey, aynı atomları mukayese ediyorsak, bu daima doğrudur. **Ve** genel olarak farklı moleküllerdeki bağ enerjilerini mukayese ediyorsak, şunu biliriz: çift bağ tek bağdan daha kuvvetli, üçlü bağdan daha zayıftır. Tabi ki en zayıf bağ, bağ yapmayan bağdır (yani nonbonding).

Şimdi de 2pz orbitalinin bulunduğu durumları konuşalım. Benzer şekilde burada da 2pz orbitalinin doğrusal bileşimi alınır. Bu iki 2pz orbitalii arasında yapıcı girişim varsa, oluşacak MO nin şeklini ekranda görmektesiniz. Sizce bu pi orbitali mi yoksa sigma orbitali midir?

Her iki cevabı da duyuyorum, bazılarınızın sigma dediğini duydum. Doğru cevap, gerçekten, sigma olacaktı. Buna σ_{2pz} orbitali adı verilir. Çünkü bağ eksenine baktığımızda, bağ eksenini boyunca düğüm düzlemi gözlenmez, yani bağ eksenini etrafında silindirik simetrik, bu nedenle sigma orbitali adı verilir. Bazı p orbitalleri pi MO leri, bazı p orbitali sigma MO leri oluşturur. Özellikle, pz orbitali sigma bağı oluşturur. Bu sınıf için bilmeniz gereken minimum neden şudur; çekirdeklerarası bağ eksenini daima z eksenini olarak seçilir. Pz orbitalleri bu eksen üzerinde uç uca tek lop örtüşmesi yaparlar. Bu nedenle molekülün ortasında ϵ yoğunluğu artar. İki tane pz orbitalinin bir araya gelerek, yapıcı girişim oluşturduğunu görmektesiniz.

Şimdi de karşı-bağ orbitali hakkında konuşalım, burada yok edici girişim oluşur. Yok edici girişimde, iki atom arasındaki dalga fonksiyonları kısmen birbirini yok ederler ve bunun sonucunda merkezde bir düğüm düzlemi oluşur. Bu bağ hangisidir? sigma mı ? pi mi? Evet hala sigma. Merkezde aşağı doğru, yani düşey düzlemde bir düğüm düzlemi görülmektedir. Burada bir şeye işaret etmek istiyorum. Bağ eksenini üzerinde bir düğüm düzlemi varsa buna pi orbitali denir. Bu nedenle bu hala sigmadır-- σ_{2pz}^* orbitali dir. **Burada yok edici girişim oluşur.**

2pz orbitali içeren moleküle örnek olarak O2 molekülünü alalım. Önce şuna işaret etmek istiyorum. O2 molekülünde sigma $2\sigma_{2pz}$ orbitalinin enerjisi 2π orbitallerinden daha düşüktür. Ve $2\sigma_{2pz}^*$ orbitalinin enerjisi ise $2\pi^*$ orbitallerinden daha yüksektir. Burada O2 molekülü için sadece değerlik ϵ ları gösterilmektedir. Her bir O atomunun 6 tane değerlik ϵ nu vardır.

Bunları daha öncekilere benzer şekilde dolduralım. Burada σ_{2pz} orbitalleri de dolacaktır. Böylece 2 σ_{2s} de, 2 σ_{2s}^* da, 2 σ_{2pz} de, sonra 1 tane π_{2px} ve 1 tane π_{2py} .

Şimdi ϵ dizilişini yazabiliriz. Sanırım bunun ϵ dizilişi ders notlarınızda bulunmaktadır. O2 nin bağ derecesi nedir? 2 dir. Özür dilerim. ϵ ların hepsini koymamışım. OK 4756 toplam 2,4,6,8..12 ϵ koymamız gerekiyordu. π_{2px} ve π_{2py} orbitallerini de dolduralım, son iki tanesi π^* orbitallerine girecektir. Bunu kasten yapmadım, fakat bu size bir şeyi gösterdi. AO lerindeki ϵ sayıları toplamı ile MO lerindeki ϵ sayısı toplamı birbirine eşit olmalıdır. eşit olmalıdır Toplam değerlik ϵ nın hepsi MO lerine konulmuş olmalıdır. Burada ϵ sayımı yapmamışım. Mutlaka ϵ sayımı yaptığınızdan emin olun. Özür dilerim. Böylece π_{2px}^* ve π_{2py}^* orbitallerinde 1 er ϵ bulunacaktır.

Şimdi bağ derecesini bulalım. Doğru yaptınız. 2 olmalıydı. Bağlar ve karşı bağlardaki ϵ sayıları toplamının farkını alıp ikiye bölmemiz gerekirdi. Burada vurgulamak istediğim şey şudur. Görüldüğü gibi MOT göre O₂ molekülü biradikaldir. Hatırlayın, tanıma göre, eşleşmemiş ϵ na sahip olam moleküllere radikal diyorduk. Gördüğünüz gibi O₂ molekülünde iki tane eşleşmemiş ϵ bulunmaktadır- biri π_{2px}^* diğeri π_{2py}^* orbitallerinde bulunmaktadır. Bu Lewis yapılarını kullanarak öngöremediğimiz yapılardan biridir. ama MOT ile öngörebildik. O2 biradikaldir. Lewis yapıları ile yapamadığımız buna karşılık MOT si yapabildiğimiz bir örnek olması bakımından çok önemlidir.

Aynı çekirdekli moleküllere ait bir tane daha örnek vermek istiyorum. Bu N₂ molekülü dür. Önce şuna işaret etmek istiyorum. O₂ molekülü ile N₂ molekülünü enerji diyagramını karşılaştıracak olursak, σ orbitali ile π orbitallerinin enerjileri yer değiştirmiştir. Bu bir sapmadır. AO lerini doldururken bazen benzer sapmalar ile karşılaşmıştık. Bu hatırlamanız gereken şeylerden biridir. 4942 Burada hatırlamanız gereken şudur. Eğer Z = 8 veya daha büyükse, O₂ burada kırılma noktasıdır, sigma 2p orbitalinin enerjisi , pi 2p orbitalinden daha düşük enerjide bulunur. Z= 7 veya daha küçük ise böyle olur. N stomunun atom numarası nedir? 5?. --5 tane değerlik ϵ nu vardır. Fakat atom numarası 7 dir. Yani Z=7 dir. – bu kırılma noktasıdır. Gerçekten, N₂ molekülünde σ orbitalinin enerjisi π orbitalinden daha yüksektir. Bunlar hatırlamanız gereken çok önemli ayrıntılardır. Bunu notlarınıza yazdım, bunu unutmamanız için ders notlarınıza büyük bir yıldız koyabilirsiniz. MO lerin çiziminden sorumlu olacaksınız. MO diyagramını bu şekilde doldurun. Ve N₂ molekülünde σ orbitalinin enerjisinin π orbitalinden daha yüksek olduğunu unutmayın. N₂ molekülünde toplam 2,4,6,8,10 tane değerlik ϵ nu vardır. Buradaki MO lerini doldurmadan önce ϵ ları saydım. Şimdi dolduralım. 2 ϵ σ_{2s} de, 2 ϵ σ_{2s}^* da, 2 ϵ π_{2px} ve 2 ϵ π_{2py} de ve sonra 2 tane σ_{2pz} de..

Bu bizim N₂ molekülünün MO diyagramıdır. Tekrar ediyorum, sizin için yazdım.fakat ϵ dizilişinin ne olduğunu siz çözebilirsiniz. Bu şekilde yazmanız gerekir. N₂ nin bağ derecesi nedir?

Evet 3 olacak. Devam edin. Bunu siz hesaplayabilirsiniz.

Bugünkü dersin sonuna geldik. Cuma günü farklı çekirdekli örnekleri bitireceğiz.