

22 Hadi başlayalım.  $4 dz^2$  orbitalinin hal fonksiyonu nedir? 10 saniye süre. Çok iyi. Herkes orbital isimlerinden hal fonksiyonlarına geçişi öğrenmiş gibi görünüyor. Bu önemli. Bu klikir sorusuna biraz daha ayrıntılı bakalım. Problem-setinizi yaparken, bu tür soruları cevaplandırmak, size basit gelmeyebilir. Fakat gerçekten, bir hal fonksiyonunda veya orbital isimlerinde kaç tane farklı orbital olacağını kolayca düşünebilirsiniz.

108 ikinci kliker sorusuna geçelim ve bir tane daha yapalım. İki tane kuantum sayısına sahip bir atomda kaç tane orbital bulunur? Diyelim ki bu kuantum sayıları  $n=4$  ve  $l = -2$  olsun. Bu kuantum numaralarında kaç tane farklı orbitale sahip olabilirsiniz? Bu haftasonu baktıysanız problem setinizde benzerleri var, bu soru size aşına gelmeliydi. Şimdiye kadar yapmış olmalıydınız, ilave 10 saniye daha veriyorum.

155 OK. Çoğunuz doğru yapmış, bu iyi bir başlangıç oldu, fakat bazılarınız çelişkili cevaplar vermiş. Hadi bu soruya bir bakalım.

Söylediğimiz şuydu TAHTA,  $n=4$  ve  $ml = -2$  idi,  $n=4$  ise sahip olacağımız en yüksek  $l$  değeri nedir? 3, OK,  $l$  üç değerini almalıdır, çünkü  $ml = -2$  ye eşittir.  $l$  nin alacağı ikinci en yüksek değer nedir? 2 OK. Bu orbital de olabilir.  $l = 1$  değerini alabilir mi? Bu orbitale sahip olabilir miyiz? Hayır, sahip olamayız. Çünkü,  $l = 1$  değerini alırsa,  $ml = -2$  değerini alamaz, çünkü manyetik kuantum sayısı sadece  $-l$  ile  $+l$  arasındaki değerleri alır. Yani  $l = 1$  mümkün değildir, çünkü başlangıçtaki şartlara uymaz. Bu durumda sadece iki farklı  $l$  değeri dikkate alınır.  $M$  değerini zaten biliyoruz. Şimdi orbitalleri sayalım. Orbitaller üç kuantum sayısıyla tanımlanır. Sonuçta toplam 2 orbital vardır. Her hangi bir kuantum sayısı kombinasyonu görürseniz, mesela, kaç tane orbital olacağına hemen karar vermek size yanılabilir, bütün olası orbitalleri yazarak denemelisiniz.

Bugün H atomu ile ilgili tartışmaları bitireceğiz. Pazartesi günü S orbitallerinin radyal olasılık dağılımını konuşmaya başlamıştık. Onu bitireceğiz ve p orbitallerini konuşmaya devam edeceğiz s orbitallerinde yaptığımız gibi önce şekilleri hakkında konuşacağız, sonra radyal olasılık dağılımına geçeceğiz, daha sonra s ve p orbitallerinin farklı yarıçaplarının radyal olasılıklarını mukayese edeceğiz, bunu da yaptıktan sonra çok elektronlu sistemlere geçeceğiz.

403 Dikkat ettiğiniz gibi, bu noktaya kadar yaklaşık 6.5 ders yaptık ve bu sürede sadece tek elektronlu sistemleri konuştuk, sadece H atomunu anlattık. İleriye projeksiyon yaparsak, yarıyıl sonuna kadar ancak karbon atomuna kadar gelebileceğimizi düşünebilirsiniz. Sizi temin ederim, dönem sonuna kadar, her atom için 6 ders ayırmayacağım, aslında H atomu hakkında öğrendiğimiz bütün prensipleri çok elektronlu atomlara uygulayacağız, fakat bazı değişiklikler yapacağız, e-e itme terimlerini ilave edeceğiz, aynı genel fikirleri kullanarak herhangi bir çok  $é$  lu atomu düşünebileceğiz ve SE ni kullanarak çok elektronlu sistemlere uygulayacağız.

455 Karbon atomundan bahsedecek olmamız çok iyi haber. Organik kimyacıyım, bu nedenle karbon atomunu çok severim, bahsetmek istediğim favori atomlarımdan biridir. Bu noktadan sonra karbon bağları gibi, tepkimeleri gibi ilginç şeylerden bahsedebileceğiz. Çok e- lu atomlar hakkındaki düşüncelerimizi ve yorumlarımızı bitirdikten sonra, bunun gibi diğer ilginç şeyler hakkında konuşabileceğiz.

519 Kaldığımız yerden devam edelim. Öncelikle, Pazartesi gününden beri hala H atomunu konuşuyoruz. Pazartesi günü, bir dalga fonksiyonu için SE nin çözümünü tartışmıştık. Ayrıca, çözdüğümüzde veya SE nin çözümüne baktığımızda şunu görmüştük. H atomunun veya bir orbitalin dalga fonksiyonunu tam olarak tanımlamak için 3 farklı quantum sayısına ihtiyacımız vardı. Gerekli olan sadece n baş quantum sayısı değildi, ki enerjiyi belirlemek için bu kuantum sayısı gereklidir, ayrıca l ve m kuantum sayılarına da ihtiyacımız vardı. Bununla ilgili bir tıktama sorusunu biraz önce yapmıştık.

601 Ayrıca şunları konuşmuştuğuk, dalga fonksiyonuna ne deriz? Dalga fonksiyonu ne anlama gelir? Gibi soruların cevaplarını vermiştik. Önce, klasik benzetmeler yönünden konuştuk, bir dalga fonksiyonunun karşılığı yoktu, klasik terimlerle düşünöcek olursak dalga fonksiyonlarını resmetmenin bir yolu bulunamıyordu, fakat dalga fonksiyonunun karesini için bir yorum yapabiliydik. Bir dalga fonksiyonu seçip onun karesini alabiliydik, bir atomda belirli bir noktada elektronun bulunma olasılık yoğunluğuna eşit olacaktı.

Bir **genel** şekil görebilmek açısından bu faydalı bir terimdir, fakat aslında bir elektronun çekirdekten ne kadar uzak olduđu ile ilgileniyorsak, olasılık yoğunluğunu konuşmak yerine, ki belli bir hacimdeki olasılıktır, radial olasılık yoğunluğunu konuşmak çok daha faydalı olacaktır. Radial olasılık yoğunluğu, çekirdekten belli bir uzaklıktaki çok ince bir küre yüzeyinde elektronun bulunma olasılığıdır, uzaklık  $r$  olarak tanımlanmıştır, çok çok ince küresel kabuk ise  $dr$  ile ifade edilmiştir.

706 Kısaca şunu söylüyoruz, çekirdekten belli bir  $r$  uzaklığında çok ince bir kabuk alırsanız, bu yarıçapta elektronun bulunma olasılığıdır, radyal olasılık dağılımı için verdiğimiz tanım budur. 723 şimdi formülüne bakabiliriz.

Bu, s orbital için ROD nin formülüdür, şüphesiz küresel simetriktir. p ve d orbitallerini konuştuğumuzda biraz farklı olacaktır, burada eşitliklerine girmeyeceğiz ama bu size ROD nin ne olduđu hakkında bir fikir verir, ne hakkında konuştuğumuz anlaşılır.

742 Gerçekten yapacağımız şey, olasılık yoğunluğu yerine biraz önce bahsettiğimiz olasılığı koymaktır, olasılık yoğunluğunun dalga fonksiyonunun karesi olduğunu biliyoruz. Bunu belli  $r$  uzaklığındaki çok ince küre yüzeyi ile çarpın. Buradaki hacim hakkında konuşacak olursak, bu yüzey alanıdır, yani  $4\pi r^2$  dir, ve bunu  $dr$  kalınlığı ile çarparsınız. Bu hacim terimini alırsak, bu hacimdeki olasılık ile çarparsak, çekirdekten belli bir  $r$  uzaklığındaki e- nun bulunma olasılığını elde ederiz.

825 Pazartesi günü dersin sonunda bir örnek vermiştik. H atomunun 1s orbitalinin grafiğini çizmiştik, bu yarıçapın fonksiyonu olarak çizilmiş radial olasılık grafiğı idi. Bunu grafiğı çizdiğimizde bu eğriyi, olasılık eğrisini elde ettik, çekirdekten belli bir uzaklıkta e- nun maksimum bulunma olasılığı vardı ve buna en olası yarıçap dedik ve  $r_{mp}$  ile gösterdik.

855 H atomunun 1s orbital için en olası yarıçap  $a_0$  uzaklığına karşılık gelir, Hatırlayın  $a_0$  Bohr yarıçapıdır, ve bir sabittir. Bizi ilgilendiren, endişelenmemiz gereken budur. Bohr modelini konuşmuştuğuk, bu modeled yarıçap belli bir uzaklıktaydı. Klasik bir modeldi, e- çekirdekten tam bu uzaklıkta bulunur derdik,.QM ile bunu yapamazsınız. Çekirdekten belli bir uzaklıkta e- nun bulunma olasılığından söz etmek daha doğru bir resimdir. Burada, 1s orbitalinde en olası yarıçap,  $a_0$  Bohr yarıçapına karşılık gelir.

931 Burada şimdi bahsedeceğimiz diğer bir şeyi derste anlatmak bende biraz stress yaratır, çünkü öğrenciler için biraz kafa karıştırıcıdır. Elimden geldiği kadar izah etmeye çalışacağım. Mesela farklı düğümler veya olasılığın olmadığı alanlar hakkında konuşacağım. 945 bir orbitalde, her zaman R nin sıfır olduğu bir yer vardır ve bu düğüm değildir. Radyal olasılık dağılım grafiğinde her zaman R nin sıfır olduğu bir yer vardır. Bunun üzerinde düşünelim.

956 Başlangıçta sezgisel olarak tersmiş gibi görünebilir. Çünkü çekirdekteki olasılık yoğunluğunun en büyük olduğunu biliyoruz, bir hacim içindeki e- olasılığa göre, çekirdek üzerinde  $\epsilon$  nun bulunma olasılığı çok çok yüksektir, fakat unutmayın, burada olasılık yoğunluğunu bir hacimle, küre yüzeyi üzerindeki bir hacim ile, çarpmamız gerekir. 1014 burada r yi sıfır olarak tanımladığımızdan, aslında olasılık yoğunluğunu sıfır ile çarpıyoruz demektir. Burada sıfır noktasına sahip olmamızın nedeni budur. Tekrar altını çizelim, bu radyal düğüm değildir, bu grafiğin başlangıç noktasıdır, çünkü olasılık yoğunluğunun sıfır ile çarpılmasından kaynaklanır.

1037 diğer dalga fonksiyonlarının radial olasılık dağılımlarına bakalım, 2s ve 3s orbitallerinin dalga fonksiyonlarını inceleyelim. radial olasılık dağılımlarına göre nasıl çizileceğini düşünelim. Burada radyal olasılık dağılımını, yarıçapın bir fonksiyonu olarak çiziyoruz, ve 2s orbital için, buna benzer bir grafik elde ederiz.

1114 Tekrar sıfırdan başladık, burada bir düğüm var, ve tekrar en olası yarıçapı tanımladık. 2s orbital için en olası yarıçap  $a_0$  in 6 katıdır.

ROD nun bize ne söylediğini bir düşünecek olursak, H atomunun 2s orbitalindeki bir elektron 1s orbitalinden 6 kat daha uzakta bulunur. Diğer bir deyişle, bunu şöyle ifade edebiliriz. H atomunun birinci uyarılmış hali, yani  $n=2$  hakkında düşünecek olursak, H atomunun temel halinden veya 1s orbitalinden çok daha büyüktür. Büyük dediğimizde, konuştuğumuz şeyin klasik bir tanım olmadığını hatırlayın, olasılıktan söz ediyoruz, en olası yarıçapın çekirdekten çok daha uzak olduğunu söylemek istiyoruz.

1216 3s orbitaline de bakabiliriz. Bu durumda buna benzer bir grafik elde ederiz, bunu ders notlarınıza çizebilirsiniz, yine,  $\epsilon$  nun en çok bulunduğu en olası yarıçapı tanımlayalım. 3s orbitalinde en olası yarıçap  $a_0$  in 11.5 katıdır.

H atomunda 3s orbitalindeki bir  $\epsilon$  nun çekirdeğe olan uzaklığı, 1s orbitaline göre 11.5 kat daha fazladır. Çekirdekten 11.5 kat daha uzaktır.

Şimdi bu konuda sorumlu olduğunuz yerleri işaret edeceğim. H atomunun 1s orbitalinin en olası yarıçapının  $a_0$  a eşit olduğunu bilmelisiniz. 2s in 1s den daha büyük olduğunu, benzer şekilde 3s in de 2s ten daha büyük olduğunu bilmelisiniz, yani gittikçe daha büyük olduğunu bilmelisiniz. Ama 3s in 1s ten 11.5 kat daha uzakta olduğunu bilmek zorunda değilsiniz, sadece eğilimi bilmeniz yeter.

1335 işaret edeceğim diğer nokta, bu iki grafikte, düğümler vardır, aynı zamanda 2s orbitalinde kaç tane radial düğüm olacağını belirledik, radial düğüm sayısına göre, 1 düğüm olduğunu gördük. 3s orbitalinde kaç tane radial düğüm vardır? 2 iyi, hiç kimse  $R=0$  dakini radial düğüm olarak saymamış, memnun oldum. 3s orbitalinde 3 tane düğüm olduğunu ayrıca bu formülden hesaplayabiliriz, şöyleki  $n-l-1$ , radyal düğüm sayısını verir. Ayrıca ROD na bakabiliriz ve kaç tane düğüm olduğunu sayabiliriz.

1416 Buradaki iki duruma bakacak olursak ve onları klasik bakış açısına göre düşünersek, bunu yapmamız doğaldır çünkü hayatımızı bu dünyada yaşarız, çoğumuz her zaman şeyleri atomik boyutta düşünmeyiz. Mesela, buradaki 3s orbitaline bakacak olursak, bunun nasıl olacağını sorabiliriz, çünkü şöyle diyoruz, mesela, bir e- nun burada (ortada) bulunma olasılığı vardır diyoruz, sonra e- nun daha uzaktaki bir yerde de bulunma olasılığı vardır diyoruz, ayrıca bunların arasında bir düğüm olduğunu ve bu noktada e- nun bulunma olasılığının olmadığını söylüyoruz.

1454 Bunu bir düz çizgi üzerinde düşünebiliriz, bu düz çizgi üzerinde ilerlerken “ a noktasından c noktasına gidiyoruz fakat b noktasından geçmiyoruz” diyoruz. Böyle düşünmek bizim biraz kafamızı karıştırır, bu güzel soruya , belkide şöyle cevap verebilirsiniz. Burada olasılık sıfır değildir, belkide çok çok küçük bir olasılık vardır, ve aslında, electron bazen bu düşük olasılıklı yerden geçebilir, buradaki olasılık çok küçük olduğu için görememe nedenimiz bu olabilir, aslında bu cevap doğru değildir. Aslında “e- nun burada bulunma olasılığı gerçekten sıfır dır” cevabını vermemiz gerekir. Kısaca, evet diyebiliriz, b noktasından geçmeden a noktasında c noktasına gidebiliriz. eğer parçacıktan söz ediyorsak, bu biraz şaşırtıcı olabilir, fakat hatırlayın e - nun dalga özelliği hakkında konuşmuştuk.

1548 quantum mekanik yorumuna göre, gerçekten burada e- nun olasılık yoğunluğu vardır, orada da olasılık yoğunluğu vardır ve bu ikisinin arasında olasılık yoğunluğu yoktur...eğer duran dalgayı düşünürseniz, mesela burada farklı x değerlerinde genliğe sahip olabilirsiniz, fakat ayrıca genliğin sıfır olduğu yerler da vardır, burada e nun sadece dalga olduğunu düşünürsek, tanecik özelliğini unutursak, o zaman mantıklı olabilir, aksi takdirde bunu düşünmek çok cansıkıcı olabilir, aslında QM ni konuşuyoruz, burada ne olduğu belli değildir.

*1636 PARDON, hemen düzeltiyim, n-l-1 olacaktı 3-0-1=2 radyal düğüm olmalı.*

1659 şimdi clicker sorusuna geçelim, radyal olasılık dağılımı ile ilgili. Kaç tane düğüm olduğunu ve ROD neye benzeyeceğini bulacaksınız. Burada, 5s orbitalinde kaç tane düğüm vardır ve 5s orbitalinin radyal olasılık dağılımı grafiği hangisi ile örtüşecektir? radial düğüm sayısı ile uyumlu olması gerekir.10 s daha. Bunu çok hızlı belirleyebiliriz.

1748 Tamam, % 82 doğru cevap vermiş. Burada 4 tane açılal düğüm olduğunu bilmeniz gerekirdi.  $5-0-1 = 4$  . soru var mı?

Bu grafikleri bilgisayarda çizmek benim için zor. Bu iyi bir nokta. Özür dilerim, sıfıra en çok yaklaştığım grafik bu.Bilgisayarda grafik çiziminde iyi değilim, evet sıfır noktasında sıfır olmalıydı, fakat çizgileri çok kalın yaptım, bunun yüzünden yanlış yaptıysanız, özür dilerim, benim hatamdı. Fakat burada 4 düğüm olduğunu görmeliydiniz, çünkü 5s orbitalinde 4 düğüm var, ayrıca sıfır noktası, düğüm olarak kabul edilmez, grafiği sıfırdan başlatabilseydim iyi olurdu, doğru cevap en alttaki olmalıydı.

ROD nın genel şeklini çizebilir ve hangisi olduğunu belirleyebilirsiniz, süphesiz, aralıkları tam olarak bilmeniz beklenmez fakat bunları bağıl olarak karşılaştırabilirsiniz. EVET?

1906 hayır, yok. Eğer gerçek grafiğini görmek istiyorsanız, kitabınızdaki bazı örneklere bakabilirsiniz. Bu, mesela, 6a0 a karşılık gelmez, fakat gerçekten iyi bir soru..bunu çizerken her bir pikte olasılık bu tarafa doğru gittikçe küçülür.

1926 Bunu Ders notlarınıza yazabilirsiniz, bu clicker sorusunu oradan almıştık. Şimdi p orbitallerini düşünmeye devam edelim. P orbitallerini konuşmak için iki yol var: ya dalga fonksiyonunun karesini, olasılık yoğunluğunu konuşuruz, veya radial olasılık dağılımını konuşabiliriz. p orbitallerini konuşmak, s orbitallerini konuşmaya benzer, ama aralarında fark vardır, burada farklı l değerleri bulunur, p orbitali için  $l=1$  dir, ve bildiğiniz gibi,  $L=1$  ise, bu alt kabukta toplam üç tane orbital bulunur. Son kuantum sayıları  $m=+1$  veya  $m=-1$  dir, bunlar  $p_x$  veya  $p_y$  orbitalleridir. Hatırlayın, bire bir korelasyon yapmadık, çünkü  $p_x$  ve  $p_y$   $m+1$  ve  $m-1$  orbitallerinin doğrusal kombinasyonudur. Eğer  $m=0$  ise doğrudan  $p_z$  orbitaline bakarız.

2032 s ve p orbital arasındaki en önemli fark şudur, p orbitalinde açısal momentum vardır, p dalga fonksiyonu gerçekten teta ve fi açısına bağlıdır, açısal bağımlılığı bunlardan kaynaklanır, bunun hakkında konuşacağız.

2052 burada göstereceğim şey ders notlarınızda yok. İlginizi çekiyorsa kitabınıza bakabilirsiniz, Bu çizelge doğrudan kitabınızdan alınmıştır, burada farklı orbitallerin dalga fonksiyonları gösterilmektedir. Daha önce bahsettiğim gibi, kitabınızda bir liste vardı. Burada, p orbitalinin açığa nasıl bağlı olduğu göstermek istiyorum. 2116 önce  $L=0$  orbitalini, yani S orbitalini, göstereceğim, s orbitaline baktığımızda, dalga fonksiyonunun açısal kısmının bir sabite eşit olduğunu görürsünüz.

Hatırlayın, toplam dalga fonksiyonunu radyal ve açısal kısımlara ayırmıştık. buradaki açısal kısma baktığımızda, burada  $1/4\pi$  nin karekökünü görürüz, açının ne olduğu önemli değildir, çünkü açığa bağlı değildir.

2140 tam tersine, p orbitaline baktığımızda,  $L=1$  olduğu durumda, dalga fonksiyonunun açısal kısmına bakarsanız, dalga fonksiyonunun ya teta ya, yada hem teta hem de fi ye bağlı olduğunu görürsünüz. e- nu bir orbital içinde tanımlarken açığa bağlı olduğunu biliriz. Bu şu anlama gelir, s orbitalinin tersine, p orbital küresel simetrik değildir—çekirdekten belli bir uzaklıkta aynı şekle sahip değildir. P orbitallerinin şekillerini pek çoğunuz daha önceden gördüğünü sanıyorum. p orbitallerinin bazı resimlerini önceden görmüş olduğunuzdan eminim.

2222 Burada bir şeye işaret etmek istiyorum. P orbitalinde iki tane lob vardır, bu loblar farklı renklerde gösterilmiştir, bunların fazları farklıdır. Bazen p orbitallerine baktığımızda lobların üzerine - ve + yazıldığını görürsünüz. Bunlar negatif veya pozitif yük değildir, sadece dalga fonksiyonundaki faz işaretlerini gösterir, bu faz işaretleri dalga eşitliğinden kaynaklanır. Hatırlayın, bir dalgada artı ve eksi genlikler vardı.

Bağ kavramından veya bağ oluşumundan bahsederken orbitallerin fazlarının çok önemli hale geleceğini göreceğiz. Senenin başında bağ kavramını vereceğimizden söz etmiştik, kısa bir süre sonra bu konuya geçeceğiz. İki tane p orbitali yapıcı girişim yaparsa, diğer bir değişle, girişim yapan lobların işaretleri aynı ise, yani, her iki lob eksi veya artı fazlı ise bağ meydana gelir. Halbuki, fazların işaretleri aynı değilse, bağ oluşmaz. Bağ konusuna geçtiğimizde bunların önemli olduğunu göreceğiz, fakat şimdi kısa bir not alabilirsiniz, iki tane lobumuz varsa, fazları aynı değilse, bağ meydana gelmez.

2340 Resme tekrar bakalım, bu iki lop birbirinden bir düğüm düzlemi ile ayrılmıştır, burada portakal renk ile gösterilmiştir, bu iki lobu birbirinden ayıran düzlem üzerinde e- yoğunluğu bulunmaz, bu düzlem üzerindeki noktalarda dalga fonksiyonu sıfıra eşittir, bu nedenle dalga fonksiyonunun karesi de sıfıra eşit olacaktır.

bu düzlem üzerindeki herhangi bir yerde p orbitalinin bulunma olasılığı sıfırdır, düğüm düzlemi her durumda doğrudan çekirdeğin üzerinden geçer, bu nedenle, ayrıca, p é larının çekirdek üzerinde bulunma olasılığı sıfırdır diyebiliriz.

2414 tekrar ediyorum, bu olasılık yoğunluğu grafiğini kullanabilirsiniz, psi kareye karşı çizilmiştir, bu grafikte noktaların yoğunluğu, olasılık yoğunluğu ile orantılıdır. bunlara ayrı ayrı bakarak şunları söyleyebiliriz. 2pz orbitaline bakacak olursak, e- nun en yüksek bulunma olasılığı z eksenini üzerindedir, tam burada görebilirsiniz.

Bu p orbitallerinin fazlarını düşünecek olursak, z ekseninin pozitif olduğu yerde fazın işareti artıdır. z eksenini negatif olduğu yerde fazın işareti eksidir. Hatırlayın, bağ oluşumunda bu kavram çok önemlidir, şimdilik çok fazla endişelenmenize gerek yok,

2503 Pz orbitalindeki düğüm düzleminin nerede olduğunu düşünebiliriz. Burada düğüm düzleminin nerede olduğunu gördünüz mü? Düğüm düzlemi ne olabilir? Evet XY düzlemi dir. Orada e- yoğunluğunun olmadığını görebilirsiniz. Benzer şekilde, sağdaki polar koordinatlara bakarsak, XY düzlemi teta açısının nın sıfır olduğu yerdir. Düğüm düzlemini başka bir yoldan şöyle tanımlayabiliriz, teta açısının 90 derece olduğu yerdeki düzlem, düğüm düzlemdir.

şimdi 2px orbitaline bakalım. Bu olasılık yoğunluğu haritasıdır. Burada psi kare den bahsedeceğiz. En yüksek olasılık X eksenini üzerindedir. X in artı olduğu bölgedeki dalga fonksiyonu artı fazlıdır. Bu durumda düğüm düzleminin hangisidir? YZ düzlemi dir, diğer bir deyişle, fi açısının 90 derece olduğu düzlemdir. Burada fi yi görebilirsiniz, fi yi 90 derece döndürün, yz düzleminin üzerine oluruz. Burada e- nun olasılık yoğunluğu sıfır dır.

2618 son olarak 2PY orbitaline bakalım. En yüksek olasılık Y eksenini üzerindedir. Y ekseninin artı olduğu bölgedeki lob artı fazlıdır, düğüm düzlemi XZ düzlemi olacaktır, fi nin 0 olduğu düzlem XZ düzlemdir.

2641 düğüm düzleminin ne anlama geldiği hakkında biraz daha özele girelim, düğüm düzlemi kavramının nereden geldiğine bakalım. Düğüm düzlemleri açısal düğümlerin bulunduğu yerlerde ortaya çıkar, Radial olasılık yoğunluk diyagramlarını verdiğimizde, Radyal düğümler hakkında konuşmuştuk. Burada açısal düğümler de bulunacaktır, açısal düğümler hakkında konuştuğumuzda, dalga fonksiyonundaki teta veya fi açısının değeri hakkında konuşuyoruz demektir, bu nedenle,  $\Psi^2$  veya olasılık yoğunluğu sıfır olacaktır.

2614 radyal düğümler, dalga fonksiyonu veya dalgafonksiyonunun karesinin sıfıra eşit olduğu R değeridir, dalga fonksiyonunun radial kısmı ile ilgilidir, halbuki, şimdi, açısal düğüm için dalga fonksiyonunun açısal kısmını konuşacağız.

2727 aslında tanımlamamız gereken 2 tip düğüm vardır, her ikisini de hesaplayabiliriz, bir orbitaldeki hem toplam düğüm sayısını hem de her bir düğüm sayısını ayrı ayrı belirleyebiliriz. Toplam düğüm sayısı, baş kuantum sayısı eksi 1 e eşittir. Açısal düğümleri konuşacak olursaki bir orbitaldeki açısal düğüm sayısı L nin değerine eşittir. Mesela, p

orbitallerine bakalım, her bir p orbitalinde 1 tane açısız düğüm vardır, çünkü p orbitalinde L bire eşittir.

Radyal düğüm eşitliğini son kez veriyorum. Radyal düğüm sayısı  $n-l-1$  e eşittir. Bu eşitlikleri her zaman kullanabilirsiniz, toplam düğüm sayısını biliyorsanız, açısız düğüm sayısını biliyorsanız, geride kaç tane radial düğüm kaldığını bulabilirsiniz, O zaman bu eşitliği hatırlamanıza gerek kalmaz.

2820 Birkaç örnek daha yapalım, hesaplaması çok kolaydır, bir orbitalde kaç tane düğüm olduğu, türleri ve sayısı hakkında fikir verir. Mesela, 2s orbitalinde, toplam düğüm sayısı kaçtır? 1 dediniz.,  $2-1=1$  toplam düğüm vardır Açısız düğüm sıfır dır, çünkü  $L=0$  dır, yani açısız düğümü yoktur. radial düğüm sayısı  $2-1-0=1$  dir, 1 tane radyal düğüm vardır.

2854 genel olarak bütün s orbitallerinde, toplam düğüm sayısı, radial düğüm sayısına eşittir, çünkü s orbitallerinde  $L=0$  dır. S orbitallerinde açısız düğüm yoktur.

Şimdi p orbitallerine bakalım. 2p orbitalinde kaç tane düğüm vardır? 1 tane,  $2-1=1$ , toplam düğüm sayısı 1dir.  $L=1$  olduğu için bir tane açısız düğüm vardır. Geride kaç tane radial düğüm kalır? 0 radyal düğüm. 2p orbitalinde bütün düğümler, açısız düğümdür.

Bir tane daha yapalım. 3d orbitalini konuşalım. Şimdi radial düğümler hakkında bir soru soracağım, H atomunun 3d orbitalinde kaç tane radial düğüm vardır? Başlayın ve 10 saniye süreniz var.

3009 OK çoğunuz doğru yapmış, bu bir alt kabuktur, bir tane olduğunu düşünebilirsiniz. Bunu hemen yazalım. Radial düğüm için  $N-L-1$  formülünü kullanalım. 3d orbitalinde N nedir? 3, L nedir? 2, ve eksi bir eşittir sıfır, 3d de hiç radial düğüm düzlemi yok

3044 bunu her bir orbital için hesaplayabiliriz, özellikle radial düğümler için hesapladığımızda, biraz daha ileri gideriz ve radial olasılık dağılım grafiklerini nasıl çizeceğimizi düşünürüz. bunu s orbital için yaptık, şimdi p orbital için yapacağız, sonra d orbital için. Öncelikle kaç tane düğüm olduğunu hesaplamalıyız, sonra grafiğin genel şeklini çıkartacağız.

3106 p orbitallerinin ROD ları ile şu anda gördüğünüz S orbitalinin ROD nı mukayese edelim, bu grafikleri karşılaştırarak bazı bilgiler elde ederiz. 2p orbitalini çizersek, burada gördüğünüz gibi sıfır radial düğüme sahip. Burada dikkat etmenizi istediğim diğer bir şey şu, 2s orbitalinin en olası yarıçapına bakarsanız, 2p orbitaline göre çekirdekten çok daha uzaktadır. Burada söyleyeceğimiz şey şu, 2p orbitali 2s orbitalinden daha küçüktür.

3147 bunun ne anlama geldiğini düşünelim, şüphesiz, bunu klasik terimlerle konuşamayız, bu şu anlama gelir, 2p orbitalindeki bir e- nun bulunma olasılığı çekirdeğe daha yakındır. 2s orbitalinde bulunsaydı çekirdeğe daha uzak olurdu.

Ayrıca 3s orbitaline bakalım, daha önce de bakmıştık, iki tane radial düğümü olduğunu hesaplamıştık. Şimdi de 3p orbitaline bakalım, 1 tane radial düğümü var. pardon bunu biraz önce hesaplamıştık. 3d orbitalinin radial düğüm sayısı ise sıfırdır. Hep aynı şekli ve. En olası yarıçapı hep aynı yerde görüyoruz. 3d orbitalindeki en olası yarıçap 3p den daha küçük, 3p orbitalindeki en olası yarıçap 3s den daha küçük.

Radial olasılık dağılım grafiklerini mukayese ederseniz, iki farkı şey vardır. 3253 yapacağımız ilk şey şunu düşünmektir, baş kuantum sayısı veya  $n$  değeri arttıkça, yarıçap veya en olası yarıçap nasıl değişir? mesela  $n=2$  kabuğundan  $n=3$  kabuğuna geçerken yarıçap nasıl değişir?  $2s$  orbitalindeki  $6a_0$  değerinden  $3s$  orbitaline geçerken yarıçap yaklaşık 2 kat artmaktadır, yani  $n$  arttıkça orbitalin boyutu artmaktadır. Boyutu konuşurken, bir şartı tekrar söyleyeceğim, burada olasılığı konuşuyoruz-- klasik kavramda, mutlak olarak bahsetmiyoruz, fakat genellikle, grafikte görüldüğü gibi  $n$  arttıkça çekirdekten daha çok uzaklaşılır.

3341 not aldığımız ikinci şey,  $l$  arttıkça ne olur? yarıçap nasıl değişir? Özellikle belli bir kuantum sayısında  $l$  arttıkça ne olur?  $N$  sabit tutulduğunda,  $l$  değeri arttıkça boyut azalmaktadır.

3357 Diğer kavram ile tezat bir durum var, diğer fikrin tam zıttıymış gibi geliyor. En olası yarıçapın çekirdekten ne kadar uzak olduğunu düşünmeyeceğiz, tam tersine, bir  $\epsilon$  nun çekirdeğe ne kadar yakın olduğunu düşüneceğiz. Gerçekten tam tersi bir durum olduğunu göreceğiz. 3420 Burada  $3S$ ,  $3P$  ve  $3D$  orbitallerinde  $l$  nin artışını mukayese edersek, sadece  $S$  orbitalinin çekirdeğe çok yakın bir yerde kaydedeğer bir olasılığı olduğunu görürüz. Burada azımsanmayacak olasılıkları daire içine aldım, Göreceğiniz gibi  $s$  orbitali  $p$  orbitaline göre çekirdeğe daha yakındır,  $p$  orbitali de  $d$  orbitalinden daha yakındır.

$s$  orbitalinin boyutu,  $p$  orbitalinden hala daha büyüktür,  $s$  orbitali çekirdeğe daha fazla nüfus eder, girginliği daha fazladır, çekirdeğe çok daha yakın bir yerde bulunma olasılığı vardır ve bu olasılık gerçekten azımsanamaz.

3502 Bunun sonucu şudur, Çok elektronlu atomları düşünecek olursak, biraz sonra anlatacağız,  $\epsilon$  lar birbirini çekirdeğin çekim gücüne karşı perdeler, yani,  $s$  orbitalindeki  $e^-$  lar daha az perdelenektir, bunun nedeni şudur,  $s$  orbitalleri çekirdeğe daha yakındır, bu nedenle diğer  $e^-$  lar tarafından perdelenemez, çünkü çekirdeğe çok yakın bir yerde bulunma olasılığı vardır.

Bu kavram birazdan çok önemli olacaktır, biraz sonra, çok elektronlu atomları konuşurken, bu konuya yeniden değineceğiz, şimdilik sadece bir giriş yaptım. 3543 Bu bir tür karşıt fikirdir,  $s$  orbitali daha büyük olduğu için,  $s$  orbitalindeki elektronların çekirdekten daha uzakta olması beklenir, ancak bu orbitaldeki elektronlar çekirdeğe daha çok yaklaşır, çünkü girginlikleri daha fazladır.

OK, Sanırım, artık çok elektronlu atomlara geçmeye hazırız,  $SE$  nin relativistik versiyonunu veya uyarlamasını çözdüğümüzde ne olacağını göreceğiz ve birden çok  $e^-$  ları tartışacağız. ÇEA larda, aslında dördüncü bir kuantum sayısından bahsetmemiz gerekecek, buna electron spin quantum sayısı denir. söz veriyorum bu bahsedeceğim son quantum sayısı...

Bu spin manyetik quantum sayısı  $m_s$  ( $s$  alt indis) ile gösterilir, böylece  $m_l$  den farkedirilmiş olur. Schrödinger eşitliğinin relativistic uyarlamasını çözdüğümüzde, magnetic spin quantum sayısı için 2 olası değer ortaya çıkar. Biri  $+1/2$  ye eşittir, yukarı spini gösterir, diğeri  $-1/2$  ye eşittir ve aşağı spini gösterir.

3654 Burada iki farklı çizim görülmektedir, spin quantum sayısının ne olduğu hakkında size biraz fikir verebilir. Spin, eletronun kendine has özelliğidir. Her taneciğin kendine has, özgün bir özelliği vardır, söz gelimi, kütle özgündür veya yük özgündür, spin de özgün bir özelliktir..



Bunu düşünmek için, klasik bir benzeşme yapmak istersek, çoğunlukla bize ne olduğu hakkında bir fikir verirken yardımcı olur, spini,  $\epsilon$  nun kendi eksenini etrafında dönmesi şeklinde resmedebiliriz. Gördüğümüz gibi, kendi eksenini etrafında dönerken, bu doğrultuda dönerse yukarı spin, diğer doğrultuda dönerse aşağı spin deriz.

Aslında, spin için iyi bir klasik benzetme yoktur, spini gerçekten bu şekilde düşünemeyiz, fakat bize orada ne olduğu hakkında bir fikir verir, teknik olarak orada ne olduğunu kesin olarak bilmediğimiz halde bize bir fikir vermesi açısından faydalıdır. Bu benzetmeyi sevmemin nedeni, spinin çok önemli bir özelliğine işaret eder, ve  $e^-$  nu tarif eden bir fikirdir. Gerçek orbitalden bağımsızdır. 3 kuantum sayısı kullanarak, bir orbitali tamamen tanımlayabiliriz, fakat dördüncü bir kuantum sayısı vardır ve  $e^-$  hakkında bazı şeyleri tanımlar,  $\epsilon$  nu tam olarak tanımlamak için gereklidir, bu spin fikridir. Bu nedenle gerçekten dördüncü kuantum sayısına ihtiyaç duyulur, spin ya  $-1/2$  veya  $+1/2$  olacaktır.

3825 Biraz da güncelden bahsedebiliriz, çünkü spin fikrinin nereden geldiği çok ilginç bir hikayedir, aslında ilk kez iki genç bilim adamı tarafından George Uhlenbeck, buradaki ve Samuel Goudsmit, oradaki, tarafından önerilmiştir. Arkadaştlar, bunların kim olduklarını hatırlayamıyorum, spini keşfederek hiçbir şeye sahip olamadılar. Resimde gördüğümüz gibi oldukça genç insanlardı. Sanırım bu resim dördüncü kuantum sayısını keşfettikten iki yıl sonra çekilmişti, kendinizi yakın bir arkadaşlarınızla, bu yaşlarda, benzer durumda hayal edebilirsiniz ve bu tür gözlem yaparken düşünebilirsiniz.

4. Kuantum sayısını sodyumun emisyon spektrumuna bakarken keşfettiler. 3414 Özel olarak sodyumun frekanslarına bakıyorlardı, sodyumun frekansları hakkında düşünecek olursak, şimdilerde biliniyor, ve enerji seviyeleri arasındaki farka dayanarak bu frekansları hesaplayabilirsiniz—fakat bunlar 1925 de oluyordu. Onlar ne umduklarının gerçekten biliyorlardı, söz gelişi, spektrumda tam bu noktada tek bir hat veya tek bir frekans görmeyi bekliyorlardı. 3936, belli bir frekansta, bekledikleri çizgiyi gerçekten de gözlediler, burada noktalı çizgi ile gösterdim. Fakat aslında iki hat gördüler, bir tanesi beklediklerinden biraz daha yüksek frekanstaydı, diğeri beklediklerinden biraz daha düşük frekanstaydı. Burada spektroskopi terimleri ile ifade edecek olursak, buna ikili veya dublet adı verilir. Bu frekansların orta noktası bekledikleri frekanstı, fakat aslında iki ayrı frekansa yarıyordu.

Yaptıkları gerçekten çok şaşırtıcı bir gözlemdi, çok sürprizdi ve çok heyecan vericiydi, bunun nasıl olduğunu, bu yarılmının nedenlerini düşündüler. Şuna karar verdiler,  $\epsilon$  ların kendine has bir özelliği olmalıydı. Çünkü, bu hattın orbitalin enerjisinden kaynaklandığını biliyoruz, bu nedenle orbital tek frekans vermelidir. Fakat bunun ikiye yarılması,  $e^-$  nun yeni bir özelliğinden kaynaklandığını gösterir. Şimdilerde bunu spin aşağı ve spin yukarı diye isimlendiriyoruz. Fakat o zamanlarda, bunun için bir isim veremiyorlardı. Sadece şöyle diyorlardı, TAMAM, 4. Bir kuantum sayısı var,  $\epsilon$  nun kendine has bir özelliği var, dediler

4057 hikaye talihsiz olmaya başladı, fakat aynı zamanda ilginç...Gözlemlerini ayrıntılı olarak yazdılar ve yayınladılar, Bunları impak faktörü düşük bir dergiye verdiler, sanırım Fransa da yayınlanıyordu. o zamanlar bilim dünyasına bir biçimde hiç çarpıcı gelmedi, gözlemleri hakkında ne düşündüklerini açıklamadılar, sadece gördüklerini yazmışlardı. Oldukça genç bilim adamlarıydı, şüphesiz, Beklediğiniz şeyi yaptılar, bu mantıklıydı, ve kendi alanında çok tecrübeli bir bilim adamına gittiler, çünkü tamamen radikal ve devrimsel bir fikirleri vardı, Dördüncü kuantum sayısı hakkında bu büyük açıklamayı yapmadan ve bir makalede yayınlamadan önce birisine danışmaya karar verdiler 4142 konuşmak için seçtikleri kişi Wolfgang Pauli idi, resmini burada görmekteyiz.

Beş dakika öncesine kadar, kaç kişi Goudsmit adını duymuştu? İki kişi ,OK. Pauli yi, Pauli dışarlama ilkesini kaç kişi duydu? OK. Pauli biraz daha meşhur gibi görünüyor, burada ikincide gördüğümüz gibi ..

Onlar gittiler, fikirlerini Pauli ile tartıştılar, Pauli bu fikrin tuhaf ve değersiz olduğunu, hatta saçma olduğunu söyledi. eğer ileri gidip yayınlamaya kalkarlarsa bilimsel kariyerlerinin mahfolacağını söyledi. Bu fikri paketleyip evlerine geri dönebilirlerdi, çünkü herkes saçma olduğunu düşünecekti, söylediklerine kimse inanmayacaktı, bu aptalca bir fikirdi, kısaca görüşme bitmişti. 4230 diğer disiplinlerde olduğu gibi, kimyada da, her çeşit bilim adamı var, farklı kişiliklerde insanlar var, ve ne yazık ki Pauli öncelikle çok kibirli bir insan olarak biliniyordu, ayrıca başkalarının bilimsel fikirlerini kendi fikriymiş gibi alma özelliğine sahipti.

Hikaye devam ediyor, Goudsmit daha kapıyı hızla çarpıp çıkarken, Wolfgang Pauli, 4. Quantum sayısı fikrini bir bilimsel makale olarak yazmaya başlamıştı bile. Aslında, bazı geliştirmeler yapmıştı, yetenekli bir düşünürdü, iki genç bilim adamının yapabileceğinden çok daha anlaşılır bir şekilde ifade etti. Fakat şimdi, olay aydınlığa kavuştu, bu spin kuantum sayısı fikrini ilk bulan kişiler olarak iki bilim adamı bütün övgüyü aldı. Bir keşfin kendisi kadar, bu keşiflerin politik arkaplanı hakkında düşünmek de ilginçtir. Bunu Nobel ödülleri bol miktarda görürsünüz. Nobel ödülü almaya layık keşiflerden sorumlu kişilerin arkasında genellikle ilginç küçük hikayeler, küçük bir skandal vardır.

4333 Pauli çok meşhur oldu, Pauli dışarlama ilkesi ile tanındı, bu ilke bize “bir atomda iki elektron aynı dört kuantum sayısına sahip olamaz” der.

Bunun ne anlama geldiğini bir düşünelim. Bir dalga fonksiyonu alırsak, onu  $N$ ,  $L$  and  $M_L$  kuantum sayıları ile tanımlarsak, sadece bir orbitali tam olarak tanımlamış oluruz demektir. 4404 Tam tersine, bir dalga fonksiyonu alırsak, onu  $N, L, M_L$  ve ayrıca spin kuantum sayıları ile tanımlarsak, neyi tanımlamış oluruz? Bir  $\epsilon$  nu. Şimdi bir orbital içindeki bir  $\epsilon$  nu tam olarak tanımlayabiliriz.

Bu önemli bir farklılıktır, - 3 kuantum sayısının bize ne söylediğine karşılık, dördüncü kuantum sayısının bize hangi bilgiler verdiği arasında önemli fark vardır.

Her atomda bir orbitalde bulunacak  $\epsilon$  sayısını 2 ile sınırlamalıyız, anlamına gelir. Çünkü bir orbitalde  $1\epsilon$  ya yukarı spinlidir, ya da aşağı spinlidir, veya her ikisi de bulunur.

4445 Örnek olarak Neon atomuna bakalım, Ne atomunda 10  $\epsilon$  vardır, ekranda bu orbitalleri görüyorsunuz, size aşına gelebilir, şunu düşünmek önemlidir. niçin 10  $\epsilon$  nun tamamını temel hale koymadık? niçin  $\epsilon$  ları hepsi en düşük enerjili orbitale gitmek istemiyor? Hepsi en kararlı

olmak ister, hepsi en düşük enerjili orbitale gitmek ister, ama bunu yapamazlar, çünkü Pauli dışarlama ilkesi izin vermez—bu ilkeye göre bütün  $\ell$  lar dört farklı kuantum sayısına sahip olmalıdır, bu nedenle, sadece ikisinin 3 kuantum sayısı aynı olabilir, çünkü,  $M_s$  için sadece iki seçenek vardır.

4530 Bir clicker sorusu soralım Pauli Dışarlama İlkesi hakkında düşünelim. :Biraz önceki soruya benziyor ama aynı soru olmadığını göreceksiniz.Cevaplamanız için 10 saniye süreniz var..

OK, iyi. Çoğunuz bu iki kuantum sayısına sahip olacak  $\ell$  sayısının 4 olacağını bulmuş. 4 farklı olasılık olacağını fark etmiş. *En kolay yolu, belkide onu aşağıya çekmek* ikinci en yüksek yüzde, hala cevabın 2 olduğunu düşünüyor, hatırlayın, bu problemi sınıfta daha önce çözmüştük, fakat orbitaller hakkında konuşmuştuk, burada bu üç kuantum sayısına sahip iki farklı orbital var, fakat  $\ell$  hakkında konuşacak olursak ayrıca  $M_s$  den bahsetmemiz gerekir. İki orbitalimiz varsa, toplam kaç tane  $\ell$  olmalıdır? Evet, 2 orbital ve 4  $\ell$ , bu kuantum setlerine sahip olabilir...

Problem setlerinizde buna dikkat edin. Bazen Kuantum sayısı seti verilerek orbital sayısı sorulur, bazen de kuantum sayısı seti verilerek elektron sayısı sorulur. Önce soruyu dikkatli okuduğunuzdan emin olun ve ikisi arasındaki farkı fark edin.

Bugünlük hepsi bu kadar, Cuma günü, derse çok  $\ell$  atomların dalga fonksiyonlarını anlatarak başlayacağım.