

## KİM405-Kuantum Kimyasına Giriş

2020-2021 Güz dönemi KİM405 derisi için verilen ödevler.

1. Ödev (Grup-A): Siyah Cisim Işıması. Teslim Tarihi: 12 Kasım 2020

NOT: Detaylı bir şekilde hazırlanılacaktır. Burada, daha önce işlediğimiz duran dalgaları kapsayacak şekilde tartışılması gerekir.

1. Ödev (Grup-B): Hidrojen Atomunun Spektrumu: Bohr Atom Modeli

NOT: Euler-Lagrange eşitliği kullanılarak atomik yarıçap, enerji düzeyleri ve iyonlaşma enerjisi için birer ifade türetildikten sonra periyodik tablonun yorumlanması gerekir.

Grup-A	Grup-B
Onur Furkan Bayram	Şebnem Deniz Arıcı
Mehmet Arslan	Judy Aldabak
Büşra Kandemir	Zeyneb Alparslan
Emre Hasten	Damla Atacı
Nursena Soyaldı	Ömer Can Demirkaya
Melike Özkurt	Özlem Dirican
Nisa Söylemez	Pelin Sağlam
Furkan Tost	Gamze Şener
Başak Çırak	Anıl Güngör
Seda Şiraz	Kübra Begüm Gürçay
Afra Ekici	Aleyna Kaya
Furkan Güney	Sibel Kaymak
Gürkan Atan	Selda Koca
Hatice Akyol	Gizem Koyun
Öznur Yazıcı	Elif Kuloğlu
Selin Özacar	Şevval Suer
Mert Mısırlıoğlu	Esra Nur Şen
Ahmet Güney Yılmaz	Muhsin Can Tetik
	Gizem Torun
	Mervenur Uslu

2. Ödev Teslim Tarihi: 20 Kasım 2020

2. Ödev (Grup-A): Kuantum mekaniğinin varsayımları/postülleri ve Zamandan bağı ve zamandan bağımsız Schrödinger eşitlikleri.

Not: klasik fizikteki momentum, kinetik enerji, açısal momentum gibi dinamiklerin kuantum mekaniğinde karşılık gelen işlemcilerini içerek şekilde hazırlanmalı.

2. Ödev (Grup-B): Kutuda parçacık modeli için zamandan bağımsız Schrödinger eşitliğini çözerek, etilen molekülün pi-elektronlarını uygulayarak, en düşük enerjiye sahip elektronik geçişi hesaplayınız, b) bu pi-elektronlarının temel ve ilk uyarılmış durumu temsil eden moleküler orbitallerini çiziniz.

NOT: pi-elektronlarının karbon atomundan pi-bağı uzunluğunun yarısı kadar uzaklaştığını varsayınız.

Grup-A	Grup-B
Onur Furkan Bayram	Şebnem Deniz Arıcı

Mehmet Arslan	Judy Aldabak
Büşra Kandemir	Zeyneb Alparslan
Emre Hasten	Damla Atacı
Nursena Soyaldı	Ömer Can Demirkaya
Melike Özkurt	Özlem Dirican
Nisa Söylemez	Pelin Sağlam
Furkan Tost	Gamze Şener
Başak Çırak	Anıl Güngör
Seda Şiraz	Kübra Begüm Gürçay
Afra Ekici	Aleyna Kaya
Furkan Güney	Sibel Kaymak
Gürkan Atan	Selda Koca
Hatice Akyol	Gizem Koyun
Öznur Yazıcı	Elif Kuloğlu
Selin Özacar	Şevval Suer
Mert Mısırlıoğlu	Esra Nur Şen
Ahmet Güney Yılmaz	Muhsin Can Tetik
	Gizem Torun
	Mervenur Uslu

### 3. ÖDEV: Teslim Tarihi: 27-Kasım 2020.

Aşağıda iki atomlu molekülün dönme enerjisinin klasik fizik yasalarına göre nasıl olduğu tartışılmıştır. Diatomik (iki atomlu molekül) için Schrödinger dalga denklemini çözerek, kuantum mekaniksel olarak R34 ile verilen eşitliği çözerek

a) Diatomik molekülün dönme enerji seviyeleri için bir eşitlik elde edin. Burada moleküler bağın sabit olduğunu kabul edin.

b) HCl, HI, H<sub>2</sub>, CO, moleküllerinden birini kimyasal bağ uzunluğunu, bunların literatürdeki dönme spektrumlarını kullanarak hesaplayınız.

### 4. ÖDEV: Teslim Tarihi: 11-Aralık 2020.

H atom için Schrödinger dalga denklemini çözerek, enerji düzeyleri ve dalga fonksiyonları (atomik orbitalleri) ve kuantum sayılarını elde ederek yorumlayınız. Burada bir grafik çizim programı kullanılarak s ve p atomik orbitalleri n=1 ve 2 için çizilecektir.

## 5. ÖDEV: Teslim Tarihi: 11-Aralık 2020.

a) Hückel Moleküler orbital yaklaşımını kullanarak, 1,3-bütadien molekülünün enerji düzeylerini ve moleküler orbitallerini elde ederek yorumlayınız.

b) En düşük enerji düzeyleri arasındaki geçişi hesaplayınız.

## 6. ÖDEV: Atomik Terim Sembolleri

Teslim Tarihi: 25-Aralık 2020.

Spin-orbit etkileşmelerinin atomik enerji düzeylerinde yarılmalara neden olduğundan dolayı atomların kuantum enerji düzeylerini ve özfonksiyonlarını yalnızca elektron konfigürasyonu veya  $nlm_l$  kuantum sayılarıyla tanımlamak yeterli olmaz. Aynı zamanda spin (S) ve toplam açısal momentumu (J) da içerecek şekilde tanımlanması gerekir. Kullanım kolaylığı açısından, spektroskopide bu enerji düzeylerini temsil eden özfonksiyonları, terim sembolü adı verilen kısa bir gösterim şekli olan  $^{2S+1}L_J$  formunda ifade edilir. Bir başka deyişle terim sembolü iyi dört kuantum sayısının ( $L, S, J, M_J$ ) kısaltılmış bir gösterim şeklidir.

Burada toplam orbital açısal momentum kuantum sayısı  $L = 0, 1, 2, 3, \dots$  için sırasıyla S, P, D, F, ... harf sembolleri kullanılır. S ise toplam spin açısal momentum kuantum sayısıdır. Üst simge  $2S + 1$  spin-çokluk sayısı olarak adlandırılır ve fiziksel anlamı ise aynı dalga fonksiyonunda verilen toplam spin kuantum sayısına göre, spin açısal momentumunun (S) mümkün olan yönelim sayısını gösterir. Bir başka deyişle atomun belirli bir elektronik durumuyla ilişkili olası spin durumlarının sayısıdır: singlet, doublet, triplet, vs. Burada  $L=0$  durumunda terim-sembolü için kullanılan S harfi ile toplam-spin kuantum sayısı S birbirine karıştırılmamalı. Terim sembolünde, J alt-indisi toplam açısal momentum kuantum sayısını gösterir. Toplam açısal kuantum sayısı J nin alabileceği mümkün değerler  $|L - S|$  ile  $(L + S)$  aralığında değişir:  $|L - S| \leq J \leq L + S$ . Toplam magnetik kuantum sayısı  $M_J$  ise  $-J$  ile  $+J$  aralığındaki tam ve yarı-tamsayılarını alır:  $-J \leq M_J \leq +J$ . Toplam alabileceği farklı değer is  $2J + 1$  kadardır. Bunlar aşağıdaki tabloda özetlenmiştir. Atomların terim sembollerini elde ederken, Hund kurallarına ve Pauli dışarlama ilkesi göz önüne alınması gerekir.

Yukarıda kısaca tartışılan spin-orbital çiftlenimini kullanarak C atomunun  $[[\text{He}]2s^22p^2]$  atomunun mümkün olan tüm mikro-durumlarını elde edeliniz.