

GAZİ ÜNİVERSİTESİ, Fen Fakültesi
2021-2022 Bahar Dönemi KİM 2254 İnorganik Kimya Laboratuvarı
Moleküler Modelleme I
Rapor Formu

Dersin sorumlu Öğretim Üyesi:

ADI-SOYADI:	TARİH:
NUMARASI:	ŞUBE:

Deneyin amacı: (10P)

Sorular (80 P)

1. BeH₂, H₂O, BCl₃, PCl₅, BrF₅, and SF₆ moleküllerinin lewis nokta yapılarını ve molekül geometrilerini belirleyiniz. (6x3=18P)

2. Aşağıdaki çizelgeyi PM3 yöntemine göre doldurunuz. (12p)

	ΔH_o	H CX bağ açısı	r (C-X) bağ uzunluğu
Florometan			
Klorometan			
Bromometan			
İyodometan			

a) Baę açısı ile X atomunun elektronegatiflięi arasında bir iliřki var mıdır? (5p)

b) Bent kuralını tanımlayınız. Hesaplama sonuçları bu kural ile uyum içinde midir? (5p)

3. a) H₂ ve N₂ moleküllerinin MO diyagramını oluřturunuz.

b) Baę derecelerini belirleyiniz. (5p)

c) HOMO / LUMO orbitallerinin enerjilerini ve řekillerini belirleyiniz. (6p)

4. Ařaęıdaki çizelgeyi PM3 yöntemine göre doldurunuz. (6p)

Bileřik	r _{C-C} (Å)	r _{C-H} (Å)
etan		
etilen		
asetilen		

a) Baę uzunluęu ile baę derecesi arasındaki iliřki nedir? (5p)

b) Karbon- hidrojen baę uzunluęu deęiřimi nasıl açıklanabilir? (5p)

5. O₂ molekülü için aşağıdaki çizelgeyi doldurunuz. (8p) (manyetizmayı dikkate alarak işlem yapınız.)

	$S=s_1+s_2$ toplam spin	$2S+1$ multiplisite	Toplam enerji	Oluşum Entalpisi
				
				

a) Hangi O₂ molekülü daha karardır, neden? (5p)

b) Kararlı molekülün manyetizması nedir? (5p)

Kaynakça (5p):