

Projenin Adı:

Verilen Kuantum Sayılarına Göre Katmanları ve Elektron Sayılarını Bulma

İçindekiler:

Özet.....	1
1. Giriş.....	1
1.1 Projenin Amacı.....	2
2. Yöntem.....	2
3. Bulgular.....	3
4. Sonuçlar ve Tartışma.....	9
5. Önerilenler.....	9
6. Kaynaklar.....	9

Özet:

Kimyada çokça kullanılan Kuantum Sayıları'nda elektron hesaplamak için veya belirtilen katmana kadar hangi katmandan kaçar adet olduğunu tek tek saymadan bilememekteyiz. Bu durum küçük sayılarda etkisini göstermese de büyük sayılara gelindiği vakit epey bir süremizi çalmaktadır. Ben de bu projede bu sıkıntıyı gidermeyi amaçladım ve katmanların neyden etkilenecek sayısının değiştiğini bulup düzene soktum.

Bu projeyi yaparken ilk öncelikle Enerji Katmanına göre oluşan güç sıralamasına dikkat etmem gerektiğine karar verdim ve sıralamayı neyin nasıl etkilediği konusunda araştırma yaptım. Ardından durumu etkileyen değişkenlerin azaltma durumunda mı yoksa arttırma durumunda mı etki ettiklerine dikkat ettim. Onları sürekli yerlerini değiştire değiştire kullandığımda sadece Baş Kuantum Sayısı ile Açısal Momentum (İkincil) Kuantum Sayısı verildiğinde bize toplam elektron sayısını ve orbital katmanlarından kaçar adet olduğunu (mesela s, p, d, f gibi) döndürebilen düzeni buldum.

Bu aşamadan sonra hem bunu kolaylıkla kanıtlatabilmek hem de görsel olarak gösterebilmek için bunun algoritması ile işleyen ve bize toplam elektron sayısını döndürebilen bir programı Visual Studio ve C# kullanarak Windows Form üzerinden yazıp ekran görüntülerini ekledim.

1. Giriş

Günümüzde kullanılan atom modelinin çıkmasıyla elektronların yerini daha detaylı belirtme ihtiyacı duyulmuştur. Bunun için de elektron sayısını belirtirken "Kuantum Sayıları" günümüzde kullanılan bir yöntem olmuştur.

Resim 1. Kuantum Sayılarına Göre Periyodik Tabloda Katmanlar

Kuantum sayıları günümüzde kimyada, özellikle atom konusunda hem elektronların sayısını belirleme hem temel haline göre protonları belirleme hem de elektronların yerini belirtirken çokça kullanılmaktadır. Günümüz şartlarında Birincil Kuantum Sayısı (n) ve Açısal Momentum (İkincil) Kuantum Sayısı (l) sayılarını kullanarak en son orbitali belirtebiliyoruz. Elektron sayısını bulurken veya toplam katman sayısını veya bir katmanın kaç tane olduğunu bulurken katmanları artan enerji düzeylerine göre sırayla yazarak ve yazdığımız yere kadar elektronları belirtip tek tek sayarak veya toplayarak bulabiliyoruz ama bu büyük bir zaman kaybına yol açabilmektedir.

Günümüzde her bir Açısal Momentum (İkincil) Kuantum Sayısı'nın kaç adet elektron içerdiği bilinse bu işlem minik bir çarpma işlemi ve ardından basit bir toplama işlemi ile kolaylıkla bulunabilmektedir ama buradaki esas sorun orbitallerin (s, p, d, f) kaç adet içerdiğini gösteren herhangi bir formül bulunmamaktadır. Katmanları bulurken günümüzdeki kullanılan en yaygın yöntem ise tek tek yazıp bulmaktır ama bu işlem de yukarıda değindiğim gibi çok fazla vakit alabilmektedir.

1.1 Projenin Amacı

Projenin amacı, verilen kuantum sayısına göre, o orbitale kadar hangi katmanlardan (s, p, d, f) kaçar tane olduğunu bu proje kapsamında geliştirilen formülle bularak hesaplama zamanını olabildiğince kısaltmaktır.

Bu proje ile aynı zamanda elektron sayısı bilinen bir atomun hangi iki " s " katmanı arasında olduğu ve sadece herhangi bir katmanın kaç adet olduğu da kolaylıkla bulunabilir.

2. Yöntem

Günümüzde her şey bir düzen içerisinde hareket etmektedir ve bu düzen kuantum sayılarındaki orbital sayılarında da geçerlidir. Her bir eş katmana (aynı Açısal Momentum (İkincil) Kuantum Sayısı'na) geçişte orbitallerin sayısında düzenli bir artış vardır. Bu artışı değişkenlere göre düzenleyip formülize ettiğimizde de günümüzde verilen Baş Kuantum ve İkincil Kuantum Sayısı'na kadar bulmak istediğimiz katmanların kaç adet olduğu karşımıza çıkmaktadır.

Burada toplamda üç değişkenimiz vardır: Verilen Baş Kuantum Sayısı, Verilen Açısal Momentum Kuantum Sayısı'nın sayısal değeri, bulmak istediğimiz katmanın Açısal Momentum Kuantum Sayısı'nın sayısal değeri. Sırasıyla " n ", " l verilen", " l istenlen" diye isimlendirmeler yaptım. Bu değişkenleri kullanarak bir sonuç elde etmeye çalıştığımızda karşımıza şu hata çıkıyor: Katmanlar enerji düzeylerine göre sıralandığında araya Baş Kuantum Sayısı kendinden sonrakine kıyasla daha büyük olmasına rağmen Açısal Momentum (İkincil) Kuantum Sayısı daha büyük olduğu için ondan daha büyük bir enerji düzeyine sahip olabiliyor. Dolayısıyla sıralamada kendisinden daha büyük Baş Kuantum Sayısı olan orbitallerden daha sonraya yerleştirilebiliyor.

Resim 2. Günümüzde Kullanılan Orbitallerin Enerji Düzeylerine Göre Sıralanışı

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f < 6d < 7p < 8s$$

Bu durum için de formülde kullanılmak üzere yeni bir değişken tanımlama gereği duydum ve ona da “ofazla (fazla orbital’den gelmektedir)” ismini verdim ve şuna eşitlendi:

$$\text{ofazla} = \text{Iverilen} - \text{listenen}$$

Aynı zamanda elektron sayısı bilinen atomun katman sayısını da bulmak için matematikteki kökler aracılığıyla yer belirlemeye benzer bir yöntem uygulanmıştır, bakınız Resim 3.

Resim 3. Kökler Aracılığıyla Yer Belirleme

Sayıların karesi aracılığıyla kökün hangi sayılar arasında olduğu bulma:
Örnek olarak $\sqrt{17}$ alınmıştır.

$$4^2 = 16$$
$$5^2 = 25$$
$$16 < 17 < 25$$

dolayısıyla $\sqrt{17}$ "4" ile "5" arasındadır.

3. Bulgular

Değişkenler üzerine hangi değişkenin herhangi bir orbitali etkileme durumuna göre farklı birleşimler kullanılarak örnek kuantum sayılarında tek tek denenmiş ve değiştirilmiştir ve iki durum bulunmuş ve duruma göre iki formül türetilmiştir:

1) ofazla pozitif bir tam sayı ise: $n - \text{listenen} + \text{ofazla} - 1 = \text{bulunmak istenen katmanın kaç adet olduğu}$

2) ofazla 0 (sıfır)’a eşit veya küçükse (negatifse): $n - \text{listenen} + \text{ofazla} = \text{bulunmak istenen katmanın kaç adet olduğu}$

Formülleri kullanılarak duruma istenen İkincil Kuantum Sayısı’na göre orbitalin kaç adet olduğu kolaylıkla bulunabilmektedir.

Resim 4. Örnek 1

5f için:	
Eski bulunuşu:	
1s, 2s, 3s, 4s, 5s, 6s, 7s.....	7 adet s katmanı
2p, 3p, 4p, 5p, 6p.....	5 adet p katmanı
3d, 4d, 5d.....	3 adet d katmanı
4f, 5f.....	2 adet f katmanı
formül ile:	
s: ofazla = 3 - 0 = 3	5 - 0 + 3 - 1 = 7 tane s katmanı
p: ofazla = 3 - 1 = 2	5 - 1 + 2 - 1 = 5 tane p katmanı
d: ofazla = 3 - 2 = 1	5 - 2 + 1 - 1 = 3 tane d katmanı
f: ofazla = 3 - 3 = 0	5 - 3 + 0 = 2 tane f katmanı
bulundurmaktadır.	
formül doğru değeri sağlamaktadır.	

Resim 5. Örnek 2

6s için:	
Eski yöntem ile:	
1s, 2s, 3s, 4s, 5s, 6s.....	6 tane s katmanı
2p, 3p, 4p, 5p.....	4 tane p katmanı
3d, 4d	2 tane d katmanı
.....	f katmanı bulunmamaktadır
formül ile:	
s: ofazla = 0 - 0 = 0	6 - 0 - 0 = 6 tane s katmanı
p: ofazla = 0 - 1 = -1	6 - 1 + (-1) = 4 tane p katmanı
d: ofazla = 0 - 2 = -2	6 - 2 + (-2) = 2 tane d katmanı
f: ofazla = 0 - 3 = -3	6 - 3 + (-3) = 0 tane f katmanı
bulunmaktadır.	
Formül doğru değeri sağlamaktadır.	

Buradaki formül katman sayısını bulmaya yöneliktir. Açısal Momentum Kuantum Sayısı'na göre aldığı elektron sayıları hesaplanıp çarpılarak ve en son değer toplanarak kaç adet elektron içerdiği bulunabilir (Resim 6'te olduğu gibi).

Resim 6. Katman Sayıları Üzerinden Elektron Bulma

6s için:	
(daha önceki bulunan veriler kullanılmıştır)	
s katmanı sayısı:	6
p katmanı sayısı:	4
d katmanı sayısı:	2
f katmanı sayısı:	0
katman sayısı ve alabildiği elektron sayısı çarpılır ve toplanır:	
(* işareti çarpmayı temsil etmektedir)	
6 * 2 + 4 * 6 + 2 * 10 = 56	
Atomumuz 56 elektron içermektedir.	

Resim 6 tam dolu orbitallerin elektron sayılarını bulmaya yöneliktir ama tam dolu olmama durumunda Resim 7'deki yol izlenebilir.

Resim 7. Tam Dolu Olmayan Orbitale Göre Elektron Bulma

6s¹ için
(Daha önceki bulunan verilerden faydalanılmıştır.)

Uygulanabilecek Yol :
Toplam elektron sayısı - (En son katmanın aldığı en fazla elektron - En son katmanda bulunan elektron sayısı)

Örnek kullanımı:
Toplam elektron = 56
En son katmanın aldığı en fazla elektron = 2
En son katmanda bulunan elektron sayısı = 1

$56 - (2 - 1) = 55$ elektrona sahiptir.

Sadece elektron sayısının bilinmesi durumunda hangi katmanlar arasında olduğu ise yine aynı formüllerle Resim 8'deki gibi bulunabilir.

Resim 8. Elektron Sayısına Göre Son Orbitalin Hangi Aralıkta Olduğunu Bulma

Burada örnek açısından 17 sayısı ele alınır.

Tahmini 3s ile 4s arasında olduğu tahmin ediliyor.

3s için:
s: ofazla = 0 - 0 = 0 3 - 0 - 0 = 3 e = 3 * 2 = 6
p: ofazla = 0 - 1 = -1 3 - 1 - 1 = 1 e = 1 * 6 = 6
d: ofazla = 0 - 2 = -2 3 - 2 - 2 = -1
f: yukarı -1 (eksi bir) ile sonlandığı için hesaplanmaz.
toplam 12 elektronu vardır.

4s için:
s: ofazla = 0 - 0 = 0 4 - 0 - 0 = 4 e = 4 * 2 = 8
p: ofazla = 0 - 1 = -1 4 - 1 - 1 = 2 e = 2 * 6 = 12
d: ofazla = 0 - 2 = -2 4 - 2 - 2 = 0
f: yukarı 0 (sıfır) ile sonlandığı için hesaplanmaz.

toplam 20 elektronu vardır.

17 elektronlu bir atomun son orbitali 3s ile 4s arasındadır.

Normal Dizilim:
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 = 17$ elektron

Hesaplamamız doğrudur.

İki katmanı tek tek hesaplayıp arasında olmama durumunda tekrar başka bir orbitali hesaplamak uzun süreceği için s orbitaline göre Resim 9'daki kısıyoldan elektron sayısını bulma yolu izlenebilir.

Resim 9. S Orbitalinin Elektron Sayısını Kısıyoldan Bulma

Örnek olarak 5s seçilmiştir:

İlk katman normal bir şekilde bulunur:

s : ofazla = 0 - 0 = 0 5 - 0 - 0 = 5
Sonraki katmanlar öncekinin 2 azı şeklinde devam edecektir.

p : 3, d : 1

Sağlaması:
p : ofazla = 0 - 1 = -1 5 - 1 - 1 = 3 Doğru
d : ofazla = 0 - 2 = -2 5 - 2 - 2 = 1 Doğru

Bu kısayol doğru sonucu sağlamıştır.

Anlatımı pekiştirmek amacıyla bu dediğim formülü kullanarak kullanıcıya elektron sayısını döndüren bir uygulama da yazdım ve ekran görüntülerini ekledim. (Bakınız Resim 10 ve 11)

Resim 10. Uygulamanın Ana Ekranı

Ana Sayfa

Başlarındaki Sayılara
Göre Sırayla Bilgileri
Doldurunuz.

1) Baş Kuantum
Sayısı: 1
(Proje raporuna uygun
olması için 8s 'e kadar
geçerlidir.)

2) Açısal Momentum
(İkincil) Kuantum
Sayısını Seçiniz:

3) Doluluk Oranı: ☒ Tam Dolu ☐ Boş Orbital Var
Boş Orbital Varsa
Son Katmandaki
Elektron Sayısı:

Hesapla

Toplam Elektron Sayısı:

Resim 11. Resim 6'daki Örneğin Uygulanması

Ana Sayfa

Başlarındaki Sayılara
Göre Sırayla Bilgileri
Doldurunuz.

1) Baş Kuantum
Sayısı: 6
(Proje raporuna uygun
olması için 8s 'e kadar
geçerlidir.)

2) Açısal Momentum
(İkincil) Kuantum
Sayısını Seçiniz: s

3) Doluluk Oranı: ☒ Tam Dolu ☐ Boş Orbital Var
Boş Orbital Varsa
Son Katmandaki
Elektron Sayısı:

Hesapla

Toplam Elektron Sayısı: 56

Program bize doğru sonuçlar döndürmektedir.12, 13, 14, 15, 16, 17, 18 ve 19. Resimlerde kaynak kodlarına yer verilmiştir.

Resim 12. Baş Kuantum Sayısına Göre İkincil Kuantum Sayısını Ayarlayan Fonksiyon

```
//Programlayan Mehmet Can AYDIN

void ComboBox1Values(int kirma)
{
    //daha kısa kodla halletmek için döngü kullanmayı tercih ettim.
    comboBox1.Items.Clear();
    comboBox1.Text = "";

    while (true)
    {
        comboBox1.Items.Add("s");
        if (kirma == 0) break;

        comboBox1.Items.Add("p");
        if (kirma == 1) break;

        comboBox1.Items.Add("d");
        if (kirma == 2) break;

        comboBox1.Items.Add("f");
        break;
    }
}
```

Resim 13. Orbitalerin Tam Dolu Olmama Durumunda Fazla Elektron Sınırını Belirleyen Fonksiyon

```
void ComboBox2Values(int kirma)
{
    //daha kısa kodla halletmek için döngü kullanmayı tercih ettim.
    comboBox2.Items.Clear();
    comboBox2.Text = "";

    for (int i = 0; i < kirma; i++)
    {
        comboBox2.Items.Add(i);
    }
}
```

Resim 14. Form Yüklendiğinde Başlangıç Durumunu Ayarlama

```
private void Form1_Load(object sender, EventArgs e)
{
    comboBox2.Enabled = false;
    radioButton1.Checked = true;
}
```

Resim 15. Son Orbitalin Tam Dolu Olmadığı Belirtildiğinde En Son Katmanın Alabileceği Elektron Sayılarını Ayarlama (Resim 13'teki Fonksiyon Kullanılmıştır)

```
private void RadioButton2_CheckedChanged(object sender, EventArgs e)
{
    // Doluluk durumuna göre son orbitaldeki elektron sayısı ayarlanıyor.
    comboBox2.Enabled = radioButton2.Checked;

    // Açısal Momentum Kuantum Sayısına Göre Orbitalde olabilecek elektron sayısını ekleme

    comboBox2.Items.Clear();

    switch (comboBox1.Text)
    {
        case "s":
            ComboBox2Values(2); break;
        case "p":
            ComboBox2Values(6); break;
        case "d":
            ComboBox2Values(10); break;
        case "f":
            ComboBox2Values(14); break;
        default:
            ComboBox2Values(0); break;
    }
}
```

Resim 16. Baş Kuantum Sayısına Göre İkincil Kuantum Sayısını Alacağımız Yerin Değerlerini Ayarlama (Resim 12'deki Fonksiyon Kullanılmıştır)

```
private void NumericUpDown1_ValueChanged(object sender, EventArgs e)
{
    //Baş Kuantum Sayısına Göre İkincil Kuantum Sayısını Ayarlamamızı Sağlayan Kutucuğu Ayarlama
    switch (numericUpDown1.Value)
    {
        case 1:
            ComboBox1Values(0); break;
        case 2:
            ComboBox1Values(1); break;
        case 3:
            ComboBox1Values(2); break;
        default:
            ComboBox1Values(3); break;
    }
}
```

Resim 17. Hesapla Butonuna Tıklandığında Boş Değer Girilmesini Engelleme

```
private void Button1_Click(object sender, EventArgs e)
{
    if(comboBox1.Text == "")
    {
        MessageBox.Show("Açısal Momentum Kuantum Sayısının Değeri Boş Bırakılmamalıdır!", "Hata", MessageBoxButtons.OK, MessageBoxIcon.Error);
    }
    else if(radioButton2.Checked && comboBox2.Text == "")
    {
        MessageBox.Show("Son Katmanda Kaç Elektron Olduğunun Bilgisi Boş Bırakılmamalıdır!", "Hata", MessageBoxButtons.OK, MessageBoxIcon.Error);
    }
    else
    {

```

Resim 18. Toplam Elektron Sayısını Hesaplama

```
/*buradan irtibaren hesaplamalar başladığı için
 * proje raporunda formüllere verilen değerler kullanılmıştır */

int lverilen, n = Convert.ToInt32(numericUpDown1.Value);
int sonuc = 0;

switch (comboBox1.Text)
{
    case "s":
        lverilen = 0; break;
    case "p":
        lverilen = 1; break;
    case "d":
        lverilen = 2; break;
    default:
        lverilen = 3; break;
}

for (int listenen = 0; listenen < 5; listenen++)
{
    int ofazla = lverilen - listenen;

    int orbital = n - listenen + ofazla;

    if (ofazla > 0) orbital--; //"--" -1'i ifade ediyor.
    if (orbital <= 0) break;

    switch (listenen)
    {
        case 0:
            sonuc += orbital * 2; break;
        case 1:
            sonuc += orbital * 6; break;
        case 2:
            sonuc += orbital * 10; break;
        default:
            sonuc += orbital * 14; break;
    }
}
```


Resim 19. Son Katmanın Tam Dolu Olup Olmadığı Kontrol Edip İşlemi Yapma ve Sonucu Ekran Yazdırma

```
//son katmandaki eksik elektrona göre kontrol etme
if (radioButton2.Checked)
{
    int son_katman = Convert.ToInt32(comboBox2.Text);
    int normalde_olan;

    switch (comboBox1.Text)
    {
        case "s":
            normalde_olan = 2; break;
        case "p":
            normalde_olan = 6; break;
        case "d":
            normalde_olan = 10; break;
        default:
            normalde_olan = 14; break;
    }

    sonuc -= normalde_olan - son_katman;
}

//sonucu son label'a yazdırmak.
label5.Text = "Toplam Elektron Sayısı: " + sonuc;
}
```

4. Sonuçlar ve Tartışma

Elde edilen sonuçlar doğrultusunda formülün doğru bir şekilde çalıştığı tespit edilmiştir ve herhangi bir atoma göre özel kural da içermediği için gelecekte yeni atomlar eklendiğinde onun Açısız Momentum Kuantum Sayısı'na göre katman sayısı yapılabileceği de tespit edilmiştir.

5. Öneriler

Bu belirtilen formüller katman sayısı üzerinden bulunmaktadır. Resim 9'da "S" katmanı üzerinden elektron bulmanın kısa yolu sadece "S" orbitali için geçerli olup diğer orbitaller için farklı kolay hesaplama yöntemleri geliştirilebilir.

Aynı zamanda elektron sayısı verilen atomun son orbitalinin hangi aralıkta olduğu dolaylı yoldan hesaplandığı için bunun mantığı kullanılarak bize direk sonucu verecek bir formül geliştirilebilir.

6. Kaynaklar

"Elektronların Orbitallere Yazılması," Eokultv, erişim 22.09.2019

<https://www.eokultv.com/periodyik-sistem-ve-elektron-dizilimleri-11-sinif/22768>