

**T.C.**  
**TRAKYA ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**  
**GALYUM HALOJENÜRLERİNİN MOLEKÜLER**  
**YAPILARININ KARARLILIĞININ İNCELENMESİ**  
**DİLEK BALA**  
**YÜKSEK LİSANS TEZİ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI**  
**Yrd.Doç.Dr. MUSTAFA ÇALIŞKAN**  
**EDİRNE – 2012**

**GALYUM HALOJENÜRLERİNİN MOLEKÜLER  
YAPILARININ KARARLILIĞININ İNCELENMESİ**

**DİLEK BALA**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**FİZİK ANABİLİMDALI**

**2012**

**TRAKYA ÜNİVERSİTESİ**

**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü onayı

Doç.Dr. Mustafa ÖZCAN  
Fen Bilimleri Enstitü Müdürü

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak gerekli şartları sağladığımı onaylarım.

Prof.Dr. Hasan AKBAŞ  
Fizik Anabilim Dalı Başkanı

Bu tez tarafımda okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Yrd.Doç.Dr. Mustafa ÇALIŞKAN  
Tez Danışmanı

Bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Fizik Anabilim Dalında bir Yüksek Lisans tezi olarak oy birliği ile kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri:

İmza

Prof.Dr. Serap ŞENTÜRK DALGIÇ

.....

Yrd.Doç.Dr. Mustafa ÇALIŞKAN

.....

Yrd.Doç.Dr. H. R. Ferhat KARABULUT

.....

Tarih: 19/11/2012

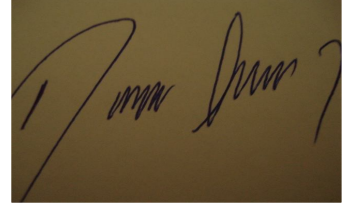
**T.Ü.FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI YÜKSEK LİSANS PROGRAMI**  
**DOĞRULUK BEYANI**

İlgili tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını ve kullanılan tüm literatür bilgilerinin kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını beyan ederim.

19/11/2012

Dilek BALA

**İmzası**

A rectangular box containing a handwritten signature in black ink on a light brown background. The signature is cursive and appears to read 'Dilek BALA'.

# İÇİNDEKİLER

|  | Sayfa No |
|--|----------|
| <b>ÖZET</b>  | i        |
| <b>ABSTRACT</b>  | ii       |
| <b>TEŞEKKÜR</b>  | iii      |
| <b>ŞEKİLLERİN LİSTESİ</b>  | iv       |
| <b>TABLULARIN LİSTESİ</b>  | v        |
| <b>TABLULARIN LİSTESİ ( DEVAMI )</b>   | vi       |
| <b>TABLULARIN LİSTESİ ( DEVAMI )</b>   | vii      |
| <b>KISALTMALAR</b>   | viii     |
| <b>1. GİRİŞ</b>  | 1        |
| <b>2. GALYUM, FLOR, KLOR, BROM VE İYOT ELEMENTLERİNİN FİZİKSEL VE KİMYASAL ÖZELLİKLERİ</b> | 3        |
| <b>2.1. Galyum Elementi</b>  | 3        |
| 2.1.1. Galyum Elementinin Fiziksel Özellikleri ve Kullanım Alanları                        | 4        |
| 2.1.2. Galyum Elementinin Kimyasal Özellikleri ve Bileşikleri                              | 5        |
| <b>2.2. Flor Elementi</b>  | 7        |
| 2.2.1. Flor Elementinin Fiziksel Özellikleri ve Kullanım Alanları                          | 8        |
| 2.2.2. Flor Elementinin Kimyasal Özellikleri ve Bileşikleri                                | 9        |
| <b>2.3. Klor Elementi</b>  | 11       |
| 2.3.1. Klor Elementinin Fiziksel Özellikleri ve Kullanım Alanları                          | 12       |
| 2.3.2. Klor Elementinin Kimyasal Özellikleri ve Bileşikleri                                | 13       |
| <b>2.4. Brom Elementi</b>  | 16       |
| 2.4.1. Brom Elementinin Fiziksel Özellikleri ve Kullanım Alanları                          | 17       |
| 2.4.2. Brom Elementinin Kimyasal Özellikleri ve Bileşikleri                                | 18       |

|  |    |
|--|----|
| <b>2.5. İyot Elementi</b>  | 21 |
| 2.5.1. İyot Elementinin Fiziksel Özellikleri ve Kullanım Alanları                    | 22 |
| 2.5.2. İyot Elementinin Kimyasal Özellikleri ve Bileşikleri                          | 23 |
| <b>3. MX<sub>3</sub> YAPISINDAKİ MOLEKÜLLERİN TOPLAM POTANSİYELİNİN HESAPLANMASI</b> | 26 |
| <b>3.1. Yumuşak Küre Potansiyeli</b>   | 27 |
| <b>3.2. Bağlanma Potansiyeli</b>   | 31 |
| <b>3.3. Van der Waals Etkileşme Potansiyeli</b>                                      | 33 |
| <b>3.4. Elektrik Potansiyeli</b>   | 36 |
| <b>3.5. Dipol-Dipol Etkileşme Potansiyeli</b>  | 38 |
| <b>3.6. Toplam Etkileşme Potansiyeli</b>   | 41 |
| <b>4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA</b>   | 42 |
| <b>4.1. MX<sub>3</sub> molekülünün yapısı</b>  | 42 |
| 4.1.1. Monomerik Galyum Triflorür  | 43 |
| 4.1.2. Monomerik Galyum Triklorür  | 46 |
| 4.1.3 Monomerik Galyum Tribromür   | 49 |
| 4.1.4. Monomerik Galyum Triiyodür  | 52 |
| <b>4.2. M<sub>2</sub>X<sub>6</sub> Molekülünün Yapısı</b>                            | 59 |
| 4.2.1. Dimerik Galyum Triflorür  | 60 |
| 4.2.2. Dimerik Galyum Trikorür   | 63 |
| 4.2.3. Dimerik Galyum Tribromür  | 67 |
| 4.2.4. Dimerik Galyum Triiyodür  | 71 |
| <b>KAYNAKLAR</b>   | 79 |
| <b>ÖZGEÇMİŞ</b>  | 82 |

Yüksek Lisans Tezi

Galyum Halojenürlerinin Moleküler Yapılarının Kararlılığının İncelenmesi

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

## ÖZET

Bu çalışmada, galyum halojenürler ( $\text{GaF}_3$ ,  $\text{GaCl}_3$ ,  $\text{GaBr}_3$ ,  $\text{GaI}_3$ ,  $\text{Ga}_2\text{F}_6$ ,  $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ,  $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ,  $\text{Ga}_2\text{I}_6$ ) için sistemlerin yerel yapısı incelenmiş ve böylece galyum halojenürlerin sıvı fazdaki yapıların anlaşılması için ayrıntılı iyonik etkileşimleri içeren molekül dinamiği simülasyonu metodu ile mikroskobik potansiyel model elde edilmiştir.

Bu potansiyel model kullanılarak, galyum halojenürlerin yumuşak küre potansiyeli ( $U_{CSS}$ ), Van der Waals etkileşim potansiyeli ( $U_{VW}$ ), elektrik potansiyeli ( $U_{EL}$ ), dipol-dipol etkileşim potansiyeli ( $U_{dd}$ ) ve bağlanma potansiyelini ( $U_B$ ) içeren toplam potansiyel enerjileri hesaplanmıştır.

Bu potansiyel model kullanılarak, galyum halojenürlerin bağ uzunlukları, titreşim frekansları, bağ açıları ve bağlanma enerjileri hesaplanarak, denge durumundaki moleküler yapıları ve geometrik şekilleri bulunmuştur. Bulunan bu bağ uzunlukları ve titreşim frekansları mevcut verilerle karşılaştırılmıştır.

Bu çalışmada, galyum halojenür atomik kümelerinin denge durumundaki moleküler yapıları, İyonlar arası Kuvvet Modeli kullanılarak olarak hesaplanmıştır.

Yıl: 2012

Sayfa Sayısı: 96

..... Thesis  
.....The Title of Thesis  
Trakya University Institute of Natural Sciences  
..... The name of Department

## ABSTRACT

In this work first, ionic interactions model potential have obtained to investigated local and liquid structure of gallium halides ( $\text{GaF}_3$ ,  $\text{GaCl}_3$ ,  $\text{GaBr}_3$ ,  $\text{GaI}$ ,  $\text{Ga}_2\text{F}_6$ ,  $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ,  $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ,  $\text{Ga}_2\text{I}_6$ ) by molecular dynamics simulation method.

The total potential energy including soft sphere potential ( $U_{\text{CSS}}$ ), Van der Walls interactions potential ( $U_{\text{VW}}$ ), Electrical potential ( $U_{\text{EL}}$ ), Dipol-Dipol interactions potential ( $U_{\text{DD}}$ ), and Binding potential ( $U_{\text{B}}$ ) calculated using this model potential.

In equilibrium state molecular structure and geometric shapes have obtained which bond lengths, vibrational frequencies, bond angle and binding energy for gallium halides calculated using this model potential computed bond lengths and vibrational frequencies are compare with literature.

In this work, atomic clusters of gallium halides in equilibrium state moleculer structure have investigated by using Interionic Force Model.

Year : 2012

Number of Pages : 96

Keywords : Interionic Force Model, Gallium Halides, Moleculer Structure



## TEŐEKKÜR

Tez danıřmanlıđını üstlenen, alıřmamın her adımında bilgilerinden yararlandıđım, bilgisayar programlarını kullanmamda bana yardımcı olan, sayın hocam Yrd.Do.Dr. Mustafa ALIŐKAN 'a teőekkür ve saygılarımı sunarım.

alıřmanın yapıldıđı T.Ü. Fen Fakóltesi Fizik Bölümü Bařkanı Prof.Dr. Hasan AKBAŐ'a ve yardımlarını esirgemeyen Atom ve Molekül Fiziđi Anabilim Dalı Bařkanı Prof. Dr. Serap DALGI'a verdikleri destekten dolayı teőekkür ve saygılarımı sunarım.

Bu alıřmam süresince maddi ve manevi desteđini eksik etmeyen, her zaman yanımda olan eřim Dođukađan KAYMAKCI'ya teőekkürü bir bor bilirim.

## ŞEKİLLERİN LİSTESİ

|                    |   |    |
|--------------------|---|----|
| <b>Şekil 2.1.</b>  | Galyum elementinin resmi  | 3  |
| <b>Şekil 2.2.</b>  | Flor elementinin resmi  | 7  |
| <b>Şekil 2.3.</b>  | Klor elementinin resmi  | 11 |
| <b>Şekil 2.4.</b>  | Brom elementinin resmi  | 16 |
| <b>Şekil 2.5.</b>  | İyot elementinin resmi  | 21 |
| <b>Şekil 3.1.</b>  | Monomerik $MX_3$ Molekülünün Geometrik Yapısı   | 28 |
| <b>Şekil 4.1.</b>  | Galyum triflorürün ( $GaF_3$ ) denge durumundaki molekül yapısı                       | 45 |
| <b>Şekil 4.2.</b>  | Galyum triklorürün ( $GaCl_3$ ) denge durumundaki molekül yapısı                      | 48 |
| <b>Şekil 4.3.</b>  | Galyum tribromürün ( $GaBr_3$ ) denge durumundaki molekül yapısı                      | 51 |
| <b>Şekil 4.4.</b>  | Galyum triiyodürün ( $GaI_3$ ) denge durumundaki molekül yapısı                       | 54 |
| <b>Şekil 4.5.</b>  | Monomerik galyum trihalojenürlerin ( $GaX_3$ ) toplam enerji değişim grafiği          | 55 |
| <b>Şekil 4.6.</b>  | Monomerik galyum trihalojenürlerin ( $GaX_3$ ) Van der waals enerji değişim grafiği   | 56 |
| <b>Şekil 4.7.</b>  | Monomerik galyum trihalojenürlerin ( $GaX_3$ ) bağ uzunluğu değişim grafiği           | 57 |
| <b>Şekil 4.8.</b>  | Monomerik galyum trihalojenürlerin ( $GaX_3$ ) maksimum frekans değişim grafiği       | 57 |
| <b>Şekil 4.9.</b>  | Monomerik galyum trihalojenürlerin ( $GaX_3$ ) bağ açısı değişim grafiği              | 58 |
| <b>Şekil 4.10.</b> | Dimerik galyum triflorürün ( $Ga_2F_6$ ) denge durumundaki molekül yapısı             | 62 |
| <b>Şekil 4.11.</b> | Dimerik galyum triklorür ( $Ga_2Cl_6$ ) molekülünün denge durumundaki yapısı          | 65 |
| <b>Şekil 4.12.</b> | Dimerik galyum tribromür ( $Ga_2Br_6$ ) molekülünün denge durumundaki yapısı          | 69 |
| <b>Şekil 4.13.</b> | Dimerik galyum triiyodür ( $Ga_2I_6$ ) molekülünün denge durumundaki yapısı           | 73 |
| <b>Şekil 4.14.</b> | Dimerik galyum trihalojenürlerin ( $Ga_2X_6$ ) toplam enerji değişim grafiği          | 75 |
| <b>Şekil 4.15.</b> | Dimerik galyum trihalojenürlerin ( $Ga_2X_6$ ) Van der waals enerjisi değişim grafiği | 76 |
| <b>Şekil 4.16.</b> | Dimerik galyum trihalojenürlerin ( $Ga_2X_6$ ) bağ uzunlukları değişim grafiği        | 77 |
| <b>Şekil 4.17.</b> | Dimerik galyum trihalojenürlerin ( $Ga_2X_6$ ) maksimum frekans değişim grafiği       | 77 |
| <b>Şekil 4.18.</b> | Dimerik galyum trihalojenürlerin ( $Ga_2X_6$ ) bağ açısı değişim grafiği              | 78 |

## TABLOLARIN LİSTESİ

|  |    |
|--|----|
| <b>Tablo 2.1.</b> Galyum elementinin iyonlaşma enerjileri ( k J mol <sup>-1</sup> )  | 5  |
| <b>Tablo 2.2.</b> Galyum elementinin izotopları  | 5  |
| <b>Tablo 2.3.</b> Galyum elementinin indirgenme potansiyeli  | 6  |
| <b>Tablo 2.4.</b> Flor elementinin iyonlaşma enerjileri ( k J mol <sup>-1</sup> )  | 9  |
| <b>Tablo 2.5.</b> Flor elementinin izotopları  | 10 |
| <b>Tablo 2.6.</b> Flor elementinin indirgenme potansiyeli  | 10 |
| <b>Tablo 2.7.</b> Klor elementinin iyonlaşma enerjileri ( k J mol <sup>-1</sup> )  | 13 |
| <b>Tablo 2.8.</b> Klor elementinin izotopları  | 13 |
| <b>Tablo 2.9.</b> Klor elementinin indirgenme potansiyeli  | 14 |
| <b>Tablo 2.10.</b> Brom elementinin iyonlaşma enerjileri ( k J mol <sup>-1</sup> )   | 18 |
| <b>Tablo 2.11.</b> Brom elementinin izotopları   | 18 |
| <b>Tablo 2.12.</b> Brom elementinin indirgenme potansiyeli   | 19 |
| <b>Tablo 2.13.</b> İyot elementinin iyonlaşma enerjileri ( k J mol <sup>-1</sup> )   | 23 |
| <b>Tablo 2.14.</b> İyot elementinin izotopları   | 23 |
| <b>Tablo 2.15.</b> İyot elementinin indirgenme potansiyeli   | 24 |
| <b>Tablo 4.1.</b> Galyum triflorür (GaF <sub>3</sub> ) molekülü için giriş parametreleri<br>( M galyum iyonu ve X flor iyonunu temsil etmektedir ) | 43 |
| <b>Tablo 4.2.</b> Galyum triflorür (GaF <sub>3</sub> ) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları  | 43 |
| <b>Tablo 4.3.</b> Galyum triflorür (GaF <sub>3</sub> ) molekülü için titreşim frekansları (cm <sup>-1</sup> )                                      | 44 |
| <b>Tablo 4.4.</b> Galyum triflorür (GaF <sub>3</sub> ) molekülünün denge durumundaki enerjileri (eV)   | 45 |
| <b>Tablo 4.5.</b> Galyum triklorür (GaCl <sub>3</sub> ) molekülü için giriş parametreleri<br>( M galyum iyonu ve X klor iyonunu göstermektedir )   | 46 |
| <b>Tablo 4.6.</b> Galyum triklorür (GaCl <sub>3</sub> ) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları   | 46 |
| <b>Tablo 4.7.</b> Galyum triklorür (GaCl <sub>3</sub> ) molekülü için titreşim frekansları (cm <sup>-1</sup> )                                     | 47 |
| <b>Tablo 4.8.</b> Galyum triklorür (GaCl <sub>3</sub> ) molekülünün hesaplanan enerjileri ( eV )   | 48 |
| <b>Tablo 4.9.</b> Galyum tribromür (GaBr <sub>3</sub> ) molekülü için giriş parametreleri<br>( M galyum iyonu ve X brom iyonunu göstermektedir )   | 49 |
| <b>Tablo 4.10.</b> Galyum tribromür (GaBr <sub>3</sub> ) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları  | 49 |
| <b>Tablo 4.11.</b> . Galyum tribromür (GaBr <sub>3</sub> ) molekülü için titreşim frekansları (cm <sup>-1</sup> )                                  | 50 |

|   |    |
|---|----|
| <b>Tablo 4.12.</b> Galyum tribromür ( $\text{GaBr}_3$ ) molekülünün hesaplanan enerjileri ( eV )  | 51 |
| <b>Tablo 4.13.</b> Galyum triiyodür ( $\text{GaI}_3$ ) molekülü için giriş parametreleri<br>( M galyum iyonu ve X iyot iyonunu göstermektedir )                   | 52 |
| <b>Tablo 4.14.</b> Galyum triiyodür ( $\text{GaI}_3$ ) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları   | 52 |
| <b>Tablo 4.15.</b> Galyum triiyodür ( $\text{GaI}_3$ ) molekülü için titreşim frekansları ( $\text{cm}^{-1}$ )  | 53 |
| <b>Tablo 4.16.</b> Galyum triiyodür ( $\text{GaI}_3$ ) molekülünün hesaplanan enerjileri ( eV )   | 54 |
| <b>Tablo 4.17.</b> Galyum trihalojenürlerin ( $\text{GaX}_3$ ) potansiyel enerji değerleri ( eV )   | 55 |
| <b>Tablo 4.18.</b> Galyum trihalojenürlerin ( $\text{GaX}_3$ ) bağ uzunlukları, maksimum titreşim frekansları ve bağ açıları değerleri                            | 56 |
| <b>Tablo 4.19.</b> Dimerik galyum triflorür ( $\text{Ga}_2\text{F}_6$ ) molekülü için giriş parametreleri<br>( M galyum iyonu ve X flor iyonunu göstermektedir )  | 60 |
| <b>Tablo 4.20.</b> Dimerik galyum triflorür ( $\text{Ga}_2\text{F}_6$ ) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları  | 61 |
| <b>Tablo 4.21.</b> Dimerik galyum triflorür ( $\text{Ga}_2\text{F}_6$ ) molekülü için titreşim frekansları  | 61 |
| <b>Tablo 4.22.</b> Dimerik galyum triflorür ( $\text{Ga}_2\text{F}_6$ ) molekülünün hesaplanan etkileşme potansiyel enerjileri ( eV )                             | 62 |
| <b>Tablo 4.23.</b> Dimerik galyum triklorür ( $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ) molekülü için giriş parametreleri<br>( M galyum iyonu ve X klor iyonunu göstermektedir ) | 63 |
| <b>Tablo 4.24.</b> Dimerik galyum triklorür ( $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları   | 64 |
| <b>Tablo 4.25.</b> Dimerik galyum triklorür ( $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ) molekülü için titreşim frekansları   | 65 |
| <b>Tablo 4.26.</b> Dimerik galyum triklorür ( $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ) molekülünün hesaplanan etkileşme potansiyel enerjileri ( eV )                            | 66 |
| <b>Tablo 4.27.</b> Dimerik galyum tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ) molekülü için giriş parametreleri<br>( M galyum iyonu ve X brom iyonunu göstermektedir ) | 67 |
| <b>Tablo 4.28.</b> Dimerik galyum tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları   | 68 |
| <b>Tablo 4.29.</b> Dimerik galyum tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ) molekülü için titreşim frekansları   | 69 |
| <b>Tablo 4.30.</b> Dimerik galyum tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ) molekülünün hesaplanan enerjileri ( eV )   | 70 |

|   |    |
|---|----|
| <b>Tablo 4.31.</b> Dimerik galyum triiyodür ( $Ga_2I_6$ ) molekülü için giriş parametreleri<br>( M galyum iyonu ve X iyot iyonunu göstermektedir )    | 71 |
| <b>Tablo 4.32.</b> Dimerik galyum triiyodür ( $Ga_2I_6$ ) molekülü için hesaplanan<br>bağ uzunlukları   | 72 |
| <b>Tablo 4.33.</b> Dimerik galyum triiyodür ( $Ga_2I_6$ ) molekülü için titreşim frekansları  | 73 |
| <b>Tablo 4.34.</b> Dimerik galyum triiyodür ( $Ga_2I_6$ ) molekülünün hesaplanan<br>enerjileri (eV)   | 74 |
| <b>Tablo 4.35.</b> Dimerik galyum trihalojenür moleküllerinin ( $Ga_2X_6$ )<br>enerji değerleri (eV)  | 74 |
| <b>Tablo 4.36.</b> Dimerik galyum trihalojenürlerin ( $Ga_2X_6$ ) İKM ile hesaplanan bağ<br>uzunlukları, maksimum titreşim frekansları ve bağ açıları | 76 |

## KISALTMALAR

**İ K M** : İyonlar arası Kuvvet Modeli ( IFM: Interionic Force Model ).

**est.gas-phase** : gaz fazı.

**H F** : Hartree–Fock Hesaplama Yöntemi ( Hartree–Fock Level Computation ).

**E D** : Elektron Kırınım Deneyi ( Electron Diffraction ).

**ED/SP** : Elektron saçılması ve titreşimsel spektroskopinin ortak analizi  
( Joint electron diffraction and vibrational spectroscopic analysis ).

**Ra** : Raman spektroskopisi ( Raman spectroscopy ).

**IR** : Kızılötesi spektroskopisi ( İnfrared spectroscopy ).

**MI** : Matris ayırma spektroskopisi ( Matrix isolation spectroscopy ) .

**R** : Göreli ( Relativistic ) .

**MRSDCI** : Çok Kaynaklı Tek ve Çift Konfigurasyonlu Etkileşim Modeli  
( Multireference Single and Double Configuration Interaction Method ).

**MRSDCI (+Q)** : Çok Kaynaklı Davidson Düzelmelerini İçeren Tek ve Çift Konfigurasyonlu  
Etkileşim Modeli (As Above Including the multireference Davidson correction).

**ND** : Nötron Kırınım Deneyi ( Neutron Diffraction ).

**Q R** : Quasirelativistic.

**M W** : Mikrodalga Spektroskopisi ( Microwave Specroscopy ).

**CCSD** : Birleştirilmiş Tek ve Çiftli Kümeler ( Coupled Cluster Singles and Doubles ).

## BÖLÜM 1

### GİRİŞ

Herhangi bir molekülün serbest haldeki titreşim hareketi incelendiğinde molekülle ilgili yapısal özelliklere ulaşılabilir. Bu ifadenin dayanağı olarak ta, molekülü oluşturan atomların cinsleri ve taşıdığı elektronik özelliklere bağlı olarak molekülün sahip olduğu üç boyutlu geometrinin ve elektron bulutunun uzaysal dağılımı gibi önemli fiziksel parametrelerin molekülün sahip olduğu titreşimsel davranışlarla belirlenebilir olması gösterilebilir. Moleküllerin titreşim modlarını belirlemenin yolu ise titreşim sonucunda gözlenen atomik yerdeğişirmelerdeki iç koordinatları kullanmaktır. Belirlenen her bir titreşim modu kendisini oluşturan iç koordinatlara ait kuvvet parametrelerinin alacağı değerlere göre bir titreşim frekansına sahiptir. Molekülün iç koordinatlarına ait kuvvet parametrelerinin moleküle ait potansiyel enerjiye bağlı olarak ifade edilmesi, potansiyel modelleme çalışmalarında kullanılan modelin önemini arttırmaktadır.

Çalışmamızda metal halojenürlerin yapı analizlerinde rahatlıkla kullanılacak parametrelere sahip olan bir potansiyel model oluşturulmuş ve bu potansiyel modeli içeren küçük molekül kümeleri için geliştirilmiş moleküler dinamiğin programı yardımıyla metal halojenür moleküllerinin bağ açıları ve uzunlukları, geometrileri ve titreşim frekansları hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar farklı deneysel veri ve teorik modellerin sonuçları ile karşılaştırılarak modelin doğruluğu ve kullanılan parametrelerin diğer metaller için de uygun olduğu anlaşılmıştır. Bu çalışmada  $MX_3$  yapısındaki moleküllerin statik ve moleküler yapısının incelenmesi amaçlanmıştır. Burada M: metal ( Ga ), X: Halojenür ( F, Cl, Br, I ) olmak üzere sıvı yapıdaki galyum halojenürleri, iyonlar arası kuvvet modeli ( İKM ) kullanılarak moleküler geometrileri bulunmuştur. Öncelikle, toplam potansiyelin bulunabilmesi için her molekül için yumuşak küre potansiyeli, bağlanma potansiyeli, Van der Waals etkileşme potansiyeli, elektrik potansiyeli, dipol-dipol etkileşme potansiyeli hesaplanmıştır.

Magdolna Hargittai'nin yayınlanmış olan "Molecular Structure of Metal Halides (metal halojenlerin moleküler yapıları)" başlıklı çalışmasında [1], monomerik galyum trihalojenürler  $\text{GaF}_3$ ,  $\text{GaCl}_3$ ,  $\text{GaBr}_3$ ,  $\text{GaI}_3$  ve dimerik galyum trihalojenürler  $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ,  $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ,  $\text{Ga}_2\text{I}_6$  için deneysel ve teorik olarak bağ uzunlukları, bağ açıları, titreşim frekansları bulunmuştur.

Bu çalışmada, daha önce birçok sisteme uygulanıp, iyi sonuçlar vermiş olan, küçük moleküler kümeler için geliştirilen, molekül dinamiği programını ( İKM ) [2], Magdolna Hargittai'nin çalışmasında yer alan monomerik ve dimerik galyum trihalojenürlerine [1] uygulayarak; denge durumundaki bağ uzunlukları, bağ açıları, enerjileri, üç boyutlu koordinatları ve titreşim frekansları hesaplanmış, elde edilen sonuçlar Hargittai'nin elde ettiği sonuçlar ile karşılaştırılmıştır.

$\text{MX}_3$  yapısındaki moleküllerin geometrik yapısını incelerken kullandığımız toplam potansiyelin hesaplanma yöntemi Bölüm 2 'de ayrıntılı olarak verilmiştir. Bölüm 3 'te ise monomerik  $\text{GaX}_3$  ve dimerik  $\text{GaX}_3$  ( $\text{Ga}_2\text{X}_6$ ) molekül sistemlerinin İKM parametreleri, atomlar arası bağ uzunlukları, bağ açıları, enerjileri ve titreşim frekansları detaylı olarak tablolar halinde verilmiş ve bulunan denge durumu koordinatları kullanılarak moleküllerin geometrik şekilleri oluşturulmuştur.



## BÖLÜM 2

### GALYUM, FLOR, KLOR, BROM VE İYOT ELEMENTLERİNİN FİZİKSEL VE KİMYASAL ÖZELLİKLERİ

#### 2.1. Galyum Elementi



Şekil 2.1. Galyum elementinin resmi.

Sembölü : Ga

Atom numarası : 31

Atom ağırlığı : 69.723 ( gr / mol )

Oda koşullarında ( 25 °C = 298 K ) : Gümüşümsü beyaz renkli , katı halde .

Periyotlar tablosundaki sınıfı : Metal ve p-blok elementi .

Galyum metali ilk olarak 1875 yılında Lecoq de Boisbaudran tarafından keşfedilmiştir. Galyum alüminyumun eldesi sırasında yan ürün olarak elde edilir. Boksit mineralinin saflaştırılması ile alüminyum ile beraber elde edilir. Daha sonra elektroliz ile saf olarak elde edilir [30].

### 2.1.1. Galyum Elementinin Fiziksel Özellikleri ve Kullanım Alanları

Yoğunluğu : 5.904 ( g / ml )

Erime noktası : 29.76 °C ( 302.91 K )

Kaynama noktası : 2204 °C ( 2477 K )

Molar hacmi : 11.80 ( ml / mol )

Özgül ısı : 0.37 ( J g<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup> )

Mineral sertliği : 1.5

Isı iletkenliği : 0.29 ( W cm<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup> )

Buharlaştırma Entalpisi : 256 ( k J mol<sup>-1</sup> )

Atomlaştırma Entalpisi : 277 ( k J mol<sup>-1</sup> )

Kullanım Alanları :

1. Cam ve porselenlere ıslak görünüm vermek için kullanılır.
2. Yarı iletken ve transistör gibi cihazların üretiminde kullanılır.
3. Galyum arsenit bileşiği elektriği ışığa çevirebilme özelliğinden dolayı birçok uygulamada kullanılmaktadır [30].

### 2.1.2. Galyum Elementinin Kimyasal Özellikleri ve Bileşikleri

Elektronik konfigürasyonu : [Ar] . 3 d<sup>10</sup> . 4 s<sup>2</sup> . 4 p<sup>1</sup>

Kabuk yapısı : 2 . 8 . 18 . 3

Elektronegatiflik : 1.81 ( Pauling birimine göre )

2.42 ( Sanderson elektronegativitesine göre )

Elektron ilgisi : 28.9 ( k J mol<sup>-1</sup> )

Atomik yarıçap: 130 pm ( 136 pm hesaplanan )

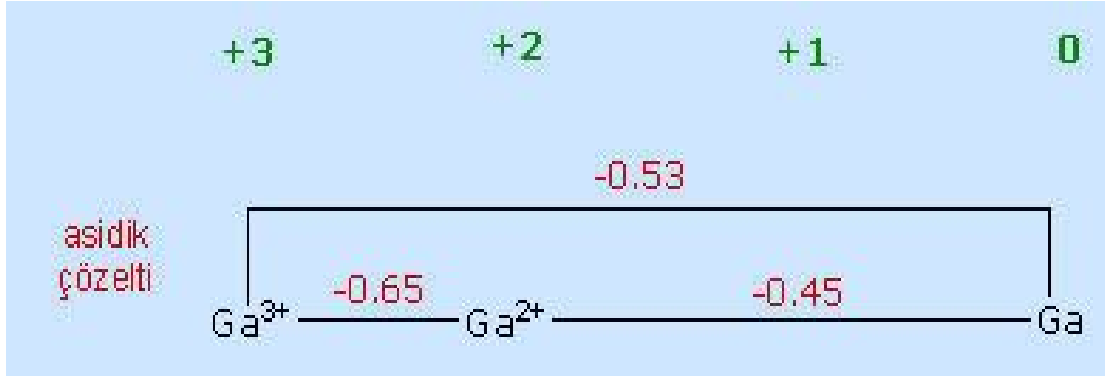
Oksidasyon sayısı : 3

**Tablo 2.1.** Galyum elementinin iyonlaşma enerjileri ( k J mol<sup>-1</sup> )

|                         |        |
|-------------------------|--------|
| I. İyonlaşma Enerjisi   | 578.8  |
| II. İyonlaşma Enerjisi  | 1979.3 |
| III. İyonlaşma Enerjisi | 2963.0 |
| IV. İyonlaşma Enerjisi  | 6180.0 |

**Tablo 2.2.** Galyum elementinin izotopları

| İzotop           | Yarılanma süresi |
|------------------|------------------|
| <sup>64</sup> Ga | 2.63 dakika      |
| <sup>65</sup> Ga | 15.20 dakika     |
| <sup>66</sup> Ga | 9.50 saat        |
| <sup>67</sup> Ga | 3.26 dakika      |
| <sup>68</sup> Ga | 1.13 saat        |
| <sup>69</sup> Ga | Kararlı          |
| <sup>70</sup> Ga | 21.10 dakika     |
| <sup>71</sup> Ga | Kararlı          |
| <sup>72</sup> Ga | 14.10 saat       |
| <sup>73</sup> Ga | 74.87 saat       |
| <sup>74</sup> Ga | 8.10 dakika      |
| <sup>85</sup> Ga | 2.10 dakika      |

**Tablo 2.3.** Galyum elementinin indirgenme potansiyeli

Bileşikleri :

[GaH<sub>3</sub>]<sub>2</sub> , GaF<sub>3</sub> , GaF<sub>3</sub>.3H<sub>2</sub>O , Ga<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub> , Ga<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub> , GaBr<sub>3</sub> , Ga<sub>2</sub>I<sub>6</sub> , GaO , Ga<sub>2</sub>O , Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> , GaS , Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> , GaSe , Ga<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> , GaTe , Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> , GaN [30].

## 2.2. Flor Elementi



Şekil 2.2. Flor elementinin resmi.

Sembölü : F

Atom numarası : 9

Atom ağırlığı : 18.9984032 ( gr / mol )

Oda koşullarında ( 25 °C = 298 K ) : Açık sarı renkli gaz .

Periyotlar tablosundaki sınıfı : Ametal ve p-blok elementi .

1529 yılında Georigius Agricola kalsiyum florür bileşiğini tanımlamıştır. İlk defa 1886 yılında Henri Moissan tarafından izole edilmiştir.

En önemli minerali fluorit veya florspati denilen ( kalsiyum diflorür )  $\text{CaF}_2$  'dir. Flor 'un saf olarak eldesi 1 / 2 oranında sıcak erimiş KF, HF bileşenlerinin elektrolizi ile gerçekleşir. Flor en aktif element olup  $\text{O}_2$  ve asal gazlar hariç tüm elementlerle hemen reaksiyona girer. Fazla reaktif olmasının nedeni F – F bağının kolay kopması yani disosiyasyon enerjisinin az olmasıdır. Sadece (-1) oksidasyon sayısına sahiptir yani tek bağ yapabilir. [30].

### 2.2.1. Flor Elementinin Fiziksel Özellikleri ve Kullanım Alanları

Yoğunluğu : 0.001696 ( g / ml )

Erime noktası :  $-219.62\text{ }^{\circ}\text{C}$  ( 53.53 K )

Kaynama noktası :  $-188.12\text{ }^{\circ}\text{C}$  ( 85.03 K )

Molar hacmi : 11.20 ( ml / mol )

Özgül ısısı : 0.824 ( J / g K )

Isı iletkenliği : 0.0277 ( W / m K )

Buharlaşma Entalpisi : 3.27 ( kJ mol<sup>-1</sup> )

Atomlaşma Entalpisi : 79 ( kJ mol<sup>-1</sup> )

Kullanım Alanları :

1. Teflon adı verilen aside ve baza dayanıklı polimerlerin üretiminde kullanılır.
2. Cama etki eden tek bileşik hidroflorik asit ( HF ) olduğundan cam yüzeylerin aşındırma işleminde kullanılır.
3. Diş sağlığı için gerekli bir madde olduğu için diş macunlarında kullanılır.
4. Tek atomlu florlar, yarıiletken özelliğe sahip olduğundan yarıiletken ürünlerin üretiminde kullanılır.
5. Floroklorohidrokarbon bileşiği buzdolabı, klima ve deodorantlarda kullanılır. Fakat floroklorohidrokarbon bileşiği ozon tabakasına zararlı bir maddedir [30].

### 2.2.2. Flor Elementinin Kimyasal Özellikleri ve Bileşikleri

Elektronik konfigürasyonu : [He] . 2 s<sup>2</sup> . 2 p<sup>5</sup>

Kabuk yapısı : 2 . 7

Elektronegatiflik : 3.98 ( Pauling birimine göre )

4.00 ( Sanderson elektronegatifliğine göre )

Elektron ilgisi : 328 ( k J mol<sup>-1</sup> )

Atomik yarıçap: 50 pm ( hesaplanan 42 pm )

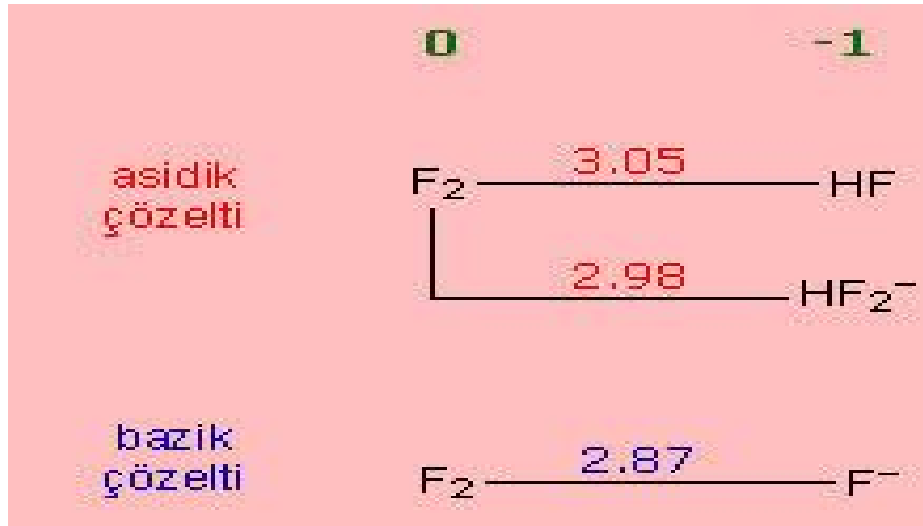
Oksidasyon sayısı : - 1

**Tablo 2.4.** Flor elementinin iyonlaşma enerjileri ( k J mol<sup>-1</sup> )

|                          |          |
|--------------------------|----------|
| I. İyonlaşma Enerjisi    | 1681.0   |
| II. İyonlaşma Enerjisi   | 3374.2   |
| III. İyonlaşma Enerjisi  | 6050.4   |
| IV. İyonlaşma Enerjisi   | 8407.7   |
| V. İyonlaşma Enerjisi    | 11022.7  |
| VI. İyonlaşma Enerjisi   | 15164.1  |
| VII. İyonlaşma Enerjisi  | 17868.0  |
| VIII. İyonlaşma Enerjisi | 92038.1  |
| IX. İyonlaşma Enerjisi   | 106434.3 |

**Tablo 2.5.** Flor elementinin izotopları

| İzotop          | Yarılanma Süresi |
|-----------------|------------------|
| $^{17}\text{F}$ | 64.5 saniye      |
| $^{18}\text{F}$ | 1.83 saat        |
| $^{19}\text{F}$ | Kararlı          |
| $^{20}\text{F}$ | 11.00 saniye     |
| $^{21}\text{F}$ | 4.16 saniye      |
| $^{22}\text{F}$ | 4.23 saniye      |

**Tablo 2.6.** Flor elementinin indirgenme potansiyeli

[30].



### 2.3. Klor Elementi



Şekil 2.3. Klor elementinin resmi.

Sembölü : Cl

Atom numarası : 17

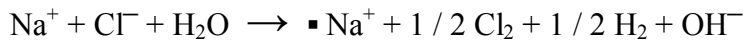
Atom ağırlığı : 35.453 ( gr / mol )

Oda koşullarında ( 25 °C = 298 K ) : Sarı-yeşil renkli gaz .

Periyotlar tablosundaki sınıfı : Ametal ve p-blok elementi .

Klor ilk olarak 1774 Carl Wilhelm Scheele tarafından keşfedildi. 1810 yılında ise bu günkü ismi Humphry Davy tarafından verildi.

Klor, deniz suyunda NaCl formunda bulunur. NaCl elektrolizi ile saf klor elde edilebilir.



Diğer bir elde edilme yöntemi ise piroluri denilen  $\text{MnO}_2$  ve HCl asitten sıcakta elde edilir.



3.5 ppm 'in üzerinde kokusu hissedilir. 1000 ppm ve üzerinde öldürücü özelliği vardır.

Hatta I. Dünya savaşında savaş gazı olarak kullanılmıştır [30].

### 2.3.1. Klor Elementinin Fiziksel Özellikleri ve Kullanım Alanları

Yoğunluğu : 0.003214 ( g / ml )

Erime noktası :  $-101.5$  °C ( 171.6 K )

Kaynama noktası :  $-34.04$  °C ( 239.11 K )

Molar hacmi : 17.39 ( ml / mol )

Özgül ısı : 0.48 ( J / g K )

Isı iletkenliği : 0.0089 ( W / m K )

Buharlaşma Entalpisi : 10.2 ( kJ mol<sup>-1</sup> )

Atomlaşma Entalpisi : 122 ( kJ mol<sup>-1</sup> )

Kullanım Alanları :

1. Mikrop öldürücü ve renk giderici olarak kullanılır.
2. Bitkisel kaynaklı maddelerin ( yün, pamuk, kağıt gibi ) beyazlatılmasında kullanılır.
3. HCl asit üretiminde kullanılır.
4. Korrozif bir madde olan klor, doymuş organik bileşiklerle yerdeğiştirme, doymamış organik bileşiklerde de katılma reaksiyonları oluştururlar.
5. İçme sularında mikrop öldürücü olarak kullanılır.
6. Dezenfektan olarak kullanılır [30].

### 2.3.2. Klor Elementinin Kimyasal Özellikleri ve Bileşikleri

Elektronik konfigürasyonu : [Ne] . 3 s<sup>2</sup> . 3 p<sup>5</sup>

Kabuk yapısı : 2 . 8 . 7

Elektronegatiflik : 3.16 ( Pauling birimine göre )

3.48 ( Sanderson elektronegatifliğine göre )

Elektron ilgisi : 349 ( k J mol<sup>-1</sup> )

Atomik yarıçap: 100 pm ( hesaplanan 79 pm )

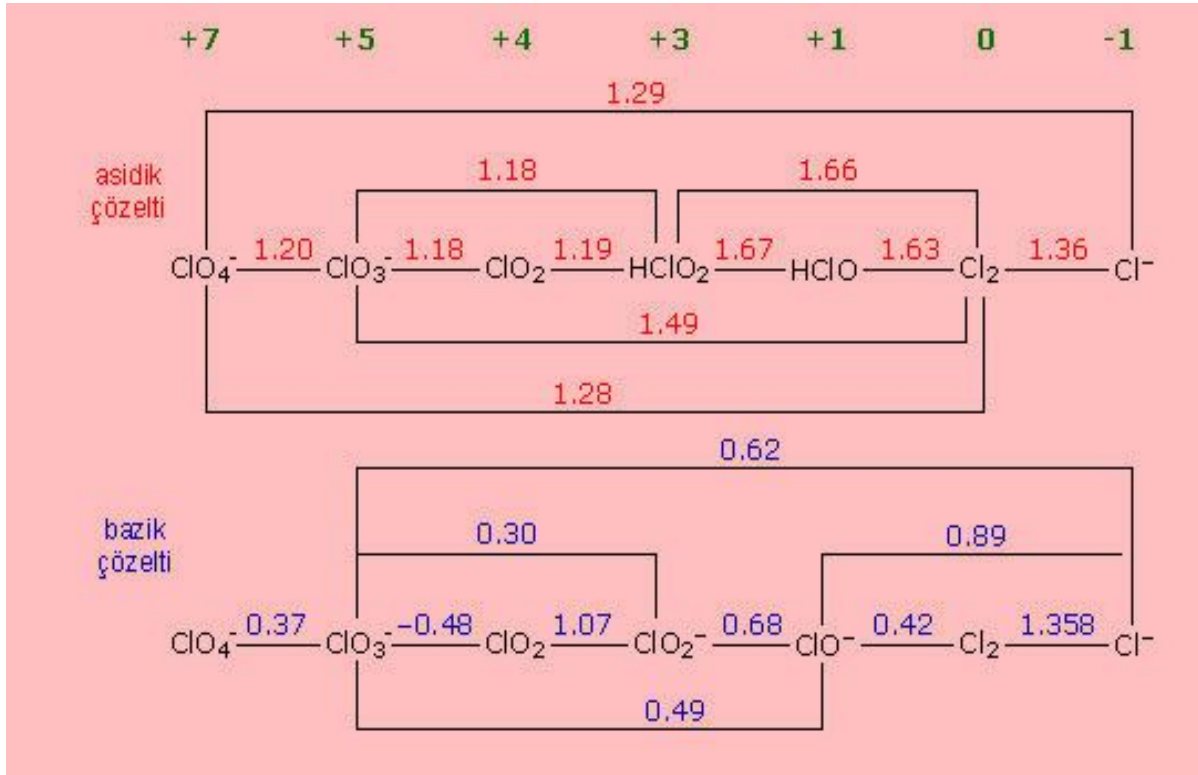
Oksidasyon sayısı : - 1, + 1, 3, 5, 7

**Tablo 2.7.** Klor elementinin iyonlaşma enerjileri ( k J mol<sup>-1</sup> )

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| I. İyonlaşma Enerjisi    | 1251.2 |
| II. İyonlaşma Enerjisi   | 2298   |
| III. İyonlaşma Enerjisi  | 3822   |
| IV. İyonlaşma Enerjisi   | 5158   |
| V. İyonlaşma Enerjisi    | 6542   |
| VI. İyonlaşma Enerjisi   | 9362   |
| VII. İyonlaşma Enerjisi  | 11018  |
| VIII. İyonlaşma Enerjisi | 33604  |
| IX. İyonlaşma Enerjisi   | 38600  |
| X. İyonlaşma Enerjisi    | 43961  |

**Tablo 2.8.** Klor elementinin izotopları

| İzotop           | Yarılanma Süresi |
|------------------|------------------|
| <sup>35</sup> Cl | Kararlı          |
| <sup>36</sup> Cl | 301.000 yıl      |
| <sup>37</sup> Cl | Kararlı          |

**Tablo 2.9.** Klor elementinin indirgenme potansiyeli

Reaksiyonları :

1. Hava ile Reaksiyonu

Klor havada azot ve oksijene karşı reaktif değildir.

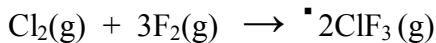
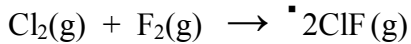
2. Su ile Reaksiyonu

Klor su ile reaksiyona girip hipoklorit (OCl<sup>-</sup>) oluşturur. Reaksiyonun denge yönü çözeltinin pH'na bağlıdır.

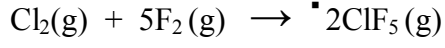


3. Halojenler ile Reaksiyonu

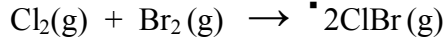
225 °C'de klor, flor ile reaksiyona girerek interhalojenleri oluşturur. Triflorür klorür (III)'ün oluşum reaksiyonunun nasıl gerçekleştiği bilinmemektedir.



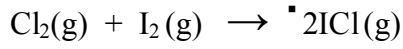
Florun fazlası ile klor'un 350 °C 'de ve 225 atm basınçta reaksiyonu sonucunda interhalojen ClF<sub>5</sub> oluşur.



Klorun gaz fazında bromla reaksiyonu sonucunda kararsız interhalojen ClBr oluşur.



Benzer şekilde klor ile iyot arasındaki oda sıcaklığında gerçekleşen reaksiyon sonucunda iyodür (I) klorür (ClI) oluşur.



#### 4. Asit ile Reaksiyonu

Klor hidrojenli bileşiklere, özellikle HBr, HI, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> ve NH<sub>3</sub> 'a etki eder.

#### 5. Baz ile Reaksiyonu

Klorürün sıcak sulu alkalilerle reaksiyonu sonucunda kloratlar ClO<sub>3</sub><sup>-</sup> oluşur.



Bileşikleri :

ClF, ClF<sub>3</sub>, ClF<sub>5</sub>, ClO<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>O, ClOClO<sub>3</sub>, Cl<sub>2</sub>O<sub>6</sub>, Cl<sub>2</sub>O<sub>7</sub> [30].

## 2.4. Brom Elementi



Şekil 2.4. Brom elementinin resmi.

Sembölü : Br

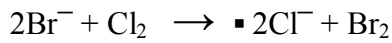
Atom numarası : 35

Atom ağırlığı : 79.904 ( gr / mol )

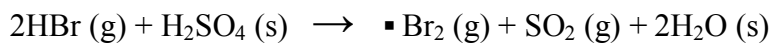
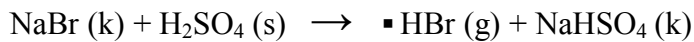
Oda koşullarında ( 25 °C = 298 K ) : Kırmızı renkli sıvı .

Periyotlar tablosundaki sınıfı : Ametal ve p-blok elementi .

Brom ilk kez Antoine Balard tarafından 1826 yılında keşfedildi. Brom doğada Na, K ve Mg bromürler halinde bulunur. Deniz suyunda az miktarda bulunan bromürlere deniz bitkilerinde ve bazı maden yataklarında rastlanır. Bromun deniz suyundan elde edilmesi, bromürlerin Cl<sub>2</sub> ile reaksiyonu sonucu olur.



Diğer bir elde edilişi ise, katı sodyum bromürün sülfürik asit ile reaksiyonu sonucunda elde edilen gaz formundaki HBr 'ün yine sülfürik asit ile yükseltgenmesi neticesinde gerçekleşir [30].



### 2.4.1. Brom Elementinin Fiziksel Özellikleri ve Kullanım Alanları

Yoğunluğu : 3.12 ( g / ml )

Erime noktası :  $-7.3$  °C ( 265.8 K )

Kaynama noktası : 59 °C ( 332 K )

Molar hacmi : 19.78 ( ml / mol )

Özgül ısı : 0.473 ( J / g K )

Isı iletkenliği : 0.00122 ( W / cm K )

Buharlaştırma Entalpisi : 15.438 ( k J mol<sup>-1</sup> )

Kullanım Alanları :

1. Alev geçirmeyen materyallerin yapımında kullanılır.
2. Su saflaştırma işleminde kullanılır.
3. Kurutucu olarak kullanılır.
4. İlaç sektöründe kullanılır.
5. AgBr fotoğrafçılıkta kullanılır.
6. Plastik yapımında alev geciktirici olarak kullanılır.
7. Etilen dibromür üretiminde kullanılmaktadır. Bu maddede petrolde vuruntuyu engellemek için kullanılır [30].

### 2.4.2. Brom Elementinin Kimyasal Özellikleri ve Bileşikleri

Elektronik konfigürasyonu : [Ar] . 3 d<sup>10</sup> . 4 s<sup>2</sup> . 4 p<sup>5</sup>

Kabuk yapısı : 2 . 8 . 18 . 7

Elektronegatiflik : 2.96 ( Pauling birimine göre )

3.22 ( Sanderson elektronegatifliğine göre )

Elektron ilgisi : 324.6 ( k J mol<sup>-1</sup> )

Atomik yarıçap: 115 pm ( hesaplanan 94 pm )

Oksidasyon sayısı : - 1, + 1, 5

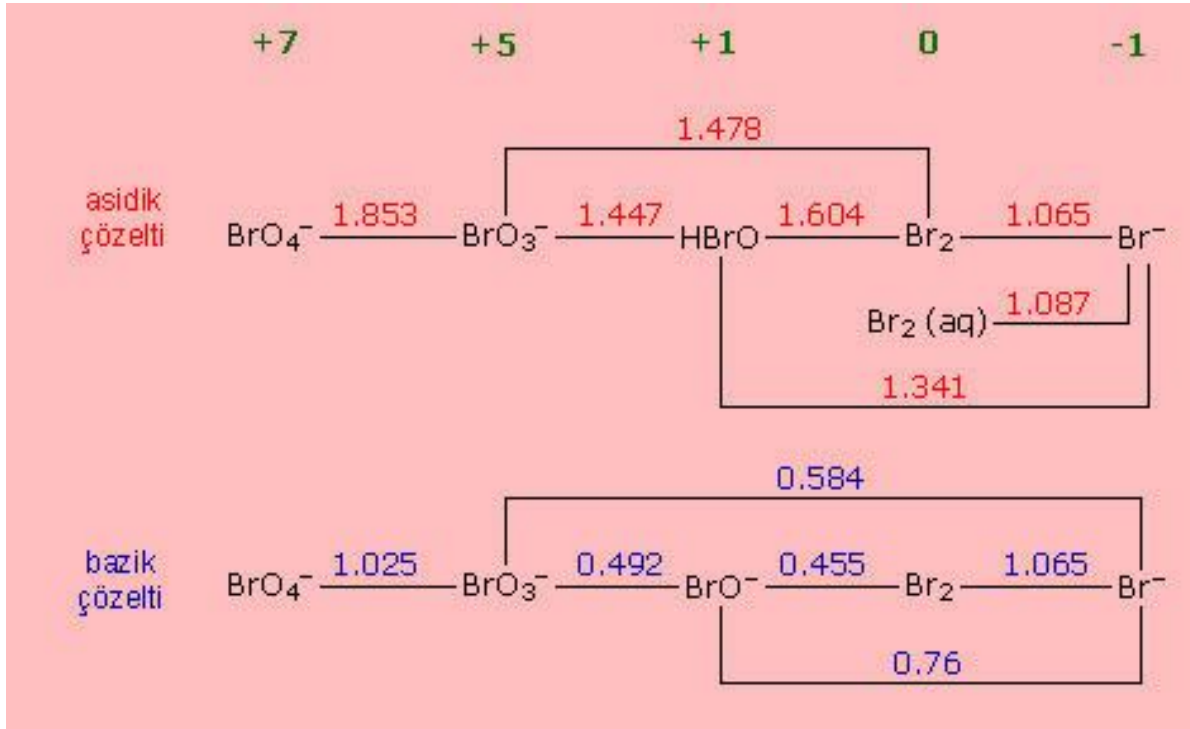
**Tablo 2.10.** Brom elementinin iyonlaşma enerjileri ( k J mol<sup>-1</sup> )

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| I. İyonlaşma Enerjisi    | 1139.9 |
| II. İyonlaşma Enerjisi   | 2103   |
| III. İyonlaşma Enerjisi  | 3470   |
| IV. İyonlaşma Enerjisi   | 4560   |
| V. İyonlaşma Enerjisi    | 5760   |
| VI. İyonlaşma Enerjisi   | 8550   |
| VII. İyonlaşma Enerjisi  | 9940   |
| VIII. İyonlaşma Enerjisi | 18600  |

**Tablo 2.11.** Brom elementinin izotopları

| İzotop           | Yarılanma Süresi |
|------------------|------------------|
| <sup>79</sup> Br | Kararlı          |
| <sup>81</sup> Br | Kararlı          |

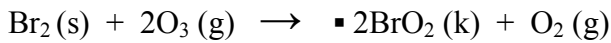


**Tablo 2.12.** Brom elementinin indirgenme potansiyeli

Reaksiyonları :

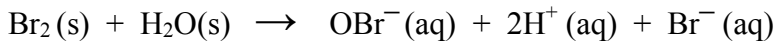
### 1. Hava ile Reaksiyonu

Brom havadaki oksijen ve azotla reaksiyon verecek kadar reaktif bir element değildir. Fakat ozon ( $\text{O}_3$ ) ile  $-78^\circ\text{C}$  reaksiyona girerek brom dioksit  $\text{BrO}_2$  oluşturur.



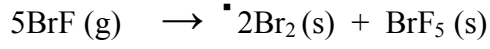
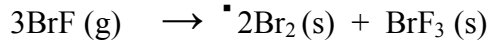
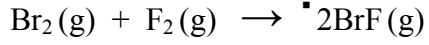
### 2. Su ile Reaksiyonu

Bromun su ile reaksiyonu sonucu hipobromit  $\text{OBr}^-$  oluşur. Reaksiyonun denge yönü ortamın pH'na bağlıdır.

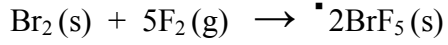


### 3. Halojenler ile Reaksiyonu

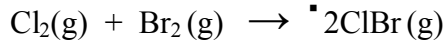
Brom, flor ile diğer halojenlerden farklı reaksiyon verir. Öncelikle gaz fazındaki brom, florür ile  $\text{BrF}$ 'yi oluşturur. Daha sonra  $\text{BrF}$ 'nin bozulması ile  $\text{Br}_2$ ,  $\text{BrF}_3$  ve  $\text{BrF}_5$  oluşur.



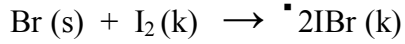
Brom'un florun fazlası ile 150 °C 'de reaksiyona girmesi ile de interhalojen BrF<sub>5</sub>'i oluşturur.



Klorun gaz fazında bromla reaksiyona girmesi ile kararsız interhalojen brom (1) klorür, ClBr oluşur.



Aynı şekilde iyodun bromla oda sıcaklığındaki reaksiyonu sonucunda interhalojen brom (1) iyodür, BrI oluşur.



#### 4. Baz ile Reaksiyonu

Brom sıcak alkali çözeltilerle reaksiyona girerek bromat BrO<sub>3</sub><sup>-</sup> oluşur.



Bileşikleri :

BrF , BrF<sub>3</sub> , BrF<sub>5</sub> , BrCl , BrO<sub>2</sub> , Br<sub>2</sub>O [30].

## 2.5. İyot Elementi



Şekil 2.5. İyot elementinin resmi.

Sembölü : I

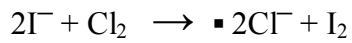
Atom numarası : 53

Atom ağırlığı : 126.90447 ( gr / mol )

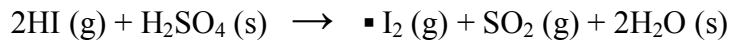
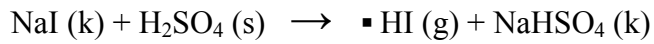
Oda koşullarında ( 25 °C = 298 K ) : Parlak menekşe-siyah renkli katı .

Periyotlar tablosundaki sınıfı : Ametal ve p-blok elementi .

İyot ilk kez Barnard Courtois tarafından 1811 yılında keşfedildi. İyodürün klor gazı ile yükseltgenmesi ile elde edilir.



Diğer bir elde ediliş tekniği ise, katı sodyum iyodürün sülfürik asit ile reaksiyonu sonucunda elde edilen gaz formundaki HI 'nın yine sülfürik asit ile yükseltgenmesi ile gerçekleşir [30].



### 2.5.1. İyot Elementinin Fiziksel Özellikleri ve Kullanım Alanları

Yoğunluğu : 4.940 ( g / ml )

Erime noktası : 113.7 °C ( 386.85 K )

Kaynama noktası : 184.3 °C ( 457.4 K )

Molar hacmi : 25.72 ( ml / mol )

Özgül ısı : 0.145 ( J / g K )

Isı iletkenliği : 0.00449 ( W / cm K )

Buharlaşma Entalpisi : 20.9 ( k J mol<sup>-1</sup> )

Atomlaşma Entalpisi : 107 ( k J mol<sup>-1</sup> )

Kullanım Alanları :

1. Gümüş iyodür fotoğrafçılıkta kullanılır.
2. Guatr hastalığını engellemek amacı ile tuzlara eklenir.
3. Alkoldeki çözeltisi tentürdiyot olarak kullanılır.
4. Besin ögesi olarak kullanılır.
5. Nişasta tayininde ( koyu mavi renk verir ) indikatör olarak kullanılır [30].

### 2.5.2. İyot Elementinin Kimyasal Özellikleri ve Bileşikleri

Elektronik konfigürasyonu : [Kr] . 4 d<sup>10</sup> . 5 s<sup>2</sup> . 5 p<sup>5</sup>

Kabuk yapısı : 2 . 8 . 18 . 18 . 7

Elektronegatiflik : 2.66 ( Pauling birimine göre )

2.78 ( Sanderson elektronegatifliğine göre )

Elektron ilgisi : 295.2 ( k J mol<sup>-1</sup> )

Atomik yarıçap: 140 pm ( hesaplanan 115 pm )

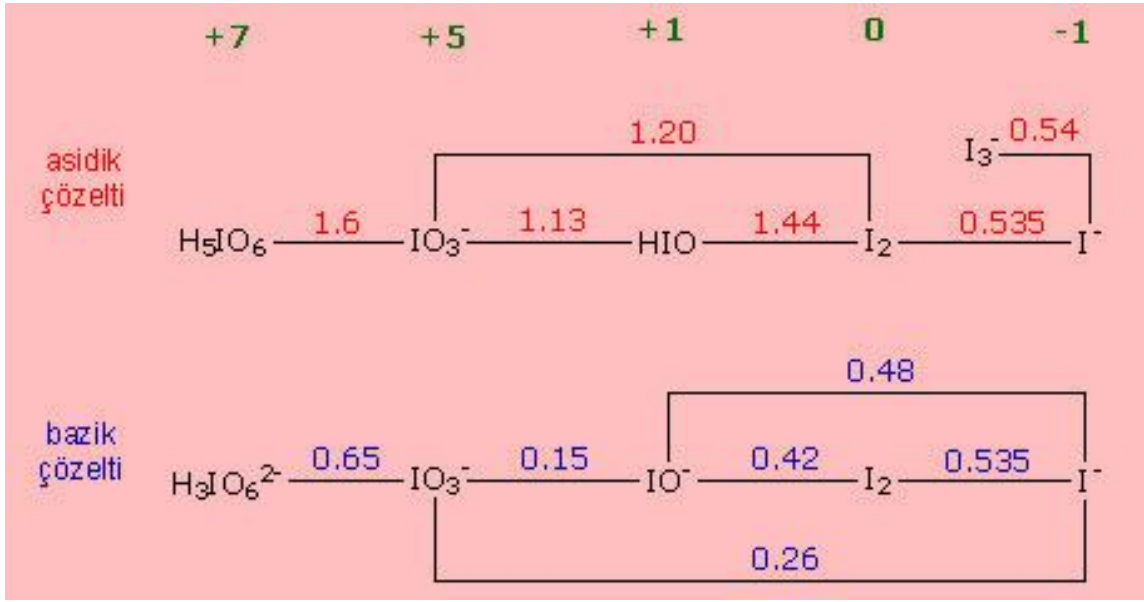
Oksidasyon sayısı : - 1, + 1, 5, 7

**Tablo 2.13.** İyot elementinin iyonlaşma enerjileri ( k J mol<sup>-1</sup> )

|                         |        |
|-------------------------|--------|
| I. İyonlaşma Enerjisi   | 1008.4 |
| II. İyonlaşma Enerjisi  | 1845.9 |
| III. İyonlaşma Enerjisi | 3180   |

**Tablo 2.14.** İyot elementinin izotopları

| İzotop           | Yarılanma Süresi          |
|------------------|---------------------------|
| <sup>122</sup> I | 3.6 Dakika                |
| <sup>123</sup> I | 13.2 Saat                 |
| <sup>124</sup> I | 4.18 Gün                  |
| <sup>125</sup> I | 59.4 Gün                  |
| <sup>126</sup> I | 13 Gün                    |
| <sup>127</sup> I | Kararlı                   |
| <sup>128</sup> I | 25 Dakika                 |
| <sup>129</sup> I | 1.7 x 10 <sup>7</sup> Yıl |
| <sup>130</sup> I | 12.36 Saat                |
| <sup>131</sup> I | 8.04 Gün                  |
| <sup>132</sup> I | 2.28 Saat                 |
| <sup>133</sup> I | 20.8 Saat                 |
| <sup>134</sup> I | 25.6 Dakika               |

**Tablo 2.15.** İyot elementinin indirgenme potansiyeli

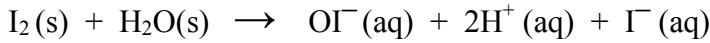
Reaksiyonları :

### 1. Hava ile Reaksiyonu

İyot havadaki oksijen ve azotla reaksiyon verecek kadar reaktif bir element değildir. Fakat ozon (O<sub>3</sub>) ile reaksiyona girerek I<sub>4</sub>O<sub>9</sub> bileşiğini oluşturur.

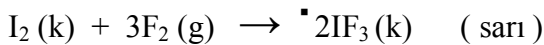
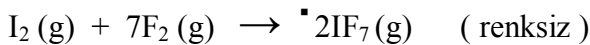
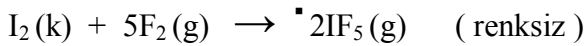
### 2. Su ile Reaksiyonu

İyodun su ile reaksiyonu sonucu hipoyodit OI<sup>-</sup> oluşur. Reaksiyonun denge yönü ortamın pH'na bağlıdır.

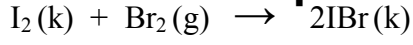


### 3. Halojenler ile Reaksiyonu

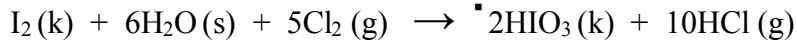
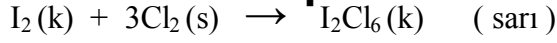
İyodun, I<sub>2</sub> oda sıcaklığında flor, F<sub>2</sub> ile reaksiyonu iyot pentaflorür bileşiğini oluşturur. Aynı reaksiyon 250 °C 'de gerçekleştiği zaman iyot heptaflorür bileşiği oluşur. Reaksiyon -45 °C 'de, CFCl<sub>3</sub> çözücüsü içerisinde gerçekleştirilirse iyot triflorür bileşiği oluşur.



İyodun brom ile reaksiyonu sonucunda çok kararsız bir yapıya ve düşük erime noktasına sahip olan interhalojen IBr bileşiği oluşur.



İyodun  $-80^\circ\text{C}$ 'de sıvı klorün fazlası ile olan reaksiyonu sonucunda iyot triklorür daha doğrusu  $\text{I}_2\text{Cl}_6$  oluşur. İyot, su ve klor reaksiyonu sonucunda iyodat asidi oluşur.



#### 4. Asit ile Reaksiyonu

İyodun sıcak derişik nitrit asit ile reaksiyonu sonucunda iyodat asidi oluşur.



#### 5. Baz ile Reaksiyonu

İyot sıcak alkali çözeltilerle reaksiyona girerek iyodat  $\text{IO}_3^-$  oluştururlar.



Bileşikleri :

$\text{IF}$  ,  $\text{IF}_3$  ,  $\text{IF}_5$  ,  $\text{IF}_7$  ,  $\text{ICl}$  ,  $[\text{ICl}_3]_2$  ,  $\text{IBr}$  ,  $\text{I}_2\text{O}_4$  ,  $\text{I}_2\text{O}_5$  ,  $\text{I}_4\text{O}_9$  [30].

### BÖLÜM 3

## MX<sub>3</sub> YAPISINDAKİ MOLEKÜLLERİN TOPLAM POTANSİYELİNİN HESAPLANMASI

Merkezi atom etrafında üç elektronun dağılımı ile oluşan kimyasal bağ yapısı üçlü yapı olarak adlandırılır. Üçlü yapı geniş olarak ele alındığında, genel fiziğin kapsadığı bölümlerden biri olan optik fiziğin içerdiği konulardan; kırılma, kızılötesi emisyon, absorpsiyon, Raman saçılmaları, elektronik geçişler, optik aberasyonu içeren deneyler başta olmak üzere sıvı polivalent (çok etkili – çok değerli birleşme) metal ve alkali halojen karışımlarının sınanması için uygun ortam elde edilebilir.

M. Hargittai'nin deneysel ve teorik birçok çalışması bu konu ile ilgilidir. Bu çalışmalardan dört tanesini, MX<sub>3</sub> molekülü için, bizim çalışmamızdaki sonuçlar ile karşılaştırmak üzere referans olarak almış bulunmaktayız [1], [3-5].

Bu konuda, Z. Akdeniz'in çok sayıdaki çalışmasından altı tanesini çalışmamıza yön vermesi amacıyla referans olarak almış bulunmaktayız [6-11].

M. Çaliskan ve S. Ş. Dalgıç'ın bu konu ile ilgili birçok çalışması ayrıca, G. Pastore, Z. Akdeniz ve M. P. Tosi'nin çalışmaları, MX<sub>3</sub> molekülünün denge durumundaki moleküler yapısının incelenmesi için, referans olarak alınmıştır. [10-21].

X: Halojen ( F, Cl, Br, I ) ve M: Metal ( Ga ) olmak üzere üçlü yapı, bir üçgenin merkezinde metal, üç yüzeyinde halojen olan yapıdır.

Fakat değişik sistemler incelendiğinde farklı polivalent iyonlarının, yerel koordinasyonunun farklı şekillerde olduğu gözlemlenirse birkaç temel alternatifle karşılaşılabılır. Serbest iyonlarla ilişkili ve M-X bağ uzunluğunun ( r ), dipol momentin büyüklüğünün ( P ) olduğu toplam potansiyel enerji U( P, r ) şeklinde yazılır.



### 3.1. Yumuşak Küre Potansiyeli

Kısa mesafe Coulomb etkileşme potansiyeli ve itici potansiyel toplamı yumuşak küre potansiyeli ( $U_{CSS}$ ) olarak tanımlanır ve

$$U_{CSS} = U_C + U_r \quad (3.1.1)$$

ya da,

$$U_{CSS} = \sum_{i,j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \phi_{ij} \quad (3.1.2)$$

şeklinde yazılabilir. (2.1.1) Denklemde  $U_C$  Coulomb etkileşme potansiyeli,  $U_r$  itici potansiyel olmak üzere sırasıyla,

$$U_C = \sum_{i,j} \frac{Z_i Z_j}{r_{ij}} e^2 \quad (3.1.3)$$

ve örten itici potansiyel ise,

$$U_r = \phi_{ij} = \phi_{ij}(r_{ij}) = f(\rho_i + \rho_j) \exp \left[ \frac{R_i + R_j - r_{ij}}{\rho_i + \rho_j} \right] \quad (3.1.4)$$

olarak verilir.

Bu denklemlerde,

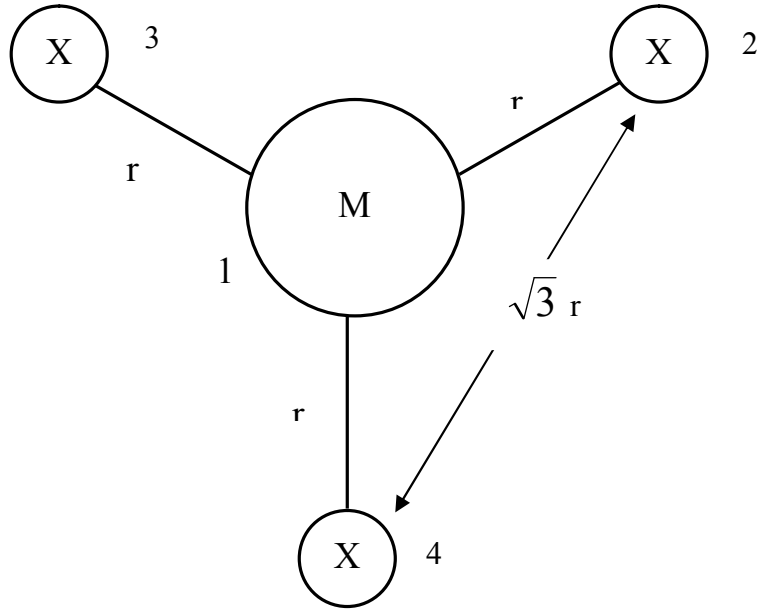
$e$ : elektron yükü,  $Z_i$ : iyonik valans,  $r_{ij}$ : iyonlar arası uzaklık,  $\phi_{ij}$ : itici potansiyel ( $U_r \equiv \phi_{ij}$ ),  $f$ : kuvvet sabiti ( $e^2 / \text{Å}^2$ ),  $\rho_i$ : iyonların birbirine yaklaşabilme sertlik derecesi ( etkin yarıçap ya da iyonların etkinlik sıkıştırılabilirlik mesafesi ),  $R_i$ : iyonik yarıçap olarak verilmektedir.

Burada  $q_i = e Z_i$  olduğu göze önüne alınıp (2.1.2) bağıntısında  $\phi_{ij}(r_{ij})$  yerine yazıldığında yumuşak küre potansiyelinin genel biçimi,

$$U_{CSS} = \sum_{i,j} \frac{Z_i Z_j}{r_{ij}} e^2 + f(\rho_i + \rho_j) \exp \left[ \frac{R_i + R_j - r_{ij}}{\rho_i + \rho_j} \right] \quad (3.1.5)$$

şeklini almaktadır.

$U_{CSS}$  Yumuşak küre potansiyelini monomerik  $MX_3$  molekül yapısı için hesaplayalım :



**Şekil 3.1.** Monomerik  $MX_3$  Molekülünün Geometrik Yapısı ( M: Metal, X: Halojen )

Şekil 3.1. 'de görüldüğü gibi,

1 ) Üç etkileşme M-X arasında r mesafede,

2 ) Üç etkileşme X-X arasında  $\sqrt{3} r$  mesafede,

olmak üzere, toplam altı etkileşme terimi yazacağız. Bu altı etkileşme teriminin toplamı bize  $MX_3$  yapısının yumuşak küre potansiyelini verecek.

Buna göre,

$$\begin{aligned}
U_{C S S} = & \left[ \frac{Z_{X_1} Z_{X_2}}{r_{X_1 X_2}} e^2 + f(\rho_{X_1} + \rho_{X_2}) \exp\left(\frac{R_{X_1} + R_{X_2} - r_{X_1 X_2}}{\rho_{X_1} + \rho_{X_2}}\right) \right] + \\
& \left[ \frac{Z_{X_1} Z_{X_3}}{r_{X_1 X_3}} e^2 + f(\rho_{X_1} + \rho_{X_3}) \exp\left(\frac{R_{X_1} + R_{X_3} - r_{X_1 X_3}}{\rho_{X_1} + \rho_{X_3}}\right) \right] + \\
& \left[ \frac{Z_{X_2} Z_{X_3}}{r_{X_2 X_3}} e^2 + f(\rho_{X_2} + \rho_{X_3}) \exp\left(\frac{R_{X_2} + R_{X_3} - r_{X_2 X_3}}{\rho_{X_2} + \rho_{X_3}}\right) \right] + \\
& \left[ \frac{Z_{X_1} Z_M}{r_{X_1 M}} e^2 + f(\rho_{X_1} + \rho_M) \exp\left(\frac{R_{X_1} + R_M - r_{X_1 M}}{\rho_{X_1} + \rho_M}\right) \right] + \\
& \left[ \frac{Z_{X_2} Z_M}{r_{X_2 M}} e^2 + f(\rho_{X_2} + \rho_M) \exp\left(\frac{R_{X_2} + R_M - r_{X_2 M}}{\rho_{X_2} + \rho_M}\right) \right] + \\
& \left[ \frac{Z_{X_3} Z_M}{r_{X_3 M}} e^2 + f(\rho_{X_3} + \rho_M) \exp\left(\frac{R_{X_3} + R_M - r_{X_3 M}}{\rho_{X_3} + \rho_M}\right) \right] \quad (3.1.6)
\end{aligned}$$

olur.

(3.1.6) Denklemde  $Z_{X_i} \equiv Z$  ;  $r_{X_i} \equiv r$  ,  $r_{X_i} \equiv \sqrt{3} r$  ;  $\rho_{X_i} \equiv \rho$  ;  $R_{X_i} \equiv R$  ,  
( $i = 1,2,3$ ) olarak alınabilir. Böylece, yumuşak küre potansiyeli için,

$$\begin{aligned}
U_{C S S} = & \left[ \frac{Z^2 e^2}{\sqrt{3} r} + f(2\rho) \exp\left(\frac{2R - \sqrt{3} r}{2\rho}\right) \right]^{(1, 2)} + \\
& \left[ \frac{Z^2 e^2}{\sqrt{3} r} + f(2\rho) \exp\left(\frac{2R - \sqrt{3} r}{2\rho}\right) \right]^{(1, 3)} + \\
& \left[ \frac{Z^2 e^2}{\sqrt{3} r} + f(2\rho) \exp\left(\frac{2R - \sqrt{3} r}{2\rho}\right) \right]^{(2, 3)} + \\
& \left[ \frac{Z Z_M e^2}{r} + f(\rho + \rho_M) \exp\left(\frac{R + R_M - r}{\rho + \rho_M}\right) \right]^{(1, M)} + \\
& \left[ \frac{Z Z_M e^2}{r} + f(\rho + \rho_M) \exp\left(\frac{R + R_M - r}{\rho + \rho_M}\right) \right]^{(2, M)} + \\
& \left[ \frac{Z Z_M e^2}{r} + f(\rho + \rho_M) \exp\left(\frac{R + R_M - r}{\rho + \rho_M}\right) \right]^{(3, M)} \tag{3.1.7}
\end{aligned}$$

denkleme ulaşılır. Aynı terimler göz önüne alınarak, yumuşak küre potansiyeli için son olarak,

$$\begin{aligned}
U_{C S S} = & 3 \left[ \frac{Z^2 e^2}{\sqrt{3} r} + f(2\rho) \exp\left(\frac{2R - \sqrt{3} r}{2\rho}\right) \right] + \\
& + 3 \left[ \frac{Z Z_M e^2}{r} + f(\rho + \rho_M) \exp\left(\frac{R + R_M - r}{\rho + \rho_M}\right) \right] \tag{3.1.8}
\end{aligned}$$

bağıntısı elde edilir.

### 3.2. Bağlanma Potansiyeli

Bir atomun kütlesi daima kendisini oluşturan parçacıkların kütleleri toplamından daha küçüktür. Bu noktadaki kütle kaybına eşdeğer enerjiye o çekirdeğin bağlanma enerjisi denir. Bağlanma enerjisi çekirdek için bir kararlılık ölçütüdür. Atomlarda bağlanma enerjileri hareketli elektronların uzaklaşmasını engelleyen elektrostatik kuvvetlerden dolayı oluşan iyonizasyon enerjileri gibi çekirdekleri oluşturan nükleonları bir arada tutan etkileşme kuvvetlerinden meydana gelmektedir.

$\vec{P}_j$  : Dipol momenti

$B=B(r_{ij})$ : Halojen ve metal iyonunun kısa mesafede üst üste gelmesiyle oluşan deformasyon dipolün enerjisi olmak üzere bağlanma potansiyeli,

$$U_B = \sum_{i,j} \vec{P}_j \cdot B(r_{ij}) \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (3.2.1)$$

şeklinde yazılır. Burada deformasyon dipolün enerjisi,

$$B(r_{ij}) = \frac{|Y|}{\alpha_x K} \left| \frac{d\phi_{ij}(r_{ij})}{dr_{ij}} \right| \quad (3.2.2)$$

şeklindedir.

Burada ,  $Y$  etkin halojen kabuk yükü ve  $K$  kabuk çeperi kuvvet sabitidir.  $\alpha_x$  ise halojen

polarizasyonunu gösteren sabittir. Ayrıca  $\alpha_s = \frac{|Y|}{K}$  alınır.  $\alpha_s$  Kısa mesafe polarizasyon katsayısıdır. Böylece bağlanma potansiyelini;

$$U_B = \sum_{i,j} \vec{P}_j \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \frac{|Y|}{\alpha_x K} \left| \frac{d\phi_{ij}(r_{ij})}{dr_{ij}} \right| \quad (3.2.3)$$

veya

$$U_B = \sum_{i,j} \vec{P}_j \cdot B(r_{ij}) \frac{r_{ij}}{r_{ij}} \quad (3.2.4)$$

olarak yazabiliriz.

$MX_3$  molekülü için, metal ile halojen arasındaki uzaklık  $r$  ve halojenle ile halojen arası uzaklıkta  $\sqrt{3} r$  'dir. Buna göre  $i, j = 1, 2, 3$  için,

$$B(r_{MX_i}) = B(r), \quad r_{MX_i} = r, \quad |\vec{P}_j| = P \quad \text{olacağından,}$$

$$\vec{P}_1 \cdot \vec{r}_2 = P_1 r_2 \cos 90^\circ = 0 \quad (\text{Farklı indisli skaler çarpımı sıfır})$$

$$\vec{P}_1 \cdot \vec{r}_1 = P_1 r_1 \cos 180^\circ = -P r \quad (\text{Aynı indisli skaler çarpımı negatif})$$

şeklindedir. Buna göre,  $MX_3$  yapısındaki moleküller için bağlanma potansiyeli için,

$$U_B = \frac{\vec{P}_1 \cdot \vec{r}_1}{r} B(r) + \frac{\vec{P}_2 \cdot \vec{r}_2}{r} B(r) + \frac{\vec{P}_3 \cdot \vec{r}_3}{r} B(r) \quad (3.2.5)$$

şeklini alır. Burada, benzer terimleri göz önüne alırsak,

$$U_B = 3 \frac{P r \cos 180^\circ}{r} B(r) \quad (3.2.6)$$

şeklinde yazılabilir. Son olarak  $MX_3$  yapısındaki moleküllerin Metal-Halojen bağlanma potansiyeli için,

$$U_B = -3 P B(r) \quad (3.2.7)$$

bağıntısı elde edilir.

### 3.3. Van der Waals Etkileşme Potansiyeli

Helyum ve Argon gibi asal gaz (etkileşmeye girmeyen, son yörüngesi tam dolu olan) atomları da dahil olmak üzere bütün atom veya moleküller Van der Waals kuvvetlerinden dolayı birbirlerine zayıf ve kısa mesafeli çekimlerle etkilerler. İyonik, kovalent ve metalik bağlanma mekanizmaları olmadan, bu kuvvetler gazların sıvılara dönüşümü ve sıvıların donarak katılaşımlarından sorumludurlar. Adezyon, kohezyon, sürtünme, yüzey gerilimi, viskozite vb. kuvvetler Van der Waals kuvvetlerinden oluşurlar.  $r$  uzaklığındaki iki molekül arasındaki Van der Waals çekim kuvveti  $r^{-7}$ , potansiyeli ise  $r^{-6}$  ile orantılıdır. Bundan dolayı bu kuvvet birbirine çok yakın moleküller için oldukça önemlidir.

Polar moleküller (sürekli elektrik dipol momentleri olan moleküller) kendilerini zıt uçlarını yan yana getirecek şekilde yönlendirirler ve böylece moleküller birbirlerini kuvvetlice çekerler. Burada etki ile oluşan moment polar molekül ile aynı doğrultudadır. Sonuç ise çekici bir kuvvettir. Polar bir molekülün sabit yük asimetrisine karşıt olarak, polar olmayan (nonpolar) molekül devamlı olarak kayan bir asimetriğe sahiptir. İki nonpolar molekül yeterince yakınlaştığında, bunların değişen yük dağılımları beraberce kayma eğiliminde olurlar ve böylelikle yandaş uçlar daima zıt işaretlere sahip olurlar. Böylece daimi çekici bir kuvvet oluştururlar.

Kimyasal olarak bağlı olmayan bütün atom ve molekül çiftleri arasında görülen Van der Waals kuvvetleri moleküller arası zayıf kuvvetleri belirten bir terimdir. Katı ve sıvıların temel özelliklerinden olan bu kuvvet, sıvıların viskozitesini ve yüzey gerilimini etkilerler. Ayrıca birdenbire genişleyen gazların soğumasına da neden olurlar Van der Waals kuvvetlerinin oluşumunda en büyük neden komşu iki molekülünün ortak hareketleri sonucu birbirlerine çekmeleridir. Van der Waals kuvvetleri, bir moleküldeki elektronlar başka bir molekülün elektronlarını ancak iki molekül birbirine çok yakın ise etkileyebildiklerinden (elektron korelasyonları) ancak çok küçük mesafelerde ortaya çıkarlar. Bu kuvvet moleküllerdeki elektron sayısı ile doğru orantılı olduğundan; halojenlerin kaynama noktası, florndan iyoda doğru, alkanlarda ise Karbon zincirinin uzunluğuna bağlı olarak yükselir.

Van der Waals kuvveti, maddeyi oluşturan moleküller arasındaki elektrostatik kökenli bir çekim kuvvetidir. Çekirdek çevresinde bir bulut oluşturan elektronların negatif yükleri ile, çekirdeğin pozitif yükü denkleştirdiğinden atomlar ve moleküller elektriksel olarak yansızdır. Pozitif ve negatif yükler bir elektrik dipolü oluşturabilirler. Su molekülü gibi asimetrik moleküllerde, negatif yüklerin ağırlık merkezi ortalama olarak pozitif yüklerin ağırlık merkezi ile çakışır ve bu durum kalıcı dipol oluşumunu engeller. Bunun yanı sıra belirli bir anda elektronların konumundaki dalgalanmalar nedeni ile yüklerin ağırlık merkezi çakışmaz ve böylelikle molekül, çevresindeki uzayda elektrik alanı yaratan bir dipole sahip olur. İki elektrik dipolü birbirlerine bir takım kuvvetler uygularlar (dipol-dipol etkileşimi) ve kalıcı dipolleri olmayan iki atom ya da molekül arasındaki dipol etkileşim kuvvetinin zaman içindeki ortalama değerine Van der Waals kuvveti adı verilir. Van der Waals kuvvetleri çekimsel kuvvet olduklarından moleküller arasındaki  $r$  uzaklığı ile çok çabuk değişirler (bu değişim  $r^{-7}$  ile orantılıdır). Elektron ve spinlere bağlı olan iyonik ve kovalanet bağlarda bulunan kuvvetler Van der Waals kuvvetlerinden çok daha güçlüdürler. Zayıf olmalarına karşın Van der Waals kuvvetleri sıvıların ve bazı katıların kohezyonunu sağlamada önemli rol oynarlar.

C: kuvvet sabitleri olmak üzere, Van der Waals etkileşmesi potansiyeli için,

$$U_{VW} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{C_i C_j}{r_{ij}^6} \quad (3.3.1)$$

bağıntısı geçerlidir.

$MX_3$  molekülünün kuvvet sabitleri metal için  $C_M$ , halojenler için  $C_{X_i} = C_X$  olarak alınır. Buna göre (2.3.1) bağıntısı,

$$U_{VW} = -\left[ \frac{C_M C_{X_1}}{r_{M X_1}^6} + \frac{C_M C_{X_2}}{r_{M X_2}^6} + \frac{C_M C_{X_3}}{r_{M X_3}^6} \right] - \left[ \frac{C_{X_1} C_{X_2}}{r_{X_1 X_2}^6} + \frac{C_{X_1} C_{X_3}}{r_{X_1 X_3}^6} + \frac{C_{X_2} C_{X_3}}{r_{X_2 X_3}^6} \right] \quad (3.3.2)$$

şeklini alır.



Burada,

$$r_{X_1X_2} = r_{X_1X_3} = r_{X_2X_3} = \sqrt{3}r ; \quad r_{MX_1} = r_{MX_2} = r_{MX_3} = r \quad \text{ve}$$

$$C_{X_1} = C_{X_2} = C_{X_3} = C_X \quad \text{olduklarından, (2.3.2) denklemini,$$

$$U_{VW} = - \left[ \frac{C_M C_X}{r^6} + \frac{C_M C_X}{r^6} + \frac{C_M C_X}{r^6} \right] - 3 \left[ \frac{C_X^2}{(\sqrt{3}r)^6} \right] \quad (3.3.3)$$

şeklini alır. Son olarak, (2.3.3) denklemindeki benzer terimler göz önüne alınırsa,  $MX_3$  yapısındaki moleküller için Van der Waals etkileşme potansiyeli ifadesi,

$$U_{VW} = -3 \left[ \frac{C_M C_X}{r^6} + \frac{C_X^2}{(\sqrt{3}r)^6} \right] \quad (3.3.4)$$

olarak elde edilir.

### 3.4. Elektrik Potansiyeli

Yükler ve dipoller elektrik alanı, elektrik alanda elektriksel potansiyeli ( $U_{EL}$ ) ve dipol dipol etkileşme potansiyelini ( $U_{dd}$ ) oluşturur. Dış alandaki bir dipolün potansiyelinden elektriksel potansiyel meydana gelir. Buna göre (dipol elektrik alan etkileşmesi) elektriksel potansiyel,

$$U_{EL} = -\sum_{i,j} \vec{P}_j \cdot \vec{Z}_i e \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \quad (3.4.1)$$

bağıntısı ile verilir.  $MX_3$  yapısındaki moleküller için, (3.4.1) bağıntısı kullanılarak elektrik potansiyeli,

$$\begin{aligned} U_{EL} = & -e \left[ \frac{\vec{P}_{X_1} \cdot \vec{r}_{MX_1}}{r_{MX_1}^3} Z_M \right] - e \left[ \frac{\vec{P}_{X_1} \cdot \vec{r}_{X_3X_1}}{r_{X_3X_1}^3} Z_{X_3} \right] - e \left[ \frac{\vec{P}_{X_1} \cdot \vec{r}_{X_2X_1}}{r_{X_2X_1}^3} Z_{X_2} \right] \\ & - e \left[ \frac{\vec{P}_{X_2} \cdot \vec{r}_{MX_2}}{r_{MX_2}^3} Z_M \right] - e \left[ \frac{\vec{P}_{X_2} \cdot \vec{r}_{X_1X_2}}{r_{X_1X_2}^3} Z_{X_1} \right] - e \left[ \frac{\vec{P}_{X_2} \cdot \vec{r}_{X_3X_2}}{r_{X_2X_1}^3} Z_{X_3} \right] \\ & - e \left[ \frac{\vec{P}_{X_3} \cdot \vec{r}_{MX_3}}{r_{MX_3}^3} Z_M \right] - e \left[ \frac{\vec{P}_{X_3} \cdot \vec{r}_{X_2X_3}}{r_{X_2X_3}^3} Z_{X_2} \right] - e \left[ \frac{\vec{P}_{X_3} \cdot \vec{r}_{X_1X_3}}{r_{X_1X_3}^3} Z_{X_1} \right] \quad (3.4.2) \end{aligned}$$

olarak yazılabilir.

$\vec{P}_j \cdot \vec{r}_{ij}$  Skaler çarpımları, iki vektör arasındaki açılar göz önüne alınarak yapılırsa, (3.4.2) denklemi,

$$\begin{aligned}
U_{EL} = -e \left\{ \left[ Z_M \left( \frac{P_{X_1} r \cos 180^\circ}{r^3} + \frac{P_{X_2} r \cos 180^\circ}{r^3} + \frac{P_{X_3} r \cos 180^\circ}{r^3} \right) \right] \right. \\
+ Z_1 \left( \frac{P_{X_3} \sqrt{3} r \cos 180^\circ}{(\sqrt{3} r)^3} \right) + Z_1 \left( \frac{P_{X_2} \sqrt{3} r \cos 180^\circ}{(\sqrt{3} r)^3} \right) + Z_2 \left( \frac{P_{X_1} \sqrt{3} r \cos 180^\circ}{(\sqrt{3} r)^3} \right) \\
+ Z_2 \left( \frac{P_{X_3} \sqrt{3} r \cos 180^\circ}{(\sqrt{3} r)^3} \right) + Z_3 \left( \frac{P_{X_2} \sqrt{3} r \cos 180^\circ}{(\sqrt{3} r)^3} \right) \\
\left. + Z_3 \left( \frac{P_{X_1} \sqrt{3} r \cos 180^\circ}{(\sqrt{3} r)^3} \right) \right\} \quad (3.4.3)
\end{aligned}$$

şeklini alır. (3.4.3) Denklemindeki aynı terimler göz önüne alınarak denklem düzenlenirse,  $MX_3$  yasadaki moleküller için elektriksel potansiyeli,

$$U_{EL} = -e \left[ -\frac{3 P Z_M}{r^2} - \frac{6 P Z}{3 r^2} \right] \quad (3.4.4)$$

olarak elde edilir. (2.4.4) Denkleminde iyonik yüklerle oluşturulan elektrik alanının büyüklüğü,

$$E(r) = -e \left[ -\frac{3 Z_M}{r^2} - \frac{6 Z}{3 r^2} \right] \quad (3.4.5)$$

olduğundan, son olarak  $MX_3$  yapısındaki moleküller için elektriksel potansiyeli,

$$U_{EL} = P E(r) \quad (3.4.6)$$

olarak elde edilir.

### 3.5. Dipol - Dipol Etkileşme Potansiyeli

Moleküllerin pozitif ve negatif kutuplarının birbirlerini çekmeleri sonucu dipol- dipol kuvvetleri oluşur. Molekül içindeki pozitif ve negatif iyonlardan oluşan dipoller arasındaki etkileşmelere dipol- dipol etkileşmesi adı verilir. Pozitif ve negatif yüklerin ağırlık merkezlerinin aynı noktada olmadığı moleküllerde gözlemlenen bir özelliktir. Negatif yük elektronegatifliği en yüksek olan elementte bulunur. Sonuç olarak molekülün bir kısmı negatif, bir kısmı da pozitif yük kazanır ve burada bir elektrik dipolü oluşur. İki kutuplunun büyüklüğü ise her yükün değeri ile aralarında ki etkin uzaklığın çarpımına eşit olan iki kutuplu momenti gösterir. İki kutuplu momentin birimi  $3.3356 \times 10^{-30}$  (C.m) coulomb metreye eşit olan DEBYE'dir (D).

Genel olarak, dipol-dipol etkileşme potansiyeli,

$$U_{dd} = \sum_{i,j} \left[ \frac{\vec{P}_i \cdot \vec{P}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3 (\vec{P}_i \cdot \vec{r}_{ij}) (\vec{P}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] + \sum_j \frac{P_j^2}{2\alpha_x} \quad (3.5.1)$$

bağıntısı ile verilir. Burada,  $\alpha_x$ : Halojen polarizasyon sabiti ve  $\sum_j \frac{P_j^2}{2\alpha_x}$  : Yaklaşıklık sabitidir.

(3.5.1) Bağıntısı kullanılarak,  $MX_3$  yapısındaki moleküller için dipol – dipol etkileşme potansiyeli,

$$\begin{aligned}
U_{dd} = & \left[ \left( \frac{\vec{P}_{X_1} \cdot \vec{P}_{X_3}}{(r_{X_1X_3})^3} + \frac{\vec{P}_{X_1} \cdot \vec{P}_{X_2}}{(r_{X_1X_2})^3} + \frac{\vec{P}_{X_2} \cdot \vec{P}_{X_3}}{(r_{X_2X_3})^3} \right) \right] + \\
& + \left[ \left( 3 \frac{(\vec{P}_{X_1} \cdot \vec{r}_{X_1X_3})(\vec{P}_{X_3} \cdot \vec{r}_{X_1X_3})}{(r_{X_1X_3})^5} \cdot \frac{(\vec{P}_{X_1} \cdot \vec{r}_{X_1X_2})(\vec{P}_{X_2} \cdot \vec{r}_{X_1X_2})}{(r_{X_1X_2})^5} \cdot \frac{(\vec{P}_{X_2} \cdot \vec{r}_{X_2X_3})(\vec{P}_{X_3} \cdot \vec{r}_{X_2X_3})}{(r_{X_2X_3})^5} \right) \right] + \\
& + \left[ \frac{(\vec{P}_{X_2} \cdot \vec{r}_{X_2X_1})(\vec{P}_{X_1} \cdot \vec{r}_{X_2X_1})}{(r_{X_2X_1})^5} \cdot \frac{(\vec{P}_{X_3} \cdot \vec{r}_{X_3X_1})(\vec{P}_{X_1} \cdot \vec{r}_{X_3X_1})}{(r_{X_3X_1})^5} \cdot \frac{(\vec{P}_{X_3} \cdot \vec{r}_{X_3X_2})(\vec{P}_{X_2} \cdot \vec{r}_{X_3X_2})}{(r_{X_3X_2})^5} \right] + \\
& + \left( \frac{P_{X_1}^2}{2\alpha_X} + \frac{P_{X_2}^2}{2\alpha_X} + \frac{P_{X_3}^2}{2\alpha_X} \right) \tag{3.5.2}
\end{aligned}$$

olarak buluruz. (3.5.2) denklemini,

$$U_{dd} = U_{dd_1} + U_{dd_2} + U_{dd_3} \tag{3.5.3}$$

olarak yazabiliriz.

Burada,

$$U_{dd_1} = 3 \cdot \frac{P P \cos 180^\circ}{(\sqrt{3}r)^3} = 3 \cdot \frac{P \cdot P \cos 180^\circ}{(\sqrt{3}r)^2 (\sqrt{3}r)} = \frac{P \cdot P \cos 180^\circ}{\sqrt{3}r^3}$$

$$U_{dd_1} = -\frac{P^2}{\sqrt{3}r^3} = -\frac{\sqrt{3}P^2}{3r^3} \quad (3.5.4)$$

$$U_{dd_2} = -3 \cdot 6 \left( \frac{P \sqrt{3}r \cos 180^\circ P \sqrt{3}r \cos 180^\circ}{(\sqrt{3}r)^5} \right)$$

$$U_{dd_2} = -2\sqrt{3} \frac{P^2}{r^3} \quad (3.5.5)$$

$$U_{dd_3} = \frac{P^2 + P^2 + P^2}{2\alpha_x} = \frac{3P^2}{2\alpha_x} \quad (3.5.6)$$

bağıntıları ile verilir. Buna göre, (3.5.4), (3.5.5) ve (3.5.6) bağıntıları (3.5.3) bağıntısında yerlerine yazılırsa, MX<sub>3</sub> yapısındaki moleküller için dipol-dipol etkileşme potansiyeli,

$$U_{dd} = -\frac{\sqrt{3}P^2}{3r^3} - 2\sqrt{3} \frac{P^2}{r^3} + \frac{3P^2}{2\alpha_x}$$

$$U_{dd} = -\frac{5\sqrt{3}P^2}{3r^3} + \frac{3P^2}{2\alpha_x} \quad (3.5.7)$$

olarak elde edilir.

### 3.6. Toplam Etkileşme Potansiyeli

$MX_3$  Yapısındaki moleküller için,  $U$  toplam etkileşme potansiyeli;  $U_{C S S}$  yumuşak küre potansiyeli (3.1.8) bağıntısı,  $U_B$  bağlanma potansiyeli (3.2.7) bağıntısı,  $U_{V W}$  Van der Waals etkileşme potansiyeli (3.3.4) bağıntısı,  $U_{E L}$  elektrik potansiyeli (3.4.6) bağıntısı ve  $U_{d d}$  dipole – dipole etkileşme potansiyeli (3.5.7) bağıntısının toplanması sonucu elde edilir. Buna göre, toplam etkileşme potansiyeli,

$$U = U_{C S S} + U_B + U_{V W} + U_{E L} + U_{d d} \quad (3.6.1)$$

olacağından,

$$\begin{aligned} U = & 3 \left[ \frac{Z^2 e^2}{\sqrt{3} r} + f(2\rho) \exp\left(\frac{2R - \sqrt{3} r}{2\rho}\right) \right] + \\ & + 3 \left[ \frac{Z Z_M e^2}{r} + f(\rho + \rho_M) \exp\left(\frac{R + R_M - r}{\rho + \rho_M}\right) \right] - 3 P B(r) \\ & - 3 \left[ \frac{C_M C_X}{r^6} + \frac{C_X^2}{(\sqrt{3} r)^6} \right] - e \left[ -\frac{3 P Z_M}{r^2} - \frac{6 P Z}{3 r^2} \right] - \\ & - \frac{5\sqrt{3} P^2}{3 r^3} + \frac{3 P^2}{2 \alpha_X} \end{aligned} \quad (3.6.2)$$

elde edilir.

(3.6.2) Bağıntısındaki toplam potansiyeli hesaplayacak bir bilgisayar programı yapılarak,  $M$  metali ve  $X$  halojeni için diğer parametreler belirlenip,  $r$  belirli aralıklarla arttırılarak, her bir  $r$  değerine karşılık gelen toplam potansiyel enerji değerleri hesaplanabilir. Bu toplam potansiyel enerji değerlerinden minimum olanına karşılık gelen  $r$  değeri, kararlı yapıdaki  $MX_3$  molekülünün bağ uzunluğu değerini verir.

## BÖLÜM 4

### SONUÇLAR VE TARTIŞMA

#### 4.1. $MX_3$ Molekülünün Yapısı

Yüksek lisans tezi çalışmasının bu kısmında, monomerik galyum trihalojenürleri; galyum triflorür ( $GaF_3$ ), galyum triklorür ( $GaCl_3$ ), galyum tribromür ( $GaBr_3$ ) ve galyum triiyodür ( $GaI_3$ ) molekül kümelerinin her biri için, ayrıntılı iyonik etkileşmeleri içeren mikroskobik potansiyel modeller kullanılmıştır. İyonlar arası kuvvet modeli kullanılarak (İKM), yapılan hesaplamalar  $GaF_3$ ,  $GaCl_3$ ,  $GaBr_3$  ve  $GaI_3$  molekül kümelerinin her birinin, denge durumundaki, molekül yapılarının sonuçlarını vermiştir. Bu potansiyel model kullanılarak  $GaF_3$ ,  $GaCl_3$ ,  $GaBr_3$ ,  $GaI_3$  bağ açıları ve uzunlukları, titreşim frekansları, kısa mesafe Coulomb etkileşme potansiyel enerjisi ( $U_C$ ) ile örten itici potansiyel enerjisinin ( $U_r$ ) toplamı olan, yumuşak küre potansiyel enerjisi ( $U_{CSS}$ ), Van der Waals etkileşim potansiyel enerjisi ( $U_{VW}$ ), elektriksel potansiyel enerjisi ( $U_{EL}$ ), dipol – dipol etkileşme potansiyel enerjisi ( $U_{dd}$ ), bağlanma potansiyel enerjisini ( $U_B$ ) içeren toplam potansiyel enerji ( $U_{TOP}$ ) hesaplanmıştır. İyonlar arası kuvvet modeli kullanılarak, yapılan hesaplamalarda, kullanılan parametreler, her bir molekül için, tablolar şeklinde verilmiştir. Bu tablolarda kullanılmış olan giriş parametreleri, metal galyum ve halojenler flor, klor, brom, iyot olmak üzere;

$Z_M$ : metalin valans değeri,  $Z_X$ : halojenin valans değeri,  $R_M$  (Å): metal in iyonik yarıçapı,  $R_X$  (Å): halojenin iyonik yarıçapı,  $\rho_M$  (Å): metalin sertlik parametresi,  $\rho_X$  (Å): halojenin sertlik parametresi,  $\alpha_X$  (Å<sup>3</sup>) : halojenin elektrik polarizasyonu,  $\alpha_s$  (Å<sup>3</sup>/e) : halojenin kısa menzil polarizasyonu ve  $C_X$  (eÅ<sup>5/2</sup>) : Halojenin Van der Waals katsayısıdır.



#### 4.1.1. Monomerik Galyum Triflorür (GaF<sub>3</sub>)

GaF<sub>3</sub> Molekülünün, iyonlar arası kuvvet modeli kullanılarak, denge durumundaki, titreşim frekansları, bağ uzunlukları, etkileşme potansiyel enerjileri, molekül resmi ve bağ açılarını bulmaya yönelik, iyonların üç boyutlu koordinatlarını hesaplamak için, bilgisayar programlarında kullanılmış olan giriş parametreleri Tablo 4.1. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.1.**Galyum triflorür (GaF<sub>3</sub>) molekülü için giriş parametreleri  
( M galyum iyonu ve X flor iyonunu temsil etmektedir )

| $Z_M$ | $Z_X$   | $R_M$ (Å)         | $\rho_M$ (Å)       | $R_X$ (Å)           | $\rho_X$ (Å)         | $C_X$ (eÅ <sup>5/2</sup> ) | $\alpha_X$ (Å <sup>3</sup> ) | $\alpha_s$ (Å <sup>3</sup> /e) |
|-------|---------|-------------------|--------------------|---------------------|----------------------|----------------------------|------------------------------|--------------------------------|
| 1.995 | - 0.665 | 0.97 <sup>a</sup> | 0.045 <sup>a</sup> | 1.32 <sup>b,c</sup> | 0.215 <sup>b,c</sup> | 2.08 <sup>b,c</sup>        | 0.88 <sup>b,c</sup>          | 0.2 <sup>c</sup>               |

<sup>a</sup>[6], <sup>b</sup>[7], <sup>c</sup>[8] Burada  $Z_M = -3 Z_X$  'dir .

**Tablo 4.2.** Galyum triflorür (GaF<sub>3</sub>) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları

| Parametre                       | Kullanılan Metot<br>( İKM ) | Karşılaştırılan<br>Metodlar |                           |                    |
|---------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------------|--------------------|
|                                 | Bağ uzunluğu (Å)            | ED                          | ED/SP                     | HF                 |
| Ga -F <sub>2</sub>              | 1.883                       | -                           | -                         | -                  |
| Ga -F <sub>3</sub>              | <u>1.713</u>                | <u>1.713</u> <sup>a</sup>   | <u>1.713</u> <sup>a</sup> | 1.709 <sup>b</sup> |
| Ga- F <sub>4</sub>              | <u>1.713</u>                | -                           | -                         | -                  |
| F <sub>2</sub> - F <sub>3</sub> | 3.052                       | -                           | -                         | -                  |
| F <sub>2</sub> - F <sub>4</sub> | 3.052                       | -                           | -                         | -                  |
| F <sub>3</sub> - F <sub>4</sub> | 3.078                       | -                           | -                         | -                  |

<sup>a</sup>[1], <sup>b</sup>[22]

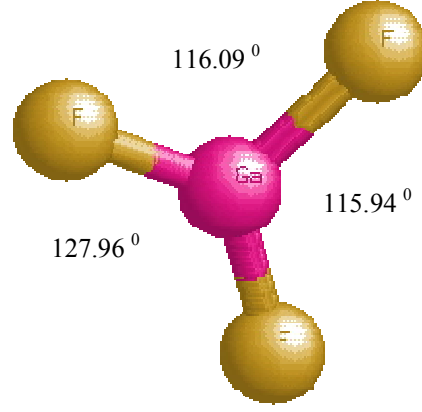
Tablo 4.2 'de görüldüğü gibi GaF<sub>3</sub> molekülü için bağ uzunluğu 1.713-1.883Å aralığında bulunmuştur. Böylece, ED, ED/SP, HF, metotlarıyla hesaplanan değerler ile İKM yöntemi ile hesaplanan değerlerin birbirleriyle uyum içinde oldukları görülmektedir. GaF<sub>3</sub> molekülünün 3 boyutlu geometrik şekli Şekil 4.1.'de görülmektedir. İKM yöntemi ile hesaplanmış bağ uzunluğu, 1.713 (Å) değerine fit edilerek, bulunan koordinatlar kullanılarak, Şekil 4.1. 'deki geometrik yapı ve bağlar arasındaki açılar hesaplanmıştır.

**Tablo 4.3.** Galyum triflorür (GaF<sub>3</sub>) molekülü için titreşim frekansları (cm<sup>-1</sup>)

|                  | Metot         | $\nu_1$          | $\nu_2$ | $\nu_3$ | $\nu_4$ |
|------------------|---------------|------------------|---------|---------|---------|
| GaF <sub>3</sub> | est.gas-phase | 636 <sup>a</sup> | -       | -       | -       |
|                  | İKM           | <u>596.36</u>    | 397.58  | 566.09  | 162.15  |

<sup>a</sup>[1].

Bir molekülün yapısını incelerken, bilinmesi gereken önemli verilerden biriside titreşim frekansıydı, bundan giriş bölümünde bahsetmiştik. Tablo 4.3.'de görüldüğü gibi İKM metodu ile hesaplanan GaF<sub>3</sub> molekülünün frekans değerleri 162.15 - 596.36 (cm<sup>-1</sup>) değerleri arasındadır. Tablo 4.3.'e dikkat edilirse, İKM ile hesaplanan frekans değerleri, est.gas-phase yöntemi ile hesaplanan frekans değerine yakındır. Burada bu frekans değerleri, 1.713 (Å) bağ uzunluğu değerine fit edilerek hesaplanmıştır. Bağ uzunluklarının ve frekans değerlerin uyum içinde olması, kullanılmış olan İKM 'nin bu sistemler için uyumlu ve doğru bir seçim olduğunu göstermektedir.



**Şekil 4.1.** Galyum triflorürün (  $\text{GaF}_3$  ) denge durumundaki molekül yapısı .

Galyum triflorür ( $\text{GaF}_3$ ) molekülünün denge durumundaki hesaplanmış etkileşme potansiyel enerji değerleri Tablo 4.4. 'te verilmiştir.

**Tablo 4.4.** Galyum triflorür ( $\text{GaF}_3$ ) molekülünün denge durumundaki enerjileri ( eV )

| Molekül        | $U_c + U_r$ | $U_{VW}$ | $U_{EL}$ | $U_{dd}$ | $U_B$  | $U_{TOP}$ |
|----------------|-------------|----------|----------|----------|--------|-----------|
| $\text{GaF}_3$ | - 1.4939    | - 0.0157 | - 0.4405 | 0.1872   | 0.0855 | - 1.6774  |

Burada;  $U_{CSS} = U_c + U_r$  : yumuşak küre potansiyel enerjisi,  $U_{VW}$  : Van der Waals potansiyel enerjisi,  $U_{EL}$  : elektriksel potansiyel enerji,  $U_{dd}$  : dipol-dipol potansiyel enerjisi,  $U_B$  : bağlanma potansiyel enerjisi,  $U_{TOP}$  : toplam potansiyel enerji olarak tanımlanmaktadır.

#### 4.1.2. Monomerik Galyum Triklorür (GaCl<sub>3</sub>)

GaCl<sub>3</sub> Molekülünün, iyonlar arası kuvvet modeli kullanılarak, denge durumundaki, titreşim frekansları, bağ uzunlukları, etkileşme potansiyel enerjileri, molekül resmi ve bağ açılarını bulmaya yönelik, iyonların üç boyutlu koordinatlarını hesaplamak için, bilgisayar programlarında kullanılmış olan giriş parametreleri Tablo 4.5. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.5.** Galyum triklorür (GaCl<sub>3</sub>) molekülü için giriş parametreleri  
( M galyum iyonu ve X klor iyonunu göstermektedir )

| $Z_M$ | $Z_X$   | $R_M$ (Å)         | $\rho_M$ (Å)       | $R_X$ (Å)           | $\rho_X$ (Å)         | $C_X$ (eÅ <sup>5/2</sup> ) | $\alpha_X$ (Å <sup>3</sup> ) | $\alpha_s$ (Å <sup>3</sup> /e) |
|-------|---------|-------------------|--------------------|---------------------|----------------------|----------------------------|------------------------------|--------------------------------|
| 2.577 | - 0.859 | 0.97 <sup>a</sup> | 0.045 <sup>a</sup> | 1.71 <sup>b,c</sup> | 0.238 <sup>b,c</sup> | 5.50                       | 1.36 <sup>b,c</sup>          | 0.46 <sup>c</sup>              |

<sup>a</sup>[6], <sup>b</sup>[7], <sup>c</sup>[8] . Burada  $Z_M = -3 Z_X$  'dir .

**Tablo 4.6.** Galyum triklorür (GaCl<sub>3</sub>) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları

| Parametre            | Kullanılan Metot<br>( İKM ) | Karşılaştırılan<br>Metodlar |           |            |
|----------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------|------------|
|                      | Bağ uzunluğu (Å)            | ED (Å)                      | ED/SP (Å) | MRSDCI (Å) |
| Ga – Cl <sub>2</sub> | 2.152                       | -                           | -         | -          |

|                                   |              |                           |                           |                    |
|-----------------------------------|--------------|---------------------------|---------------------------|--------------------|
| Ga – Cl <sub>3</sub>              | <u>2.101</u> | <u>2.101</u> <sup>b</sup> | <u>2.101</u> <sup>a</sup> | 2.095 <sup>a</sup> |
| Ga – Cl <sub>4</sub>              | <u>2.101</u> | -                         | -                         | -                  |
| Cl <sub>2</sub> – Cl <sub>3</sub> | 3.659        | -                         | -                         | -                  |
| Cl <sub>2</sub> – Cl <sub>4</sub> | 3.659        | -                         | -                         | -                  |
| Cl <sub>3</sub> – Cl <sub>4</sub> | 3.687        | -                         | -                         | -                  |

<sup>a</sup>[1], <sup>b</sup>[25] .

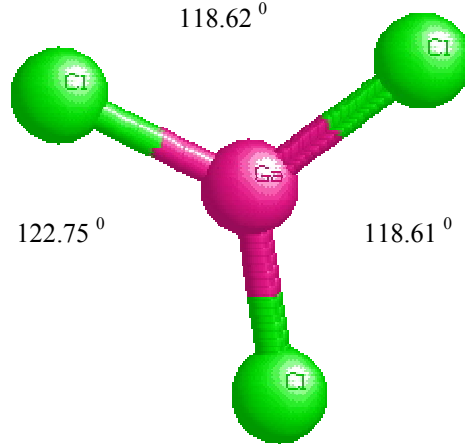
Tablo 4.6. 'da görüldüğü gibi  $\text{GaCl}_3$  molekülü için bağ uzunluğu 2.101 - 2.152 (Å) değerleri aralığında bulunmuştur. Böylece, ED, ED/SP, MRSDCI metotlarıyla hesaplanan değerler ile İKM yöntemi ile hesaplanan değerlerin birbirleriyle uyum içinde oldukları görülmektedir.  $\text{GaCl}_3$  molekülünün üç boyutlu geometrik şekli Şekil 4.2. 'de görülmektedir. İKM yöntemi ile hesaplanmış bağ uzunluğu 2.101 (Å) değerine fit edilerek bulunan koordinatlar yardımı ile Şekil 4.2. 'deki geometrik yapı ve bağ açıları hesaplanmıştır.

**Tablo 4.7.** Galyum triklorür ( $\text{GaCl}_3$ ) molekülü için titreşim frekansları ( $\text{cm}^{-1}$ )

|                 | Metot     | $\nu_1$            | $\nu_2$            | $\nu_3$            | $\nu_4$            |
|-----------------|-----------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| $\text{GaCl}_3$ | gas-Ra    | 382 <sup>a,b</sup> | -                  | 457 <sup>a,b</sup> | 128 <sup>a,b</sup> |
|                 | gas-IR    | -                  | 143 <sup>c</sup>   | 464 <sup>c</sup>   | 131 <sup>c</sup>   |
|                 | gas-IR    | -                  | 145 <sup>a</sup>   | 450 <sup>a</sup>   | 128 <sup>a</sup>   |
|                 | MI(Ar)-IR | -                  | 136.2 <sup>a</sup> | 470.3 <sup>a</sup> | 132.1 <sup>a</sup> |
|                 | MI(Ar)-R  | 384 <sup>a</sup>   | -                  | 467 <sup>a</sup>   | 132 <sup>a</sup>   |
|                 | İKM       |                    | 346.91             | 123.11             | <u>448.36</u>      |

<sup>a</sup>[1], <sup>b</sup>[23], <sup>c</sup>[24].

Tablo 4.7. 'de görüldüğü gibi İKM metodu ile hesaplanan  $\text{GaCl}_3$  molekülünün frekans değerleri 123,11 - 448,36 ( $\text{cm}^{-1}$ ) değerleri arasındadır. Tablo 4.7. 'ye dikkat edilirse, İKM ile hesaplanan frekans değerleri; gas-Ra, gas-IR, MI(Ar)-IR, MI(Ar)-R yöntemleri ile hesaplanan frekans değerleri uyum içindedir. Burada frekanslar, Ga-Cl bağ uzunluğu olan 2.101 (Å) değerine fit edilerek hesaplanmıştır. Bağ uzunluklarının ve frekans değerlerin uyum içinde olması, kullanılmış olan İKM 'nin bu sistemler için uyumlu ve doğru bir seçim olduğunu göstermektedir.



**Şekil 4.2.** Galyum triklorürün (  $\text{GaCl}_3$  ) denge durumundaki molekül yapısı .

$\text{GaCl}_3$  molekülünün denge durumunda hesaplanan etkileşme potansiyel enerji değerleri Tablo 4.8. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.8.** Galyum triklorür ( $\text{GaCl}_3$ ) molekülünün hesaplanan enerjileri ( eV )

| Molekül         | $U_c + U_r$ | $U_{VW}$ | $U_{EL}$ | $U_{dd}$ | $U_B$  | $U_{TOP}$ |
|-----------------|-------------|----------|----------|----------|--------|-----------|
| $\text{GaCl}_3$ | - 2.1790    | - 0.0372 | - 0.4294 | 0.1587   | 0.1266 | - 2.3603  |

Tabloda görülen kısa mesafe etkileşme potansiyel enerjileri;  $U_{C S S} = U_c + U_r$  : yumuşak küre potansiyel enerjisi,  $U_{VW}$  : Van der Waals potansiyel enerjisi,  $U_{EL}$  : elektriksel potansiyel enerji,  $U_{dd}$  : dipol-dipol potansiyel enerjisi,  $U_B$  : bağlanma potansiyel enerjisi,  $U_{TOP}$  : toplam potansiyel enerji olarak tanımlanmaktadır.

### 4.1.3. Monomerik Galyum Tribromür (GaBr<sub>3</sub>)

GaBr<sub>3</sub> Molekülünün, iyonlar arası kuvvet modeli kullanılarak, denge durumundaki, titreşim frekansları, bağ uzunlukları, etkileşme potansiyel enerjileri, molekül resmi ve bağ açılarını bulmaya yönelik, iyonların üç boyutlu koordinatlarını hesaplamak için, bilgisayar programlarında kullanılmış olan giriş parametreleri Tablo 4.9. 'da verilmiştir.

**Tablo 4.9.** Galyum tribromür (GaBr<sub>3</sub>) molekülü için giriş parametreleri  
( M galyum iyonu ve X brom iyonunu göstermektedir )

| $Z_M$ | $Z_X$   | $R_M$ (Å)         | $\rho_M$ (Å)       | $R_X$ (Å)           | $\rho_X$ (Å)         | $C_X$ (eÅ <sup>5/2</sup> ) | $\alpha_X$ (Å <sup>3</sup> ) | $\alpha_s$ (Å <sup>3</sup> /e) |
|-------|---------|-------------------|--------------------|---------------------|----------------------|----------------------------|------------------------------|--------------------------------|
| 2.769 | - 0.923 | 0.97 <sup>a</sup> | 0.045 <sup>a</sup> | 1.84 <sup>b,c</sup> | 0.258 <sup>b,c</sup> | 7.17                       | 1.7 <sup>b,c</sup>           | 0.76 <sup>c</sup>              |

<sup>a</sup>[6], <sup>b</sup>[7], <sup>c</sup>[8] Burada  $Z_M = -3 Z_X$  'dir .

**Tablo 4.10.** Galyum tribromür (GaBr<sub>3</sub>) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları

| Parametre                         | Kullanılan Metot<br>( İKM ) | Karşılaştırılan<br>Metodlar |                    |
|-----------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|--------------------|
|                                   | Bağ uzunluğu (Å)            | ED                          | MRSDCI             |
| Ga -Br <sub>2</sub>               | <u>2.224</u>                | -                           | -                  |
| Ga -Br <sub>3</sub>               | <u>2.224</u>                | <u>2.224</u> <sup>a</sup>   | 2.265 <sup>a</sup> |
| Ga- Br <sub>4</sub>               | <u>2.224</u>                | -                           | -                  |
| Br <sub>2</sub> - Br <sub>3</sub> | 3.844                       | -                           | -                  |
| Br <sub>2</sub> - Br <sub>4</sub> | 3.844                       | -                           | -                  |
| Br <sub>3</sub> - Br <sub>4</sub> | 3.869                       | -                           | -                  |

<sup>a</sup>[1] .

Tablo 4.10. 'da görüldüğü gibi GaBr<sub>3</sub> molekülü için bağ uzunluğu 2.224 Å olarak bulunmuştur. Böylece, ED ve MRSDCI metotlarıyla hesaplanan değerler ile İKM yöntemi ile hesaplanan değerlerin birbirleriyle uyum içinde oldukları görülmektedir. GaBr<sub>3</sub> molekülünün üç boyutlu geometrik şekli Şekil 4.3.'de görülmektedir. İKM yöntemi ile hesaplanmış bağ uzunluğu 2.224 Å değerine fit edilmiştir. Şekil 4.3 'deki geometrik yapının açı değerleri görülmektedir.

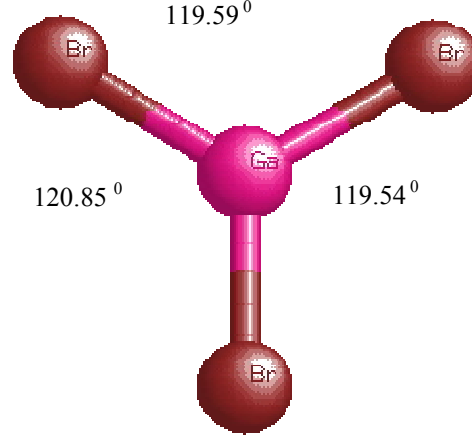
**Tablo 4.11.** Galyum tribromür (GaBr<sub>3</sub>) molekülü için titreşim frekansları (cm<sup>-1</sup>)

|                   | Metot     | $\nu_1$            | $\nu_2$         | $\nu_3$            | $\nu_4$           |
|-------------------|-----------|--------------------|-----------------|--------------------|-------------------|
| GaBr <sub>3</sub> | gas-Ra    | 237 <sup>b,c</sup> | -               | 343 <sup>b,c</sup> | 83 <sup>b,c</sup> |
|                   | gas-IR    | -                  | 95 <sup>a</sup> | -                  | -                 |
|                   | MI(Xe)-IR | -                  | 98 <sup>a</sup> | 341 <sup>a</sup>   | 85 <sup>a</sup>   |
|                   | İKM       | 235.43             | 89.77           | <u>346.69</u>      | 86.54             |

<sup>a</sup>[1], <sup>b</sup>[23], <sup>c</sup>[26].

Tablo 4.11. 'de görüldüğü gibi, İKM metodu ile hesaplanan GaBr<sub>3</sub> molekülünün titreşim frekansları değerleri 86.54 - 346.69 (cm<sup>-1</sup>) değerleri arasındadır. Tablo 4.11. 'e dikkat edilirse, İKM ile hesaplanan frekans değerleri; gas-Ra, gas-IR, MI(Xe)-IR yöntemleri ile hesaplanan frekans değerleri ile uyum içindedir. Tablo 4.11. 'deki frekans değerleri, Tablo 4.9. 'da verilmiş olan parametreler kullanılarak ve Ga-Br arası bağ uzunluğu 2.224 (Å) değerine fit edilerek aynı parametreler ile hesaplanmıştır. Bağ uzunluklarının ve frekans değerlerinin uyum içinde olması, kullanılmış olan İKM 'nin galyum tribromür (GaBr<sub>3</sub>) molekülü için uyumlu ve doğru bir seçim olduğunu göstermektedir.





**Şekil 4.3.** Galyum tribromürün ( $\text{GaBr}_3$ ) denge durumundaki molekül yapısı .

Monomerik galyum tribromür ( $\text{GaBr}_3$ ) molekülünün, Tablo 4.9. 'da verilmiş olan parametreler kullanılarak, hesaplanmış olan, denge durumu potansiyel enerji değerleri, Tablo 4.12. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.12.** Galyum tribromür ( $\text{GaBr}_3$ ) molekülünün hesaplanan enerjileri (eV)

| Molekül         | $U_c + U_r$ | $U_{VW}$ | $U_{EL}$ | $U_{dd}$ | $U_B$  | $U_{TOP}$ |
|-----------------|-------------|----------|----------|----------|--------|-----------|
| $\text{GaBr}_3$ | - 2.4136    | - 0.0475 | - 0.4354 | 0.1437   | 0.1622 | - 2.5903  |

Tablo 4.12. 'da verilmiş olan, kısa mesafe etkileşme potansiyel enerjileri;  $U_{CSS} = U_c + U_r$  : yumuşak küre potansiyel enerjisi,  $U_{VW}$  : Van der Waals potansiyel enerjisi,  $U_{EL}$  : elektriksel potansiyel enerji,  $U_{dd}$  : dipol-dipol potansiyel enerjisi,  $U_B$  : bağlanma potansiyel enerjisi,  $U_{TOP}$  : toplam potansiyel enerji olarak tanımlanmaktadır.

#### 4.1.4. Monomerik Galyum Triiyodür (GaI<sub>3</sub>)

GaI<sub>3</sub> Molekülünün, iyonlar arası kuvvet modeli kullanılarak, denge durumundaki, titreşim frekansları, bağ uzunlukları, etkileşme potansiyel enerjileri, molekül resmi ve bağ açılarını bulmaya yönelik, iyonların üç boyutlu koordinatlarını hesaplamak için, bilgisayar programlarında kullanılmış olan giriş parametreleri Tablo 4.13. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.13.** Galyum triiyodür (GaI<sub>3</sub>) molekülü için giriş parametreleri  
( M galyum iyonu ve X iyot iyonunu göstermektedir )

| $Z_M$ | $Z_X$   | $R_M$ (Å)         | $\rho_M$ (Å)       | $R_X$ (Å)           | $\rho_X$ (Å)         | $C_X$ (eÅ <sup>5/2</sup> ) | $\alpha_X$ (Å <sup>3</sup> ) | $\alpha_s$ (Å <sup>3</sup> /e) |
|-------|---------|-------------------|--------------------|---------------------|----------------------|----------------------------|------------------------------|--------------------------------|
| 2.520 | - 0.840 | 0.97 <sup>a</sup> | 0.045 <sup>a</sup> | 2.02 <sup>b,c</sup> | 0.289 <sup>b,c</sup> | 10.10                      | 3.04 <sup>b,c</sup>          | 1.24 <sup>c</sup>              |

<sup>a</sup>[6], <sup>b</sup>[7], <sup>c</sup>[8]. Burada  $Z_M = -3 Z_X$  'dir .

**Tablo 4.14.** Galyum triiyodür (GaI<sub>3</sub>) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları

| Parametre                       | Kullanılan Metot<br>( İKM ) | Karşılaştırılan<br>Metot  |
|---------------------------------|-----------------------------|---------------------------|
|                                 | Bağ uzunluğu (Å)            | ED (Å)                    |
| Ga – I <sub>2</sub>             | 2.529                       | -                         |
| Ga – I <sub>3</sub>             | <u>2.458</u>                | <u>2.458</u> <sup>a</sup> |
| Ga – I <sub>4</sub>             | <u>2.458</u>                | -                         |
| I <sub>2</sub> – I <sub>3</sub> | 4.294                       | -                         |
| I <sub>2</sub> – I <sub>4</sub> | 4.293                       | -                         |
| I <sub>3</sub> – I <sub>4</sub> | 4.306                       | -                         |

<sup>a</sup>[1].

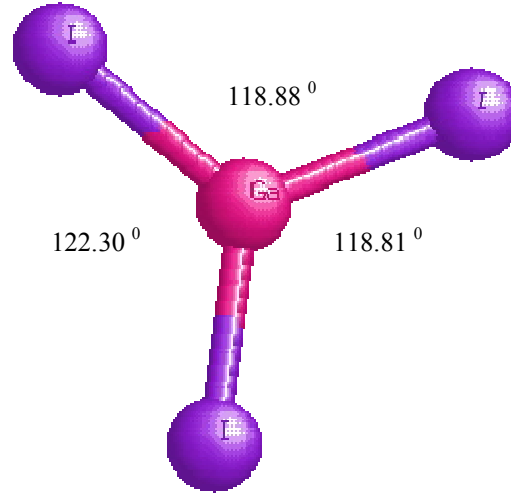
Tablo 4.14. 'de görüldüğü gibi  $\text{GaI}_3$  molekülü için bağ uzunluğu 2.458-2.529 Å aralığında bulunmuştur. Böylece ED ile hesaplanan değer ile İKM yöntemi ile hesaplanan değerlerin birbirleriyle uyum içinde oldukları görülmektedir.  $\text{GaI}_3$  molekülünün üç boyutlu geometrik şekli Şekil 4.4. 'de görülmektedir. Şekil 4.4. 'deki geometrik yapının açıları İKM yöntemi ile hesaplanmış bağ uzunluğu 2.458 Å değerine fit edilerek elde edilmiş olan koordinatlar kullanılarak bulunmuştur.

**Tablo 4.15.** Galyum triiyodür ( $\text{GaI}_3$ ) molekülü için titreşim frekansları ( $\text{cm}^{-1}$ )

|                  | Metot     | $\nu_1$          | $\nu_2$         | $\nu_3$            | $\nu_4$         |
|------------------|-----------|------------------|-----------------|--------------------|-----------------|
| GaI <sub>3</sub> | gas-Ra    | 162 <sup>a</sup> | -               | 276 <sup>a</sup>   | 60 <sup>a</sup> |
|                  | gas-Ra    | 147 <sup>b</sup> | -               | 275 <sup>b</sup>   | 50 <sup>b</sup> |
|                  | gas-IR    | -                | 63 <sup>a</sup> | -                  | 54 <sup>a</sup> |
|                  | MI(Ar)-R  | -                | -               | 292.7 <sup>a</sup> | -               |
|                  | MI(Xe)-IR | -                | -               | 280 <sup>a</sup>   | -               |
|                  | İKM       |                  | 146.32          | 60.36              | <u>246.81</u>   |

<sup>a</sup>[1], <sup>b</sup>[23].

Tablo 4.15. 'de görüldüğü gibi, İKM metodu ile hesaplanan  $\text{GaI}_3$  molekülünün frekans değerleri 59.41 - 246.81 ( $\text{cm}^{-1}$ ) değerleri arasındadır. İKM ile hesaplanan frekans değerleri, gas-Ra, gas-IR, MI(Xe)-IR, MI(Ar)-R, yöntemleri ile hesaplanan frekans değerleri uyum içindedir. Tablo 4.14. 'deki titreşim frekansı değerleri ve 2.458 (Å) değerine fit edilmiş olan Ga-I arasındaki bağ uzunluğu, Tablo 4.13. 'deki İKM giriş parametreleri kullanılarak hesaplanmıştır. Bağ uzunlukları ve frekans değerlerinin uyum içinde olması,  $\text{GaI}_3$  molekülü için kullanılmış olan İKM 'nin bu molekül için uyumlu ve doğru bir seçim olduğunu göstermektedir.



**Şekil 4.4.** Galyum triiyodürün ( $\text{GaI}_3$ ) denge durumundaki molekül yapısı .

$\text{GaI}_3$  molekülünün denge durumunda hesaplanan enerji değerleri Tablo 4.16 'da verilmiştir.

**Tablo 4.16.** Galyum triiyodür ( $\text{GaI}_3$ ) molekülünün hesaplanan enerjileri ( eV )

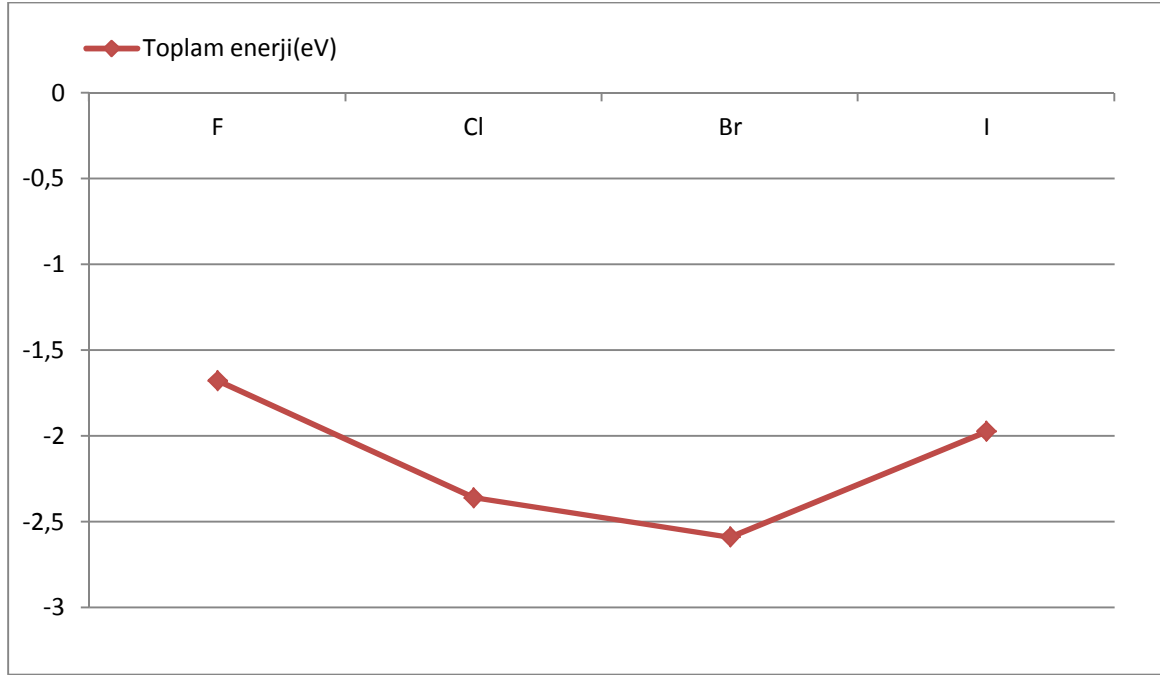
| Molekül        | $U_c + U_r$ | $U_{VW}$ | $U_{EL}$ | $U_{dd}$ | $U_B$  | $U_{TOP}$ |
|----------------|-------------|----------|----------|----------|--------|-----------|
| $\text{GaI}_3$ | - 1.7802    | - 0.0486 | - 0.4665 | 0.1671   | 0.1536 | - 1.9745  |

Tablo 4.16. 'da  $\text{GaI}_3$  molekülü için, değerleri verilmiş olan, kısa mesafe etkileşme potansiyel enerjileri ;  $U_{C S S} = U_c + U_r$  : yumuşak küre potansiyel enerjisi,  $U_{VW}$  : Van der Waals potansiyel enerjisi,  $U_{EL}$  : elektriksel potansiyel enerji,  $U_{dd}$  : dipol-dipol potansiyel enerjisi,  $U_B$  : bağlanma potansiyel enerjisi,  $U_{TOP}$  : toplam potansiyel enerji olarak tanımlanmaktadır.

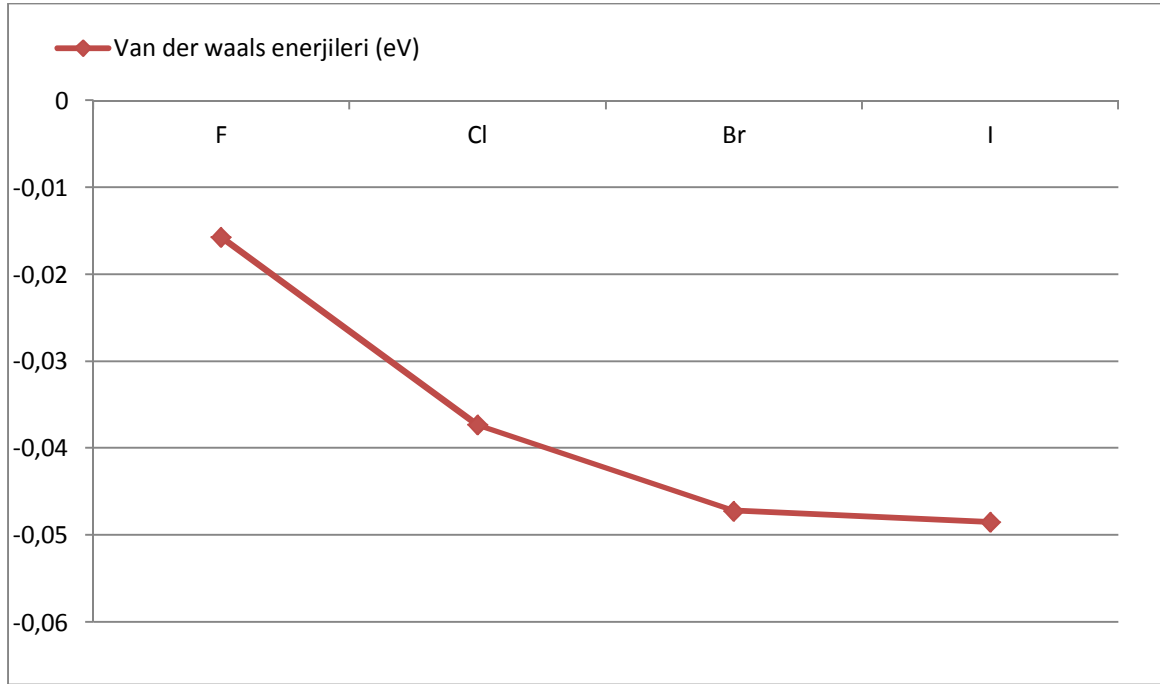
Karşılaştırma yapmak için, monomerik galyum trihalojenürlerinin ( $\text{GaX}_3$ ), potansiyel enerji değerleri Tablo 4.17. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.17.** Galyum trihalojenürlerin ( $\text{GaX}_3$ ) potansiyel enerji değerleri ( eV )

| Molekül         | $U_{\text{CSS}}$ | $U_{\text{VW}}$ | $U_{\text{EL}}$ | $U_{\text{DD}}$ | $-U_{\text{B}}$ | $U_{\text{TOP}}$ |
|-----------------|------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|
| $\text{GaF}_3$  | - 1.4939         | - 0.0157        | - 0.4405        | 0.1872          | 0.0855          | - 1.6774         |
| $\text{GaCl}_3$ | - 2.1790         | - 0.0372        | - 0.4294        | 0.1587          | 0.1266          | - 2.3603         |
| $\text{GaBr}_3$ | - 2.4136         | - 0.0475        | - 0.4354        | 0.1437          | 0.1622          | - 2.5903         |
| $\text{GaI}_3$  | - 1.7802         | - 0.0486        | - 0.4665        | 0.1671          | 0.1536          | - 1.9745         |



**Şekil 4.5.** Monomerik galyum trihalojenürlerin ( $\text{GaX}_3$ ) toplam enerji değişim grafiği.

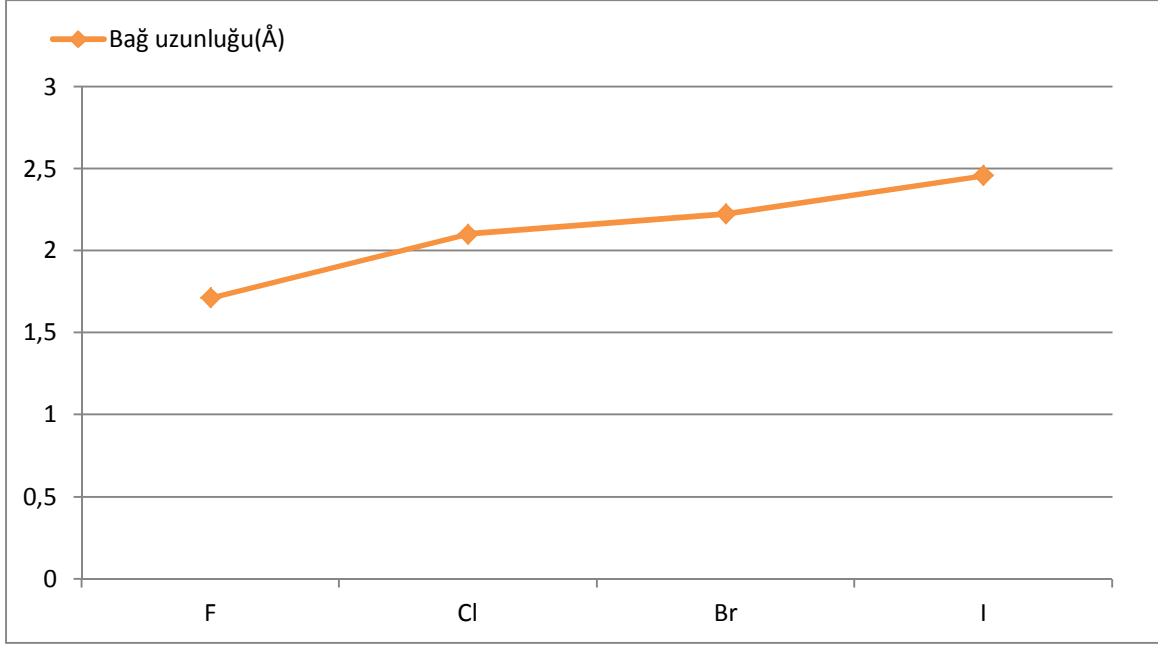


**Şekil 4.6.** Monomerik galyum trihalojenürlerin (GaX<sub>3</sub>) Van der waals enerji değişim grafiği.

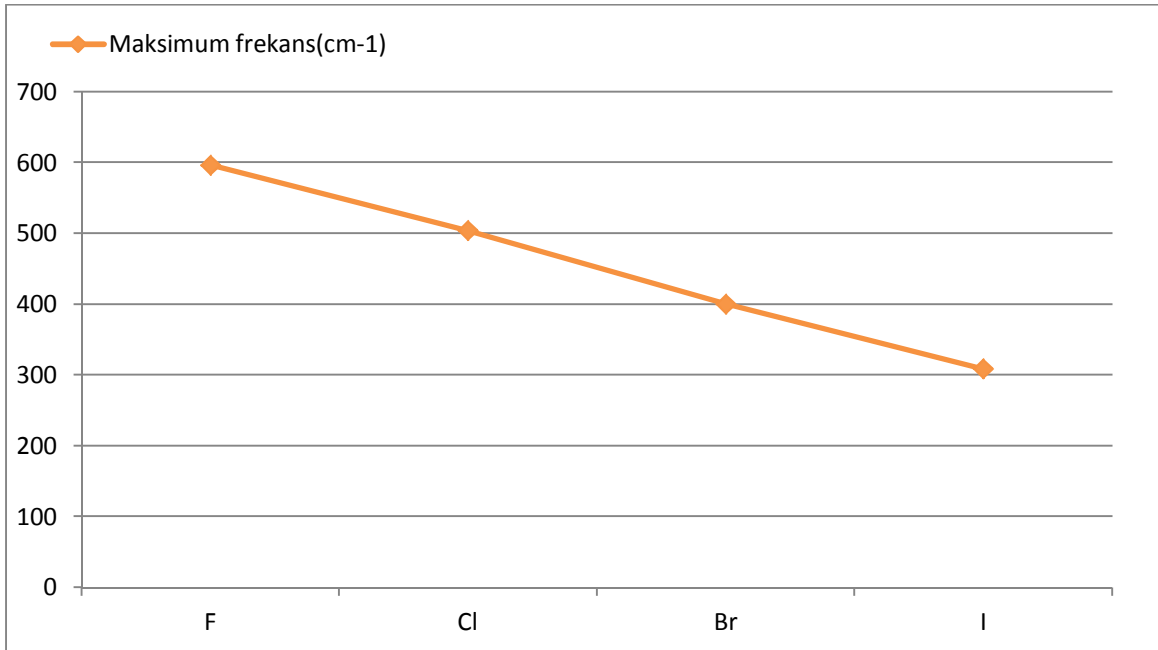
Karşılaştırma yapmak için, monomerik galyum trihalojenürlerinin (GaX<sub>3</sub>), bağ uzunlukları değerleri, maksimum titreşim frekansları değerleri ve bağ açıları değerleri, Tablo 4.18. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.18.** Monomerik Galyum trihalojenürlerin (GaX<sub>3</sub>) bağ uzunlukları, maksimum titreşim frekansları ve bağ açıları değerleri

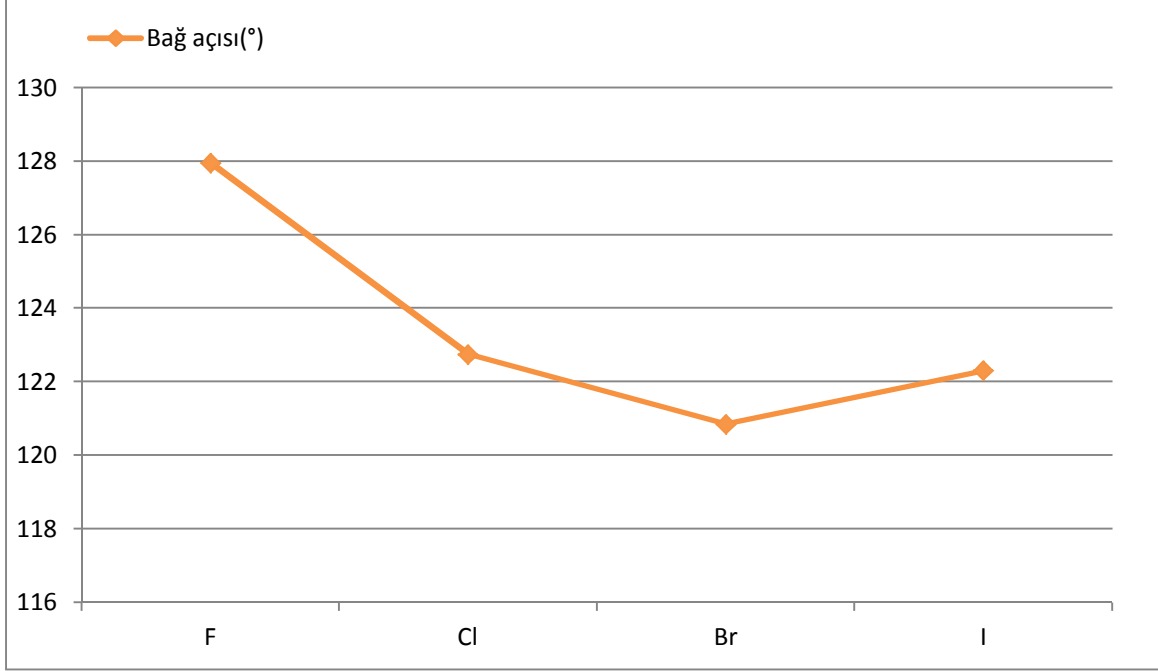
| Molekül           | Fit Edilen Bağ Uzunluğu (Å) | Maksimum Frekans(cm <sup>-1</sup> ) | Bağ Açısı ( $\theta^0$ ) |
|-------------------|-----------------------------|-------------------------------------|--------------------------|
| GaF <sub>3</sub>  | 1.713                       | 596.36                              | 127.96                   |
| GaCl <sub>3</sub> | 2.101                       | 448.36                              | 122.75                   |
| GaBr <sub>3</sub> | 2.224                       | 346.69                              | 120.85                   |
| GaI <sub>3</sub>  | 2.458                       | 246.81                              | 122.30                   |



Şekil 4.7. Monomerik galyum trihalojenürlerin (GaX<sub>3</sub>) bağ uzunluğu değişim grafiği.



Şekil 4.8. Monomerik galyum trihalojenürlerin (GaX<sub>3</sub>) maksimum frekans değişim grafiği.



Şekil 4.9. Monomerik galyum trihalojenürlerin (GaX<sub>3</sub>) bağ açısı değişim grafiği.



## 4.2. $M_2X_6$ Molekülünün Yapısı

Tez çalışmasının bu kısmında, dimerik galyum trihalojenürleri [  $(GaX_3)_2 = Ga_2X_6$  ] ; dimerik galyum triflorür ( $Ga_2F_6$ ), dimerik galyum triklorür ( $Ga_2Cl_6$ ), dimerik galyum tribromür ( $Ga_2Br_6$ ), dimerik galyum triiyodür ( $Ga_2I_6$ ) molekül kümelerinin her biri için, ayrıntılı iyonik etkileşmeleri içeren mikroskobik potansiyel modeller kullanılmıştır. İyonlar arası kuvvet modeli kullanılarak (İKM), yapılan hesaplamalar  $Ga_2F_6$ ,  $Ga_2Cl_6$ ,  $Ga_2Br_6$  ve  $Ga_2I_6$  molekül kümelerinin her birinin, denge durumundaki, molekül yapılarının sonuçlarını vermiştir. Bu potansiyel model kullanılarak,  $Ga_2F_6$ ,  $Ga_2Cl_6$ ,  $Ga_2Br_6$ ,  $Ga_2I_6$  molekül kümelerinin bağ açıları ve uzunlukları, titreşim frekansları, kısa mesafe Coulomb etkileşme potansiyel enerjisi ( $U_C$ ) ile örten itici potansiyel enerjisinin ( $U_r$ ) toplamı olan, yumuşak küre potansiyel enerjisi ( $U_{CSS}$ ), Van der Waals etkileşim potansiyel enerjisi ( $U_{VW}$ ), elektriksel potansiyel enerjisi ( $U_{EL}$ ), dipol – dipol etkileşme potansiyel enerjisi ( $U_{dd}$ ), bağlanma potansiyel enerjisini ( $U_B$ ) içeren toplam potansiyel enerji ( $U_{TOP}$ ) hesaplanmıştır. İyonlar arası kuvvet modeli kullanılarak, yapılan hesaplamalarda, kullanılan parametreler, her bir molekül için, tablolar şeklinde verilmiştir. Bu tablolarda kullanılmış olan İKM giriş parametreleri, metal (M): galyum ve halojenler (X): flor, klor, brom, iyot iyonlarını temsil etmek üzere;

$Z_M$ : metalin valans değeri,  $Z_X$ : halojenin valans değeri,  $R_M$  (Å): metal in iyonik yarıçapı,  $R_X$  (Å): halojenin iyonik yarıçapı,  $\rho_M$  (Å): metalin sertlik parametresi,  $\rho_X$  (Å): halojenin sertlik parametresi,  $\alpha_X$  (Å<sup>3</sup>) : halojenin elektrik polarizasyonu,  $\alpha_S$  (Å<sup>3</sup>/e) : halojenin kısa menzil polarizasyonu ve  $C_X$  (eÅ<sup>5/2</sup>) : Halojenin Van der Waals katsayısı olarak alınmıştır.

#### 4.2.1. Dimerik Galyum Triflorür ( $\text{Ga}_2\text{F}_6$ )

$\text{Ga}_2\text{F}_6$  Molekülünün, iyonlar arası kuvvet modeli kullanılarak, denge durumundaki, titreşim frekansları, bağ uzunlukları, etkileşme potansiyel enerjileri, molekül resmi ve bağ açılarını bulmaya yönelik, iyonların üç boyutlu koordinatlarını hesaplamak için, bilgisayar programlarında kullanılmış olan giriş parametreleri Tablo 4.19. 'da verilmiştir.

**Tablo 4.19.** Dimerik galyum triflorür ( $\text{Ga}_2\text{F}_6$ ) molekülü için giriş parametreleri  
( M galyum iyonu ve X flor iyonunu göstermektedir )

| $Z_M$ | $Z_X$  | $R_M(\text{Å})$   | $\rho_M(\text{Å})$ | $R_X(\text{Å})$     | $\rho_X(\text{Å})$   | $C_X(e\text{Å}^{5/2})$ | $\alpha_X(\text{Å}^3)$ | $\alpha_S(\text{Å}^3/e)$ |
|-------|--------|-------------------|--------------------|---------------------|----------------------|------------------------|------------------------|--------------------------|
| 2,064 | -0.688 | 0.97 <sup>a</sup> | 0.045 <sup>a</sup> | 1.32 <sup>b,c</sup> | 0.215 <sup>b,c</sup> | 2.08 <sup>b,c</sup>    | 0.88 <sup>b,c</sup>    | 0.2 <sup>c</sup>         |

<sup>a</sup>[6], <sup>b</sup>[7], <sup>c</sup>[8] Burada  $Z_M = -3 Z_X$  'dir .

**Tablo 4.20.** Dimerik galyum triflorür ( $\text{Ga}_2\text{F}_6$ ) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları

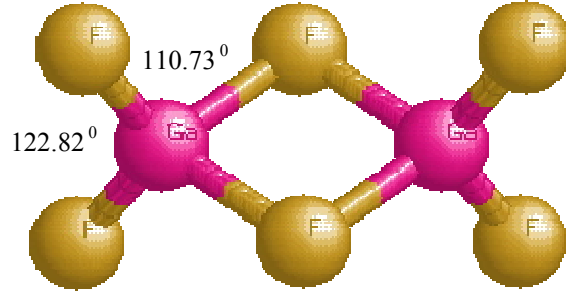
| Parametre                   | Kullanılan Metot<br>( İKM) | Parametre                 | Kullanılan Metot<br>( İKM ) |
|-----------------------------|----------------------------|---------------------------|-----------------------------|
|                             | Bağ uzunluğu (Å)           |                           | Bağ uzunluğu (Å)            |
| $\text{Ga}_1 - \text{Ga}_2$ | 2.888                      | $\text{F}_3 - \text{F}_5$ | 3.024                       |
| $\text{Ga}_1 - \text{F}_3$  | <u>1.717</u>               | $\text{F}_3 - \text{F}_6$ | 3.024                       |
| $\text{Ga}_1 - \text{F}_4$  | <u>1.717</u>               | $\text{F}_3 - \text{F}_7$ | 4.535                       |
| $\text{Ga}_1 - \text{F}_5$  | 1.953                      | $\text{F}_3 - \text{F}_8$ | 5.445                       |
| $\text{Ga}_1 - \text{F}_6$  | 1.953                      | $\text{F}_4 - \text{F}_5$ | 3.024                       |
| $\text{Ga}_1 - \text{F}_7$  | 4.006                      | $\text{F}_4 - \text{F}_6$ | 3.024                       |
| $\text{Ga}_1 - \text{F}_8$  | 4.006                      | $\text{F}_4 - \text{F}_7$ | 5.445                       |
| $\text{Ga}_2 - \text{F}_3$  | 4.006                      | $\text{F}_4 - \text{F}_8$ | 4.535                       |
| $\text{Ga}_2 - \text{F}_4$  | 4.006                      | $\text{F}_5 - \text{F}_6$ | 2.631                       |
| $\text{Ga}_2 - \text{F}_5$  | 1.953                      | $\text{F}_5 - \text{F}_7$ | 3.024                       |
| $\text{Ga}_2 - \text{F}_6$  | 1.953                      | $\text{F}_5 - \text{F}_8$ | 3.024                       |
| $\text{Ga}_2 - \text{F}_7$  | 1.717                      | $\text{F}_6 - \text{F}_7$ | 3.024                       |
| $\text{Ga}_2 - \text{F}_8$  | 1.717                      | $\text{F}_6 - \text{F}_8$ | 3.024                       |
| $\text{F}_3 - \text{F}_4$   | 3.014                      | $\text{F}_7 - \text{F}_8$ | 3.014                       |

Dimerik Galyum triflorürün molekül yapısını bulmak için, bilgisayar programı kullanılarak yapılan titreşim frekansı hesaplamaların sonuçları Tablo 4.21. 'de verilmiştir. Bu hesaplamalarda İKM metodu kullanılarak yapılmıştır.

**Tablo 4.21.** Dimerik galyum triflorür ( $\text{Ga}_2\text{F}_6$ ) molekülü için titreşim frekansları ( $\text{cm}^{-1}$ )

|                         | Metot | $\nu_1$ | $\nu_2$ | $\nu_3$       | $\nu_4$ |
|-------------------------|-------|---------|---------|---------------|---------|
| $\text{Ga}_2\text{F}_6$ | İKM   | 416.82  | 205.89  | <u>571.57</u> | 159.94  |

Tablo 4.21. 'de görüldüğü gibi, dimerik galyum triflorür  $\text{Ga}_2\text{F}_6$  molekülü için maksimum titreşim frekansı değeri  $571.57 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$  olarak hesaplanmıştır. Tablo 4.20 'de görüldüğü gibi, dimerik galyum triflorür  $\text{Ga}_2\text{F}_6$  molekülü için, Ga-F arası bağ uzunluğu  $1.717 - 1.953 \text{ (Å)}$  değerleri arasında ve Ga-Ga arası uzaklık  $2.888 \text{ (Å)}$  olarak bulunmuştur.  $\text{Ga}_2\text{F}_6$  molekülünün diğer bütün iyonları arasındaki uzaklıkları da Tablo 4.20. 'de mevcuttur.



**Şekil 4.10.** Dimerik galyum triflorürün ( $\text{Ga}_2\text{F}_6$ ) denge durumundaki molekül yapısı .

$\text{Ga}_2\text{F}_6$  Molekülünün denge durumunda, hesaplanmış olan etkileşme potansiyeli enerji değerleri Tablo 4.22. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.22.** Dimerik galyum triflorür ( $\text{Ga}_2\text{F}_6$ ) molekülünün hesaplanan etkileşme potansiyel enerjileri ( eV )

| Molekül                 | $U_c + U_r$ | $U_{VW}$ | $U_{EL}$ | $U_{dd}$ | $U_B$  | $U_{TOP}$ |
|-------------------------|-------------|----------|----------|----------|--------|-----------|
| $\text{Ga}_2\text{F}_6$ | - 3.2568    | - 0.0712 | - 1.1583 | 0.4860   | 0.1864 | - 3.8139  |

Tablo 4.22. 'de  $\text{Ga}_2\text{F}_6$  molekülü için, değerleri verilmiş olan, kısa mesafe etkileşme potansiyel enerjileri ;  $U_{C S S} = U_c + U_r$  : yumuşak küre potansiyel enerjisi,  $U_{V W}$  : Van der Waals potansiyel enerjisi,  $U_{EL}$  : elektriksel potansiyel enerji,  $U_{d d}$  : dipol-dipol potansiyel enerjisi,  $U_B$  : bağlanma potansiyel enerjisi,  $U_{TOP}$  : toplam potansiyel enerji olarak tanımlanmaktadır.

#### 4.2.2. Dimerik Galyum Triklorür ( $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ )

Dimerik galyum triklorür  $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$  molekülünün, denge durumundaki, titreşim frekansları, bağ uzunlukları, etkileşme potansiyel enerjileri, molekül resmi ve bağ açılarını bulmaya yönelik, iyonların üç boyutlu koordinatlarını hesaplamak için, iyonlar arası kuvvet modelinde kullanılan, bilgisayar programlarının, giriş parametreleri Tablo 4.23.'de verilmiştir.

**Tablo 4.23.** Dimerik galyum triklorür ( $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ) molekülü için giriş parametreleri  
( M galyum iyonu ve X klor iyonunu göstermektedir )

| $Z_M$ | $Z_X$  | $R_M (\text{Å})$  | $\rho_M (\text{Å})$ | $R_X (\text{Å})$    | $\rho_X (\text{Å})$  | $C_X (e\text{Å}^{5/2})$ | $\alpha_X (\text{Å}^3)$ | $\alpha_s (\text{Å}^3/e)$ |
|-------|--------|-------------------|---------------------|---------------------|----------------------|-------------------------|-------------------------|---------------------------|
| 2.571 | -0,857 | 0.97 <sup>a</sup> | 0.045 <sup>a</sup>  | 1.71 <sup>b,c</sup> | 0.238 <sup>b,c</sup> | 5.50 <sup>b,c</sup>     | 1.36 <sup>b,d</sup>     | 0.46 <sup>b,d</sup>       |

<sup>a</sup>[6], <sup>b</sup>[7], <sup>c</sup>[8], <sup>d</sup>[9]. Burada  $Z_M = -3 Z_X$  'dir .

**Tablo 4.24.** Dimerik galyum triklorür ( $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları

| Parametre                   | Kullanılan Metot ( İKM ) | Karşılaştırılan Metotlar |                    | Parametre                   | Kullanılan Metot ( İKM ) |
|-----------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------|-----------------------------|--------------------------|
|                             | Bağ uzunluğu (Å)         | ED                       | HF                 |                             | Bağ uzunluğu (Å)         |
| $\text{Ga}_1 - \text{Ga}_2$ | 3.509                    | -                        | -                  | $\text{Cl}_3 - \text{Cl}_5$ | 3.670                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Cl}_3$ | <u>2.116</u>             | <u>2.116<sup>a</sup></u> | 2.098 <sup>b</sup> | $\text{Cl}_3 - \text{Cl}_6$ | 3.670                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Cl}_4$ | <u>2.116</u>             | -                        | -                  | $\text{Cl}_3 - \text{Cl}_7$ | 5.551                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Cl}_5$ | 2.326                    | 2.305 <sup>a</sup>       | 2.316 <sup>b</sup> | $\text{Cl}_3 - \text{Cl}_8$ | 6.675                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Cl}_6$ | 2.326                    | -                        | -                  | $\text{Cl}_4 - \text{Cl}_5$ | 3.670                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Cl}_7$ | 4.894                    | -                        | -                  | $\text{Cl}_4 - \text{Cl}_6$ | 3.670                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Cl}_8$ | 4.894                    | -                        | -                  | $\text{Cl}_4 - \text{Cl}_7$ | 6.675                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Cl}_3$ | 4.894                    | -                        | -                  | $\text{Cl}_4 - \text{Cl}_8$ | 5.551                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Cl}_4$ | 4.894                    | -                        | -                  | $\text{Cl}_5 - \text{Cl}_6$ | 3.054                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Cl}_5$ | 2.326                    | -                        | -                  | $\text{Cl}_5 - \text{Cl}_7$ | 3.670                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Cl}_6$ | 2.326                    | -                        | -                  | $\text{Cl}_5 - \text{Cl}_8$ | 3.670                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Cl}_7$ | 2.116                    | -                        | -                  | $\text{Cl}_6 - \text{Cl}_7$ | 3.670                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Cl}_8$ | 2.116                    | -                        | -                  | $\text{Cl}_6 - \text{Cl}_8$ | 3.670                    |
| $\text{Cl}_3 - \text{Cl}_4$ | 3.707                    | -                        | -                  | $\text{Cl}_7 - \text{Cl}_8$ | 3.707                    |

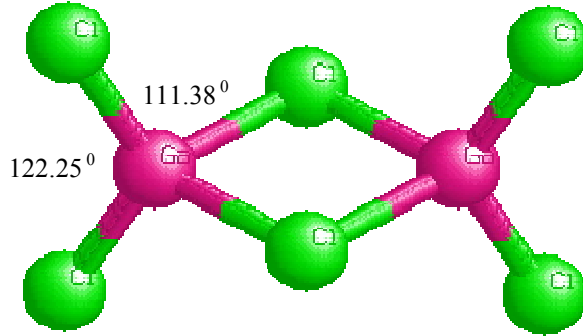
<sup>a</sup>[1], <sup>b</sup>[27].

Dimerik galyum triklorürün molekül yapısını bulmak için, iyonlar arası kuvvet modeli için geçerli olan, bilgisayar programı kullanılarak, yapılan titreşim frekansı hesaplamaların sonuçları Tablo 4.25. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.25.** Dimerik galyum triklorür ( $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ) molekülü için titreşim frekansları ( $\text{cm}^{-1}$ )

|                          | Metot | $\nu_1$ | $\nu_2$ | $\nu_3$       | $\nu_4$ |
|--------------------------|-------|---------|---------|---------------|---------|
| $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ | İKM   | 309.07  | 180.93  | <u>484.12</u> | 114.22  |

Tablo 4.25. 'de görüldüğü gibi, dimerik galyum triflorür  $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$  molekülün, denge durumundaki, maksimum titreşim frekansı  $484,12 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$  olarak hesaplanmıştır. Tablo 4.24. 'de verilmiş olan,  $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$  molekülünün, Ga-Cl iyonları arasındaki bağ uzunluğu  $2.326 - 2.116 \text{ (Å)}$  ve Ga-Ga iyonları arasındaki uzaklık ise  $3.509 \text{ (Å)}$  olarak hesaplanmış, diğer iyonlar arasındaki uzaklıklar ve bağ uzunlukları da bu tabloda mevcuttur. Burada 2.116 (Å) değerindeki bağ uzunluğu, elektron saçılma deneyi (ED) sonucuna fit edilmiştir.

**Şekil 4.11.** Dimerik galyum triklorür ( $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ) molekülünün denge durumundaki yapısı.

Dimerik galyum triklorür ( $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ) molekülünün denge durumunda hesaplanan enerji değerleri Tablo 4.26. 'da verilmiştir.

**Tablo 4.26.** Dimerik galyum triklorür ( $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ ) molekülünün hesaplanan etkileşme potansiyel enerjileri ( eV )

| Molekül                  | $U_c + U_r$ | $U_{VW}$ | $U_{EL}$ | $U_{dd}$ | $U_B$  | $U_{TOP}$ |
|--------------------------|-------------|----------|----------|----------|--------|-----------|
| $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ | - 4.3441    | - 0.1624 | - 1.1252 | 0.4275   | 0.2701 | - 4.9341  |

Tablo 4.26. 'da  $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$  molekülünün, değerleri verilmiş olan, kısa mesafe etkileşme potansiyel enerjileri Bölüm 2 'de isimlendirildiği gibi sırasıyla;  $U_{CSS} = U_c + U_r$  : yumuşak küre potansiyel enerjisi,  $U_{VW}$  : Van der Waals potansiyel enerjisi,  $U_{EL}$  : elektriksel potansiyel enerji,  $U_{dd}$  : dipol-dipol potansiyel enerjisi,  $U_B$  : bağlanma potansiyel enerjisi,  $U_{TOP}$  : toplam potansiyel enerji, olarak isimlendirilmiştir.



### 4.2.3. Dimerik Galyum Tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ )

Dimerik galyum tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ) molekülünün, denge durumundaki, iyonların üç boyutlu koordinatlarını (molekül resmi ve bağ açılarını bulmak için), titreşim frekansları, bağ uzunlukları ve etkileşme potansiyel enerjilerini, hesaplamak için, iyonlar arası kuvvet modelinde kullanılan, bilgisayar programlarının, giriş parametreleri Tablo 4.27.'de verilmiştir.

**Tablo 4.27.** Dimerik galyum tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ) molekülü için giriş parametreleri ( M galyum iyonu ve X brom iyonunu göstermektedir )

| $Z_M$ | $Z_X$  | $R_M(\text{Å})$   | $\rho_M(\text{Å})$ | $R_X(\text{Å})$     | $\rho_X(\text{Å})$   | $C_X(e\text{Å}^{5/2})$ | $\alpha_X(\text{Å}^3)$ | $\alpha_S(\text{Å}^3/e)$ |
|-------|--------|-------------------|--------------------|---------------------|----------------------|------------------------|------------------------|--------------------------|
| 2.664 | -0.888 | 0.97 <sup>a</sup> | 0.045 <sup>a</sup> | 1.84 <sup>b,c</sup> | 0.258 <sup>b,c</sup> | 7.17 <sup>d</sup>      | 1.7 <sup>b,c</sup>     | 0.76 <sup>c</sup>        |

<sup>a</sup>[6], <sup>b</sup>[7], <sup>c</sup>[8], <sup>d</sup>[9].

Tablo 4.27. 'deki  $Z_X$  değeri bu çalışmada belirlenmiş,  $Z_M$  değeri de  $Z_M = -3 Z_X$  bağıntısından hesaplanmıştır. Diğer parametreler ise [6-9] kaynaklarından alınmıştır.

**Tablo 4.28.** Dimerik galyum tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları

| Parametre                   | Kullanılan Metot ( İKM ) | Karşılaştırılan Metotlar |                    |                           | Parametre                   | Kullanılan Metot ( İKM ) |
|-----------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------|---------------------------|-----------------------------|--------------------------|
|                             | Bağ uzunluğu (Å)         | ED                       | HF                 | ND                        |                             | Bağ uzunluğu (Å)         |
| $\text{Ga}_1 - \text{Ga}_2$ | 3.572                    | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_3 - \text{Br}_5$ | 3.916                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Br}_3$ | <u>2.260</u>             | 2.250 <sup>a</sup>       | 2.286 <sup>b</sup> | <u>2.260</u> <sup>c</sup> | $\text{Br}_3 - \text{Br}_6$ | 3.916                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Br}_4$ | <u>2.260</u>             | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_3 - \text{Br}_7$ | 5.945                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Br}_5$ | 2.473                    | 2.453 <sup>a</sup>       | 2.503 <sup>b</sup> | 2.420 <sup>c</sup>        | $\text{Br}_3 - \text{Br}_8$ | 7.138                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Br}_6$ | 2.473                    | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_4 - \text{Br}_5$ | 3.916                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Br}_7$ | 5.236                    | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_4 - \text{Br}_6$ | 3.916                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{Br}_8$ | 5.236                    | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_4 - \text{Br}_7$ | 7.138                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Br}_3$ | 5.236                    | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_4 - \text{Br}_8$ | 5.945                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Br}_4$ | 5.236                    | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_5 - \text{Br}_6$ | 3.221                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Br}_5$ | 2.473                    | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_5 - \text{Br}_7$ | 3.916                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Br}_6$ | 2.473                    | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_5 - \text{Br}_8$ | 3.916                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Br}_7$ | 2.260                    | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_6 - \text{Br}_7$ | 3.916                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{Br}_8$ | 2.260                    | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_6 - \text{Br}_8$ | 3.916                    |
| $\text{Br}_3 - \text{Br}_4$ | 3.952                    | -                        | -                  | -                         | $\text{Br}_7 - \text{Br}_8$ | 3.952                    |

<sup>a</sup>[1] , <sup>b</sup>[28] , <sup>c</sup>[29].

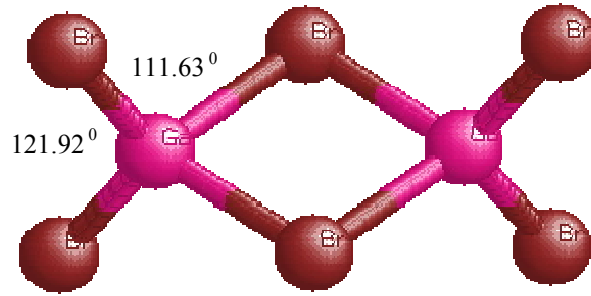
Dimerik galyum tribromürün molekül yapısını bulmak için, iyonlar arası kuvvet modeli için geçerli olan, bilgisayar programı kullanılarak, yapılan titreşim frekansı hesaplamalarının sonuçları Tablo 4.28. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.29.** Dimerik galyum tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ) molekülü için titreşim frekansları ( $\text{cm}^{-1}$ )

|                          | Metot | $\nu_1$ | $\nu_2$ | $\nu_3$       | $\nu_4$ |
|--------------------------|-------|---------|---------|---------------|---------|
| $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ | İKM   | 222.85  | 136.23  | <u>375.68</u> | 93.36   |

Tablo 4.27. 'de görüldüğü gibi, dimerik galyum tribromür  $\text{Ga}_2\text{Br}_6$  molekülünün, denge durumundaki, maksimum titreşim frekansı  $375.68 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$  olarak hesaplanmıştır.

Tablo 4.28. 'de verilmiş olan,  $\text{Ga}_2\text{Br}_6$  molekülünün, Ga–Br iyonları arasındaki bağ uzunlukları  $2.260 - 2.473 \text{ (Å)}$  değerleri arasında ve Ga-Ga iyonları arasındaki uzaklık ise  $3.572 \text{ (Å)}$  olarak hesaplanmış, diğer iyonlar arasındaki uzaklıklar ve bağ uzunlukları da bu tabloda mevcuttur. Burada 2.260 (Å) değerindeki bağ uzunluğu, nötron saçılma deneyi (ND) sonucuna fit edilmiştir.

**Şekil 4.12.** Dimerik galyum tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ) molekülünün denge durumundaki yapısı.

Dimerik galyum tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ) molekülünün denge durumunda hesaplanan enerji değerleri Tablo 4.30. 'da verilmiştir.

**Tablo 4.30.** Dimerik galyum tribromür ( $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ ) molekülünün hesaplanan enerjileri (eV)

| Molekül                  | $U_c + U_r$ | $U_{VW}$ | $U_{EL}$ | $U_{dd}$ | $U_B$  | $U_{TOP}$ |
|--------------------------|-------------|----------|----------|----------|--------|-----------|
| $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ | - 4.4064    | - 0.1902 | -1.0691  | 0.3769   | 0.3152 | - 4.9736  |

Tablo 4.30. 'da  $\text{Ga}_2\text{Br}_6$  molekülünün, değerleri verilmiş olan, kısa mesafe etkileşme potansiyel enerjileri Bölüm 2 'de adlandırıldığı gibi burada da;  $U_{CSS} = U_c + U_r$ : yumuşak küre potansiyel enerjisi,  $U_{VW}$ : Van der Waals potansiyel enerjisi,  $U_{EL}$ : elektriksel potansiyel enerji,  $U_{dd}$ : dipol-dipol potansiyel enerjisi,  $U_B$ : bağlanma potansiyel enerjisi,  $U_{TOP}$ : toplam potansiyel enerji, olarak adlandırılmıştır.

#### 4.2.4. Dimerik Galyum Triiyodür ( $\text{Ga}_2\text{I}_6$ )

Dimerik galyum triiyodür ( $\text{Ga}_2\text{I}_6$ ) molekülünün, denge durumundaki, iyonların x, y, z koordinatlarını (molekül resmi ve bağ açılarını bulmak için), titreşim frekansları, bağ uzunlukları ve etkileşme potansiyel enerjilerini, hesaplamak için, iyonlar arası kuvvet modelinde kullanılan, bilgisayar programlarının, giriş parametreleri Tablo 4.31.'de verilmiştir.

**Tablo 4.31.** Dimerik galyum triiyodür ( $\text{Ga}_2\text{I}_6$ ) molekülü için giriş parametreleri  
( M galyum iyonu ve X iyot iyonunu göstermektedir )

| $Z_M$ | $Z_X$  | $R_M(\text{Å})$   | $\rho_M(\text{Å})$ | $R_X(\text{Å})$     | $\rho_X(\text{Å})$   | $C_X(e\text{Å}^{5/2})$ | $\alpha_X(\text{Å}^3)$ | $\alpha_S(\text{Å}^3/e)$ |
|-------|--------|-------------------|--------------------|---------------------|----------------------|------------------------|------------------------|--------------------------|
| 2.610 | -0.870 | 0.97 <sup>a</sup> | 0.045 <sup>a</sup> | 2.02 <sup>b,c</sup> | 0.289 <sup>b,c</sup> | 10.10 <sup>d</sup>     | 3.04 <sup>b,c</sup>    | 1.24 <sup>c</sup>        |

<sup>a</sup>[6], <sup>b</sup>[7], <sup>c</sup>[8], <sup>d</sup>[9].

Tablo 4.31. 'de verilmiş olan  $Z_X$  değeri bu çalışmada belirlenmiş,  $Z_M$  değeri de  $Z_M = -3 Z_X$  bağıntısından hesaplanmıştır. Diğer parametreler ise [6-9] kaynaklarından alınmıştır.

**Tablo 4.32.** Dimerik galyum triiyodür ( $\text{Ga}_2\text{I}_6$ ) molekülü için hesaplanan bağ uzunlukları

| Parametre                   | Kullanılan Metot ( İKM ) | Karşılaştırılan Metot    | Parametre                 | Kullanılan Metot ( İKM ) |
|-----------------------------|--------------------------|--------------------------|---------------------------|--------------------------|
|                             | Bağ uzunluğu (Å)         | ND                       |                           | Bağ uzunluğu (Å)         |
| $\text{Ga}_1 - \text{Ga}_2$ | 3.895                    | -                        | $\text{I}_3 - \text{I}_5$ | 4.225                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{I}_3$  | <u>2.450</u>             | <u>2.450<sup>a</sup></u> | $\text{I}_3 - \text{I}_6$ | 4.225                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{I}_4$  | <u>2.450</u>             | -                        | $\text{I}_3 - \text{I}_7$ | 6.288                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{I}_5$  | 2.682                    | 2.630 <sup>a</sup>       | $\text{I}_3 - \text{I}_8$ | 7.610                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{I}_6$  | 2.682                    | -                        | $\text{I}_4 - \text{I}_5$ | 4.225                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{I}_7$  | 5.522                    | -                        | $\text{I}_4 - \text{I}_6$ | 4.225                    |
| $\text{Ga}_1 - \text{I}_8$  | 5.522                    | -                        | $\text{I}_4 - \text{I}_7$ | 7.604                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{I}_3$  | 5.522                    | -                        | $\text{I}_4 - \text{I}_8$ | 6.284                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{I}_4$  | 5.522                    | -                        | $\text{I}_5 - \text{I}_6$ | 3.688                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{I}_5$  | 2.682                    | -                        | $\text{I}_5 - \text{I}_7$ | 4.225                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{I}_6$  | 2.682                    | -                        | $\text{I}_5 - \text{I}_8$ | 4.225                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{I}_7$  | 2.450                    | -                        | $\text{I}_6 - \text{I}_7$ | 4.225                    |
| $\text{Ga}_2 - \text{I}_8$  | 2.450                    | -                        | $\text{I}_6 - \text{I}_8$ | 4.225                    |
| $\text{I}_3 - \text{I}_4$   | 4.275                    | -                        | $\text{I}_7 - \text{I}_8$ | 4.275                    |

<sup>a</sup>[29]

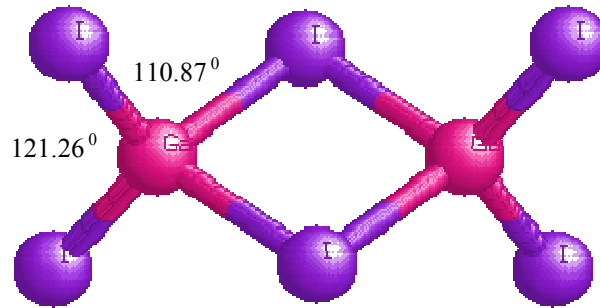
Dimerik galyum triiyodürün molekül yapısını bulmak için, iyonlar arası kuvvet modeli için geçerli olan, bilgisayar programı kullanılarak, yapılan titreşim frekansı hesaplamalarının sonuçları Tablo 4.33. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.33.** Dimerik galyum triiyodür ( $\text{Ga}_2\text{I}_6$ ) molekülü için titreşim frekansları ( $\text{cm}^{-1}$ )

|                         | Metot | $\nu_1$ | $\nu_2$ | $\nu_3$       | $\nu_4$ |
|-------------------------|-------|---------|---------|---------------|---------|
| $\text{Ga}_2\text{I}_6$ | İKM   | 195.17  | 103.71  | <u>306.85</u> | 73.82   |

Tablo 4.33. 'de görüldüğü gibi, dimerik galyum triiyodür  $\text{Ga}_2\text{Br}_6$  molekülünün, denge durumundaki, maksimum titreşim frekansı  $306.85 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$  olarak hesaplanmıştır.

Tablo 4.32. 'de verilmiş olan,  $\text{Ga}_2\text{I}_6$  molekülünün, Ga-I iyonları arasındaki bağ uzunlukları  $2.450 - 2.682 \text{ (Å)}$  değerleri arasında ve Ga-Ga iyonları arasındaki uzaklık ise  $3.895 \text{ (Å)}$  olarak hesaplanmış, diğer iyonlar arasındaki uzaklıklar ve bağ uzunlukları da bu tabloda mevcuttur. Burada  $2.450 \text{ (Å)}$  değerindeki bağ uzunluğu, nötron saçılma deneyi (ND) sonucuna fit edilmiştir.

**Şekil 4.13.** Dimerik galyum triiyodür ( $\text{Ga}_2\text{I}_6$ ) molekülünün denge durumundaki yapısı.

Dimerik galyum triiyodür ( $\text{Ga}_2\text{I}_6$ ) molekülünün denge durumunda hesaplanan enerji değerleri Tablo 4.34. 'de verilmiştir.

**Tablo 4.34.** Dimerik galyum triiyodür ( $\text{Ga}_2\text{I}_6$ ) molekülünün hesaplanan enerjileri (eV)

| Molekül                 | $U_c + U_r$ | $U_{VW}$ | $U_{EL}$ | $U_{dd}$ | $U_B$  | $U_{TOP}$ |
|-------------------------|-------------|----------|----------|----------|--------|-----------|
| $\text{Ga}_2\text{I}_6$ | - 3.7915    | - 0.2217 | - 1.4038 | 0.5198   | 0.3641 | - 4.5331  |

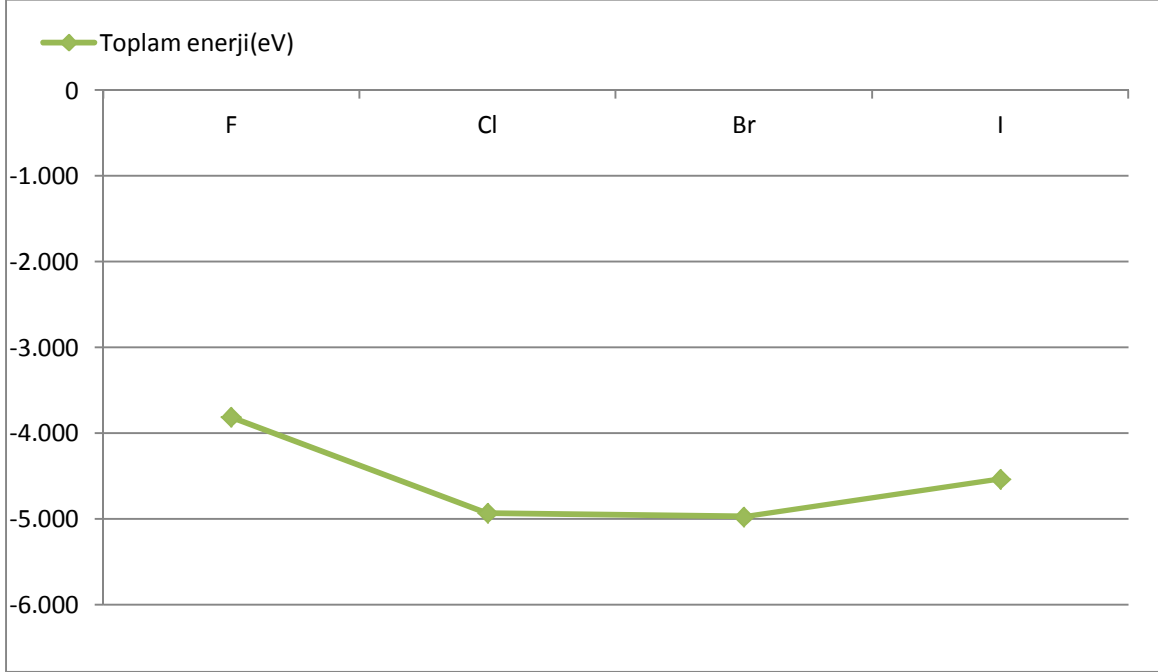
Tablo 4.34. 'de dimerik galyum triiyodür ( $\text{Ga}_2\text{I}_6$ ) molekülünün, değerleri verilmiş olan, kısa mesafe etkileşme potansiyel enerjileri Bölüm 2 'de yapıldığı gibi burada da;  $U_{CSS} = U_c + U_r$ : yumuşak küre potansiyel enerjisi,  $U_{VW}$ : Van der Waals potansiyel enerjisi,  $U_{EL}$ : elektriksel potansiyel enerji,  $U_{dd}$ : dipol-dipol potansiyel enerjisi,  $U_B$ : bağlanma potansiyel enerjisi,  $U_{TOP}$ : toplam potansiyel enerji, olarak isimlendirilmiştir.

Dimerik galyum trihalojenür moleküllerinin ( $\text{Ga}_2\text{X}_6$ ), karşılaştırma yapmak için, enerji değerleri Tablo 4.35. 'de verilmiştir.

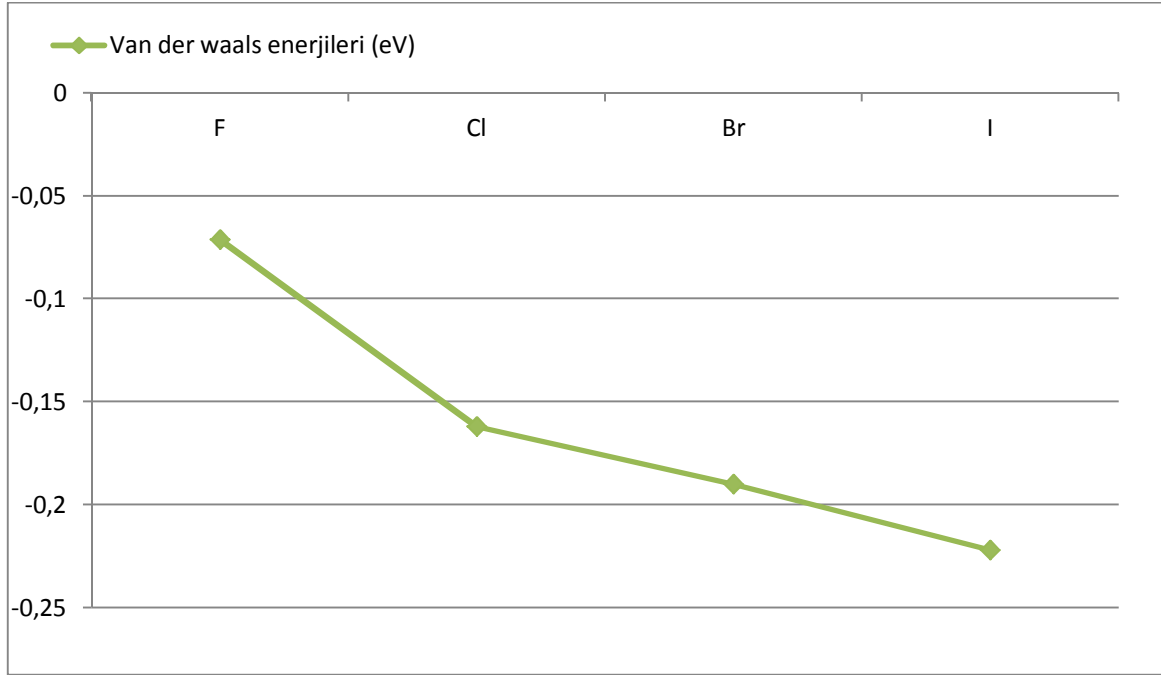
**Tablo 4.35.** Dimerik galyum trihalojenür moleküllerinin ( $\text{Ga}_2\text{X}_6$ ) enerji değerleri (eV)

| Molekül                  | $U_{CSS}$ | $U_{VW}$ | $U_{EL}$ | $U_{DD}$ | $-U_B$ | $U_{TOP}$ |
|--------------------------|-----------|----------|----------|----------|--------|-----------|
| $\text{Ga}_2\text{F}_6$  | - 3.2568  | - 0.0712 | - 1.1583 | 0.4860   | 0.1864 | - 3.8139  |
| $\text{Ga}_2\text{Cl}_6$ | - 4.3441  | - 0.1624 | - 1.1252 | 0.4275   | 0.2701 | - 4.9341  |
| $\text{Ga}_2\text{Br}_6$ | - 4.4064  | - 0.1902 | - 1.0691 | 0.3769   | 0.3152 | - 4.9736  |
| $\text{Ga}_2\text{I}_6$  | - 3.792   | - 0.2217 | - 1.404  | 0.5198   | 0.3641 | - 4.5331  |





**Şekil 4.14.** Dimerik galyum trihalojenürlerin (Ga<sub>2</sub>X<sub>6</sub>) toplam enerji değişim grafiği.

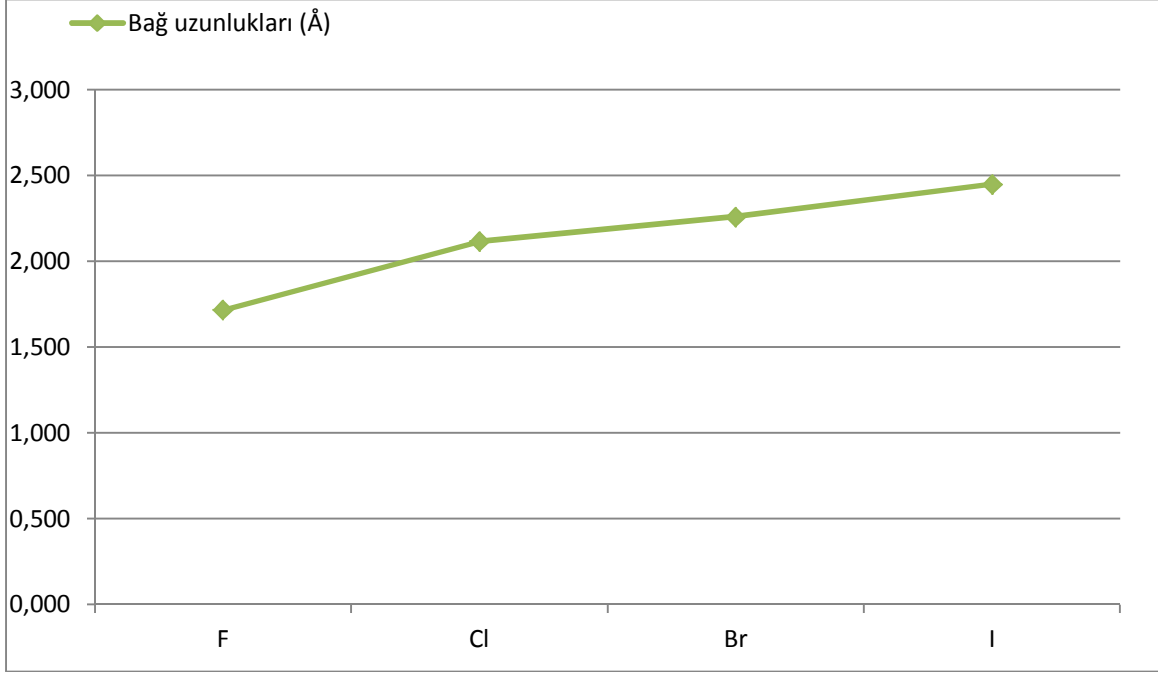


Şekil 4.15. Dimerik galyum trihalojenürlerin ( $Ga_2X_6$ ) Van der waals enerjisi değişim grafiği.

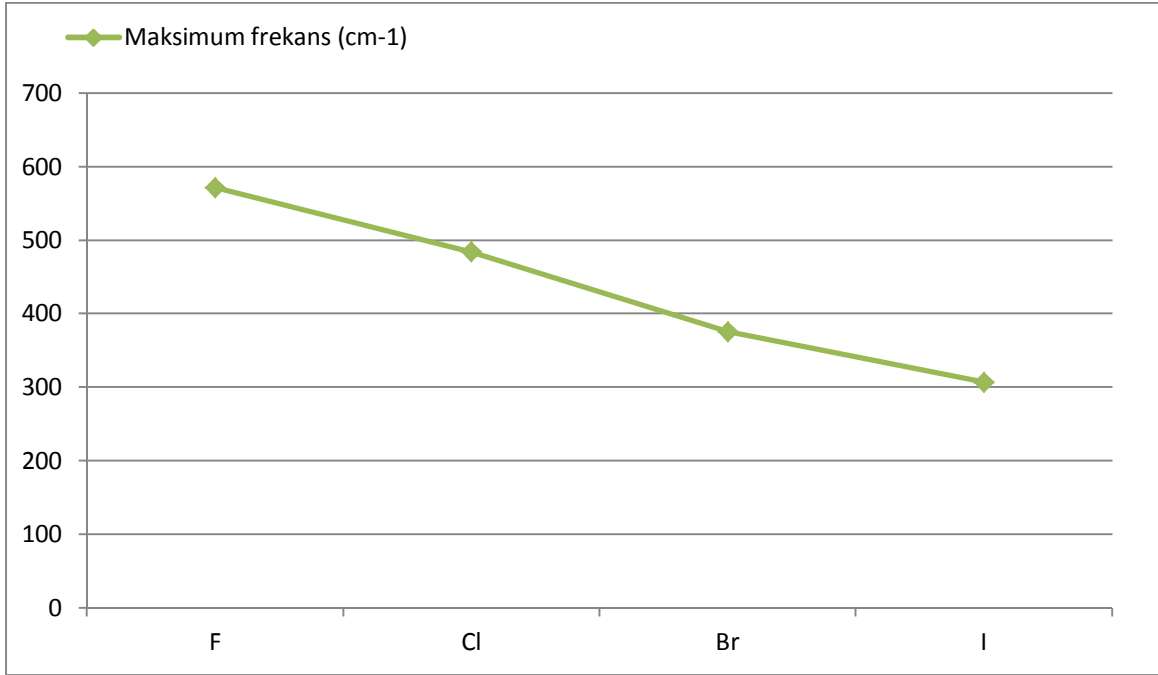
Dimerik galyum trihalojenür moleküllerinin ( $Ga_2X_6$ ) karşılaştırılan bağ uzunlukları, maksimum titreşim frekans ve bağ açıları değerleri Tablo 4.36. 'da verilmiştir.

**Tablo 4.36.** Dimerik galyum trihalojenürlerin ( $Ga_2X_6$ ) İKM ile hesaplanan bağ uzunlukları, maksimum titreşim frekansları ve bağ açıları

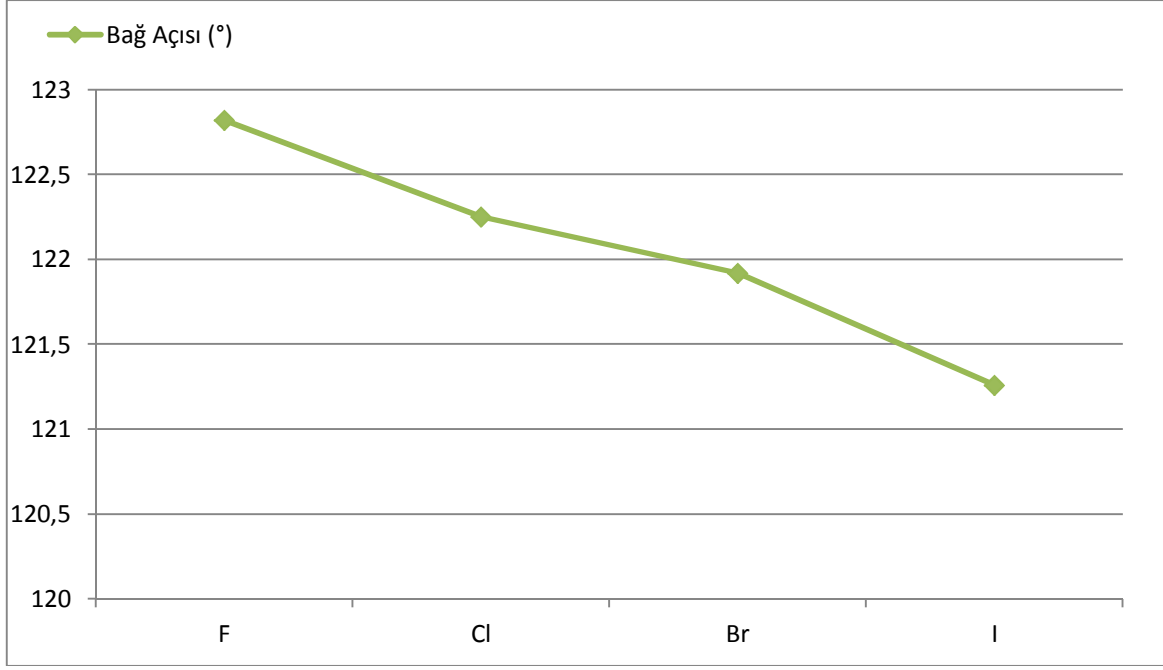
| Molekül    | Fit Edilen Bağ Uzunluğu (Å) | Maksimum Frekans ( $cm^{-1}$ ) | Bağ Açısı ( $\theta^0$ ) |
|------------|-----------------------------|--------------------------------|--------------------------|
| $Ga_2F_6$  | 1.717                       | 571.57                         | 122.82                   |
| $Ga_2Cl_6$ | 2.116                       | 484.12                         | 122.25                   |
| $Ga_2Br_6$ | 2.260                       | 375.68                         | 121.92                   |
| $Ga_2I_6$  | 2.450                       | 306.85                         | 121.26                   |



Şekil 4.16. Dimerik galyum trihalojenürlerin (Ga<sub>2</sub>X<sub>6</sub>) bağ uzunlukları değişim grafiği.



Şekil 4.17. Dimerik galyum trihalojenürlerin (Ga<sub>2</sub>X<sub>6</sub>) maksimum frekans değişim grafiği.



Şekil 4.18. Dimerik galyum trihalojenürlerin (Ga<sub>2</sub>X<sub>6</sub>) bağ açısı değişim grafiği.

## KAYNAKLAR

- [1] M. Hargittai, “ *Molecular Structure of Metal Halides* ”, Chem. Rev. **100**, 2233 (2000).
- [2] Z. Akdeniz, G. Pastore and M. P. Tosi, “ *An Ionic Model for Molecular Units in Molten Aluminium Trichloride and Alkali Chloroaluminates* ”, Phys.Chem.Liq. **32**, 191 (1996).
- [3] M. Hargittai, M. Kolonits, L. Gödörházi, “ *Molecular Geometry of Monomeric and Dimeric Aluminum Tribromide from Gas-Phase Electron Diffraction* ”, Chem. Phys. Letters, **257**, 321 (1996).
- [4] M. Hargittai, M. Kolonits, J. Tremmel, J.-L. Fourquet, G. Ferey, “ *The molecular geometry of iron trifluoride from electron diffraction and a reinvestigation of aluminum trifluoride* ”, Struct. Chem., **1**, 75 (1990).
- [5] M. Hargittai, “ *The Molecular Geometry of Gas-Phase Metal Halides* ”, Coordination Chemistry Reviews, **91**, 35 (1988).
- [6] Z. Akdeniz, M. Çaliskan, Z. Çiçek, M. P. Tosi, “ *Polymeric Structures in Aluminium and Gallium Halides* ”, Z. Naturforsch. **55a**, 575 (2000).
- [7] Z. Akdeniz, A. Karaman and M.P.Tosi, “ *Ionic Interactions in Actinite Tetrahalides* ”, Z. Naturforsch. **56a**, 376 (2001).
- [8] Wang Li, M. P. Tosi, “ *Binding of Tetrahedral Halocomplexes of Polyvalent Metal Ions in an Ionic Model* ”, N. Cimento No. 12, **10 D**, 1497 (1988).
- [9] Z. Akdeniz, Z. Çiçek, M. P. Tosi, “ *Structure and Energetics of Neutral and Cesium-compensated Charged Clusters in Zirconium Chloride Melts* ”, Molecular J. Liq. **88**, 175 (2000).
- [10] G. Pastore, Z. Akdeniz, M. P. Tosi, “ *Structure of Molten Yttrium Chloride in an Ionic Model* ”, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 8297–8304 (1991).
- [11] Z. Akdeniz, M. P. Tosi, “ *Molecular Clusters in Zirconium and Thorium Tetrachloride Melts* ”, Journal of Molecular Liquids **96–97**, 439 (2002).
- [12] S. Senturk Dalgic, C. Canan, M. Caliskan, “ *Equilibrium structure of CuO and CuS using the interionic force model* ”, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials Vol. **9**, No. 6, 1719 (2007) .

- [13] S. Senturk Dalgic and M. Caliskan, “ *Equilibrium structure of germanium sulfur  $Ge_nS_m$  clusters* ”, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials Vol. 9, No. 10, P. 3054 (2007) .
- [14] S. Senturk Dalgic and M. Caliskan, “ *Equilibrium Structure of Tantalum Oxygen Clusters* ”, 2007 American Institute of Physics, P. 559 (2007) .
- [15] S. Senturk Dalgic, H. Gurbuz, M. Caliskan, O. Ozgec, “ *Semi-empirical potentials for  $CuI$*  ”, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials Vol.7, No.4, P.2059 (2005).
- [16] M. Caliskan, S. Senturk Dalgic, “ *Molecular Structure of Monomeric Cadmium-Dihalides,  $CdCl_2$ ,  $CdBr_2$ ,  $CdF_2$ ,  $CdI_2$*  ”, IX. Ulusal Sıvıhal Fiziği Sempozyumu, 22–25 Eylül 2005, İstanbul Üniversitesi Baltalimanı Tesisleri İstanbul (2005).
- [17] M. Caliskan, S. Senturk Dalgic, “ *Equilibrium Structure of Manganese Trifluoride ( $MnF_3$ ) Molecule* ”, TFD 22. Fizik Kongresi , 14 – 17 Eylül 2004 , Bodrum Türkiye (2004) .
- [18] H. Gurbuz, M. Caliskan, S. Senturk Dalgic, “ *The Static and Molecular Structure of Barium Dibromide: A Theoretical Study* ” TFD 22 . Fizik Kongresi , 14–17 Eylül 2004 , Bodrum Türkiye (2004) .
- [19] M. Caliskan, Y. Ozguven, S. Dalgic, S.Senturk Dalgic, “ *Üçlü Halojen Nadir Toprak Metal Tuzlarının Denge Yapısı* ”, TFD 22 . Fizik Kongresi , 14 – 17 Eylül 2004, Bodrum Türkiye (2004) .
- [20] M. Caliskan, S. Senturk Dalgic, “ *Equilibrium Struture of Monomeric and Dimeric Gold Trifluoride* ”, TFD 23 . Uluslararası Fizik Kongresi , 13 – 16 Eylül 2005, Muğla Üniversitesi , Muğla Türkiye (2005) .
- [21] S. Senturk Dalgic, M. Caliskan, C. Canan, “ *Molecular Structure and Interaction Potential of  $P_2Se$*  ”, ISNOG 2008 , Fransa (2008) .
- [22] V.G. Solomonik, V.V. Sliznev, and S.V. Smorodin, “ *Molecular Structures, Force Fields, and Vibrational Spectra of Aluminum and Gallium Di- and Trifluorides: Nonempirical MO LCAO SCF Study* ”, Zh. Fiz. Khim. (Russ. J. Phys. Chem.) 70 (4), 705-709 (1996).
- [23] I. R. Beattie, J. R. J. Horder, “ *Gas-phase Raman spectroscopy of the trihalides of aluminium, gallium, and indium. The Raman spectra of solid and liquid indium trichloride and tribromide* ”, Chem.Soc.A 2655 (1969).

- [24] C. E. Sjogren, P. Klaeboe, E. Rytter, “ *High temperature infrared spectra of dimeric and monomeric  $AlBr_3$ ,  $AlI_3$  and  $GaCl_3$  in the vapour phase* ”, Spectrochim. Acta **40A**, 457 (1984).
- [25] A. Haaland, A. Hammel, K.-G. Martinsen, J. Tremmel, H. V. J. Volden, “ *Molecular structures of monomeric gallium trichloride, indium trichloride and lead tetrachloride by gas electron diffraction* ”, Chem. Soc. Dalton Trans. 2209 (1992).
- [26] I. R. Beattie, J. R. Horder, “ *Gas-phase Raman Spectra of Some Dihalides of Zinc and Mercury, of  $GaCl_2$  and of  $GaCl_2Br$  and  $GaBr_2Cl$*  ”, J. Chem. Soc. A, 2433 (1970).
- [27] Brian J. Duke, Tracy P. Hamilton, and Henry F. Schaefer III , “ *Chlorogallanes ( $GaClH_2$ ,  $GaCl_2H$ , and  $GaCl_3$ ) and Their Dimer Isomers* ”, Inorg. Chem. **30**, 4225 (1991).
- [28] A. D. Alvarenga, M.-L. Saboungi, L. A. Curtiss, M. Grimsditch and L. E. McNeil, “ *Structure and dynamics of molten aluminium and gallium trihalides. II: Raman spectroscopy and ab-initio calculations* ” Mol. Phys. **81**, 409 (1994).
- [29] M.-L. Saboungi, M. A. Howe, D. L. Price, “ *Structure and dynamics of molten aluminium and gallium trihalides I. Neutron diffraction* ”, Mol. Phys. **79**, 847 (1993).
- [30] [www.kimyaevi.org](http://www.kimyaevi.org)

## ÖZGEÇMİŞ

1985 yılında Yalova'da doğdum. 2002 yılı Medine Tayfur SÖKMEN Lisesi mezunuyum. 2008 yılında Uludağ Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünden mezun oldum. 2009 yılından beri Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Bölümü Atom ve Molekül Fiziği anabilim dalında yüksek lisans yapmaktayım.