

# Eski Kuantum Kuramının Doğuşu

Klasik fizik ile açıklanamayan deneysel sonuçları açıklanabilmesi için görelilik kuramı<sup>1</sup> ve kuantum kuramı adı verilen iki ana daldan oluşan modern fizik ortaya çıkmıştır. Kuantum mekaniği de denilen kuantum kuramının kimyaya uygulanmasıyla ortaya çıkan yeni bilim dalına *kuantum kimyası* adı verilmiştir.

## Planck Kuantum Kavramı

Alman fizikçi Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858-1947) 1901 yılında üzülmeye de olsa yüzyıllardır kullanılan klasik fiziğe ihanet ederek enerjinin her sistemde sürekli olarak alınıp verilemeyeceğini düşünmüştür. Bazı sistemlerde enerjinin kesikli olarak alınıp verilebileceğini ileri süren Planck belli büyüklükteki bu kesikli enerjilere *enerji paketi* anlamına gelen *kuantum* adını vermiştir.

Siyah cisimdeki atomların titreşimleri sırasında da kuantumlar halinde enerji yayıldığını ileri süren Planck bir kuantumun taşıdığı enerji için

$$E = h\nu$$

Bağıntısını vermiştir. Buradaki  $\nu$  titreşim hareketinin frekansı,  $h$  ise *Planck sabiti* adı verilen ve değeri  $6,626196 \times 10^{-34} Js$  olan bir evrensel sabiti göstermektedir.

## Bohr Teorisi

Danimarkalı fizikçi Niels Henrik David Bohr (1885-1962) hidrojen atomu spektrumlarını açıklamak için Rutherford'un çekirdekli atom modeli üzerine 1913 yılında bir atom modeli ileri sürmüştür. Bu modele göre, hidrojen atomu çekirdekteki bir proton ve bu proton etrafında dönmekte olan bir elektrondan oluşmaktadır.

Bu modele dayanarak Bohr tarafından ileri sürülen varsayımlar sırayla aşağıdaki gibidir.

- *Varsayım 1:* Elektron çekirdek etrafındaki bazı kararlı dairesel yörüngelerde sabit hızla dönmektedir. Dönme sırasında  $e^-$  nun sahip olduğu merkez kaç kuvveti ile buna zıt yönde çekirdeğin  $e^-$  a uyguladığı Coulomb çekme kuvveti birbirine eşittir.

---

<sup>1</sup> Atom içerisindeki değerlik elektronlarının hızı ışık hızına göre çok düşük olduğundan görelilik kuramının kimyadaki işlevi önemsizdir.

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

- *Varsayım 2:* Elektronun açısal momentumu kuantumludur ve baş kuantum sayısı adı verilen  $n$  bir tam sayı olmak üzere yalnızca aşağıdaki değerleri alabilir.

$$L = p r = m v r = n \left( \frac{h}{2\pi} \right) = n \hbar$$

- *Varsayım 3:* Balmer-Rydberg-Ritz bağıntısından hesaplanan frekanslar  $e^-$  nun kararlı iki dairesel yörünge arasındaki geçişlerinden kaynaklanmaktadır. Kararlı yörüngeler arasındaki enerji farkı aşağıdaki şekilde bir kuantuma eşittir.

$$E_2 - E_1 = h\nu$$

Bohr varsayımlarındaki eşitliklerden yola çıkılarak hidrojen atomu ve benzeri iyonların olası kararlı dairesel elektron yörüngelerinin yarıçapı, elektronun hızı, periyodu ve enerjisi ile Balmer-Rydberg-Ritz bağıntısı için sırayla aşağıdaki eşitlikler bulunur.

$$r = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} \frac{n^2}{Z} = (5,292 \times 10^{-11} \text{ m}) \frac{n^2}{Z}$$

$$v = \frac{e^2}{2\epsilon_0 h} \frac{Z}{n} = \left( 2,188 \times 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} \right) \frac{Z}{n}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v} = \frac{4 h^3 \epsilon_0^2}{m e^4} \frac{n^3}{Z} = (1,520 \times 10^{-16} \text{ s}) \frac{n^3}{Z^2}$$

$$E = T + V = \frac{1}{2} m v^2 - \int_r^\infty F dr$$

$$= \frac{1}{2} \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \int_r^\infty \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} dr = - (2,180 \times 10^{-18} \text{ J}) \frac{Z^2}{n^2}$$

$$\bar{v} = Z^2 R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Bu eşitliklerden de görüldüğü gibi  $r$ ,  $v$ ,  $T$ ,  $E$  ve  $\bar{v}$  nicelikleri kuantumludur.

Hidrojen atomunda ( $Z = 1$ ) elektronun en düşük enerjili yörüngesinin ( $n = 1$ ) yarıçapı **Bohr yarıçapı** olarak alınır. Bohr yarıçapı  $a_0$  şeklinde gösterilir ve aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$r_1 \equiv a_0 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} = 5,292 \times 10^{-11} \text{ m}$$

Bohr atom modeli ile hidrojen atomu ve benzeri iyonların spektrumları açıklanabilirken iki ve daha çok elektronlu atomlara uygulanamaz.

Bohr atom modeli spektrum çizgilerinin yarılmasını açıklamada da yetersiz kalmaktadır.

Çok elektronlu atomların spektrumlarındaki çizgilerin elektrik alanı, magnetik alan ve yönlü magnetik alandaki kayma ya da yarılması

*yan kuantum sayısı*,  $l$  (orbital açısal momentum sayısı)

*orbital magnetik kuantum sayısı*,  $m_l$

ve *spin magnetik kuantum sayısı*,  $m_s$

kavramlarının ortaya çıkmasına neden olmuştur.

Baş kuantum sayısının gösterdiği elektron tabakaları içindeki orbital grupları  $l$ , orbitaller  $m_l$  ve orbitallerdeki elektronlar ise  $m_s$  ile karakterize edilir.

## Wilson-Sommerfeld Kuantumlama Kuralı

Birbirinden bağımsız olarak Wilson ve Alman fizikçi Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld (1868-1951) hidrojen atomu ve helyum iyonuna ilişkin spektrum çizgilerinin yarılmasını açıklayabilmek için 1915 yılında bir kuantumlama kuralı ileri sürmüşlerdir.

**Wilson- Sommerfeld kuantumlama kuralı** Bohr'un ikinci varsayımının genelleştirilmiş bir halidir. Buna göre periyodik hareket eden partiküller için aşağıdaki koşulun sağlanması öngörülmektedir.

$$\oint p_j dq_j = n_j h$$

$$j = 1, 2, \dots, 3N - k \quad \text{ve} \quad n_j = \text{tam sayı}$$