

# Hidrojen Molekülü: VB Kuramı ile Çözümü

Hidrojen çekirdekleri a ve elektronlar b ise 1 ve 2 ile simgelenerek hidrojen molekülü ders kitabında Şekil 9.22.1 de şematik olarak gösterilmektedir.

Hidrojen molekülü için Born-Oppenheimer yaklaşımından önce ve sonraki Hamiltonien operatörleri sırayla aşağıdaki gibi yazılır.

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}(\nabla_a^2 + \nabla_b^2) - \frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( -\frac{1}{r_{1a}} - \frac{1}{r_{1b}} - \frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{2b}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R} \right)$$

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( -\frac{1}{r_{1a}} - \frac{1}{r_{1b}} - \frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{2b}} + \frac{1}{r_{12}} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R}$$

Bağa katılan her iki elektronun her iki protona göre ayrı ayrı yazılan temel haldeki dalga fonksiyonları arasındaki olası çarpımların lineer kombinasyonu hidrojen molekülünün VB yöntem ile çözümü için *deneme fonksiyonu* olarak alınmaktadır.

Hidrojen molekülünün olası rezonans hallerine bakılarak deneme fonksiyonu aşağıdaki şekilde yazılır.

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$$

$$\Psi = c_1 1S_a(1) 1S_b(2) + c_2 1S_a(2) 1S_b(1)$$

$$\Psi = c_1 (\pi^{-1/2} a_0^{-3/2} e^{-r_{1a}/a_0}) (\pi^{-1/2} a_0^{-3/2} e^{-r_{2b}/a_0}) \\ + c_2 (\pi^{-1/2} a_0^{-3/2} e^{-r_{2a}/a_0}) (\pi^{-1/2} a_0^{-3/2} e^{-r_{1b}/a_0})$$

Son olarak

$$\Psi = c_1 (\pi^{-1} a_0^{-3} e^{-(r_{1a}+r_{2b})/a_0}) + c_2 (\pi^{-1} a_0^{-3} e^{-(r_{2a}+r_{1b})/a_0})$$

Born-Oppenheimer yaklaşımından sonra ele geçen Hamiltonian operatörü ve değerlik bağ kuramına göre seçilen dalga fonksiyonu

$$E = \frac{\int \Psi^* \mathcal{H} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau}$$

Eşitliğinde yerine yazılır. Sabit tutulan her R değeri için hidrojen atomunun özdeğer denkleminde de yararlanılarak hidrojen molekülü varyasyon yöntem ile çözülür.

Çözüm sonucunda bulunan enerji özdeğerleri

$$E_g \equiv E_+ = 2E_H + \frac{J + K}{1 + S^2}$$

$$E_u \equiv E_- = 2E_H + \frac{J - K}{1 - S^2}$$

ve bu öz değerlere karşılık gelen özfonksiyonlar

$$\Psi_g \equiv \Psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2(1 + S^2)}} (\Psi_1 + \Psi_2)$$

$$\Psi_u \equiv \Psi_- = \frac{1}{\sqrt{2(1 - S^2)}} (\Psi_1 - \Psi_2)$$

yukarıda görüldüğü gibidir.

Burada,

$\Psi_g \equiv \Psi_+$  çift özfonksiyonları,

$\Psi_u \equiv \Psi_-$  tek özfonksiyonları,

$E_g \equiv E_+$  çift özdeğerleri,

$E_u \equiv E_-$  tek özdeğerleri,

$E_H$  hidrojen atomunun temel halinin enerjisini,

$S$  girişim oranını,

$J$  Coulomb enerjisini,

$K$  ise rezonans enerjisi de denilen değişim enerjisini,

göstermektedir.