

# **FZM 306: Kuantum Mekanikii II**

## **13. HAFTA**

**Deniz Yılmaz**

# KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken ařağıdaki kaynak kullanılmıřtır:

**Kuantum Mekanii ve Atom Fizięi Ders Notları**

**Z. Zekeriya AYDIN**

**Ankara Üniversitesi**

# ÇOK ELEKTRONLU ATOMLAR

Bu bölümde iki veya daha fazla elektronlu atomları ele alacağız. Bu atomların ince-yapılarını inceleyip elektromanyetik ışınım ile etkileşmelerini inceleyeceğiz.

Çok elektronlu atomların elektron yapıları iki temel kural ile belirlenir:

- 1) Çok parçacıklı bir sistem, toplam enerjisi **minimum** olduğu zaman kararlıdır.
- 2) Pauli ilkesi: Elektronlar  $\frac{1}{2}$  spinli (yani fermiyon) olduklarından, atomun her kuantum durumunda ancak ve ancak bir elektron bulunabilir. Aynı durumda iki elektron bulunamaz.

Bu iki kurala uyarak,  $Ze$  yüklü bir çekirdeğin etrafına elektronlar en düşük enerji düzeyinden başlanarak yerleştirilir:

$n=1$  düzeyine  $\ell = 0$ ,  $m_s = 1/2$  ve  $m_s = -1/2$  olmak üzere 2 elektron konulur. Bu yerleşim  $1s^2$  ile gösterilir.

Üçüncü elektron  $+Ze$  yüklü çekirdeğin  $n=2$  düzeyine girecektir:

$n=2$  düzeyine  $\ell = 0$ ,  $m_s = \pm 1/2$  olmak üzere 2 elektron konulur. Bu yerleşim  $2s^2$  ile gösterilir.

Yine,  $n=2$  düzeyine  $\ell = 1$ ,  $m_l = +1, 0, -1$  ve  $m_s = \pm 1/2$  olmak üzere 6 elektron konulur. Bu yerleşim  $2p^6$  ile gösterilir.

Böylece  $n=2$  düzeyindeki 8 yer dolmuş olacaktır. Benzer şekilde  $n=3$  kabuğunda da 18 elektron yerleştirilebilir. Bu şekilde  $Z$  tane elektronu yerleştirince nötral atomumuz kurulmuş olur.

$n=1, 2, 3, 4, 5 \dots$  kabuklarına sırasıyla K, L, M, N, Q kabukları denir.

# Çok Elektronlu Atomlar İçin Schrödinger Denklemi

Çok elektronlu atomları incelemek için *merkezcil alan yaklaşımı* kullanılır. Bu yaklaşımdaki temel düşünce, her atomik elektronun çekirdek ve geri kalan elektronların oluşturdukları etkin bir küresel simetrik  $V(r)$  potansiyeli içinde hareket ettiklerini varsaymaktır. Burada oldukça nitel bir inceleme yapılacaktır.

Schrödinger denkleminde gözönüne alacağımız etkiler:

- 1) Noktasal çekirdeğin Coulomb alanında elektronların kinetik ve potansiyel enerjileri,
- 2) Elektronlar arasındaki elektrostatik (Coulomb) itmeleri,
- 3) Elektronların spinlerinin yörüngesel hareketlerle olan manyetik etkileşimleri (spin-yörünge etkileşimleri)

3. maddedeki spin-yörünge etkileşmeleri pertürbasyon olarak ele alınır. 1. ve 2. maddedeki etkileşmelerin ele alınması halinde, bu sistemin Hamiltoniyeni aşağıdaki gibi yazılır:

$$H = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{e^2}{|r_i - r_j|} ; (i < j)$$

N elektronlu sistemin dalga fonksiyonu  $\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2; \dots; \mathbf{r}_N, \sigma_N)$  olmak üzere, Schrödinger denklemi:

$$\left( \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \right) \Psi(r_1, \sigma_1; \dots; r_N, \sigma_N) = E \Psi(r_1, \sigma_1; \dots; r_N, \sigma_N)$$

biçimindedir. Hamiltoniyen  $(\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ ,  $(\mathbf{r}_j, \sigma_j)$  çiftlerinin değiş-tokuşu altında **simetriktir**; dalga fonksiyonu ise Pauli ilkesi uyarınca tamamen **antisimetrik** olmalıdır.

# İki Elektronlu Atomlar

Çekirdeğin durgun sayıldığı iki elektronlu sistemin Schrödinger denklemi,  $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  olmak üzere

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \Psi(r_1, r_2) = E \Psi(r_1, r_2)$$

şeklindedir. İki elektronun yeri değiştirilirse,  $\Psi(r_2, r_1)$  de aynı denklemi sağlar. Dolayısıyla bu denklemin iki bağımsız çözümü olarak, bu iki çözümün

$$\Psi_+(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(r_1, r_2) + \Psi(r_2, r_1)] \quad \Psi_-(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(r_1, r_2) - \Psi(r_2, r_1)]$$

şeklinde çizgisel karışımları da alınabilir. Bunlara uzay koordinatlarının yerdeğiştirmesine göre **simetrik** ve **antisimetrik** dalga fonksiyonları denir.

Spini de dahil ettiğimizde iki elektronlu sistemin tam dalga fonksiyonu

$$\Psi(r_1, r_2) = \psi(r_1, r_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2)$$

olarak yazılabilir.  $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$  spin dalga fonksiyonları 1. ve 2. elektronun  $\chi_1(\sigma_1)$  ve  $\chi_2(\sigma_2)$  dalga fonksiyonları cinsinden kurulabilir. Her iki elektronun açısal momentum işlemcileri de  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $S_{1z}$  ve  $S_{2z}$  ile gösterilir.

$$S_1^2 \chi_1(\sigma_1) = S_1(S_1+1) \hbar^2 \chi_1(\sigma_1) \quad S_{1z} \chi_1(\sigma_1) = \sigma_1 \hbar \chi_1(\sigma_1)$$

$$S_2^2 \chi_2(\sigma_2) = S_2(S_2+1) \hbar^2 \chi_2(\sigma_2) \quad S_{2z} \chi_2(\sigma_2) = \sigma_2 \hbar \chi_2(\sigma_2)$$

Elektronun spini  $\frac{1}{2}$  olduğundan  $S_{1,2} = \frac{1}{2}$  olup  $\sigma_{1,2} = \pm \frac{1}{2}$  değerlerini alabilir.



İki elektronlu sistemin toplam spini

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$$

olarak tanımlanır.  $\mathbf{S}^2$ ' nin özdeğerleri  $S(S+1)\hbar^2$  olup  $S$  kuantum sayısı  $S_1+S_2$  ' den  $|S_1-S_2|$  ' ye kadar birer atlayarak değer alır. Buna göre  $S=1$  ve  $S=0$  değerleri olasıdır.

$S=1$  : spin üçlüsü (spin triplet),  $M=+1, 0, -1$  değerlerini alır.

$S=0$  : spin birlisi (spin singlet)

Bunları  $\chi_1(\sigma_1)$  ve  $\chi_2(\sigma_2)$  ' lerin çarpımları cinsinden aşağıdaki gibi kurarız:

$$\chi(1, M) = \left\{ \begin{array}{c} \chi_1(1/2)\chi_2(1/2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1(1/2)\chi_2(-1/2) + \chi_1(-1/2)\chi_2(1/2)) \\ \chi_1(-1/2)\chi_2(-1/2) \end{array} \right\} \quad \text{SİMETRİK}$$

$$\chi(0,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1(1/2)\chi_2(-1/2) - \chi_1(-1/2)\chi_2(1/2)) \quad \text{ANTİSİMETRİK}$$

Dolayısıyla uzaysal dalga fonksiyonu simetrik ise spin dalga fonksiyonu antisimetrik, ya da uzaysal dalga fonksiyonu antisimetrik ise spin dalga fonksiyonu simetrik olmalıdır:

$$\psi_+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)\chi^{(A)}(0,0) \quad \text{PARA durumlar}$$

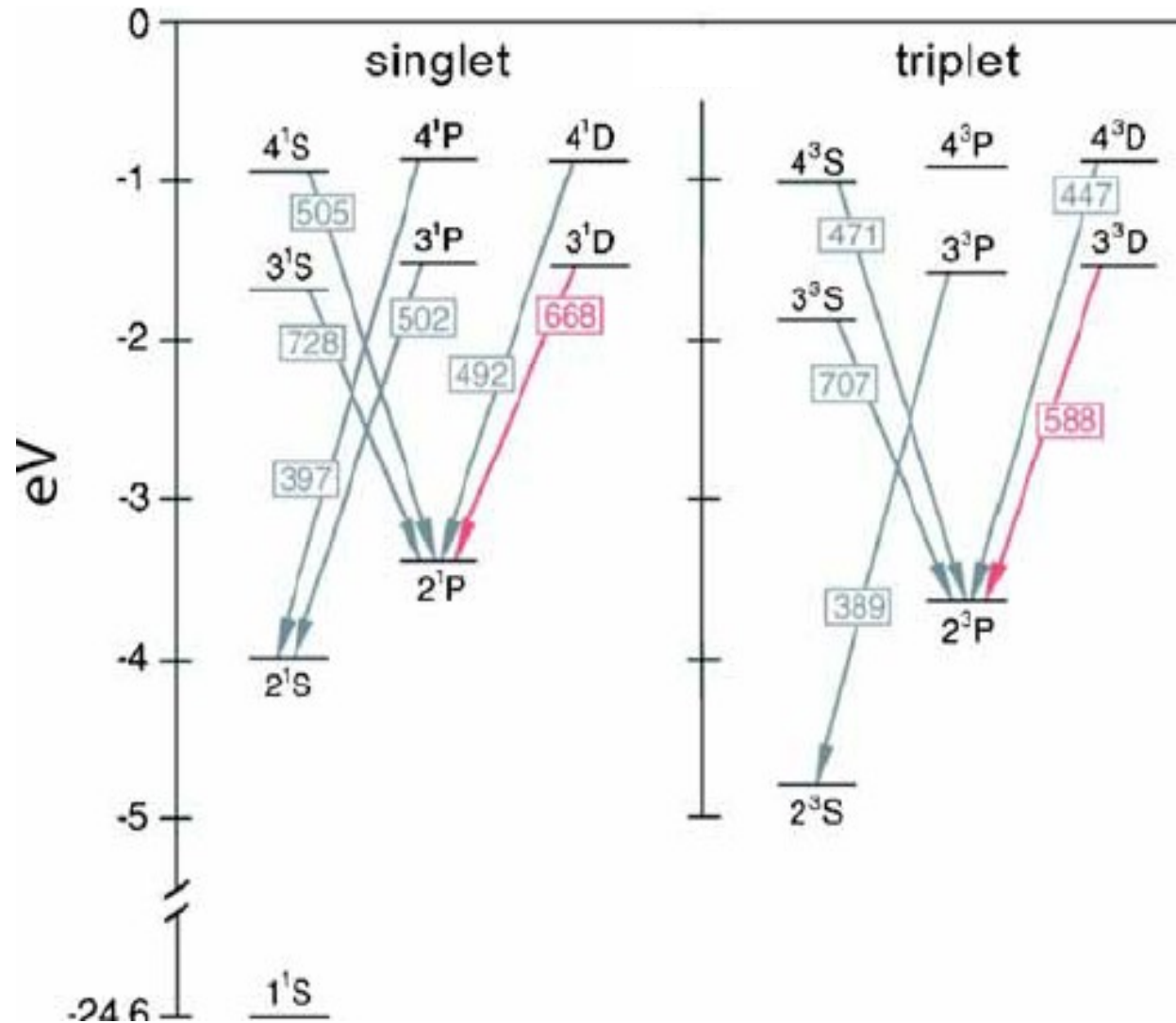
$$\psi_-(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)\chi^{(S)}(1,1) \quad \text{ORTO durumlar}$$

Elektronların yörüngesel açısal momentumları  $\mathbf{L}_1$  ve  $\mathbf{L}_2$ ; spinleri  $\mathbf{S}_1$  ve  $\mathbf{S}_2$  olmak üzere  $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$  ve  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$  ' dir ve özdeğerleri sırasıyla  $L(L+1)\hbar^2$  ve  $S(S+1)\hbar^2$  ' dir. Russel-Saunders gösteriminde  $L$  ' nin aldığı her değere bir kod harfi verilmiştir:

$$\begin{array}{cccccc} L= 0, & 1, & 2, & 3, & 4, & 5, & \dots \\ & S, & P, & D, & F, & G, & H, & \dots \end{array} \quad (2S+1)(L)_J$$

$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  olmak üzere özdeğeri  $J(J+1)\hbar^2$  ' dir.

# Helyum atomunun para ve orto durumları



# Helyum atomunun tüm enerji düzeyleri

