

FZM 306: Kuantum Mekanikii II

14. HAFTA

Deniz Yılmaz

KAYNAKLAR

Bu ders sunumu hazırlanırken ařağıdaki kaynak kullanılmıřtır:

Kuantum Mekanii ve Atom Fiziđi Ders Notları

Z. Zekeriya AYDIN

Ankara Üniversitesi

Merkezcil Coulomb Alanında Elektron Yerleşimleri

Aynı n ' ye sahip elektronlar bir kabuk oluştururlar ve bu kabuklara $n=1, 2, 3, 4, \dots$ için sırasıyla K, L, M, N, ... gibi adlar verilir.

Aynı n ve ℓ ' ye sahip elektronlar bir ise bir alt-kabuk oluştururlar. Her alt kabuk bir (n, ℓ) sayı çiftiyle adlandırılır. ℓ ' nin değeri bir küçük harfle gösterilir: $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ için sırasıyla s, p, d, f, g, h, ...

(n, ℓ) alt-kabuğunda bulunan elektronların sayısı ℓ ' yi temsil eden harfin üzerine üst olarak yazılır: $1s^2, 2p^3, 3d^{10}$ gibi.

K kabuğu sadece bir alt-kabuk (s alt-kabuğu) içerir; L kabuğu iki alt-kabuk (s ve p alt-kabukları) içerir; M kabuğu üç alt-kabuk (s, p ve d alt-kabukları) içerir.

s alt-kabukları en çok 2 elektron, p alt-kabukları en çok 6 elektron, d alt-kabukları en çok 10 elektron, f alt-kabukları en çok 14 elektron yerleştirilebilir.

n' yinci kabuktaki elektron sayısı:

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 4 \sum_{l=0}^{n-1} l + 2n = 2n^2$$

dir. Alabileceği en fazla sayıda elektron yerleştirilmiş bir alt-kabuğa **dolu** ya da **kapalı alt-kabuk** denir.

Her kapalı alt-kabuktaki elektronların yörüngesel açısal momentumlarının ve ayrıca spinlerinin toplamı sıfırdır.

$$L = \sum_{\text{alt-kabuk}} L_i = 0$$

$$S = \sum_{\text{alt-kabuk}} S_i = 0$$

Alt-Kabukların enerjilerinin sıralanışı

Kuantum sayıları n, ℓ	Alt-kabuk gösterimi	Maksimum elektron sayısı= $2(2\ell+1)$
6 2	6d	10
5 3	5f	14
7 0	7s	2
6 1	6p	6
5 2	5d	10
4 3	4f	14
6 0	6s	2
5 1	5p	6
4 2	4d	10
5 0	5s	2
4 1	4p	6
3 2	3d	10
4 0	4s	2
3 1	3p	6
3 0	3s	2
2 1	2p	6
2 0	2s	2
1 0	1s	2

Elementlerin Periyodik Cetveli

Hidrojen Atomu: $Z=1$ olup, bir elektrona sahiptir. Taban durum yerleşimi $1s$, iyonlaşma enerjisi 13.6 eV ve terim gösterimi $^2S_{1/2}$ dir.

Helyum Atomu: $Z=2$ olup, iki elektrona sahiptir. Taban durum yerleşimi $1s^2$, iyonlaşma enerjisi 24.6 eV ve terim gösterimi 1S_0 dir.

Lityum Atomu: $Z=3$ olup, üç elektrona sahiptir. Taban durum yerleşimi $1s^2 2s^1$ 'dir, iyonlaşma enerjisi 5.4 eV kadardır ve terim gösterimi $^2S_{1/2}$ dir.

Berilyum Atomu: $Z=4$ olup, dört elektrona sahiptir. Taban durum yerleşimi $1s^2 2s^2$ 'dir ve terim gösterimi 1S_0 dir.

Berilyum' dan sonra gelen B, C, N, O ve F atomlarının elektronik yerleşimleri $1s^2 2s^2 2p^x$ şeklindedir. Diğer atomlar da benzer şekilde taban durumlarına yerleştirilir ve terim gösterimleri bulunur.

Elementlerin Periyodik Cetveli

Z	Element	Elektron Yerleşimi	Terim	İyonlaşma Pot. (eV)
1	H	(1s)	$^2S_{1/2}$	13.6
2	He	(1s) ²	1S_0	24.6
3	Li	(He) (2s)	$^2S_{1/2}$	5.4
4	Be	(He) (2s) ²	1S_0	9.3
5	B	(He) (2s) ² (2p)	$^2P_{1/2}$	8.3
6	C	(He) (2s) ² (2p) ²	3P_0	11.3
7	N	(He) (2s) 2 (2p) ³	$^4S_{3/2}$	14.5
8	O	(He) (2s) ² (2p) ⁴	3P_2	13.6
9	F	(He) (2s) ² (2p) ⁵	$^2P_{3/2}$	17.4
10	Ne	(He) (2s) ² (2p) ⁶	1S_0	21.6
11	Na	(Ne) (3s)	$^2S_{1/2}$	5.1
12	Mg	(Ne) (3s) ²	1S_0	7.6
13	Al	(Ne) (3s) ² (3p)	$^2P_{1/2}$	6.0
14	Si	(Ne) (3s) ² (3p) ²	3P_0	8.1
15	P	(Ne) (3s) ² (3p) ³	$^4S_{3/2}$	11.0
16	S	(Ne) (3s) ² (3p) ⁴	3P_2	10.4
17	Cl	(Ne) (3s) ² (3p) ⁵	$^2P_{3/2}$	13.0
18	Ar	(Ne) (3s) ² (3p) ⁶	1S_0	15.8
19	K	(Ar) (4s)	$^2S_{1/2}$	4.3
20	Ca	(Ar) (4s) ²	1S_0	6.1
21	Sc	(Ar) (4s) ² (3d)	$^2D_{3/2}$	6.5
22	Ti	(Ar) (4s) ² (3d) ²	3F_2	6.8
23	V	(Ar) (4s) ² (3d) ³	$^4F_{3/2}$	6.7
24	Cr	(Ar) (4s) (3d) ⁵	7S_2	6.8
25	Mn	(Ar) (4s) ² (3d) ⁵	$^6S_{3/2}$	7.4
26	Fe	(Ar) (4s) ² (3d) ⁶	5D_4	7.9
27	Co	(Ar) (4s) ² (3d) ⁷	$^4F_{9/2}$	7.8
28	Ni	(Ar) (4s) ² (3d) ⁸	3F_4	7.6
29	Cu	(Ar) (4s) (3d) ¹⁰	$^2S_{1/2}$	7.7
30	Zn	(Ar) (4s) ² (3d) ¹⁰	1S_0	9.4

Hund Kuralları

- 1) Verilen bir yerleşim için en büyük S değerine sahip terim en düşük enerjilidir. Diğer terimlerin enerjileri S azaldıkça artar.
- 2) S' nin verilen bir değeri için, en büyük L değerine sahip olan terim en düşük enerjilidir.
- 3) Yarıdan az dolu alt-kabuğa sahip atomlar için en küçük J' li terim en düşük enerjili; yarıdan çok dolu alt-kabuğa sahip atomlar için ise en büyük J' li terim en düşük enerjilidir.

PROBLEMLER

1) Helyumun **a)** $1s2s$ **b)** $2s3s$ ve **c)** $2s2p$ durumlarındaki olası terimlerini çıkarınız.

2) Aşağıdaki elektronik yerleşimlerin olası terimlerini listeleyiniz: $1s^2$, $1s2p$, $2p^2$, $2p^3$, $2p3d$. Gerektiğinde Pauli ilkesini hesaba katınız.

3) Aşağıdaki atomların taban durumlarının yerleşimlerini yazınız ve taban durumu terimlerini Hund kuralı yardımıyla bulunuz: N($Z=7$), Al($Z=13$), Si($Z=14$), Sc($Z=21$).