

ATOM SPEKTRUMLARI-2

Çok Elektronlu Sistemlerin Atom Spektrumu

Amaç

Helyum ve Civa'nın spektral çizgilerinin kırınım yoluyla incelenmesi. Spektrum çizgilerine karşı gelen dalga boylarının sistemin geometrisinden yararlanarak bulunması.

Deneye Hazırlık Bilgileri

Atom Spektrumları-1 deneyinde tek elektronlu bir atom olan H atomunun spektrumu incelendi. Deneyin bu kısmında ise çok elektronlu sistemlerden Helyum (He) ve Civa (Hg) atomlarını inceleyeceğiz. He ve Hg atomları elektronlarla çarpıştırılarak uyarılırlar. Elektron E_1 enerjili uyarılmış durumdan E_0 enerjili taban durumuna geri dönerken, enerji düzeyleri arasındaki enerji farkına eşit enerjili ν frekanslı foton yayılır

$$h\nu = E_1 - E_0. \quad (1)$$

Burada $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Js Planck sabitidir.

Helyum atomu, $Z=2$ olmak üzere Ze yüklü çekirdeğin Coulomb alanında hareket eden (özdeş) iki elektrondan oluşmuş bir üç parçalıklı sistemdir. Çekirdeğin hareketi gözönüne alınmazsa, bu sistem durgun Ze yükünün oluşturduğu alanda hareket eden iki elektronlu (iki özdeş parçalıklı) bir sisteme dönüşür. Eğer çekirdeğin hareketinin etkisi, spin-yörünge etkileşmeleri ve bir elektronun hareketi sonucunda oluşan akımın diğer elektron üzerindeki etkisi ihmal edilirse, He atomu için Hamilton işlemcisi aşağıdaki gibi verilir:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2m} + \frac{\hat{P}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_1|} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (2)$$

Burada m elektronun kütlesi, \vec{r}_1 ve \vec{r}_2 , merkezde olduğu varsayılan çekirdeğe göre 1. ve 2. elektronun konum vektörleri, $\hat{P}_1 = -i\hbar \vec{\nabla}_1$ ve $\hat{P}_2 = -i\hbar \vec{\nabla}_2$ de elektronların momentum işlemcileridir. $-Ze^2/|\vec{r}_i|$ terimi, Ze yüklü çekirdeğin, i . elektrona uyguladığı Coulomb çekmesine ve son terimde elektronlar arası Coulomb itmesine karşı gelen potansiyel enerjilerdir. Denklem (2) ile verilen sisteme karşı gelen Schrödinger denklemi (özdeş denklemi) tam olarak çözülemez, ancak yaklaşık hesap yöntemleri (pertürbasyon vs.) kullanılarak yaklaşık çözümleri bulunabilir.

Elektronlar arasındaki etkileşme terimi ihmal edildiğinde, Denk. (2) ile verilen Hamiltoniyen için özdeş denklemi aşağıdaki gibidir

$$\hat{H}_0 U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2) U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E U(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (3)$$

Burada her iki elektronun Hamiltoniyeni ayrı ayrı düşünülmektedir. $\hat{H}_i = \frac{\hat{P}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i|}$, $i = 1, 2$

Hidrojen atomunun Hamilton işlemcisi ile aynı formadır, ancak burada $Z=2$ olduğu

unutulmamalıdır. Böylece $\hat{H}_1 u_{n_1 l_1 m_1}(\vec{r}_1) = E_1 u_{n_1 l_1 m_1}(\vec{r}_1)$ ve $\hat{H}_2 u_{n_2 l_2 m_2}(\vec{r}_2) = E_2 u_{n_2 l_2 m_2}(\vec{r}_2)$ özdeğer denklemlerinden, Denk. (3)'ün enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları

$$E = E_{n_1 n_2}^{(0)} = -\frac{m e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (4)$$

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = u_{n_1 l_1 m_1}(\vec{r}_1) u_{n_2 l_2 m_2}(\vec{r}_2) \quad (5)$$

olarak bulunur. $u_{n_i l_i m_i}(\vec{r}_i)$, $i=1,2$, H atomunun dalga fonksiyonu olup, $n_i=1,2,3,\dots$ baş kuantum, $l_i=0,1,2,\dots,(n_i-1)$ yörünge kuantum ve $m_i=-l_i,\dots,0,\dots,l_i$ manyetik kuantum sayılarıdır. Görüldüğü gibi bir manyetik kuantum sayısı m_i , herhangi bir l_i değerine karşılık $(2l_i+1)$ değer alır.

Denklem (2) ile verilen sistem iki özdeş parçacık sistemi olduğundan, elektronların değiş-tokuşu altında tamamen antisimetrik bir dalga fonksiyonuna sahip olmalıdır: $\Psi(1,2) = U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(1,2)$. Burada, $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ dalga fonksiyonunun uzaysal koordinatlara bağlı kısmı olup, $\chi(1,2)$ spin koordinatlarına bağlı kısmıdır. $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ tamamen simetrik ya da antisimetrik olabilir. Ancak, $\Psi(1,2)$ 'nin antisimetrikliğini $\chi(1,2)$ belirler. $\chi_{\text{singlet}}(1,2)$, spin singlet (tekli) durumuna karşı gelen antisimetrik özfonksiyondur ve $S=0$, çok katlılık $2S+1=1$ 'dir. Bu durumda elektronların spinleri antiparalel olacak şekilde yönelmişlerdir ve Helyumun bu durumları "para" durumlar (parahelyum durumlar) olarak adlandırılırlar. $\chi_{\text{triplet}}(1,2)$, spin triplet (üçlü) durumları için $S=1$ ve çok katlılık ise $2S+1=3$ 'dür ve simetriktir. Bu durumda elektronların spinleri paralel olarak yönelmiştir. Helyumun bu durumları "orto" durumlar (ortohelyum durumlar) olarak adlandırılır. Örneğin taban durumda ($n_1=1$ ve $n_2=1$), Pauli dışarlama ilkesi nedeniyle elektronlar spin yönelimleri zıt olacak şekilde bulunurlar: $s_1=1/2$, $s_2=-1/2$ ve toplam spin kuantum sayısı $S=0$ 'dır. Karşı gelen dalga fonksiyonu $\Psi_0(1,2) = u_{100}(\vec{r}_1) u_{100}(\vec{r}_2) \chi_{\text{singlet}}(1,2)$ ile verilir. Taban durumunda Pauli dışarlama ilkesinden triplet durumlar gözlenmez. Bu dalga fonksiyonunun, elektronların uzaysal koordinatlarına bağlı kısmı parçacık değiş-tokuşu altında simetrik, fakat spin koordinatlarına bağlı kısmı antisimetrik olduğundan $\Psi_0(1,2)$ antisimetriktir. Karşı gelen taban durum enerjisi ki bu elektronların etkileşme teriminin ihmal edildiği 0. merteye yaklaşıklıkındaki değerdir, Denk. (4)'den bulunur:

$$E_{11}^{(0)} = -\frac{m e^4 Z^2}{4 \epsilon_0^2 h^2} = -108,8 \text{ eV} . \quad (6)$$

Şimdi etkileşme teriminin katkısını da gözönüne alırsak

$$\Delta E_0 = \left\langle \Psi_0(1,2) \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \Psi_0(1,2) \right\rangle \cong 34,4 \text{ eV} \quad (7)$$

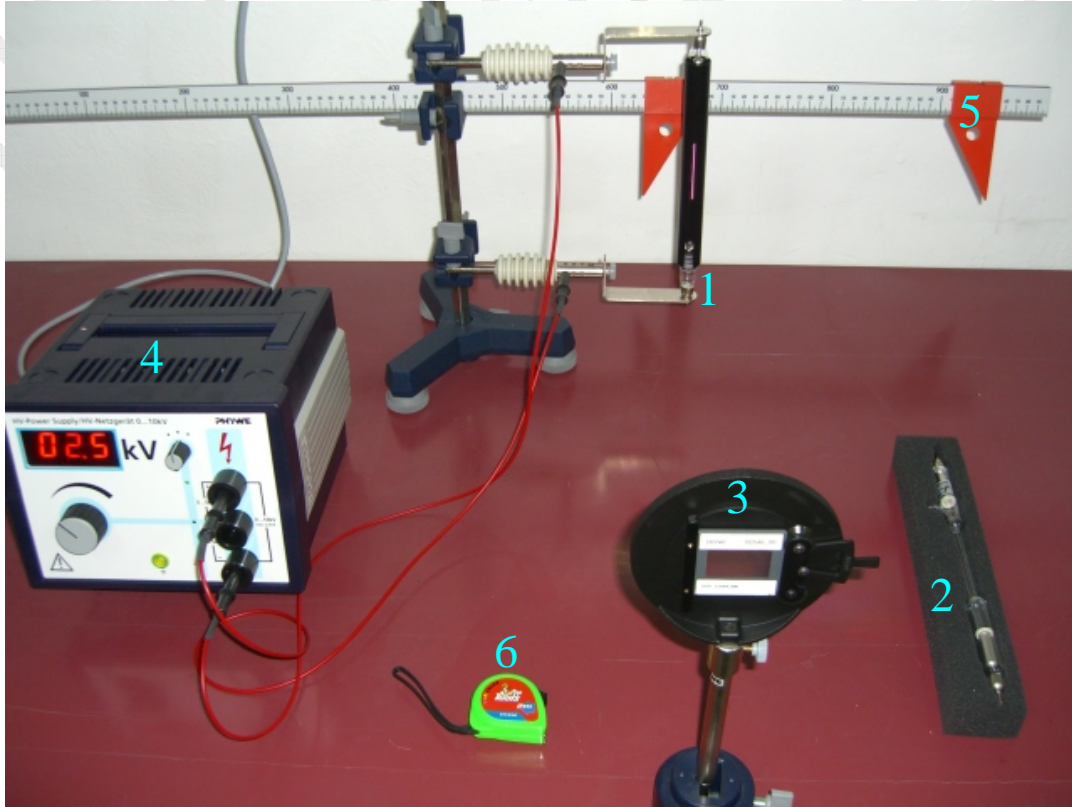
ilk merteye yaklaşıklıkında He'nin taban durum enerjisi $E_{11}^{(1)} = E_{11}^{(0)} + \Delta E_0 \cong -74,8 \text{ eV}$ olarak elde edilir. He için deneysel olarak bulunan taban durum enerjisi $-78,98 \text{ eV}$ 'tur ve burada bulunan teorik değer bu deneysel değerden %6 farklılık göstermektedir. He'nin ilk uyarılma durumu için $n_1=1$, $n_2=2$ olup, ilk uyarılma durumunun enerjisi (0. merteye yaklaşıklıkında) $E_{12}^{(0)} = -68 \text{ eV}$ 'tur. He'nin iyonlaşma enerjisi ise teorik olarak $E_{\text{iyon}} \cong 20,43 \text{ eV}$ 'tur. Bu da deneysel değerden, $E_{\text{iyon}} \cong 24,58 \text{ eV}$, farklıdır.

Burada He'nin elektronlarından biri hep taban durumunda ($1s$ durumu, $l=0$), diğeri de uyarılmış durumda kabul edilir. Elektrik dipol seçim kuralları, $\Delta S=0$, nedeniyle triplet ve singlet durumlar arasında geçiş yoktur. Ayrıca spin-yörünge etkileşmesinden bağımsız olarak toplam açısal momentum, $J=L+S$, için seçim kuralı $\Delta J=0, \pm 1$ 'dir. Eğer spin yörünge etkileşmesi küçük ise (önemsiz ise), $\Delta L=0, \pm 1$ uygulanır.

Helyum atomu için verilen bu teori, He gibi iki elektronlu atomlar, örneğin Hg atomu için de geçerlidir. Bu deneyde He ve Hg'nin spektrumunu daha iyi anlayabilmek için atom spektumlarının dili de bilinmelidir. Şimdi kısaca terim sembollerini gözden geçireceğiz. Terim sembolleri ile bir atomun enerji düzeyleri etiketlenir: $^{2S+1}L_J$. Burada, S toplam spin açısal momentumu, L toplam yörünge açısal momentumu ve J de toplam açısal momentum sayılarıdır ve $(2S+1)$ çok katlılıktır (multiplicity). L toplam yörünge açısal momentumunun aldığı değerlere göre semboller şu şekildedir: $L=0 \rightarrow S$, $L=1 \rightarrow P$, $L=2 \rightarrow D$, $L=3 \rightarrow F$, Örneğin, $S=1, L=1$ için toplam açısal momentum $J=2, 1, 0$ değerlerini alır. Spin çok katlılığı $2S+1=2.1+1=3$ tür ve karşı gelen terim sembolleri $^3P_2, ^3P_1, ^3P_0$ ile verilir.

Deneyde Kullanılacak Araçlar

Bu deneyde, 1 adet Helyum tüpü (1), 1 adet Civa tüpü (2), tüpler için bir çift tutucu, 1 adet koruyucu tüpler için, 2 adet bağlantı kablosu, 1 adet nesne tutucu, 1 adet kırınım ağı (600 çizgi/mm) (3), 1 adet yüksek gerilim güç kaynağı (4), 2 adet yalıtkan destek, 1 adet 3 ayak taban, 1 adet taban kırınım ağı için, 1 adet destek çubuğu (400 mm), 3 adet tutucu, 1 adet cetvel (1 m), 1 çift gösterge (5), 1 adet şerit metre (2m) (6) kullanılacaktır (Bakınız Şekil 2).



Şekil 1 Deney Düzeneği

Deney İçin Ön Hazırlık ve Deneyin Yapılışı

UYARI: Bu deneyde yüksek gerilim kullanıldığından tüplere ve tüp tutuculara gerilim varken dokunmayınız.

Deney düzeneğini Şekil 1'de verilmiştir. Bu deneyde yüksek gerilim güç kaynağına (4) bağlanmış Helyum ve Civa tüpleri (1,2) radyasyon kaynağı olarak kullanılmaktadır. Tüpler, destek çubuğu üzerindeki tutucular yardımıyla yalıtkan destekler arasına yerleştirilir. Tüplere zarar gelmemesi için bu işlemin iki kişi tarafından yapılması önerilir. Güç kaynağı yaklaşık Helyum tüpü için 2.5–3kV'a ve Civa için de 0.3–0.5kV'a ayarlanır. Ölçüm hatalarını azaltmak için metre tüpün hemen arkasına yerleştirilir. Metre ve kırınım ağı (3) arasındaki uzaklık d ile gösterilir ve şerit metre (6) ile ölçülür. Kırınım ağı metreye paralel, tüpten yaklaşık $d = 45\text{cm}$ uzaklıkta ve tüple aynı yükseklikte olmalıdır. Ayrıca, laboratuvar sadece metre görülecek kadar karanlık olmalıdır. Bunun için ölçüm süresince bir masa lambası kullanılır. Kırınım ağından tüpün üzerindeki parlak olan yarığa bakıldığında, ortada bir parlak çizgi ile sağında ve solunda aynı rengin birinci mertebeden spektral çizgileri gözlenir. Aynı renge karşı gelen sağdaki ve soldaki çizgiler arasındaki uzaklık 2ℓ 'dir. Bu uzaklığın yarısı ℓ , metre üzerindeki göstergeler (5) yardımıyla okunur. Göstergelerden biri tüpün merkezine, diğeri de ölçüm yapmak istenilen çizgi ile üst üste gelecek şekilde ayarlanır ve iki gösterge arasındaki uzaklık metreden okunur.

1. Şekil 1'de görüldüğü gibi Helyum (He) tüpünü yerleştiriniz. Kırınım ağını yukarıda anlatıldığı gibi ayarlayınız. $d = 45\text{cm}$ alınız ve bu uzaklığı tüm ölçümler için sabit tutunuz. Daha sonra, ışığı kapatıp masa lambasını açınız.
2. Kırınım ağından, tüpün üzerindeki parlak yarığa başınızı sabit tutarak bakınız. Tüpün sağında ve solunda yarığa göre simetrik olan spektrum çizgilerini göreceksiniz.
3. He için sırasıyla birinci mertebeden mor, mavi, turkuaz, yeşil, sarı ve kırmızı renkler için ℓ uzaklıklarını yukarıda anlatıldığı gibi okuyup Tablo 1'e kaydediniz.
4. Her bir renge karşı gelen $\sin \alpha$, dalga boyu ve enerji değerlerini hesaplayıp Tablo 4'ü doldurunuz. Kırınım ağı sabitini $g = \frac{1}{600}$ mm olarak alınız. Burada $\sin \alpha$ hesaplarken Atom Spektrumları-1 deneyinde Şekil 1 ile verilen kırınımın geometrisini göz önünde bulundurunuz.

Renk	λ_1 (nm)	ℓ (cm)	$\sin \alpha = \frac{\ell}{\sqrt{d^2 + \ell^2}}$	$\lambda_d = g \sin \alpha$ (m)	λ_d (nm)	$\Delta E_d = \frac{hc}{\lambda_d}$ (eV)
Mor $4^3D \rightarrow 2^3P$	445 ± 1					
Mavi $4^3S \rightarrow 2^3P$	470 ± 3					
Turkuaz $4^1D \rightarrow 2^1P$	490 ± 2					
Yeşil $3^1D \rightarrow 2^1P$	501 ± 2					
Sarı $3^3D \rightarrow 2^3P$	586 ± 2					
Kırmızı $3^1D \rightarrow 2^1P$	665 ± 2					

Tablo 1 He'nin spektrumu

5. Bulduğunuz deneysel dalgaboyu değerlerini teorik olanlarla karşılaştırınız ve hata hesabı yapınız. Ayrıca deneysel olarak bulduğunuz ΔE_d 'ler ile teorik olarak bulacağınız enerjileri karşılaştırınız ve sonuçları yorumlayınız. Teorik enerji değerlerini bulurken Denk. (4)'ten yararlanınız ve He'nin elektronlarından birinin hep taban durumunda diğerinin de uyarılmış durumda kabul edildiğini göz önünde bulundurunuz.

6. He tüpü yerine Hg tüpünü yukarıda anlatıldığı yerleştirip 1,2,3 ve 4 nolu adımları takip ediniz. Sonuçlarınızı Tablo 2'e kaydediniz. Daha sonra bulduğunuz deneysel dalgaboyu değerlerini teorik olanlarla karşılaştırınız ve hata hesabı yapınız.

Renk	λ_1 (nm)	ℓ (cm)	$\sin \alpha = \frac{\ell}{\sqrt{d^2 + \ell^2}}$	$\lambda_d = g \sin \alpha$ (m)	λ_d (nm)	$\Delta E_d = \frac{hc}{\lambda_d}$ (eV)
Mavi	437 ± 2					
Açık Yeşil	494 ± 2					
Koyu Yeşil	550 ± 1					
Sarı	581 ± 1					

Tablo 2 Hg'nin spektrumu

Sorular

1. Yaklaşık hesap yöntemlerinden pertüsbasyon yöntemini açıklayınız.
2. He'nin ilk uyarılmış durumu ($n_1 = 1, n_2 = 2$) için birinci mertebe yaklaşıklıkta enerjii hesaplayınız.
3. Burada Hg'nin optik spektrumu gözlemlendi. Hg için $n = 2 \rightarrow n = 1$ geçişi görünür bölgenin dışında bir ışımaya karşı gelir. Civanın spektrumundaki bu çizgiye karşı gelen enerji nasıl bir deney ile ölçülebilir.
4. Pauli dışarılama ilkesi ve Hund kurallarını açıklayınız.