

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Sommerfeld'in Atom Modeli:

- Bu modelde, elektronların dolandığı dairesel ve eliptik yörüngeler söz konusudur. Eliptik yörüngelerin a yarı-büyük eksenleri ve b yarı-küçük eksenleri olmak üzere, Sommerfeld,

$$\frac{a}{b} = \frac{n}{k}$$

bağıntısının varlığını göstermiştir. Burada n: Yörünge kuantum sayısı ve k: Azimutal kuantum sayısıdır.

- $1 \leq k \leq n$, $k=1,2,\dots,n$

dir. Eğer bir yörünge için $n=k$ ise $a/b=1$ olup yörünge **DAİRE** dir. $n > k$ ise yörünge **ELİPS** tir.

- l = yörünge açısal momentum kuantum sayısı olup $l = k-1$ dir. Veya l nin alabileceği değerler,
- $l = 0,1,2,\dots,(n-1)$ dir.

- En küçük yarıçaplı olan (çekirdeğe en yakın) birinci yörüngenin yarıçapı a_1 ;

$$a_1 = \frac{h^2}{4\pi^2 \mu \epsilon^2}$$

- olup, genel olarak yörüngelerin yarı-büyük eksenleri;

- $a = \frac{h^2 n^2}{4\pi^2 \mu \epsilon^2 Z}$ yada $a = a_1 \frac{n^2}{Z}$ dir.

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Yarıküçük eksenleri(eliptik yörünge) ise;

$$b = \frac{h^2 nk}{4\pi^2 \mu \varepsilon^2 z} \quad \text{ya da} \quad b = a_1 \frac{nk}{z}$$

- dir.Burada h:Planck sabiti , ε = elektronun yükü ,

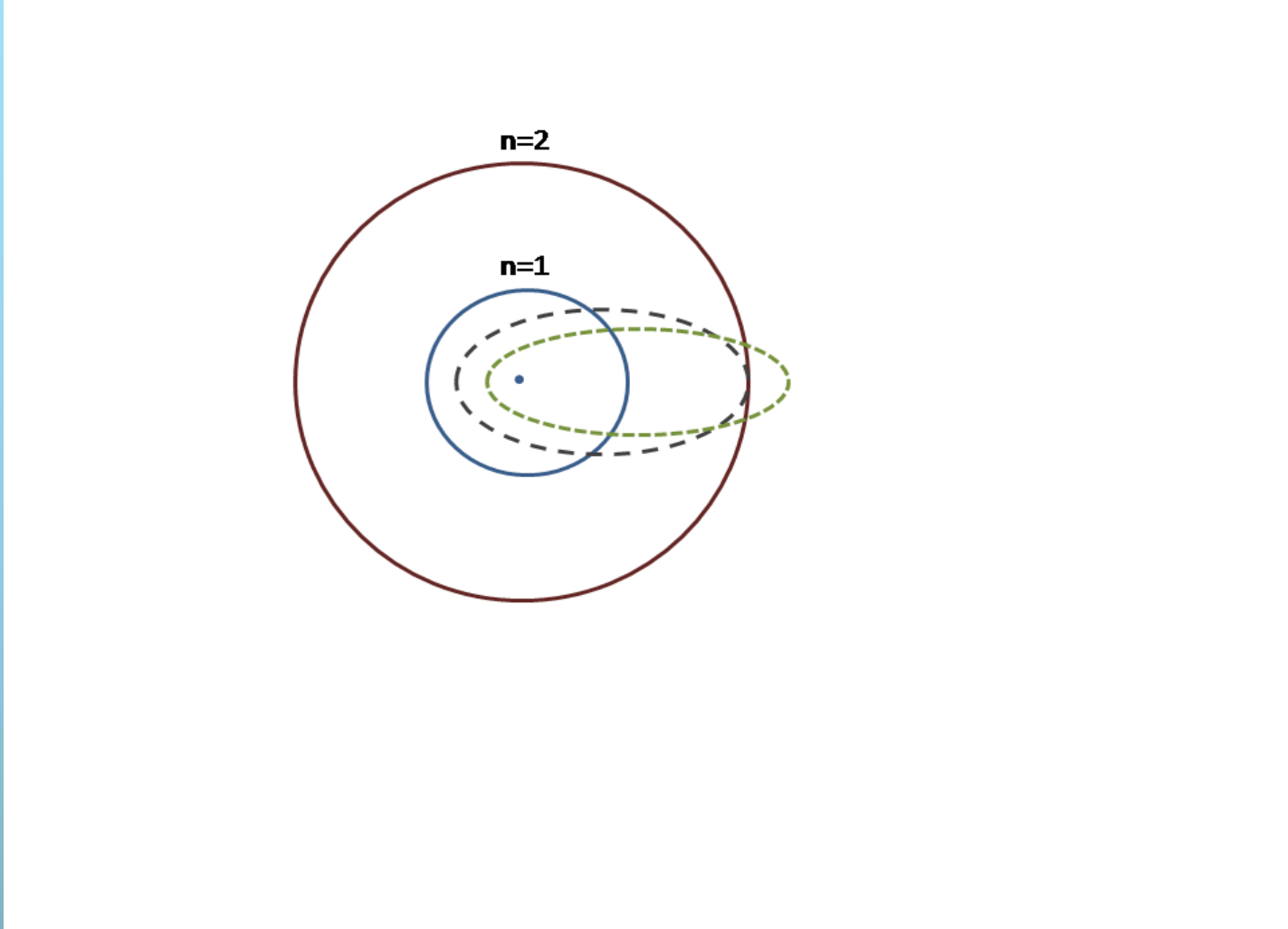
$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} : \text{indirgenmiş elektron kütlesi'dir.}$$

- Bu bağıntılardan görüleceği gibi hidrojen için (HI) elektronun yörüngesi daire olup Bohr yörüngesi ile özdeştir. $n = 1, k = 1: a/b = 1$
- Fakat 2. ve ondan sonraki yörüngelerde Bohr modeli ile farklılıklar vardır.Bu ilkeden de (modele göre) elektronun farklı yörüngelerde dolanma(bulunma) olasılığı ortaya çıkmaktadır.Yörüngeye ilişkin erke durumları ise;

- n ci yörünge'nin erkesi;
$$w_n = -\frac{2\pi^2 \mu z^2 \varepsilon^4}{h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

- idi.Buradan görüleceği üzere, yörüngelerin dairesel ya da eliptik olmaları erke değişiminde etkin olmamaktadır.Erke, n yörünge baş kuantum sayısına bağlıdır.Aynı n ye sahip dairesel ve eliptik yörüngelerde erke farklı değildir. (Bakınız şekil 42)

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)



Şekil 42. Sommerfeld atom modeline göre eliptik yörüngelerin varlığı

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Diğer atomlar için yörüngeleri inceleyelim:

- H_1I , He_2II , Li_3III , ... gibi dış yörüngesinde bir elektronu bulunan atomları ele alalım.

- $$a = a_1 \frac{n^2}{z} \quad \text{ve} \quad b = a_1 \frac{nk}{z}$$

- H_1I , He_2II ve Li_3III atomlarında $n=1$, $k=1(l=0)$ olan elektronların yörüngesi daireseldir. Ancak herbirinin yarıçapı farklı farklıdır. Şimdi bu özellikleri görelim:

- a) $n=1$ olan birinci yörünge için $a=b$ idi.

- H_1I için ;
$$a = \frac{1^2}{1} a_1 \Rightarrow a = a_1$$

- He_2II için ;
$$a = \frac{1^2}{2} a_1 \Rightarrow a = \frac{a_1}{2}$$

- Li_3III için ;
$$a = \frac{1^2}{3} a_1 \Rightarrow a = \frac{a_1}{3}$$

olduğu görülür. Çekirdekdeki yük sayısı arttıkça 1. yörünge için yarıçapı görece olarak küçülmektedir.

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- b) İkinci yörüngede ($n=2$, $k=2$ ya da $l=1$) ise, durum: $n=k$ olup $a=b$ yörünge daireseldir.
- HI için : $a=4a_1$
- Hell için : $a=4a_1/2 = 2a_1$
- LIII için : $a=4a_1/3$ dir.
- Eğer, $n=2$, $k=1(l=0)$ ise, o zaman yörünge elips olacaktır. Eksen büyüklükleri:

	<u>HI</u>	<u>Hell</u>	<u>LIII</u>
• Yarı-büyük eksen	$a=4a_1$	$a=4a_1/2$	$a=4a_1/3$
• Yarı-küçük eksen	$b=2a_1$	$b=a_1$	$b=2a_1/3$
- görülmektedir ki bunlar $a/b=2$ olan elips yörüngelerdir ve a ile b , z büyüdükçe küçülmektedir.

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- c) Üçüncü yörüngede:
- $n=3, k=3 \rightarrow l=2$ olabilir (dairesel yörünge).
- $n=3, k=2 \rightarrow l=1$ olabilir (elips yörünge).
- $n=3, k=1 \rightarrow l=0$ olabilir (elips yörünge).
- Buna göre,

	<u>HI</u>	<u>HeII</u>	<u>LiIII</u>
• $n=3, k=3$ için :	$a=9a_1$	$a=9a_1 / 2$	$a=9a_1 / 3$ (Daire)
• $n=3, k=2$ için :	$a=9a_1$	$a=9a_1 / 2$	$a=9a_1 / 3$ (Elips)
	$b=6a_1$	$b=6a_1 / 2$	$b=6a_1 / 3$
• $n=3, k=1$ için :	$a=9a_1$	$a=9a_1 / 2$	$a=9a_1 / 3$ (Elips)
	$b=3a_1$	$b=3a_1 / 2$	$b=3a_1 / 3 = a_1$ dir.

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Yörüngeler, l açısız kuantum sayısının aldıkları deęerlere göre adlandırılırlar.Şöyle ki,

- $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, (n-1)$

- Yörünge adı = s, p, d, f, g, ...

- l=0 ise, s yörüngesidir... gibi.

- Buna göre yukarıda sözü geçen durumlar için;

- a)n=1, k=1(l=0).....(ns)=1s:daire

- b)n=2, k=1(l=0).....2s:elips

- n=2, k=2(l=1).....2p:daire

- c)n=3, k=1(l=0).....3s:elips

- n=3, k=2(l=1).....3p:elips

- n=3, k=3(l=2).....3d:daire

- d)n=4, k=1(l=0).....4s:elips (e'si en büyük)

- n=4, k=2(l=1).....4p:elips

- n=4, k=3(l=2).....4d:elips

- n=4, k=4(l=3).....4f:daire

- Bu yörüngelerin e dış merkezlięi, $e = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a}$

olup burada a ve b nin deęerleri yazılırsa , $e = \frac{\sqrt{n^2 - k^2}}{n}$ olduęu görülür.

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- e dış merkezliği ne kadar büyürse yörünge o denli basıklaşır. s yörüngeleri en basık yörüngelerdir ve elektronlardan dolan ilk bölgeler olup bu yörüngeler en alt enerji düzeylerine karşılık gelirler(sahiptirler).
- HI atomunu ele alalım:
- $n=1, k=1(l=0) \rightarrow a=a_1 ; b=a_1 \rightarrow a=b=a_1$
- Yörünge:
- Bakınız şekil **43**.

- $n=2, k=2(l=1) \rightarrow a=4a_1 ; b=4a_1=a$
- $n=2, k=1(l=0) \rightarrow a=4a_1 ; b=2a_1=a/2 ;$
- Bakınız şekil **44**.

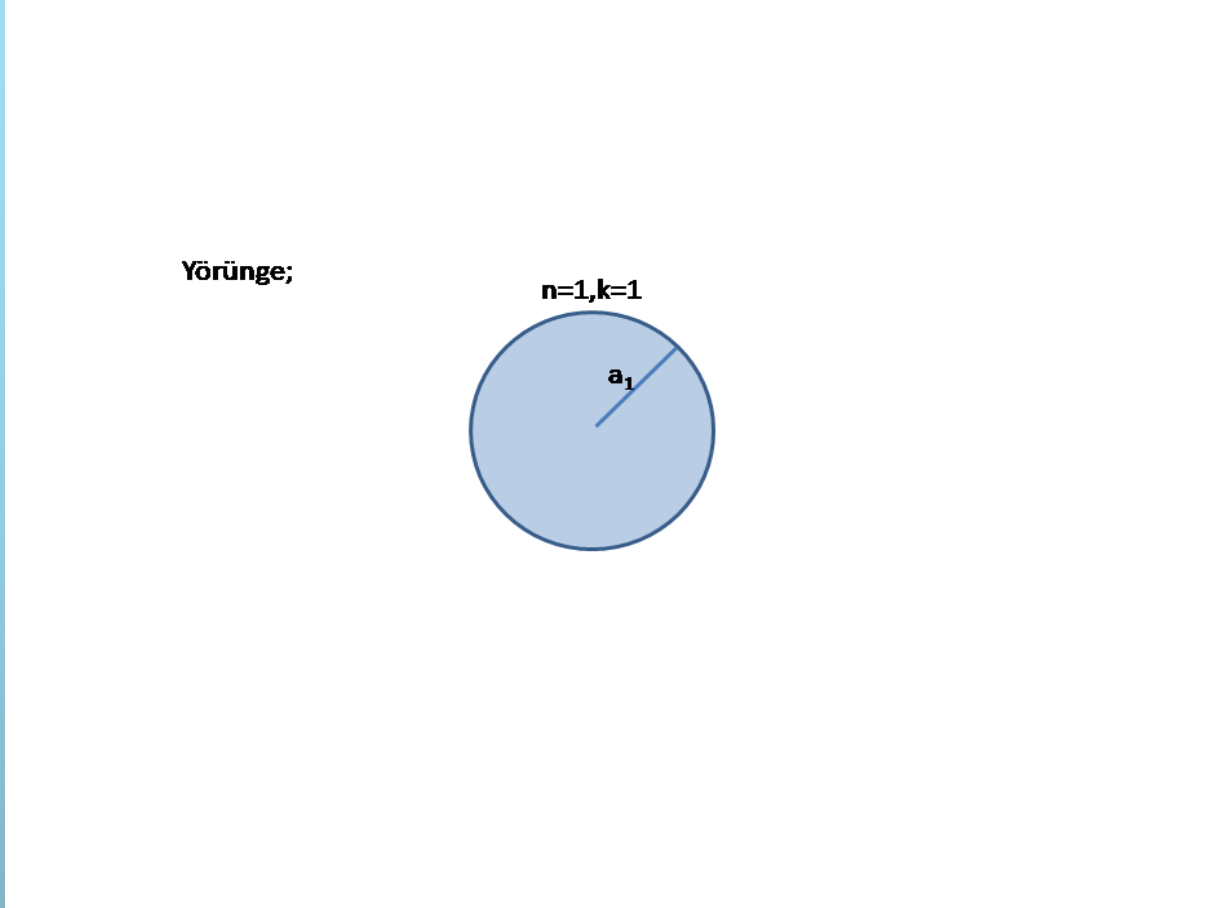
- $n=3, k=3(l=2) \rightarrow a=9a_1 ; b=a=9a_1 ; e=0$
- $n=3, k=2(l=1) \rightarrow a=9a_1 ; b=6a_1=2a/3 ;$
- $n=3, k=1(l=0) \rightarrow a=9a_1 ; b=3a_1=a/3 ;$
- Bakınız Şekil **45**

$$e = \frac{c}{a} = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$e = \frac{\sqrt{5}}{3}$$

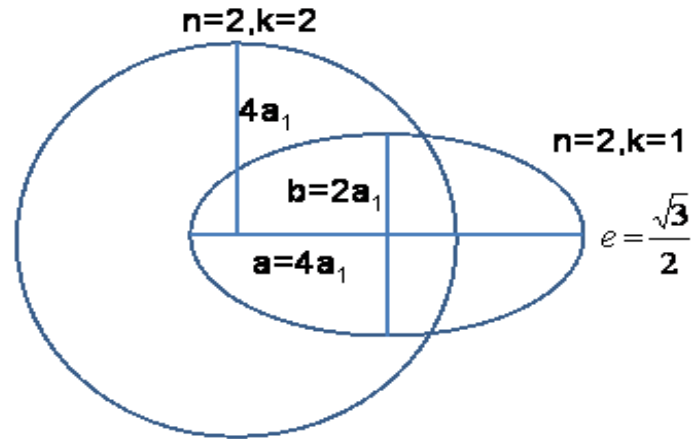
$$e = \frac{\sqrt{8}}{3}$$

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)



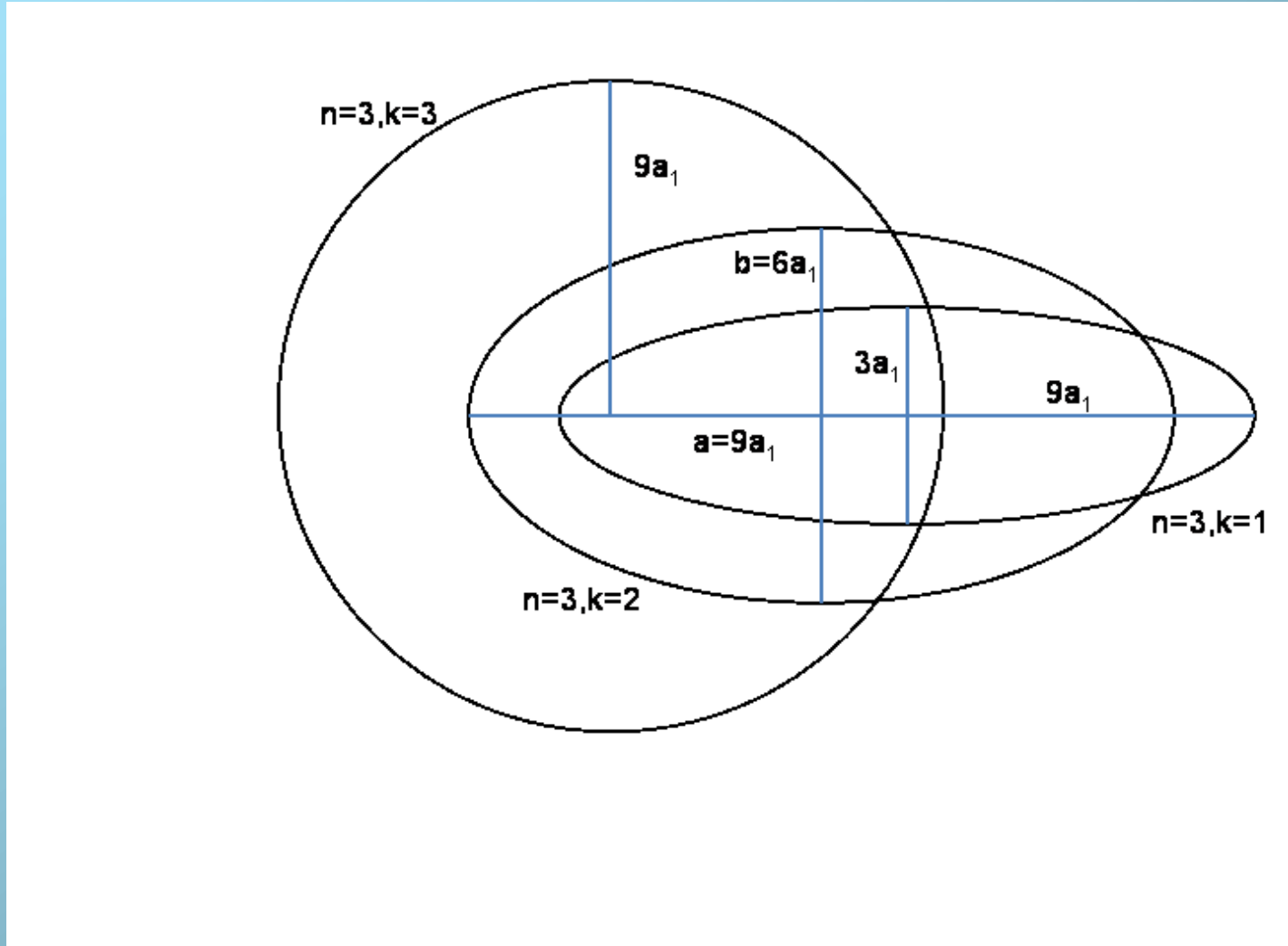
Şekil 43. $n=1$ ve $k=1$ için yörünge daireseldir

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)



Şekil 44. $n=2$ kabuğundaki olası yörüngeler

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)



Şekil 45. $n=3$ için olası yörüngeler

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- Bu durum bize şunu belirtir.

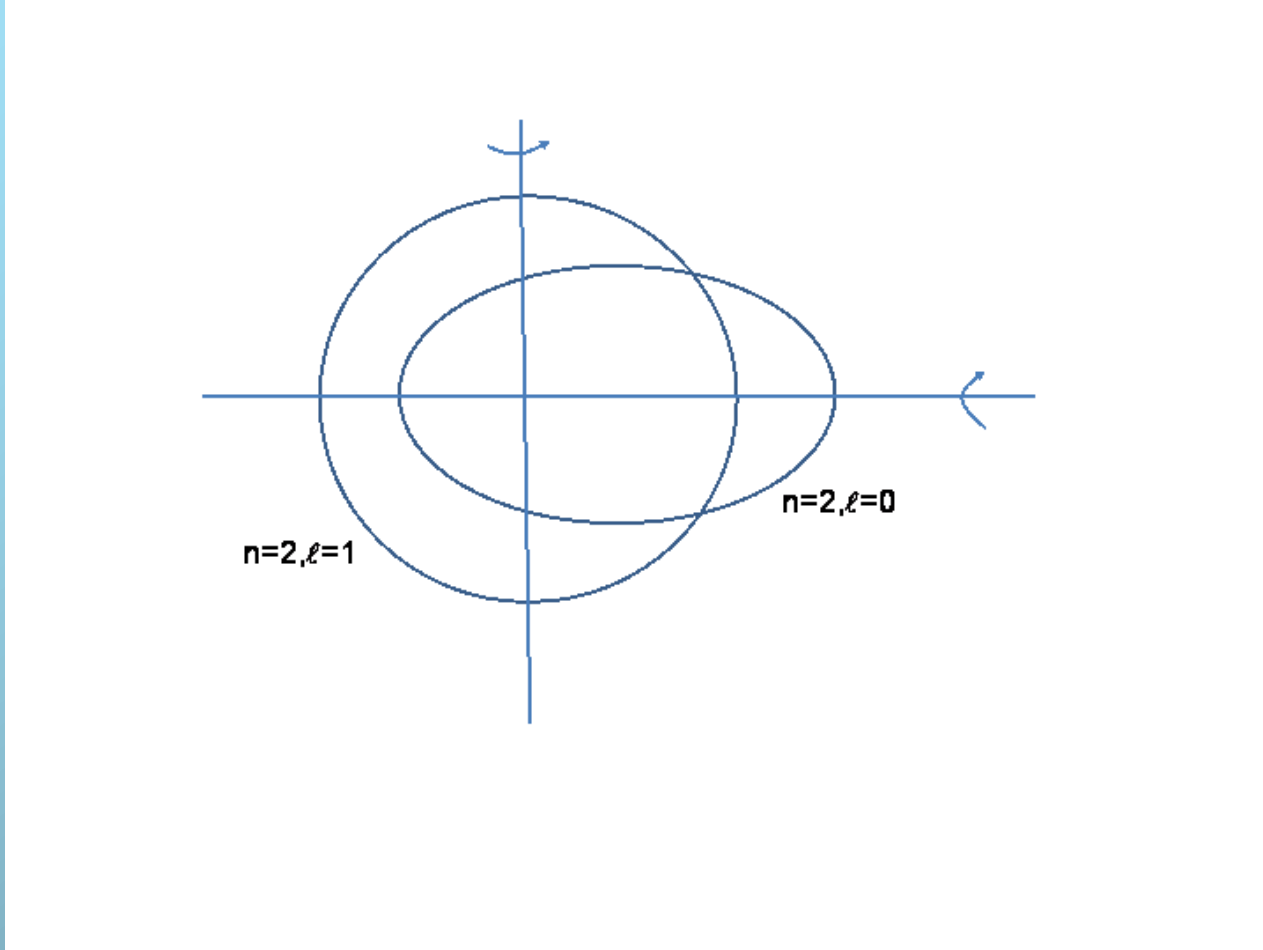
- Her ne kadar $\omega_n = -\frac{2\pi^2 \mu z^2 \varepsilon^4}{h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$ erkesi yalnızca n'ye bağlı

görünüyorsa da aslında bu erke başta n'ye ve biraz da l'ye bağlıdır.

➤ ATOMUN KABUK YAPISI

- Çok sayıda elektrona sahip atomlarda, farklı yarıçaplara sahip elektron yörüngeleri vardır. Kabukların oluşumu söz konusudur.
- Bakınız şekil 46
- Herhangi bir elementin elektronları çeşitli kabuklara (farklı) göre dağılmış bulunur. Bu kabuklar n toplam kuantum sayılarına karşılık aşağıda gösterildiği gibi adlandırılırlar:

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)



Şekil 46. Atomun kabuk yapısı

4. ATOM VE MOLEKÜL TAYFLARI (Devamı)

- $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$
- Kabuk : K, L, M, N, O, P, Q, ...
 l=0 l=1 l=2

Bu kabuklar, x-ışınlarıyla kesin olarak saptanmıştır. Yani, elektronların böyle kabuklar üzerindeki dağılımları röntgen spektrumlarından bulunmuş bir sonuçtur. Elementlerin periyodik cetvelinde yeni bir kabuğun başlaması, yeni bir periyodun başlamasına sebep olur.

➤ 4) Alkali Atomların Tayfları :

İlk kabukları dolu, en dış kabuğunda bir elektronu olan atomlar **alkali atomlardır**. $\text{Li}_3, \text{Na}_{11}, \text{K}_{19}, \dots$ vb. Alkali atomlar, hidrojenden sonra en basit tayfları verirler. Yani bunların tayfları hidrojen tayfına benzerler. Zira doymamış kabuktaki elektron sayısı (ki o, alkali atomlarda 1 tanedir) atomun tayfını belirler. Yani alkali atomların tayfları tek elektronlu atomların tayfları gibidir.

- Kabuktaki elektron sayısı= $2n^2$
 $n=1$ 'de $2n^2=2$ elektron olabilir.
 $n=2$ 'de $2n^2=8$ elektron bulunabilir.
 $n=3$ 'te $2n^2=18$ elektron bulunabilir. gibi.
- Bir alkali atomun resmini çizmede, **Bohr modelini eliptik yörüngelere genelleştiren Sommerfeld'in modeli faydalıdır.** Sommerfeld, eliptik yörüngelerin küçük ekseninin büyük eksenine oranı k/n olan (k ve n sabitler) şekillerde olabileceğini göstermiştir. Burada n büyük eksenini belirler ve $1 \leq k \leq n$, dairesel yörüngelerde ise $k=n$ 'dir.