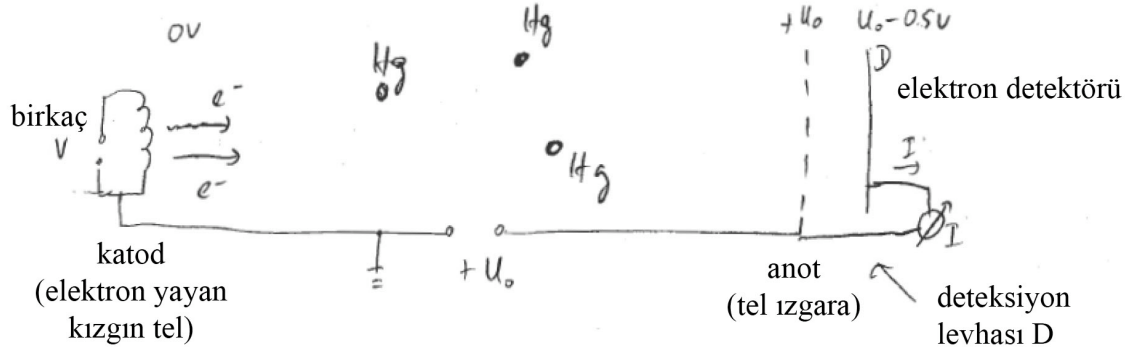


Franck-Hertz deneyi: atomlarla kuantumlanmış enerji düzeyleri (1913)

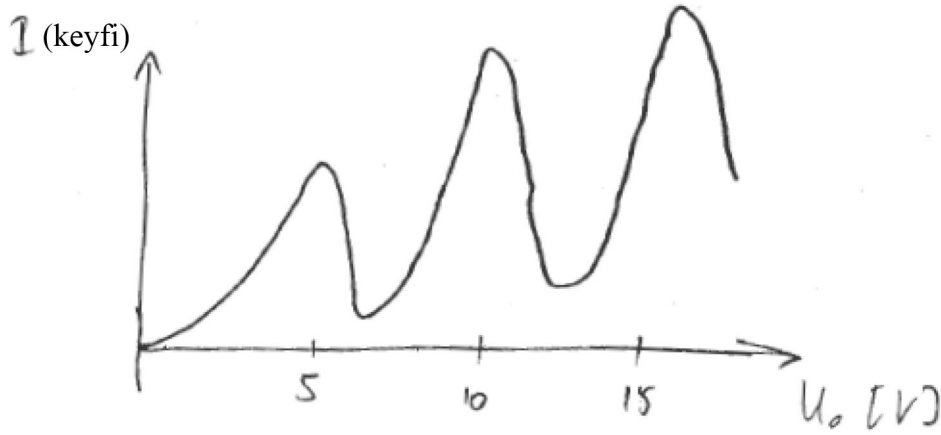
Franck-Hertz deneyi elektron-atom çarpışma tesir kesitinde rezonansları göstermiştir.



Şekil I: Franck-Hertz gereci. Katottan neşredilen elektronlar bir civa buharı içinde ivmelenirler. Eğer elektronlar elastik olmayan bir çarpışmada enerji kaybederlerse, detektöre ulaşamazlar.

Elektronlar anoda doğru civa buharı içinde uçarak ivmelendirilirler. Bunlardan bazıları anot ızgarasından geçerek, deteksiyon levhası D 'ye ulaşırlar, burada bir akım meydana getirirler. D ve A arasındaki $-0,5$ V kadar küçük bir potansiyel enerjisi $KE < 0,5$ den az olan elektronların deteksiyon levhasına ulaşmasını engeller. Böylece ölçülen akım tüm elektronlardan ileri gelir ki bunların KE 'si sıfıra yakındır.

Yorum. Gerilim başlangıçta artarken, civa buharına rağmen daha çok elektron anoda ulaşır. Civa atomları elektronlardan çok daha fazla ağırdır. Elastik çarpışmalar çok az enerji kaybıyla oluşur. $4,9$ V'a ulaşıldığında, akım aniden düşer zira elektron ve civa atomu arasında elastik olmayan bir çarpışma vuku bulur ve bu durumda Hg atomu daha yüksekte kalan bir (elektronik) duruma çıkar. Sonuç olarak elektron D detektör levhasında olunacak derecede yeteri kadar enerjiye sahip olamaz ve akım da aniden düşer. Aynı durum $9,8$ V'da yine tekrarlanır (elektron ve Hg atomları arasında iki elastik olmayan çarpışma, $15,7$ V'da vb). e-Hg çarpışma kesit alanındaki bu rezonanslar Hg atomları için $q \cdot 4,9$ V = $4,9$ eV = 8×10^{-19} J = $\frac{hc}{\lambda}$, $\lambda = 253,7$ nm için kuantumlanmış bir enerji düzeyi ortaya çıkarır. Bu gerçekten mor ötesinde kuvvetlice gözlemlenen civa emisyon çizgisidir.



Şekil II: U_0 anot voltajının fonksiyonu olarak gözlemlenmiş akım. 4,9 V; 9,8 V; 14,7 V eşit mesafeli piklerde gözlem yapılmıştır.

Farklı rezonas uyarma enerjisi qV_0 'a sahip olan diğer atomlarla da benzer rezonanslar gözlemlenebilir ki bu farklı bir geçiş dalga boyuna karşı gelir: Atomlardaki elektronlar kuantumlanmış enerji düzeylerine sahip olup, atomik emisyon ve soğurma spektrumlarının niçin kesikli çizgilere sahip olduğunu gösterir. Bunlar atomların parmak izleri olup, bazı atomların kimyasal olarak belirlenmeden önce spektrumlarından belirlenebildiklerini izah eder (örneğin He, güneş spektrumunda bulunduğundan dolayı (Yunanca Güneş) helios'dan adını almıştır).

Bohr atomu (eski KM) (1913)

Rutherford modeli (yarıçapı $r \sim 10^{-15}$ m olan pozitif yüklü çekirdek etrafında büyüklüğü 10^{-10} m olan elektron bulutu), Rutherford saçındırma sonuçlarını izah ederken, ne atomun kararlılığını (yörüngedeki elektronlar ışıma yapıp enerji kaybetmeyi 10^{-10} s'de tamamlamalıdır) ne de gözlemlenen atomik emisyon tayfını izah edememiştir. En basit hidrojen örneğinde bile, Balmer ampirik bir formül bulmuştu ki bu **Balmer dizisi** (1885) olarak bilinen bir grup emisyon çizgilerini ortaya koymuştu:

$$\nu_n = \frac{c}{\lambda_n} = R_\infty \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, \dots \quad (8-1)$$

burada $R_\infty = 3,29 \times 10^{15}$ Hz, Rydberg s.b.t.dir; $n = 3$ 'de $\lambda_3 = 656,3$ nm Balmer α çizgisi, $n = 4$ 'de $\lambda_4 = 486,1$ nm ise Balmer β çizgisi vs. olarak bilinir.

Daha sonra, farklı diziler belirlenmiştir, UV'de Lyman dizisi $\left(\frac{1}{1^2}\right)$ 'yi $\left(\frac{1}{2^2}\right)$ 'le değiştirmekle; meşhur Lyman α çizgisini $\lambda = 121$ nm'de ve Paschen dizisini $\left(\frac{1}{2^2}\right)$ 'yi $\left(\frac{1}{3^2}\right)$ ile vs. değiştirmekle elde edilmiştir. Tüm bu diziler daha genel bir formül ile özetlenebilir:

$$\nu_{nm} = \frac{c}{\lambda_{nm}} = R_{\infty} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (8-2)$$

burada $n, m, m \geq n$ olmak üzere tam sayılardır.

$n = 1$	Lyman dizisi	($m = 2$ Lyman α , $m = 3$ Lyman β vs.)
$n = 2$	Balmer dizisi	($m = 3$ Balmer α , $m = 4$ Balmer β vs.)
$n = 3$	Paschen dizisi	($m = 4$ Paschen α , $m = 5$ Paschen β vs.)

Niels Bohr, kuantum mekaniğin temelini teşkil eden şu önermelerde tüm bu çizgileri izah etmiştir.

Bohr Önermeleri

1. Atomlar belli kararlı durumlara (durağan haller) sahiptir; atom bu durağan durumlar arasında bir geçiş yaparsa, ışık neşredilir veya soğurulur.
2. İki durağan durumun enerjileri ($E_2 > E_1$) E_1, E_2 ise, $E_2 \rightarrow E_1$ geçişinde neşredilen ışığın frekansı:

$$\nu_{21} = \frac{E_2 - E_1}{h} \quad (8-3)$$

3. Dairesel yörüngeler için, kararlı durumlar, açısal momentum için $\boxed{mvr = n\hbar}$ kuantumlanma şartından belirlenebilir ki burada $n = 1, 2, 3$ ve r klasik yörünge yarıçapı ve v ise yörünge hızıdır; n tamsayısı yörünge **kuantum sayısı** olarak bilinir.

Bohr (ve fizik) şanslıydı: Bohr önerileri doğru KM enerji düzeylerini tekrar ortaya koyar. Büyük n değeri bu durum daha derin bir sebepten (Bohr karşılama ilkesi) oluşurken, küçük n değeri için sadece “kazaren” oluşur.

Bohr enerji düzeyleri

- Dairesel yörünge $\rightarrow$ merkezkaç kuvveti, Coulomb kuvvetidir:

$$\frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r} \implies m^2 v^2 r^2 = \frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0} mr \quad (8-4)$$

- Bohr kuantumlanması:

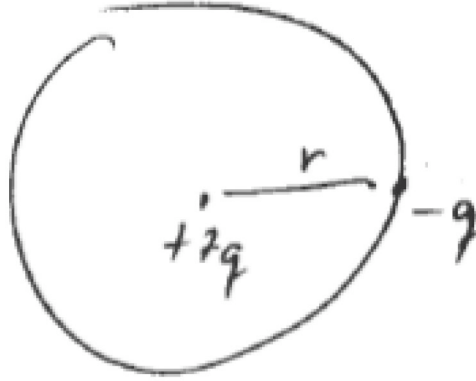
$$n^2 \hbar^2 = (mvr)^2 = \frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0} mr \quad (8-5)$$

- n -inci Bohr yörüngesi

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0}{mZq^2} n^2 \hbar^2 \quad (8-6)$$

- n -inci Bohr yörünge hızı

$$v_n = \frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{n\hbar} \quad (8-7)$$



Şekil III: Zq çekirdek yükü etrafında çembersel bir yörüngede hareket eden $-q$ yüklü elektron. Bohr sadece kararlı yörüngelere karşı gelen belli açısal momentumları önermiştir.

Enerji

$$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 - \frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \quad (8-8)$$

$$= \frac{1}{2}m \left(\frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2 \hbar^2} - \frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{mZq^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{n^2 \hbar^2} \quad (8-9)$$

$$= -\frac{1}{2}m \left(\frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2 \hbar^2} \quad (8-10)$$

Bu formülleri boyutsuz nicelik: ince yapı sabitini tanımlayarak basitleştirebiliriz.

$$\alpha = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137.036 \dots} \quad (8-11)$$

Hidrojen-gibi atomlarda ($+Zq$ çekirdek yükü etrafında tek elektron):

- n -inci Bohr yörüngesi:

$$r_n = \frac{\hbar}{mcZ\alpha} n^2 \quad (8-12)$$

- n -inci Bohr yörünge hızı

$$v_n = \frac{Z\alpha c}{n} \quad (8-13)$$

- Bohr enerji düzeyleri

$$E_n = -\frac{1}{2}mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \quad (8-14)$$

$\alpha \ll 1$, $v \ll c$ olması $Z \ll 100$ için geçerli olduğundan yukarıdaki göreceli olmayan hesaplama için doğrudur. $n = 1$ için bile, hidrojen atomu ($Z = 1$) nun elektronu için göreceli değildir. Yörünge yarıçapı n^2 ile artarken, yörünge hızı $\frac{1}{n}$ ile azalır ve bağlanma enerjisi $\frac{1}{n^2}$ ile azalır. $Z = 1$ için kararlı olan en küçük yörünge yarıçapına **Bohr yarıçapı** adı verilir.

$$a_0 = \frac{\hbar}{mc\alpha} = 0.53 \text{ Å} \quad (8-15)$$

En düşük kararlı enerji durumuna karşı elektronun bağlanma enerjisi

- $E_1 = -\frac{1}{2}mc^2(Z\alpha)^2 = -Z^2 \cdot 13.6 \text{ eV}$

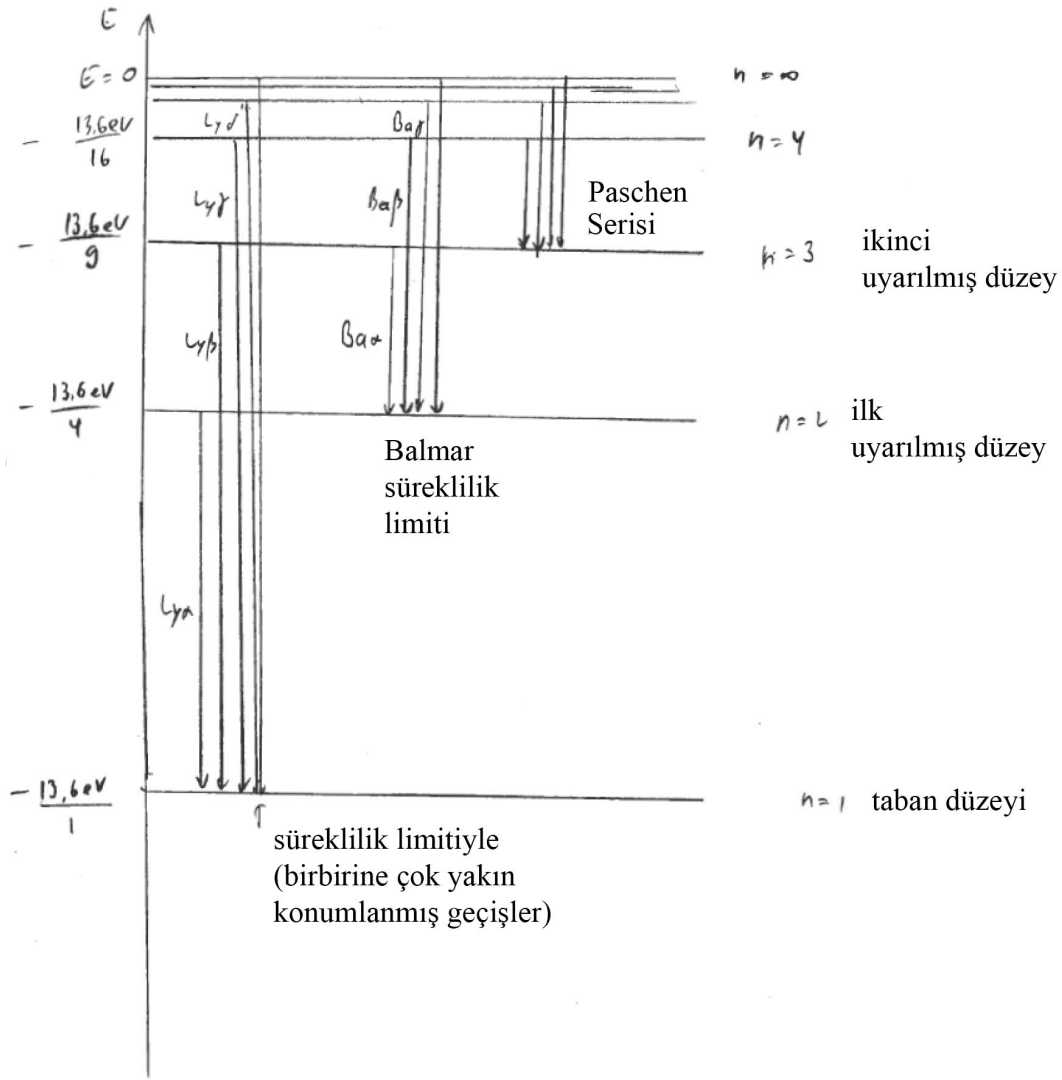
- $r_1 = \frac{\hbar}{mc\alpha} \frac{1}{Z} = \frac{a_0}{Z}$

Not. i) Göreceli olmayan bir problem çözdük. mc^2 gibi göreceli terimler, ince yapı sbt. $\alpha = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ cinsinden sonuçları ifade etmemizden dolayı ortaya çıkmaktadır.

ii) elektron kütlesi m yerine $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M}$ ile tanımlanmış olan indirgenmiş kütleyi kullanmalıydık (M = çekirdeğin kütlesi) zira iki-cisimli problemi, tek-cisimli bir probleme dönüştürmüş olduk. İndirgenmiş kütlenin ortaya çıkması çok az bir enerji kaymasına sebep olur (düzeltme $\frac{m}{M}$ mertebesinde) ve farklı izotoplar için farklı geçiş frekanslarına yol açar. $\frac{m}{M} \approx \frac{1}{1800}$ mertebesinde en büyük kesirsel frekans farkı hidrojen ve döteryum için vuku bulur.

Hidrojen spektrum çizgileri

$m > n$ ($m < n$) olmak üzere $E_m \rightarrow E_n$ geçişlerine karşı gelen emisyon (soğurma) spektrumları.



Şekil IV: Hidrojen spectrum çizgileri. n asal kuantum sayısı olup, yörüngeyi belirler. Tayf aynı düşük enerji düzeyi ile gruplanmış dizilerden oluşur: (Lyman $n = 1$, Balmer $n = 2$, Paschen $n = 3$), vs.

Geçiş Frekansları

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \quad \text{açısal frekans} \quad (\omega_{mn} = 2\pi\nu_{mn}) \quad (8-16)$$

$$\nu_{mn} = \frac{E_m - E_n}{h} \quad \text{geçiş frekansı} \quad (8-17)$$

$$\nu_{m \rightarrow n} = -\frac{1}{2} \frac{mc^2 (Z\alpha)^2}{h} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (8-18)$$

$$= \frac{Z^2 mc^2 \alpha^2}{2h} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (m > n) \quad (8-19)$$

$\rightarrow (Z = 1)$ (ampirik) spektroskopik bağıntısı ile çıkarılır

Rydberg sabiti fizikte ölçülmüş olan en doğru sabittir. Hidrojenin hassas spektrumu sonucunda

$$R = c \cdot 10973731.568639(91) \text{ m}^{-1} \quad \left(\frac{\Delta R}{R} \sim 10^{-12} \right) \quad (8-23)$$

Temel sabitlerin gerçekten sabit olduklarını (zamanda) deneysel olarak ardışık bir çok deneyle kontrol etmek gerekir.

Bohr Karşılanım İlkesi

Büyük n için $m = n + 1 \rightarrow n$ geçiş frekansını hesaplarsak

$$v_{n+1 \rightarrow n} = R_{\infty} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right) = R_{\infty} \frac{(n+1)^2 - n^2}{n^2(n+1)^2} \quad (8-24)$$

$$= R_{\infty} \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \approx \frac{2R_{\infty}}{n^3} \quad (8-25)$$

$$\rightarrow n \text{ de öncü merteye} \quad (8-26)$$

Elektron yörünge frekansıyla ($z=1$) kıyaslanırsa

$$f_{n+1} \approx f_n = \frac{v_n}{2\pi r_n} = \frac{\alpha c}{n} \frac{1}{2\pi} \frac{m c \alpha}{\hbar} \frac{1}{n^2} = \frac{m c^2 \alpha^2}{h \cdot n^3} = \frac{2}{n^3} R_{\infty} \quad (8-27)$$

$\Rightarrow$ Büyük n (büyük asal kuantum sayısı) için, $n \rightarrow n+1$ geçişinde Bohr atomundan neşredilen frekans, titreşen bir elektronun klasik emisyon frekansına eşit olur.

1. Karşılanım İlkesi. Klasik fizik, KM içinde yüksek kuantum sayısı için bir limit durumu olarak bulundurulur. $\hbar \rightarrow 0$ giderken klasik fiziğe tekrar dönüşüm aynı akıl yürütme olup, bu $\hbar \rightarrow 0$ giderken kuantumların sayısının artışı demektir. Bohr karşılanım ilkesi doğru kuramı “tahmin etme”de çok kullanışlı olup, tam bir ilke sayılmaz. Yani, $n+2 \rightarrow n$ geçişine ait hiçbir klasik karşılanım yoktur ve buna sadece KM’de izin verilir.

Bohr kuantumlanma şartı için motivasyon

Bohr izinli momentumun λ_n dalga boyunu, Bohr yörüngesinin yarıçapının dalga boyu ile kıyaslarsak:

$$p_n = m v_n = \frac{m \alpha c}{n} = \frac{\hbar}{\lambda_n} \rightarrow \lambda_n = \frac{n \hbar}{m c \alpha} \quad (8-28)$$

$$\frac{2\pi r_n}{\lambda_n} = \frac{2\pi \hbar}{m c \alpha} n^2 \frac{m c \alpha}{n \hbar} = n \quad (8-29)$$



Şekil V: Bir Bohr yörüngesindeki deBroglie dalgaları bir keman telindeki özkiplere benzemektedir ki sınır şartlarını hariç tutmak gerekmektedir (keman teli kendi üzerine kapanır).

$mvr = n\hbar$ Bohr kuantumlanma şartı, klasik çevre üzerinde bir n tamsayılı deBroglie dalgalarının denk gelmesi şartıyla eşdeğerdir. n asal kuantum sayısı klasik yörüngeye denk gelen deBroglie dalga boylarının sayısı ile ilgilidir.

Eliptik yörüngeler için genelleştirme: Wilson-Sommerfeld kuantumlanma şartı

$$\boxed{\oint pdq = nh} \rightarrow q \text{ koordinat, } p \text{ momentum olmak üzere herhangi kapalı bir yörünge için} \quad (8-30)$$

Bohr atomu: $p = mvr$, $q = \phi$ (açı)

$$\oint pdq = mvr \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi mvr = nh \quad (8-31)$$

$$mvr = n\hbar \rightarrow \text{çembersel yörünge için Bohr kuantumlanma şartı} \quad (8-32)$$

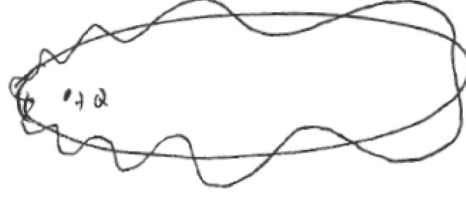
Daha genel olarak,

$$\oint pdq = \oint \frac{h}{\lambda_{dB}(q)} dq = nh \quad (8-33)$$

olup, bunun eşdeğeri

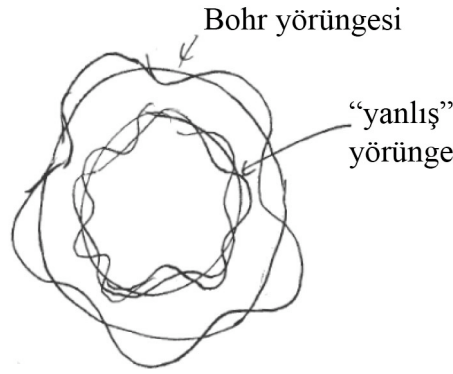
$$\oint \frac{dq}{\lambda_{dB}(q)} = n \quad (8-34)$$

Yani (yol boyunca momentum değişikliği sebebiyle λ_{dB} yol boyunca değişse bile) kapalı yörüngede deBroglie dalga boylarının tam sayısı olmalıdır. Wilson-Sommerfeld şartı eliptik yörüngeleri doğru olarak betimler (detaylar hidrojen spektrumunda):



Şekil VI: Eliptik yörüngeler için Wilson-Sommerfeld kuantumlanması. Eliptik bir yörüngede yapıcı girişim şartından dolayı doğru yörüngeler ortaya çıkar. Eliptik yörünge halinde bile, momentumun şiddeti ve böylece deBroglie dalga boyunun yörünge boyunca değişmesi durumunda bu durum sağlanır.

Kuantumlanma şartı için Motivasyon



Şekil VII: “Yanlış” yörüngelerde dalga fonksiyonu ardışık dönüşlerde yıkıcı olarak girişim yapar. Bu aynen en az zamanlı Fermat ilkesine benzemektedir ki burada en yakın yollar, yıkıcı girişimde klasik yollara karşı gelemezlerdi.

“Yanlış” yörüngede (Bohr yörüngesinden biraz ayrılmış), ardışık dönüşlerde deBroglie dalgası yıkıcı olarak girişim yapmaya başlar.

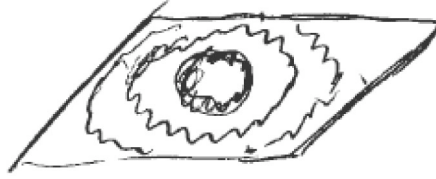
⇒ “özkipler” için sebep: **Yapıcı girişim**, aynen Fermat’ın durağan zaman ilkesinde olduğu gibidir.

Bohr modelinin cevaplayamadığı sorunlar

- “yanlış” yörünge ne kadar uzaktadır?

- Yörüngedeki kırınım hakkında ne söyleyebiliriz?
- $n \rightarrow m$ geçişlerinin doğası, gerekli zaman?
- Hidrojen taban durumu için yanlış öngörü: $L = \hbar$ (doğru cevap $L = 0$).

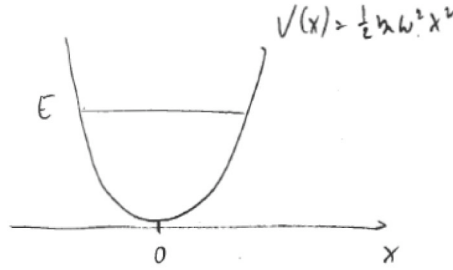
Hidrojen atomu için doğru kuantum mekaniksel betimleme daha ziyade üç boyutlu bir özküp problemidir.



Şekil VIII: Titreşen metal levha: iki boyutta kuantumlanmış kipler

KM. ψ dalga fonksiyonu titreşir, $|\psi(\mathbf{r})|^2 dv$ ise elektronu $\mathbf{r}$ civarında bulma olasılığını gösterir.

Wilson-Sommerfeld kuantumlanmasına örnek: harmonik salıncı

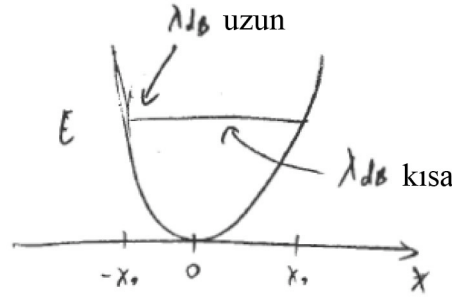


Şekil IX: Harmonik salıncı potansiyeli

Sabit toplam enerji E 'de, parçacığın momentumu p konumuna bağlıdır

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (8-35)$$

- momentumun büyüklüğü: $|p(x)| = \sqrt{2m} \sqrt{E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2}$
- Potansiyel içinde salıncı titreşirken parçacığın deBroglie dalga boyu değişir.



Şekil X: Konuma bağlı deBroglie $\lambda_{dB}(x) = \frac{h}{p(x)}$ dalga boyu. İzinli durumlar ardışık tam dönüşler için yapıcı girişime karşı gelir.

Wilson-Sommerfeld kuantumlanması

$$\oint pdq = \oint p(x)dx = 2 \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2m} \cdot \sqrt{E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2} dx \quad (8-36)$$

$$= 2\sqrt{2mE} \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{1 - \frac{m\omega^2}{2E} x^2} \quad (8-37)$$

$$= 2\sqrt{2mE} \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{1 - \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \quad (8-38)$$

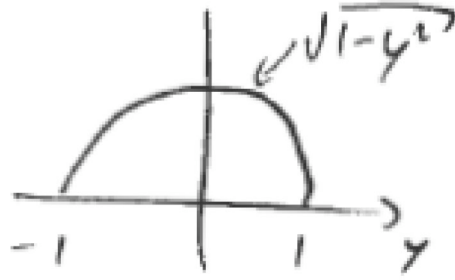
$$= 2\sqrt{2mE} x_0 \int_{-1}^1 dy \sqrt{1 - y^2} \quad (8-39)$$

$$= 2\sqrt{2mE} \frac{\pi}{2} x_0 \quad (8-40)$$

$$= \sqrt{2mE} \pi x_0 \quad (8-41)$$

$$= \sqrt{2mE} \pi \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = 2\pi \frac{E}{\omega} \quad (8-42)$$

$E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2$ ’yi burada kullandık. böylece kuantumlanma şartı $\oint pdq = nh$, $2\pi \frac{E}{\omega} = nh$ veya $E_n = n \frac{h}{2\pi} \omega = n\hbar\omega$ olur ki $\Rightarrow$ Sommerfeld kuantumlanmasına göre bir harmonik salınıcının kuantumlanmış enerji düzeyleridir. Bu hemen hemen doğrudur: tam kuantum kuramı $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ ortaya çıkarır. Bir harmonik salınıcının kuantumlanmış enerji düzeyleri (temel enerji ölçeği) $\hbar\omega$ ’nin bir basamak büyüklüğünde eşit mesafelerde sıralanır. Wilson-Sommerfeld sonucu (klasik x -yolu üzerinde klasik momentum $p(x)$ ’in kuantumlanması) tam doğru sonucu ortaya çıkaramaz, zira dalga mekaniğinde klasik yol sadece yaklaşık bir kavram olarak (limit durumu) karşımıza çıkar. Biz “durağan salınım problemi” ni çözmek zorundayız. Schrödinger denk. özdeğer probleminin matematiksel betimlemesidir.



Şekil XI: (8-39) integralini “Mathematica”sız hesaplamak için bir hatırlatıcı