

5.111 Ders Özeti #5

Bugün için okuma: Bölüm 1.3 (3. Baskıda 1.6) – Atomik Spektrumlar, Bölüm 1.7, eşitlik 9b’ye kadar (3. Baskıda 1.5, eşitlik 8b’ye kadar) – Dalga Fonksiyonları ve Enerji Düzeyleri, Bölüm 1.8 (3. Baskıda 1.7) – Baş Kuantum Numarası

Ders #6 için okuma: Bölüm 1.9 (3. Baskıda, 1.8) – Atomik Orbitaler.

Ödev: Problem seti #2 (Oturum # 8 e kadar)

Konular

Hidrojen Atomu

I. Elektronun çekirdeğe bağlanma enerjisi ($\hat{H}\psi = E\psi$)

II. Hidrojen atomu enerji seviyelerinin incelenmesi

A. Foton emisyonu (yayılması)

B. Foton absorpsiyonu (soğurması)

III. Hidrojen atomunun dalga fonksiyonları (orbitaler) ($\hat{H}\psi = E\psi$)

HİDROJEN ATOMU

I. ELEKTRONUN ÇEKİRDEĞE BAĞLANMA ENERJİSİ (E_n)

H atomu için Schrödinger eşitliği:

$$\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$$

$$m = \text{_____} = \text{_____}$$

$$e = \text{_____}$$

$$\epsilon_0 = \text{geçirgenlik sabiti}$$

$$h = \text{Planck sabiti}$$

$$\hat{H}\Psi_n = - \frac{1}{n^2} \frac{me^4 \cdot \Psi_n}{8\epsilon_0^2 h^2}$$

H atom orbitali

veya dalga fonksiyonu

E_n =elektronun çekirdeğe
bağlanma enerjisi

Bu eşitlikteki sabitler birleştirilerek tek sabite indirgenebilir:

$$\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = R_H = \text{Rydberg sabiti} = \text{_____}$$

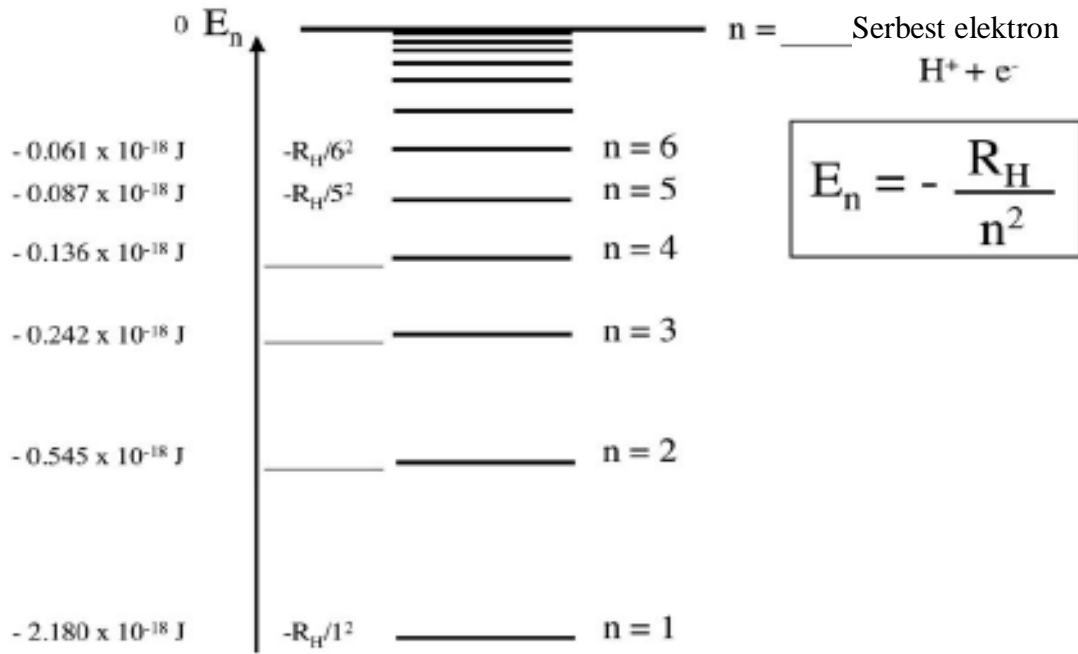
Hidrojen atomu için elektronun çekirdeğe **bağlanma enerjisi**

$$E_n = \frac{1}{n^2} \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = - \frac{R_H}{n^2}$$

burada n = _____ (bir tamsayı) = _____

ANA FİKİR Bağlanma enerjileri kuantlıdır(belirlidir)!

Baş kuantum sayısı, n, Schrödinger denkleminin çözümünden gelir.
H atomunun enerji seviyesi diyagramı



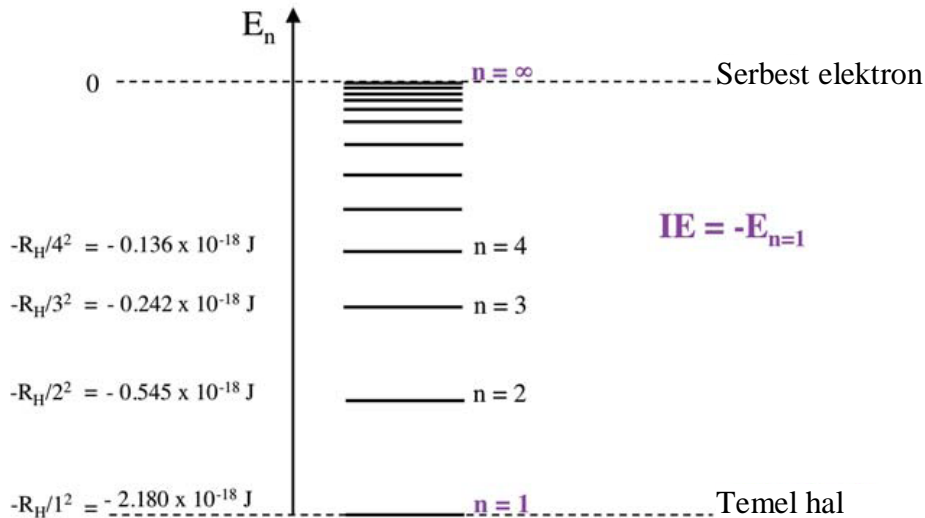
NOT: Tüm bağlanma enerjileri negatiftir. Negatif enerji, elektronun çekirdeğe bağlandığı anlamına gelir. $n=\infty$ da, $E_n = \text{_____}$. $n = \infty$ da elektron çekirdekten bağımsızdır.

En düşük (en negatif) enerji _____ olarak adlandırılır.

- Temel hal en kararlı konumdur.
- Temel hal $n = 1$ konumudur.

E_n Bağlanma enerjisinin fiziksel önemi nedir?

Hidrojen atomunun n. konumundaki $E_n = \text{_____}$ (iyonlaşma enerjisi).



İyonlaşma enerjisi (İE), gaz fazındaki atom, molekül veya iyonların n. konumundan bir elektron koparmak için gereken minimum enerjidir. (Aksi belirtilmedikçe, temel hal n=1 kabul edilir.)

- Temel halde hidrojen atomu için İE = _____ J. Bu şu anlama gelir: Temel haldeki hidrojen atomuna bu miktarda enerji verilirse, elektron artık çekirdeğe bağlanmayacaktır.
- Hidrojen atomu için n = 2 (ilk uyarılmış hal) deki İE _____ J dür.
- Hidrojen atomu için **üçüncü** uyarılmış haldeki (n = __) İE _____ J dür.

Aşağıdaki eşitlik herhangi tek-elektronlu atomlar (ve iyonlar) için bağlanma enerjisini tanımlar:

$$E_n = \frac{-13.6 Z^2}{n^2} \text{ J}$$

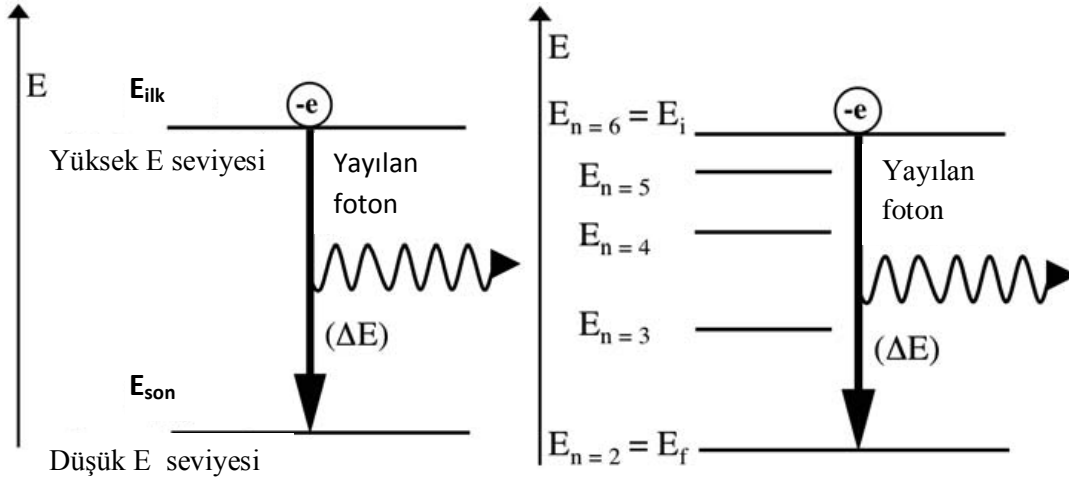
burada Z = atom numarası

H	≡ tek elektronlu atom	Z = 1 (atom numarası)
He ⁺	≡ tek elektronlu atom	Z = 2
Li ²⁺	≡ tek elektronlu atom	Z = _____
Tb ⁶⁴⁺	≡ tek elektronlu atom	Z = _____

II. HİDROJEN ATOMUNUN ENERJİ SEVİYELERİNİN İNCELENMESİ

A. FOTON YAYINLANMASI

Uyarılmış H atomu daha düşük E seviyesine inerken foton yayar. Elektron, yüksek E seviyesinden düşük enerji seviyesine geçerken, iki seviye arasındaki _____ enerji farkına eşit bir foton yayınlar.



Yayılan fotonun enerjisi hesaplanabilir.

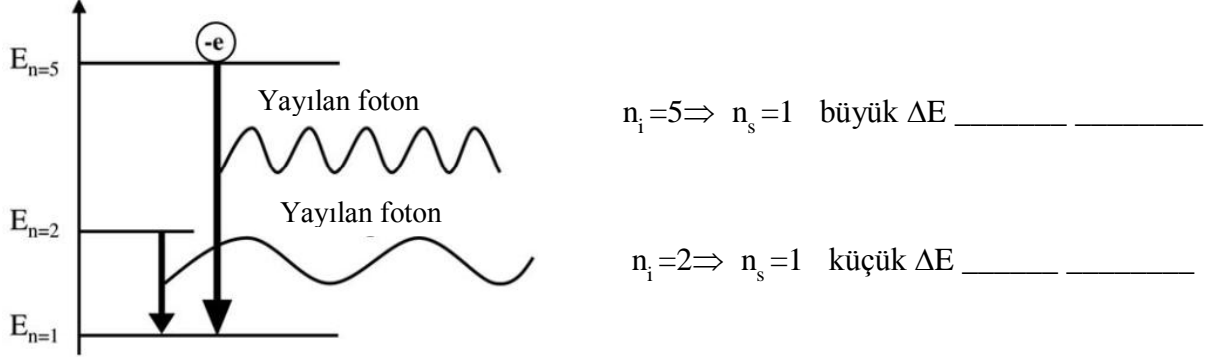
$$\Delta E = \text{_____} - \text{_____}$$

$$\Delta E = \text{_____} - \text{_____}$$

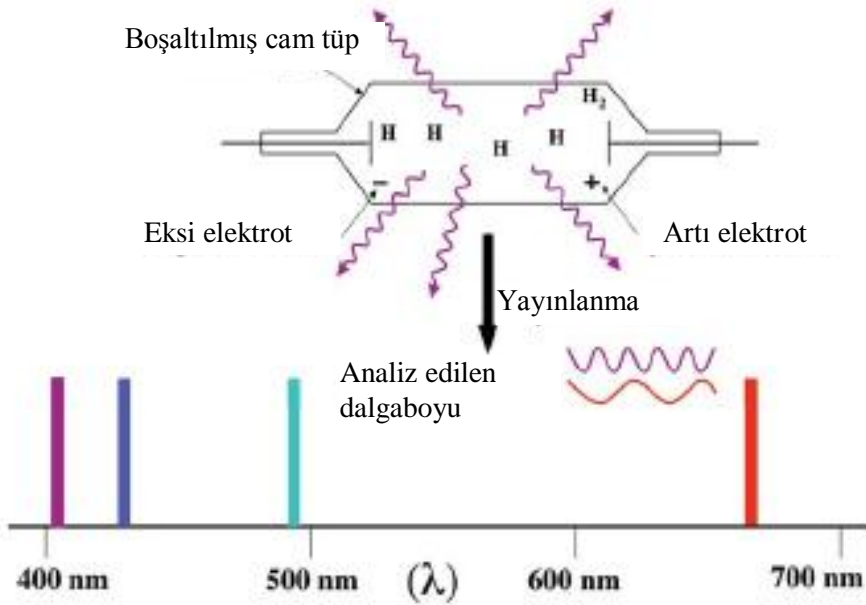
Yayımlanan fotonun enerjisini hesaplandığına göre, $\Delta E = h\nu$ eşitliğini kullanarak, frekansı (ν) da hesaplanabilir.

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} \quad \nu = \frac{hc}{\lambda}$$

Yayımlanan fotonun E , λ , ve ν değerleri arasındaki ilişkiyi düşünelim:



Sunum: hidrojen atomunun görünür bölge spektrumundaki hatların gözlenmesi.



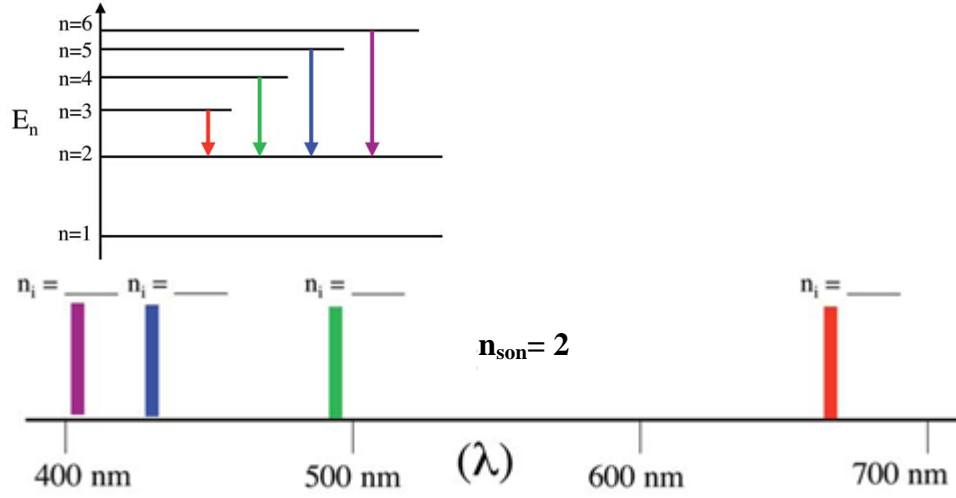
Hidrojen atomunun bu hatlarının ilk kez gözlemlendiği tarih bize oldukça uzak.

1885 J.J. Balmer H atomlarının görünür bölgede bir seri emisyon hattını gözledi, bu hatların frekanslarını basit bir formülle tanımladı.

$$\nu = 3.2910^{15} \text{ s}^{-1} \left[\left(\frac{1}{4} \right) - \left(\frac{1}{n^2} \right) \right] \quad \text{burada } n = 3, 4, 5 \dots$$

Bu formülün kökeni o zamanlar anlaşılamadı, fakat şimdi biliyoruz:

- Son enerji seviyesinin $n = 2$ olduğu elektron geçişlerinden kaynaklanmaktadır.
- Frekans değerleri $E = hv$ eşitliği ile kesin olarak hesaplanabilir.



Hidrojen atom spektrumunun görünür bölge hatları için, $E_s = E_{n=2}$.
 Bu geçişlerin öngörülen dalga boyu ve frekanslarını hesaplayabiliriz:

$$\nu = \frac{E_i - E_s}{h}$$

ve Schrödinger eşitliğinin çözümünden şunu biliyoruz:

$$E_n = \frac{-R_H}{n^2}$$

Öyleyse,

$$\nu = \left(\frac{1}{n_s^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\nu = \left(\frac{1}{n_s^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

o zaman $n_s = 2$ için,

$$\nu = \frac{R_H}{h} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \text{BALMER SERİSİ}$$

$R_H/h = \mathfrak{R} = 3.29 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$, bu Balmer serisinde gördüğümüz sabitin tam bir çözümüdür.

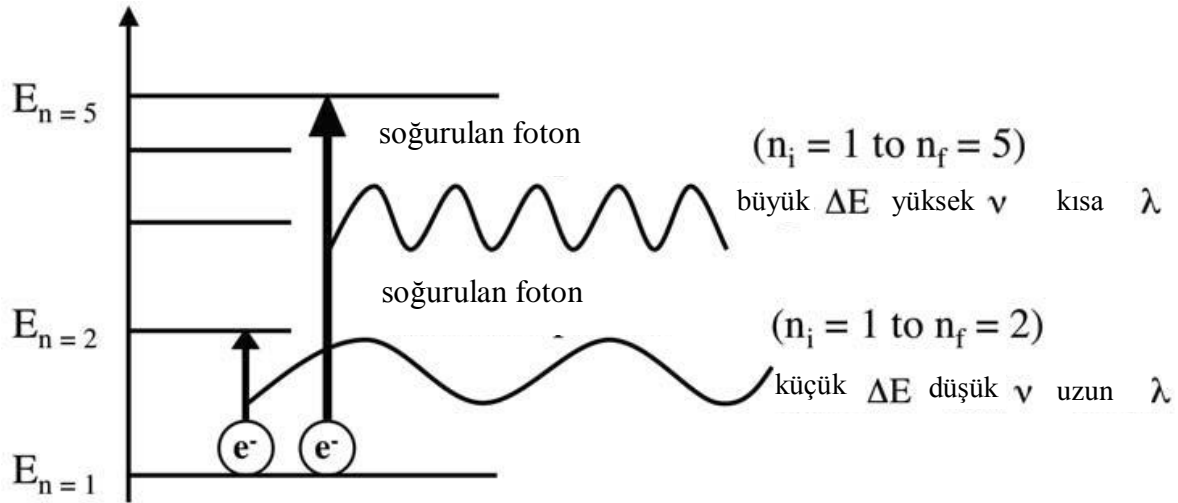
Önce, $n_i = 3, 4, 5, 6, \dots$ için ν hesaplanır, sonra $\lambda = c/\nu$ eşitliği ile λ belirlenir.

Schrödinger eşitliğinden üretilen E_n eşitliği ile hesaplanan λ değeri, gözlenen emisyonun λ veya ν değerine çok yakındır (10^8 de bir kadar).

Daha üst seviyelerden alt seviyelere yapılan tüm geçişler. Bu serilerin isimleri şöyledir:

$n_s = 1$	Lyman serisi	_____
$n_s = 2$	Balmer serisi	Görünür bölge
$n_s = 3$	Paschen serisi	_____
$n_s = 4$	Brackett serisi	_____

A. FOTON SOĞURMASI



Soğurulan ışığın frekansı aşağıdaki eşitlik kullanılarak hesaplanır:

$$\nu = \frac{R_H}{h} \left(\frac{1}{n_i} - \frac{1}{n_f} \right) \quad n_s > n_i \text{ için}$$

Not: Yayınlanan veya soğurulan ışığın enerjisi, frekansı ve dalgaboyu daima **pozitif** bir sayı olmalıdır! Soğurma ve yayınlanma kelimesi enerjinin kaybedildiğini veya kazanıldığını ifade eder.

$n_s > n_i$ ise _____. Elektronlar düşük E seviyesinden daha yüksek E seviyesine çıkarken enerji alır, yani enerji soğurur.

$n_i > n_s$ ise _____. Elektronlar yüksek E seviyesinden daha düşük E seviyesine inerken enerji verir, yani enerji yayımlar.

Rydberg formülünü kullanarak bir örnek yapalım:

Hidrojen atomunda $n = 3$ den $n = 2$ enerji seviyesine geçiş yapan bir elektron tarafından yayınlanan ışımının dalgaboyunu hesaplayınız.

$$v = \quad \quad \quad v = \quad \quad \quad =$$

$v\lambda = c$ eşitliğini kullanarak,

$$\lambda = \quad = \quad$$

$$\lambda = \quad = \quad$$

Hesapladığımız dalgaboyu, Balmer serisinde kırmızı hatta karşılık gelir. H atomunda bir elektron, $n = 3$ düzeyinden $n = 2$ düzeyine inerken, bu dalgaboyuna sahip ışık yayınlanır. Buna karşılık, elektron $n = 2$ düzeyinden $n = 3$ düzeyine çıkarken, bu dalgaboyuna sahip ışık soğurulur.

III. HİDROJEN ATOMU İÇİN DALGA FONKSİYONLARI (ORBİTALLER)

$H\Psi = E\Psi$ çözüldüğünde, çözümler E_n ve $\Psi(r, \theta, \phi)$ dir.

$\Psi(r, \theta, \phi) \equiv$ dalga fonksiyonunun durgun hali: zamandan bağımsız

$\Psi(r, \theta, \phi)$ çözümünde, iki yeni kuantum sayısı ortaya çıkar! Dalga fonksiyonunu 3 boyutlu tanımlamak için toplam 3 kuantum sayısı gerekir.

1. $n \equiv$ baş kuantum sayısı
 $n = 1, 2, 3, \dots \dots \infty$
bağlanma enerjisini belirler.
2. $l \equiv$ açısal momentum kuantum sayısı
 $l = \quad$
 l, n ile ilişkilidir.
en büyük değeri $l = n - 1$
elektronun açısal momentumunu belirler.
3. $m \equiv$ manyetik kuantum sayısı
 $m = \quad$
 m, l ile ilişkilidir
en büyük değeri $+l$, en küçük değeri $-l$ dir.
manyetik alanda atomun davranışını belirler.