

22 Tamam. herkes yerleşmeyi bitirdi. Tıklama sorusu için 10 saniye süreniz var. haydi neler yaptığınıza bir bakalım. Bu Cuma günü verdiğimiz kliker sorusuna çok benziyor. Tamam, hadi başlayalım, daha iyi yapmışsınız gibi görünüyor, bugünkü doğru cevap oranı %77, Cuma günü doğru cevap oranı % 30 du, ki çok benzer bir soruydu. Cevabın niçin 0.09×10^{-18} J olduğuna hızlıca bakalım.

106 aynı hileli dili kullandım, daha öncede de kullanmıştım, bundan sonra artık size hileli gelmeyecektir. Bu soru uyarılmış enerji seviyesi ve baş kuantum sayısı ile ilgili. hidrojen atomunun dördüncü uyarılmış enerji seviyesinin baş kuantum sayısı nedir?...5

126 OK. birileri niçin yanlış cevap verdiğini anlamıştır, umarım. Bildiğiniz gibi, doğru cevap $n=5$ seviyesidir. Artık bağlanma enerjisini bulabiliriz, iyonlaşma enerjisi şüphesiz bağlanma enerjisinin zıt işaretlisidir. Bağlanma enerjisinin daima negatif olduğunu biliyoruz, iyonlaşma enerjisinin daima pozitif olduğunu biliyoruz. hepsini bir araya getirip bu soruya tekrar bakarsak, cevap üzerinde %100 uzlaşabiliriz, buradaki seçenek 0.09 ve negatif değil. Pozitif versiyonudur, çünkü bahsettiğimiz gibi bir elektonu koparmak için sisteme vermemiz gereken enerji hakkında konuşuyoruz.

204 Bugün çoğunlukla e- nun dalga fonksiyonunu konuşacağız, başlamadan önce, Cuma günü bahsettiğimiz konuları gözden geçirmek istiyorum. Schrödinger eşitliğini çözerek, veya, aslında SE nin enerji için çözümünü kullanarak, e- ve çekirdek arasındaki bağlanma enerjilerini hesaplamıştık. Ne bulduğumuz hakkında konuştuğumuzda, öngördüğümüz bağlanma enerjisini H atomunun emisyon spektrumuna bakarak gerçekten doğrulayabildik, bir demo yaptık, ve absorpsiyon spektrumlarını konuştuk.

iki seviye arasındaki enerji farkını öngörürüz, eğer foton veriyorsa bu farkın yayımlanan ışığın enerjisine karşılık gelmesi gerektiğini biliyoruz, eğer absorpsiyonsa, bu farka karşılık gelen fotonu absorblar ve bir üst enerji düzeyine geçerler.

İki formül vardır, gördüğünüz gibi bunlar birbirine benzer. Bu formüller iki seviye arasındaki enerji farkına karşılık gelen absorblanan veya yayımlanan ışığın frekansını verir. Bu formüllerden ilki emisyon, ikincisi soğurmaya aittir.

Fark ettiğiniz gibi, bu iki formül arasındaki fark çok küçüktür, her ikisinde de z^2 terimi vardır, Bunlara Rydberg (redbörg) formülleri adı verilir, yayımlanan veya soğurulan ışığın frekansını hesaplar. Daha önce H atomu için Rydberg formülünü vermiştik, ama şimdi formülde ilave olarak Z^2 terimi var ve bu formüller sadece tek elektronlu sistemler için geçerlidir.

342 Bu formülü bağlanma enerjisinde kullanacağımızı biliyoruz. H atomunun bağlanma enerjisini neye eşittir? negatif Rydberg sabiti bölü ? n kare. Tek e- lu atomlar hakkında daha genel konuşacak olursak, şimdi, bağlanma enerjisi için daha genel bir eşitliğimiz var, $-Z^2 \times R_H / n^2$. Yukarıdaki eşitlik hakkında konuşacak olursak, aslında daha genel bir Rydberg formülünü konuşuyoruz demektir, ama burada herhangi bir $1é$ lu atom için eşitlik yeniden düzenlenmiştir, bunun için formülün önüne Z^2 terimi konmuştur.

436 Bazı problem tiplerini çözerken, problem-setinizin sonraki yarısında olduğu gibi, tek elektronlu atom için soğurulan veya yayılan ışığın frekansı hakkında konuşmanız gerekirse, örneğin Li^{+2} gibi, o zaman Z terimini koymamız gerektir, ve Li için Z değeri 3 dür. H için Z değeri şüphesiz 1 dir, bunun için H atomundan bahsettiğimizde formülde Z terimi düşer.

503 Cuma günü anlattıklarımızı kısaca gözden geçirdik, iki farklı düzey arasındaki geçişleri düşünecek olursak, son seviye, n -son değeri, n -ilk değerinden büyük ise, bu durumda, absorpsiyondan mı yoksa emisyonun bahsetmiş oluruz? Karışık cevaplar duyuyorum.

523 tabiki, absorpsiyondan yani soğurmadan bahsetmiş oluruz, çünkü n -son değeri, n -ilk değerinden büyüktür. Düşük enerji seviyesinden başlanır, bir fotonun absorblanması gerektiği anlamına gelir, enerji alınması gerekir, belli bir enerji aldıktan sonra e daha yüksek enerji seviyesine çıkar. Bu şu anlama gelir, yüksek enerji düzeyinden başladığında ve düşük enerji düzeyine geçildiğinde emisyon meydana gelir, e nun aldığı enerji geri verilir, salınan fotonun enerjisi geri verilen enerjiye eşittir, şüphesiz, eşitlikleri kullanarak, yayımlanan fotonun enerjisini, frekansını ve dalgaboyunu nasıl hesaplayacağımızı biliyoruz.

612 Schrödinger eşitliğinin enerji kısmının çözümü ile söyleyeceklerim bu kadar, şimdi Schrödinger eşitliğinin diğer kısmı üzerinde yoğunlaşacağız, Ψ nin çözümü ile ilgili olarak konuşacağız.

Şimdiye kadar bir tane kuantum sayısından, n baş kuantum sayısından bahsetmiştik. Şimdi ψ için SE nin çözümünden ortaya çıkan bir den çok kuantum sayısından bahsedeceğiz. Ψ nin gerçekte ne anlama geldiği hakkında konuşacağız.

639 Schrödinger eşitliğinden ilk bahsettiğimde, ψ nin elektronu temsil ettiğini söylemişim, daha spesifik konuşmak gerekirse, ψ yi orbital olarak düşünebilirsiniz. ψ nin ne anlama geldiğini düşüneceğiz. Bunu yaptıktan sonra, H atomu dalga fonksiyonlarının şekilleri hakkında konuşacağız, özellikle orbital şekillerini, daha sonra belki radyal olasılık dağılımından bahsedeceğiz.

706 Fakat, daha önce söylediğim gibi, dikkate almamız gereken daha fazla quantum sayısı vardır, çünkü ψ için SE çözdüğümüzde ortaya çıkarlar, bunlar tanımlamamız gereken diğer kuantum sayılarıdır. Bağlanma enerjilerini konuştuğumuzda, sadece bir tane kuantum sayısı vardı. Bu kuantum sayısı n di, yani baş kuantum sayısı. Sadece tam sayı değerleri alabiliyordu, 1, 2, 3 gibi ve sonsuza kadar gidebiliyordu. Potansiyel enerjinin kuantlaşmasının nedeni, n sayısına sahip olmasından kaynaklanır, sürekli bir enerjiye sahip olamayız, farklı enerji seviyeleri ortaya çıkar.

750 Bir dalga fonksiyonunu tanımlamak için sadece n quantum sayısı yeterli değildir, iki tane daha vardır, Bunlardan ilki l dir [TAHTA] açısal momentum kuantum sayısıdır, çünkü bir e -nun açısal momentumunu belirler. l den bahsedecek olursak, bir kuantum sayısıdır, çünkü sadece belirli değerler alabilir, istediğimiz bir değeri veremeyiz, sadece belirli değerler alır. n nin aksine, l sıfırdan başlar ve tamsayı değerleri alır, 1, 2, 3 , gibi. n nin aksine, sonsuza kadar gitmez, sınırlandırılmıştır, l nin en büyük değeri $n-1$ değerine karşılık gelir, bundan daha yüksek bir değer alamaz.

845 Bunun niçin sınırlı olduğunu sormak iyi bir sorudur-- n ve l arasında bir ilişki olduğu açıktır, ve l , n den büyük değer alamaz. Bunun nedenini düşünelim, çünkü l açısal momentumdur, bir e - nun açısal momentumunu tanımlar. Bunu bir de şu şekilde düşünelim: l , e - nun dönme kinetik enerjisidir, n ise toplam enerjidir, e - nun toplam bağlanma enerjisidir. Toplam enerji, potansiyel enerji + kinetik enerji dir. Biraz önce l nin kinetik enerji olduğunu söylemiştik, l dönme kinetik enerjisidir. Ayrıca e - nun potansiyel enerjiye sahip olduğunu

biliyoruz. Bu nedenle l nin n den daha büyük olması mantıklı değildir. aslında n e hiç bir zaman ulaşamaz, çünkü bu takdirde e- nun potansiyel enerjisinin olmaması gerekir, bu doğru değildir.

936 Bu ikinci kuantum sayısıdır, üçüncü kuantum sayısı m ile gösterilir, ancak l alt indisi vardır. buna manyetik kuantum sayısı adı verilir, burada magnetic quantum sayısının ne olduğu ile ilgilenmeyeceğiz. magnetic quantum sayısı bize orbitalin şeklinin ne olduğunu söyler veya e- nun manyetik alandaki davranışını belirler, aynı zamanda açısal momentumun z bileşenidir ve bu sayının limitleri hakkında düşünmek, bununla çok ilgilidir.

açısal momentinin bir bileşeni olduğu için, l den daha yüksek değer alamaz anlamına gelir, bu mantıklıdır, mesela 0 dan başlar ve l ye kadar gider. Bir bileşeni olduğu için, bir yöne sahiptir, bu nedenle artı l ve eksi l değerleri arasındaki değerleri alabilir, m eksi l değerinden başlar sıfırdan geçer ve artı l değerine kadar gider, bu aradaki bütün tam sayı değerleri, sıfır dahil, izinlidir.

1037 bir örnek üzerinde düşünecek olursak, mesela, $l=2$ olsun, ml nin alacağı en düşük değer ne olabilir? $ml = -2, -1, 0, 1, 2$, böylece ml için 5 farklı değer elde ettik.

1101 bunlar bizim üç kuantum sayımızdır. Aslında, bir dalga fonksiyonunu tanımlamak istiyorsak, bunun için üç tane kuantum sayısının gerekli olduğunu bilmeniz gerekir. Dalga fonksiyonu aynı zamanda üç tane yer faktörünün fonksiyonudur, bunlar r , yarıçapı, teta açısı ve ϕ açısıdır. şimdi bir dalga fonksiyonunu tam olarak tanımlayabiliriz ve dalga fonksiyonu hakkında konuşabiliriz.

Şimdi temel halin dalga fonksiyonunun ne anlama geldiğini konuşabiliriz. Cuma gününden biliyoruz. Enerji hakkında konuşurken, temel halde $n=1$ olduğunu söylemiştik, en düşük enerjili seviyedir, bir e- için en kararlı haldir. Fakat şimdi temel halin l ve m kuantum sayılarını da belirlememiz gerekir. Temel halin dalga fonksiyonunu, aynı zamanda $\Psi(1,0,0)$ dalga fonksiyonu şeklinde ifade ederiz. tekrar ediyorum, dalga fonksiyonu r , teta ve ϕ nin fonksiyonudur. 1154 Bu, temel hal dalga fonksiyonunun tam tanımıdır.

Lisede farklı tip orbitaller hakkında epeyce konuştuğunuzdan eminim, daha önceki derslerde, dalga fonksiyonunu bu şekilde işaretleyerek konuştuğunuz çok sanmıyorum. mesela orbitalleri daha çok s veya p veya d olarak isimlendirmeye alışkınsınız. Fakat bu fonksiyonlar bu harflere karşılık gelir, bunları çok kullanacağız. içinizde 1,0,0 orbitaline ne dendiğini bilen var mı? Özel olarak 1s orbitaline karşılık gelir, sadece s orbital değil, sadece 1s orbitalini gösterir.

1233 kimyacıların terminolojisini kullanmak iyidir, çünkü bu derste hepimiz kimyacıyız. Bu sayıların fiziksel tanımlarını kullanmayacağım, bundan emin olabilirsiniz, fakat orbitalin ne olduğunun anlamak için bu korelasyonu yapabilmeliyiz. (1,0,0) fonksiyonu yerine 1s orbitali deriz, çünkü bu orbitali tam olarak tanımlamanın diğer bir yolu budur. n kabuğu gösterir, burada 1 sayısı, birinci kabuğa karşılık gelmektedir. l alt kabuğu gösterir, burada s harfi ile gösterilmektedir.

aslında diğer altkabuklarda da sayıları harflere dönüştürürüz, nasıl isimlendirirdiklerine bir bakalım. $L=0$ S orbitalidir, $l=1$ ne orbitalidir? P dir. $l=2$ ne orbitalidir? d orbitalidir ve

L= 3 f orbitalidir. bu isimlerin veya harflerin bir anlamı yoktur, şunlara bir bakalım S P D F Bunlar QM öncesi spectroscopy terimleridir. Mesela , sharp, principle, defuse, fundamental . Şimdi bir anlamı yoktur, artık spectroscopi de kullanılmıyor, fakat isimlerin geldiği yer bu., Kimyacı olduğumuz için, 1,0,0 yerine 1s deriz.

1356 l kuantum sayısı için başka isimlendirmeler kullandığımız gibi, m içinde farklı isimler kullanırız. Mesela L sıfıra eşit olduğunda, m yi nasıl isimlendiririz. 1426 mesela l=1 olduğunda, Bu ne tür bir orbitaldir? P orbitali. mesela bu durumda m =0 değeri alabilir, m sıfıra eşitse buna pz orbitali deriz. Bunu göstermek için z altindisini kullanırız.

1445 benzer şekilde, M +1 e veya -1 e eşit ise, bunlara py orbital veya px orbitali deriz. Şunu bilmelisiniz, m eşit sıfır ise ve p orbitalinden bahsediyorsak daima pz orbitaline karşılık gelir, px ve py biraz karmaşıktır, m -1 ve m+1 orbitallerinin doğrusal bileşimidir, +1 pozitif doğrusal kombinasyona ve -1 negatif doğrusal kombinasyona karşılık gelir, bunlardan sorumlu değilsiniz, pozitif kombinasyonun py orbitaline, negatif kombinasyonun py orbitaline karşılık geldiğini bilmek zorunda değilsiniz, ama +1 veya -1 e sahip olduğumuzu, bunlara py veya px dediğimizi bilmelisiniz, bu kadarı yeterlidir, çünkü 1:1 karşılık gelmesinden biraz daha karmaşıktır, ama, m=0 daima pz orbitalidir.

1542 bu dalga fonksiyonlarından bazılarına bakalım, bunların orbital isimlerini bildiğinizden eminim, ama numaralarını bildiğinizi sanmıyorum. Bunu bir kere yaptıktan sonra, diğerlerini de yapabiliriz.fakat önce bu dalgafonksiyonlarından bir tanesini tanımlamamız gerekir. en düşük enerjili temel hali dalgafonksiyonu 1,0,0 dır. Buna psi1,0,0 dalgafonksiyonu denir, buna 1s orbitali deriz, ayrıca bu formula kullanarak bu orbitalin enerjisini nasıl hesaplayacağımızı biliriz, bu bağlanma enerjisidir, $-R_H/1^2$. formülde n yerine 1 koyarız, böylece enerjisini bulmuş oluruz.

1629 bundan sonraki enerji düzeyinde n=2 dir. Burada da n ve l değerleri vardır en düşük enerjide l = 0 dır, buna $\Psi_{2,0,0}$ dalgafonksiyonu denir. Bu orbitalin adı nedir? 2s orbitali. Burada bir şeye işaret etmek istiyorum, burada söylemeyi unutmuşum, fark ettiğiniz gibi s in altında bir indis yok, halbuki p nin vardır ve m nin ne olduğunu gösterir....s de buna ihtiyaç duyulmaz çünkü s orbitali sadece sıfır m değerine sahiptir. Bu nedenle yazmamıza gerek yoktur.

1718 ayrıca bu orbitalin enerjisini hesaplayabiliriz. Enerji eşittir eksi Rydberg sabiti bölü 2 nin karesi. Devam ederek bunu her orbital veya hal fonksiyonu için yazabiliriz. Mesela 2,1,1 hal işareti için dalga fonksiyonu $\Psi_{2,1,1}$ dir.bu orbitalin diğer adı nedir? 2p ne? OK, karışık cevaplar veriyorsunuz, doğru cevap 2px veya 2py, hangisini isterseniz..farkettiğiniz gibi enerjileri 2S orbitali ile aynı , bu H atomu için doğrudur, 2s ve 2p orbitallerinin enerjisi aynıdır.

1813 2,1,0 hal fonksiyonu nu konuşalım. Dalga fonksiyonu $\Psi_{2,1,0}$ dır. Hangi orbital dir? Burada tek doğru cevap vardır, 2pz orbitali. Enerjileri nasıldır? Aynı mı veya farklı mı? enerjileri aynıdır. Çünkü enerjileri sadece n değerine bağlıdır, l veya m değerine değil.

1836 son olarak, son örnek üzerinde konuşacak olursak, n=2 dir, Hal fonksiyonu 2,1,-1 dir, dalgafonksiyonu $\Psi_{2,1,-1}$ dir. Bu orbital biraz önce yaptığımızın tam tersidir. İlkinde, önce 2px demiştik, şimdikine 2py ile başlayalım..enerjileri aynıdır , sadece n değerine bağlıdır...

1903 kimya terminolojisini kullanarak dalga fonksiyonlarının nasıl isimlendirildiğini gördük...şimdi bununla ilgili clicker sorusuna geçelim. 5,1,0 hal fonksiyonuna karşılık gelen orbital hangisidir? Son 10 saniye.

1944 oran % 77, çok iyi, söylediğim gibi, bunları hatırlamak zorunda değilsiniz. geri dönüp bunlara bakmalısınız, bunların nasıl isimlendirildiklerini anlamalısınız, bundan sonraki derslerde benzer soru sorulabilir, % 77 ile iyi iş çıkardınız. Şimdi devam edelim

2003 önce şunu işaret etmek istiyorum, elimizde 3 kuantum sayısı var, 3 kuantum sayısı bir orbitali üç boyutta tanımlar, bir orbitali tarif etmek için 3 farkı kuantum sayısının gerekli olması mantıklıdır. Biraz önce söylediğim gibi, tam bir tanım için, n, l, ml kuantum sayılarına ihtiyacımız vardır. 2024 bir orbitalde n kuantum sayısı, kabuğu belirler—bir atomun klasik resmine karşılık gelir, bir enerji seviyeniz vardır, ikincisi daha uzak, sonraki daha da uzak, böylece gider, bu bir tür kabuktur 2037 l altkabuk tur, sonrada ml vardır, sonunda orbitaller tam olarak tanımlanır. 2047 Gördüğünüz şey şudur, her bir n de mutlaka l=0 mevcuttur. orbitali tanımlarken sadece tek bir olasılık vardır, s orbitalini konuşurken m alt indisini dahil etmek zorunda olmayışımızın nedeni budur.

2102 Aslında bildiğimiz bir şeyi tekrar söyleyeceğim, bunların hepsinin enerji ile nasıl ilişkili olduğundan bahsedeceğim. Bunun üzerinde gerçekten ısrarla durmak istiyorum. H atomunu konuşacak olursak--aynı n değerine sahip bütün orbitaller aynı enerjiye sahiptir. Bazılarınız kafanızdan şunu söyleyebilir. Dur bir dakika. Bunun ne olduğunu liseden hatırlıyorum. p orbitalinin enerjisinin s orbitalinden farklı olduğunu biliyorum. Bu tek é lu atomlar için doğru değildir. Çok é lu atomlar için geçerlidir. tek é lu atomları konuştuğumuzda, tek é lu atomlarda orbitallerin bağlanma enerjisi eşittir – R_H/n^2 dir. Ve sadece n e bağlıdır.

2147 mesela n=2 kabuğu hakkında konuşacak olursak, buradaki 4 orbital aynı enerjili olacaktır. Buradan bir genelleme yapabiliriz. Herhangi bir baş kuantum sayısındaki orbitallerin hepsi aynı enerji seviyesine sahiptir. Söylemek istediğim diğer bir şey, herhangi bir n kabuğunda, n^2 kadar dejenere orbital bulunur. Dejenere kelimesinin anlamı kısaca aynı enerjili demektir, yani n^2 tane orbitalin enerjileri birbirine eşittir.

2221 Buradaki enerji seviyesi diyagramına bir göz atalım, tekrar edeyim, burada gördüğünüz en düşük enerjili temel haldir,(sınıırım şu an pointer çalışmıyor), bu orbital için sadece tek seçenek vardır, çünkü n=1 dir, yapacağımız şey bu kadardır. Burada sadece 1s orbitali vardır, n2 de yerine koyarsak tek dejenere orbitale sahiptir. n=2 kabuğu hakkında konuşacak olursak, n2 eşittir 4 veya 4 tane aynı enerjili orbital vardır, bunlar 2s orbitali ile l=1 olan 2px, 2pz ve 2py orbitalleridir, bunların hepsi aynı enerjili yani dejenere orbitallerdir.

Bundan sonraki bir üst enerji seviyesi, n=3 baş kuantum sayısına aittir. Burada bir tane 3s orbitali, 3 tane p orbitali 3px,3pz, 3py vardır, ayrıca l=2 için 5 tane eş enerjili orbital mevcuttur, l=2 orbitallerini hatırlayanınız var mı? evet, herkes hatırlıyor.İYİ. 5 tane d orbital vardır, şöyle isimlendirilir, 3dxy, 3dyz, 3dz2, 3dxz ve 3d x2-y2. (tekrar çalışmaya başladı).

Burada bilmeniz gereken nedir? Bilmeniz gereken, m=0 olduğunda bu 3dz² orbitalidir. Hepsi bu kadar. Diğerleri, mesela, dxy veya dyz orbitalleri karmaşık doğrusal bileşimlerden elde edilmiştir, bunlar hakkında endişelenmenize gerek yok. İlerde bunların isimlerini ve şekillerini bilmeniz gerekir. İkinci dönem, Profesör Drennan, geçiş elementleri kimyasında

daha derinlemesine işleyecek, burada d orbitallerini ayrıntılı vermeyeceğiz, şimdi, d orbitallerin kafanızın bir yerine koyun, s ve p orbitallerindeki gibi bunları da aynı şekilde düşünmemiz gerekir. Fakat, mesela, $3dz^2$ hariç isimlerini bilmenize gerek yok. Atomlar hakkında daha ayrıntılı konuştuğumuzda d orbitalleri oldukça önemli olacaklar.

2500 d orbitalleri de eşenerjilidir, yani dejeneredir. Şimdi bundan sonraki adımı düşünmeye başlayabiliriz, çünkü orbitalleri 3 kuantum sayısı ve 3 yer değişkeni r, teta ve fi ile tamamen tanımladık, şimdi düşünmeye başlayabiliriz, Gerçekten dalga fonksiyonu nedir? Mesela, farklı dalga fonksiyonlarının şekilleri ne olabilir?

Aslında, burada psi nin fiziksel yorumunu sormamız gerekir, bir elektron için psi nin anlamını sormamız gerekir, psinin ne anlama geldiğini düşünmek için psi nin fiziksel yorumunun bilmemiz gerekir. Cevap: psinin anlamını gerçekten bilemeyiz. Bir dalga fonksiyonunun ne olduğunu klasik yoldan düşünenin bir yolu yoktur. Açıklayabilmek için klasik analogi veya benzetme yapamayız, dalga fonksiyonlarını resmedemeyiz. Dalga fonksiyonları ile çalışırken bu uygun değildir. Yoğunlukla QM de karşımıza çıkan gerçek şudur, QM ile bir dünyayı tanımlamak, gözlediğimiz dünyadan çok farklıdır, her zaman gerçek dünya ile bire bir benzetme yapamayız.

2612 Fakat bunların nasıl resmedileceği konusunda endişelenmemize gerek yok, bir dalga fonksiyonunun ne olduğunun fiziksel yorumu olmasa bile, dalga fonksiyonunun karesinin ne olduğunun fiziksel yorumu vardır. Bundan sonra, r, teta fi nin ye ile tanımlandığımız herhangi bir noktada n, l, m kuantum sayıları ile belirlediğimiz dalga fonksiyonlarının karesinin anlamını konuşacağız. Dalga fonksiyonunun karesini aldığımızda olasılık yoğunluğunu elde ederiz, Dalga fonksiyonunun karesi çekirdekten belli bir uzaklıkta çok küçük bir hacimde é nun bulunma olasılığıdır. Bu olasılık yoğunluğu dur. Buradaki önemli nokta, bu sadece olasılık değildir, aynı zamanda yoğunluktur, olasılık bölü hacime eşit olduğunu biliyoruz.

Dalga fonksiyonunun karesinin ne olduğunu düşünmemiz için, bize sağlam bir yol gösteren Max Born'a teşekkür etmemiz gerekir. Aslında, SE ilk kez ortaya atıldıktan sonra, dalga fonksiyonunun anlamının nasıl yorumlanacağı konusunda pek çok tartışma yapıldı. Pek çok fikir ileri sürülmüştü, fakat hiç biri gözlemlerle uyuşmuyordu, ta ki Max Born'a kadar. MB, dalga fonksiyonunun karesini alalım, bu ufak bir hacimde elektronun olasılık yoğunluğu dur" diye bir fikir ileri sürdü.

Bu çok yardımcı oldu bize yeni bir düşünme yolu sağladı. Dalga fonksiyonunun karesi eşitliğini türetemezdik, çünkü bu tam bir yorumlamadır, fakat bu yorum çok iyi işlemişti, bu ilk kez ileri sürülmeden önce, hiç bir deneysel gözleme daha önceki fikirler ile örtüşmüyordu, fakat olasılık yoğunluğu, yani dalga fonksiyonunun karesi deneysel gözlemlerle uyuştu.

Max Born hakkında biraz gereksiz bilgi vereyim. MB bize sadece bu dalga fonksiyonlarının karelerini vermekle kalmadı, Oliva Newton John' u da verdi, ONJ onun torunuydu, gözlerinden anladınız mı bilmiyorum ama bence biraz benziyor. Çocukken dedesinin evine gittiğinde bunları işitmiş midir acaba..belki de d.f. karesi konuşuluyordu. Sizin için biraz gereksiz ve küçük bir bilgi verdim. Şimdi gereksiz olmayan bilgilere geçelim.

2843 Şimdi olasılık yoğunluğunu nasıl düşüneceğimiz hakkında biraz daha fazla fikre sahibiz. Aslında şunu biliyoruz, bu bir yoğunluktur, gerçek bir olasılık değildir, yoğunluk nokta

diyagramına bir bakalım, burada noktaların yoğunlukları ile olasılık yoğunluğu arasında bir korelasyon vardır. Çekirdeğin yakınlarında yoğunluğun daha kuvvetli olduğunu görüyorsunuz, noktalar birbirlerine çok daha yakındır, çekirdekten uzaklaştıkça noktalar birbirinden uzaklaşır. Bu durum, çekirdekten uzaklaştıkça bu hacim içindeki olasılık yoğunluğunun gittikçe azalacağı, çekirdekten çok uzaklaştıkça sıfıra çok yaklaşacağı ama hiç bir zaman tam sıfır olmayacağı anlamına gelir. Herhangi bir orbital veya atom hakkında konuşacak olursak hiç bir zaman sonlanmazlar, sıfıra gitmezler. Fakat olasılık sadece 1A mesafede önemlidir. Bu durumda ya ϵ yoğunluğu çok çok ufaktır denir ya da hiç bir zaman sonlanmaz denir, atom nedir diye düşünürseniz her ikisi de gayet isabetli anlatım yoludur.

2944 Bu olasılık yoğunluğudur, fakat dalga fonksiyonunun gerçek çözümüne göre düşünecek olursak, bir adım geriye gidelim. H atomu için dalga fonksiyonunun çözümünü daha önce göstermiştim Olasılık yoğunluğu için tekrar göstereyim, sonr olasılık yoğunluğunu oluşturalım. Herhangi bir dalga fonksiyonunu konuşacak olursak, bunu iki bileşene ayırabiliriz. Bunlara radyal dalga fonksiyonu ve açısız dalga fonksiyonu adı verilir. Bunları ayrı ayrı inceleyebiliriz. Radyal dalga fonksiyonu, sadece elektronun çekirdeğe uzaklığı ile ilgilidir, yani yarıçap ile ilgilidir ve R harfi ile gösterilir. iki kuantum sayısı n ve ℓ ile tanımlanır, ℓ az miktarda r yarıçapının fonksiyonudur. 3034 Açısız dalga fonksiyonunu ℓ ve m ile tanımlanır, iki tane açının teta ve ϕ nin fonksiyonudur, elektronun yerini ve şeklini belirler.

3046 Bunun ne olduğuna bir bakalım, burada H atomunun 1s orbitalini göreceğiz. Kitabınıza bakarsanız, büyük bir çizelgede, çeşitli dalga fonksiyonları için SE nin çözümleri vardır. Bu 1s orbitalidir. Eğer ilgilenirseniz, 2s, 3s, 4s orbitallerine bakabilirsiniz, bunlar sizin merakınıza kalmış. Burada 1s orbitalinin çözümünü görmektesiniz. Burası radial kısmıdır, diğeri de açısız kısmıdır. Bu iki parçayı birleştirerek toplam dalga fonksiyonunu elde ederiz. Burada daha önceden görmediğiniz yeni bir sabit görmektesiniz. Burada yeni olarak neyi görürsünüz?

Evet, a_0 ...bu sizin için yeni bir sabit. Buna Bohr yarıçapı denir. Buna neden Bohr yarıçapı dediğini açıklayacağım—belki bugün Bohr isminini nereden geldiğini anlatırım, fakat şimdi bunun bir sabit olduğunu bilmeniz yeterlidir. değeri 52.9 pm veya yaklaşık 0.5 Å dır.

Söylemek istediğim önemli bir şey, H atomunun 1s orbitalinin dalga fonksiyonuna bakarsanız, aslında dalga fonksiyonunun açısız kısma bakarsanız, bir sabit göreceksiniz. Ne teta ya ne de ϕ ye bağlıdır. Bu orbitldeki bir ϵ nu tanımlamak için bu iki açının bir önemi yoktur. Yani açısız kısmın ne olduğu önemli değildir. Hepsini aynı noktaya çıkar.

3221 Bizim için anlamı nedir? Bu bize s orbitalinin tamamen simetrik olduğunu söyler. Bu mantıklıdır, çünkü sadece r ye bağımlıdır, yani çekirdeğe olan uzaklığa bağlıdır. Hem teta dan hem de ϕ den bağımsızdır.

3243 Bu resimde göstermek istediğim şey, 1s orbitalinin elektron bulutudur, bunu olasılık yoğunluğu olarak düşünün. Burada 1s dalga fonksiyonunun yarıçap değişimine karşı çizilmiş grafiğini görüyorsunuz, burada olasılığı görmektesiniz-- bu dalga fonksiyonunun karesidir. şimdi olasılık hakkında düşünebiliriz. başlangıç noktasında olasılık çok yüksektir, yarıçap arttıkça yani çekirdekten uzaklaştıkça olasılık gittikçe azalmaktadır, açıdan bağımsızdır. 3321

Burada farklı s orbitallerinin olasılık çizimlerini görmektesiniz, üst tarafta, olasılık yoğunluk grafiği verilmektedir, burada biraz önce söylediğim şeyi görebilirsiniz, çekirdek üzerindeki çok yüksek olasılık yoğunluğu, dışarı doğru gittikçe azalmaktadır. Aşağıdaki grafikler ise gerçek dalga fonksiyonlarıdır. Çok yüksekten başlar ve aşağı doğru azalır. 2s dalga fonksiyonuna bakmak çok ilginçtir. Aşağıdaki grafiğe bakalım, dalga fonksiyonunun gerçek grafiği, oldukça yüksek pozitif bir değerden başlamıştır, aşağı doğru hızla azalmış, sıfır değeri almış ve sıfırdan geçerek negatif olmuş, sonra tekrar yükselerek sıfırdan geçmemiş ama sıfıra yaklaşmıştır.

Dalga fonksiyonunun sıfır olduğu yerde, dalga fonksiyonunun karesi de sıfıra gidecek demektir. Üst taraftaki olasılık yoğunluk çizimine bakacak olursanız, ortadaki beyaz kısım olasılık yoğunluğunun sıfır olduğu yeri göstermektedir.

3425 Üçüncü duruma, 3s orbitaline bakalım. 3s orbitalinde de benzer şeyler görebiliriz. dalga fonksiyonu oldukça yüksek pozitif bir değerden başlamaktadır, azalarak sıfırdan geçer, bu noktada olasılık yoğunluğu sıfır olacaktır, yoğunluk grafiğinde görebilirsiniz, sonra negatif bölgeye geçer, sonra yine sıfırdan geçerek yükselir, tekrar pozitif olur, bu esnada ikinci bölge oluşur ve sonra azalarak sıfıra yaklaşır, bunları olasılık yoğunluk grafiğinde görebilirsiniz

3456 Gerçek dalga fonksiyonuna baktığımızda bunun anlamı nedir? Bunu dalga olarak düşündük, dalgaların hem genliği hem de yönü vardır, hem pozitif ve negatif olabilir,

3510 mesela, gerçek dalga fonksiyonuna baktığımızda, bu kısımların pozitif genliğe sahip olduğunu söyleyebiliriz, burada ise negatif genlik vardır. Eğer olasılık yoğunluk grafiğine bakarsanız, her ikisi arasında bir fark yoktur, okey, burada işaretlerin bir anlamı yoktur, çünkü karesini alıyoruz, negatif veya pozitif olmasının bir önemi yoktur, önemli olan sadece genliktir. Burada önemli olan é nun gerçek dalga davranışını düşünmektir. Bunu aklımızın bir köşesinde bulunduralım: bazı bölgeler pozitif genliğe, bazı bölgeler negatif genliğe sahiptir.

p orbitali ve bağları anlatırken bu konu tekrar gündeme gelecek, bunu daha çok konuşacağız. Bu düşünceyi biraz tanıtmak istiyorum. 3551 çünkü, elektronların dalga özelliğini düşünecek olursak, bağın oluşması için, iki farklı elektron arasında yapıcı girişimin oluşması gerekir. Bir bağ oluşturmak için yapıcı girişimin olmasını isteriz. Halbuki, yokedici girişim olursa, bir bağ oluşturamazsınız. bunun pozitif mi yoksa negatif mi olduğunu düşünmek zorundasınız. Bunu şimsi düşünmek zorunda değilsiniz, konumuz şimdi bu değil, fakat lisede p orbitalini konuşurken faz kavramını duymuş olabilirsiniz, p orbitalinin loblarını negatif ve pozitif olarak işaretlemiş olabilirsiniz. İçinizde bunları lisede yapan var mı? Çok az...işaretler gerçek dalga fonksiyonları ile ilgilidir. Bir kaç ders sonra bağ konusunu anlatırken bunlardan daha fazla bahsedeceğim. Dalga fonksiyonlarını konuşurken, biraz giriş yapmak istedim.

3637 Bu grafiklere bakarken gerçek anahtar, sıfır olasılık yoğunluğundan geçmektir, sıfır olasılık yoğunluğuna sahip olmaktır. Buna düğüm adı veririz. Düğüm, spesifik olarak, r , θ , ve ϕ ile belirlenen dalga fonksiyonunun bir değeridir, yani, dalga fonksiyonunun karesinin veya olasılık yoğunluğunun sıfır olduğu yer anlamına gelir.

Burada 1s orbitalini görmektesiniz. Burada kaç tane düğüm vardır? Evet, düğüm yoktur. Olasılık grafiğinde görüldüğü gibi, 1s orbitali asla sıfırı geçmez, düğüm içermez, süreklidir. Sonra, mesela, 3s orbitalinde kaç tane düğüm vardır?.2, doğru. 3s orbitalinde 2 tane düğüm

bulunur.

3737 Bu düğümlerin nerelerde olduğunu belirleyebiliriz, ders notlarınızda yazılmıştır. 2s orbitalinde, düğüm $2a_0$ uzaklığında bulunur, a_0 bir sabittir, ve Bohr yarıçapıdır. 3s orbitalinde $1.9 a_0$ ve $7.1a_0$ mesafesinde iki düğüm bulunmaktadır.

Ayrıca bu konuştuğumuz düğümlerin cinsini belirleyebiliriz. Gelecek derste açılal düğümleri göreceğiz, bu dersimizi konusu ise radyal düğümler...Radyal düğümler r ile tanımlanır. R nin belli değerlerinde dalga fonksiyonu ve olasılık yoğunluğu sıfıra eşit olur.

s orbitallerini konuşacak olursak, bunlar açığa bağlı değildir, sadece r ye bağlıdır. Bu nedenle sadece radyal düğüm içerirler. S orbitalindeki düğümlerin hepsi radial düğümlerdir. Mesela 2s orbitalinde $r=2a_0$ mesafesinde bir tane radyal düğüm vardır. Bu uzaklıktaki her noktada elektronun bulunma olasılığı sıfırdır.

3842 radyal düğümlerin sayısını hesaplamak çok kolaydır. Sadece s orbitaline değil, aynı zamanda, p orbitaline, d orbitaline, kısaca her tür orbitale uygulayabilirsiniz. Şöyle hesaplanır, baş kuantum sayısı eksi 1 eksi ℓ kuantum sayısı.

Bunu 1s orbitaline uygulayalım. $1-1-0 = 0$ radyal düğüm. Gördüklerimizle örtüşüyor. 2s orbital için de deneyelim. $2-1-0=1$, beklediğimiz gibi 1 radyal düğüm. Bunu olasılık yoğunluk grafiğinde görebiliriz. Şimdi de 3s orbitalini düşünelim. $3-1-0=2$ radyal düğüm.

Bu çok kolay olmalı. Bakalım bu kliker sorusunda % 100 yapabilecek misiniz. *4p orbitalinde kaç tane düğüm bulunur?* Son 10 saniye. OK. çoğunuz doğru cevaplamış. 4p orbitalinde 2 radyal düğüm vardır.—Bunu yapalım, çünkü herkes doğru cevap verememiş.

4020 4p orbitalini konuşacak olursak, eşitlik $n-1-\ell$. Başkuantum sayısı 4, sonra 1 sonra, p orbitalinin ℓ değeri kaçtır? 1, (bunu soruda belirtmemiştim) , 2 radyal düğüm olacaktı.

4049 Notlarımıza geri dönelim. Olasılık yoğunluğu nokta grafiklerini yaptıktan sonra, bu orbitallerin şekilleri hakkında bir fikir edinmiş olduk. s orbitallerinin tamamen simetrik olduğunu biliyoruz. Bugün p orbitallerini konuşamadık, bunun hakkında detaylı olarak Cuma günü konuşacağız. Daha önceden söylediğim gibi, d orbitalleri hakkında Prof. Drennan bilgi verecek.

Dalga fonksiyonunun karesi hakkında konuştuğumuzda, olasılık yoğunluklarını konuşuyoruz demektir, yani, çok küçük bir hacim içindeki olasılıktan söz ediyoruz demektir. Aslında bu küçük hacimden kurtulmanın bir yolu vardır, atomun belli bir bölgesindeki ψ nun bulunma olasılığından bahsedebiliriz. Bunu radial olasılık dağılım grafiğini kullanarak yapabiliriz. Radyal olasılık dağılımı, çekirdekten belli bir uzaklıkta çok ince bir kabukta elektronun bulunma olasılığıdır. Buradaki kalınlık dr ile tanımlanır.

Söylediğimizi bir düşünelim. çekirdekten belli uzaklıkta dr ile tanımlanan çok ince bir kabukta ψ nun bulunma olasılığından söz ediyoruz. 4158 Bu kabuğu düşünürseniz, aslında bir yumurta kabuğunu düşünebilirsiniz, bunu düşünmenin belkide en iyi yoludur, yumurtanın sarısını çekirdek gibi düşünebiliriz, yumurta tam simetrik ve tam yuvarlak olmalı. Radial olasılık dağılımı konuştuğumuzda, bu kabuktaki elektronun bulunma olasılığının ne olduğunu düşünmenizi isterim. Bunu yumurta kabuğu gibi düşünebilirsiniz.

4225 Bunu şu eşitliği kullanarak yapabilirsiniz. s orbitali için ROD eşittir $4\pi r^2$ çarpı dalga fonksiyonunun karesi çarpı dr. ($4\pi r^2 \Psi^2 dr$.) Bu bizim için anlamlıdır, çünkü, dalga fonksiyonunu düşündüğümüzde, Olasılık bölü hacim = olasılık yoğunluğudur, bunu kabuğun hacmi ile çarparsak, sonuçta olasılık elde edilir, düşüneceğimiz güzel bir terimdir.

4307 Şüphesiz belli bir uzaklıkta, dr kalınlığında çok ince bir küresel kabuk hakkında konuşuyorsak, $4\pi r^2 dr$ hakkında konuşuyoruz demektir, bunu olasılık yoğunluğu ile çarpabiliriz.

4321 Bunun grafik ile ne olduğunu gösterebiliriz. ROD nı yarıçapa karşı grafiğe alabiliriz. Ψ_{100} fonksiyonu için, 1s orbitali için, sıfır ile başlarız. Çekirdekte ROD nın değeri sıfır olacaktır, halbuki olasılık yoğunluğu çekirdek üzerinde çok yüksekti. Bunun nedeni, ROD sıfırdan başlamasının nedeni şudur. olasılık yoğunluğunu hakim ile çarparsak, yarıçap sıfır olduğunda çarpım sıfır olacaktır. Buradaki sıfır noktası biraz yapaydır.

Ders notlarımızda bu sıfır noktasını daire içine almanızı istiyorum ve buraya “ bu bir düğüm değildir” diye yazın. Buradaki düğüm değildir, Çünkü düğüm olasılık yoğunluğunun sıfır olduğu yer demektir. R=0 başlangıç noktasıdır, düğüm değildir. Yarıçaptan gittikçe uzaklaşırsak çarptığımız hakim gittikçe büyüyecek, çünkü uzağa gittikçe bu ince kabuk kabuk gittikçe büyüyecektir.

Belli bir mesafede, ϵ nun bulunma olasılığının maksimum olduğu bir noktaya ulaşılabilecektir. Bu en olası yarıçaptır, R_{e0} ile gösterilir. Bu nokta ϵ nun bulunacağı en yüksek olasılıktır. H atomu için bu a_0 a eşittir, hatırladığınız gibi bu Bohr yarıçapıdır, 0.529 Å dır. Kısaca, çekirdekten uzaklaştıkça ϵ nu her yerde bulabilirsiniz, fakat olasılığın en yüksek olduğu uzaklık Bohr yarıçapıdır, anlamına gelir.

Bohr yarıçapının nereden geldiğini biraz daha açalım. Kuantum mekaniği öncesi önerilen bir atom modelinden gelmektedir. Bu yarıçapı Niels Bohr, adını verdiği atom modelinde önermiştir. Burada Einstein ile bir fotoğrafı görülmektedir. 4545 Şunu hatırlamanız gerekir. Atomun bu modelini düşündüğümüzde, 1911 de, atomun hem ϵ na hem de çekirdeğe sahip olduğu daha yeni anlaşılmıştı. Bu ikisinin bir arada nasıl durduğunu açıklamak gerekiyordu, çekirdek ve ϵ arasındaki etkileşimi açıklayan SE 15 yıl sonra ortaya atılmıştı.

Bu arada Bohr atoma klasik bir model önerdi. Ekranın sol tarafında gördüğümüz gibi, ϵ çekirdeğin çevresindeki bir yörüngede döner. Bunun nasıl mümkün olduğunu açıklayamasa bile, bu çıkış noktasını kullandı, H atomunda enerji seviyelerinin kuantlı olduğunu biliyordu. bizim son derste gördüğümüz gibi aynı yoldan öğrenmişti. H atomunun emisyon spektrumlarını görmüştü. Biz ayrıca neon için de bakmıştık. H atomunda ayrı enerji düzeylerini gördük. O da aynı şeyi gözlemişti ve biliyordu.

Bir tür quantum mekaniksel model önerdi, atomun klasik modelinde, yörüngelerin enerji seviyelerinin kuantlı olduğu fikrini ileri sürdü. Klasik mekaniği kullanarak bazı hesaplamalar yaptı, hesaplamalar sonunda a_0 dediğimiz sayıyı buldu, bu nedenle Bohr yarıçapı adı verilmiştir. Bu değer H atomu için QM de en olası yarıçapa karşılık gelir.

Bohr modeli hakkında daha fazla konuşmayacağım, çünkü artık doğru olmadığını biliyoruz. Bunun üzerinde çok zaman harcamayacağım. Mesela, doğru olmadığını yandaki şekilde görebiliriz. çünkü H atomunda ϵ nun yarıçapı sabittir, çekirdeğe olan uzaklığını tam olarak belirlemek mümkündür. Bu klasik mekanikten gelen deterministik görüştür.

Fakat QM modeline göre yarıçapın ne olduğunu tam olarak bilemeyiz, sadece e nun belirli noktalarda bulunma olasılığından söz edebiliriz. kuantum mekaniksel resme göre gerçek budur. Bohr yarıçapı ile ROD nı üst üste getirirsek, tek bir yarıçapa göre çok daha karmaşık bir şey görürüz. Bohr yarıçapı sadece e nun bulunma olasılığının en yüksek olduğu yarıçapa karşılık gelmektedir. QM de her yarıçap olabilir, sadece bazı yarıçaplarda olasılık çok çok çok düşüktür.

Sanırım bugün biraz erken bırakacağız, fakat önümüzdeki derste ROD nı 1s den farklı orbitallere uygulayacağız.