

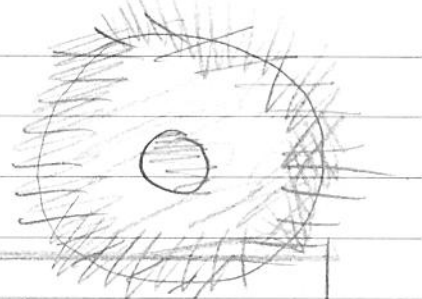
BÖLÜM-5

Atom ve Molekül Modelleri

Hidrojen Atomu

$$V = -\frac{e^2}{r}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \Phi(\vec{r}) - \frac{e^2}{r} \Phi(\vec{r}) = E \Phi(r)$$

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{mc^2 \alpha_e^2}{n^2}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

1-Boyutlu Atom Modelleri

$$V(x) = -V_0 \delta(x)$$

$$x=0$$

$$E = -|E|$$

$$\frac{d^2 \Phi}{dx^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \delta(x) \Phi = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \Phi$$

$$\Phi_I(x) = A e^{\alpha x}$$

$$x < 0$$

$$\Phi_{II}(x) = B e^{-\alpha x}$$

$$x > 0$$

$$\alpha^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

Sınır Koşulları

$$\Phi_I'(x) = \Phi_{II}'(x) \quad x=0 \rightarrow A=B \text{ olur}$$

$$\Phi_{II}'(x) - \Phi_I'(x) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \Phi_I(x) \quad x=0$$

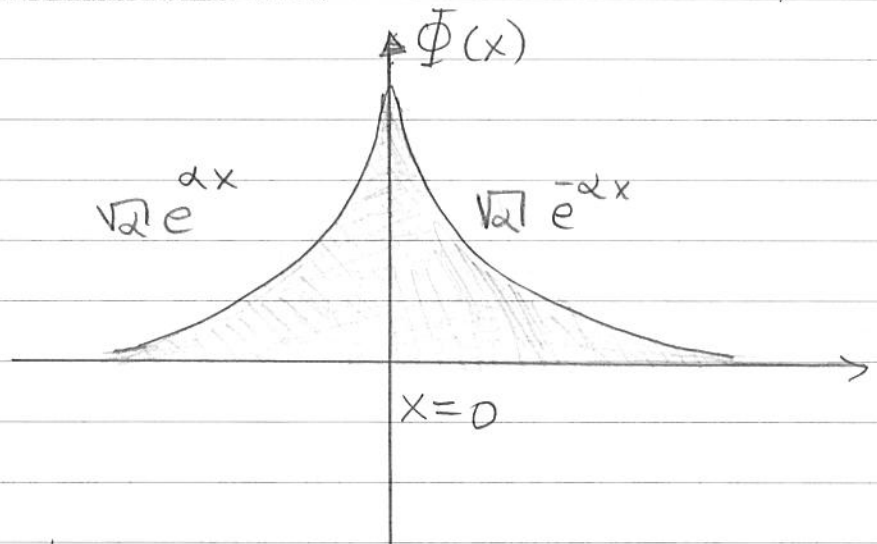
$$(-\alpha - \alpha)A = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} A$$

$$\downarrow \quad \alpha = \frac{mV_0}{\hbar^2}$$

$$\frac{2m|E|}{\hbar^2} = \frac{m^2 V_0^2}{(\hbar^2)^2}$$

$$E = -|E| = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

sadece tek bağlı durum var.



Boylandırma ile A katsayısını bulalım

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi(x)|^2 dx = 1$$

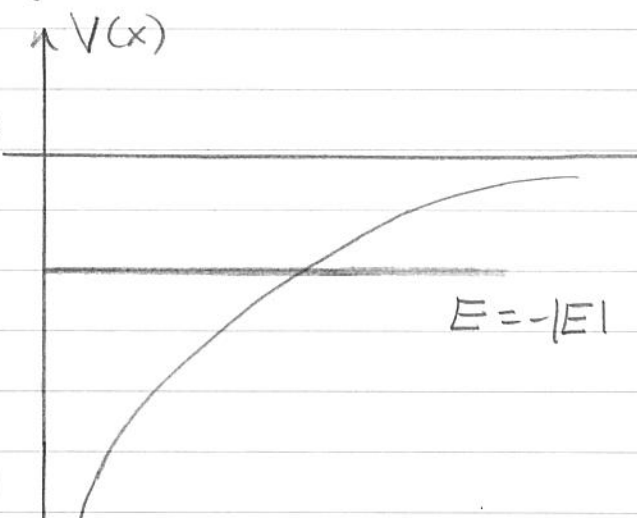
$$|A|^2 \left\{ \int_{-\infty}^0 2\alpha x e^{-2\alpha x} dx + \int_0^{\infty} 2\alpha x e^{-2\alpha x} dx \right\} = 1$$

$$A = \sqrt{\alpha}$$

$$\Phi(x) = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|}$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} V(x) = -\frac{e^2}{4x} & x > 0 \\ = \infty & x \leq 0 \end{array} \right\}$$

Potansiyeli içindeki elektron için temel durum enerjisini bulalım:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2me^2}{\hbar^2} \frac{1}{4x} = + \frac{2m|E|}{\hbar^2} \phi$$


I. $x \rightarrow \infty$ civarındaki çözüm?

II. $x \rightarrow 0$ civarındaki çözüm?

I. $x \rightarrow \infty$ $\frac{d^2\phi_\infty}{dx^2} = \alpha^2 \phi_\infty$ $\phi_\infty = A e^{-\alpha x}$

II. $x \rightarrow 0$ $\Phi(x) = f(x) e^{-\alpha x}$ ($f(x) \rightarrow 0$ $x \rightarrow 0$)

$$(f''(x) - 2\alpha f'(x) + \alpha^2 f) + \frac{2me^2}{4\hbar^2} \frac{f(x)}{x} - \frac{2m|E|}{\hbar^2} f(x) = 0$$

$$f''(x) - 2\alpha f'(x) + \frac{2me^2}{4\hbar^2} \frac{f(x)}{x} \approx 0$$

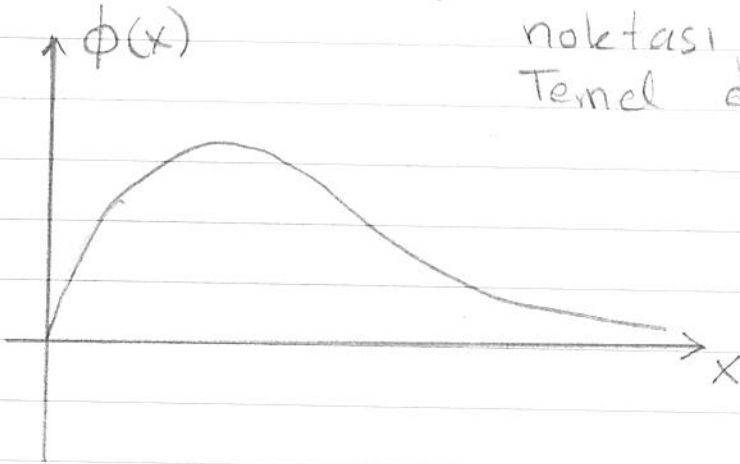
$f(x) = x$ deneyelim $\rightarrow \alpha = \frac{me^2}{4\hbar^2}$ olmalı

$$E = -|E| = -\frac{m e^4}{32 \hbar^2} = -\frac{m c^2 (\alpha_e)^2}{32}$$

$$\alpha_e = \frac{e^2}{\hbar c}$$

$$\phi(x) = A x e^{-\alpha x}$$

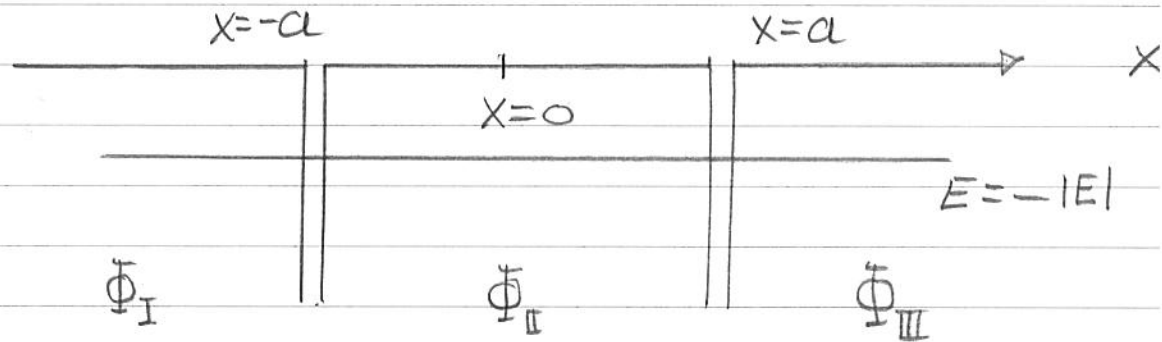
bu çözümde dönüm noktaları arasında düğüm noktası yoktur. Temel duruma karşılık gelir.



Boylandırma: $\int_0^{\infty} |\phi|^2 dx = 1 \rightarrow A = 2\alpha^{3/2}$
 (Bu işlem daha önce yapılmıştı.)

İki Atomlu Molekül Modeli

$$V(x) = -V_0 (\delta(x+a) + \delta(x-a))$$



$$\Phi_I = A e^{\alpha x} \quad x < -a$$

$$\Phi_{III} = B e^{-\alpha x} \quad x > a$$

$$\Phi_{II} = C e^{-\alpha x} + D e^{\alpha x} \quad -a \leq x \leq a$$

Potansiyel simetrik olduğundan

$$|\Phi_I(x)|^2_{x=-a} = |\Phi_{III}(x)|^2_{x=a} \quad \text{veya} \quad \int_{-\infty}^{-a} |\Phi_I|^2 dx = \int_a^{\infty} |\Phi_{III}|^2 dx$$

olmalı. Bu koşul $A^2 = B^2$ yani $B = \pm A$ ver

Sınır koşulları: ($B = A$ isin)

$$\textcircled{1} A e^{-\alpha a} = C e^{\alpha a} + D e^{-\alpha a} \quad x = -a$$

$$\textcircled{2} \alpha (-C e^{\alpha a} + D e^{-\alpha a}) - \alpha A e^{-\alpha a} = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} A e^{-\alpha a}$$

$$\textcircled{3} A e^{-\alpha a} = C e^{-\alpha a} + D e^{\alpha a} \quad x = a$$

$$\textcircled{4} -\alpha A e^{-\alpha a} - \alpha [-C e^{-\alpha a} + D e^{\alpha a}] = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} A e^{-\alpha a}$$

$$(1-3) \quad (D-C)(e^{\alpha a} + e^{-\alpha a}) = 0 \rightarrow D=C$$

$$(3) \quad A e^{-\alpha a} = 2C \cosh \alpha a$$

$$(4) \quad A e^{-\alpha a} \left(-\alpha + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) = 2\alpha C \sinh \alpha a$$

$$\left(\frac{4}{3} \right) \quad \left(-\alpha + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) = \alpha \tanh \alpha a$$

$$\frac{2mV_0}{\hbar^2} = \alpha (1 + \tanh \alpha a)$$

$$\frac{2mV_0 a}{\hbar^2} = (\alpha a) (1 + \tanh \alpha a)$$

$$\Phi_{II} = 2C \cosh \alpha x \quad \text{çift fonksiyon}$$

Sınır Koşulları : $B = -A$ için

$$\textcircled{1} \quad A e^{-\alpha a} = C e^{\alpha a} + D e^{-\alpha a} \quad \left. \vphantom{\textcircled{1}} \right\} x = -a$$

$$\textcircled{2} \quad \alpha (-C e^{\alpha a} + D e^{-\alpha a}) - \alpha A e^{-\alpha a} = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} A e^{-\alpha a} \quad \left. \vphantom{\textcircled{2}} \right\} x = -a$$

$$\textcircled{3} \quad -A e^{-\alpha a} = C e^{\alpha a} + D e^{-\alpha a} \quad \left. \vphantom{\textcircled{3}} \right\} x = a$$

$$\textcircled{4} \quad \alpha A e^{-\alpha a} - \alpha (-C e^{-\alpha a} + D e^{\alpha a}) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} A e^{-\alpha a} \quad \left. \vphantom{\textcircled{4}} \right\} x = a$$

$$(1+3) \quad (C+D)(e^{\alpha a} + e^{-\alpha a}) = 0 \quad D = -C$$

$$(3) \quad -A e^{-\alpha a} = -2C \sinh \alpha a$$

$$(4) \quad A e^{-\alpha a} \left(\alpha - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) = -2C \alpha \cosh \alpha a$$

$$\left(\frac{4}{3} \right) \quad \left(\alpha - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) = -\alpha \coth \alpha a$$

$$\frac{2mV_0 \alpha}{\hbar^2} = (\alpha a)(1 + \coth \alpha a)$$

$$\Phi_{II} = 2D \sinh \alpha x$$

tek fonksiyon

Energy özdeğerleri

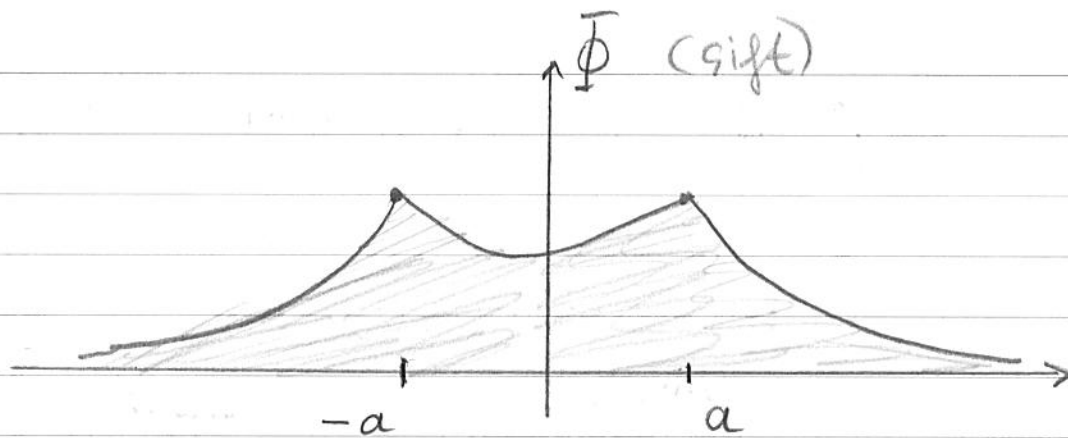
Çift fonksiyon çözümleri.

$$\Phi_I = A e^{\alpha x}$$

$$\Phi_{II} = C_1 \cosh \alpha x$$

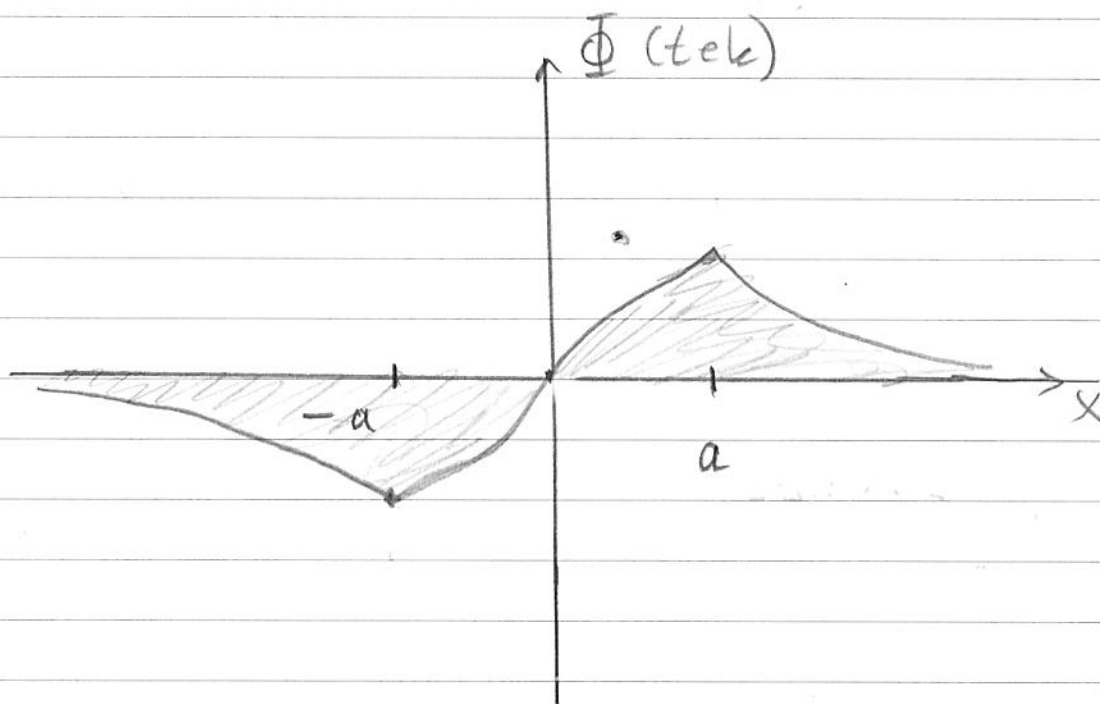
$$\Phi_{III} = A e^{-\alpha x}$$

$$C_1 = \frac{A e^{-\alpha a}}{\cosh \alpha a}$$



$$\frac{a}{a_0} \approx 1.02$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{2mV_0}$$



EK

$$\frac{a}{a_0} \frac{1}{y} = (1 + \tanh y)$$

$$y = \alpha a$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{2mV_0}$$

çift fonksiyon
çözümü için
özdeğer denklemi

$$\frac{a}{a_0} \frac{1}{y} = (1 + \coth y)$$

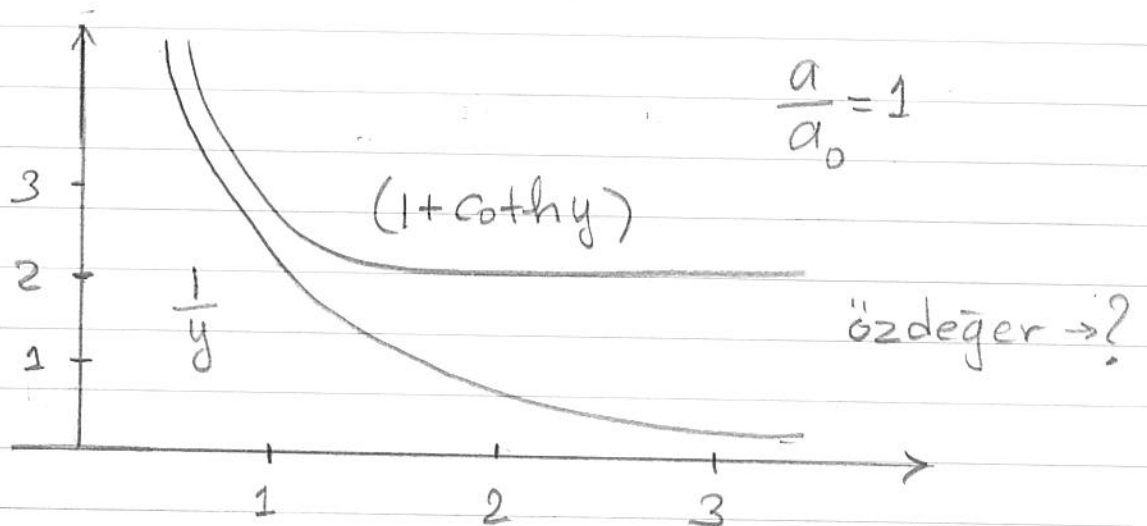
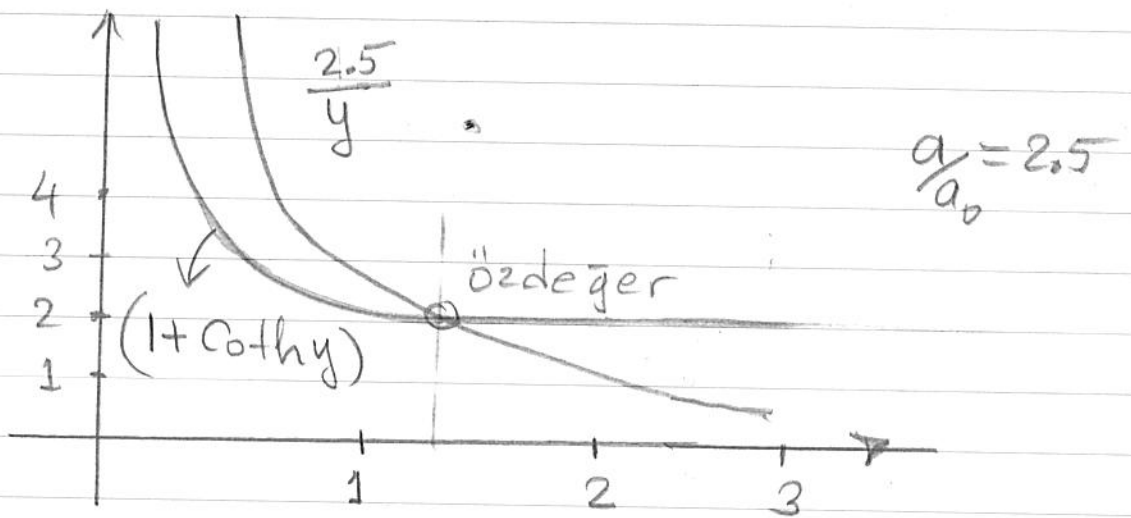
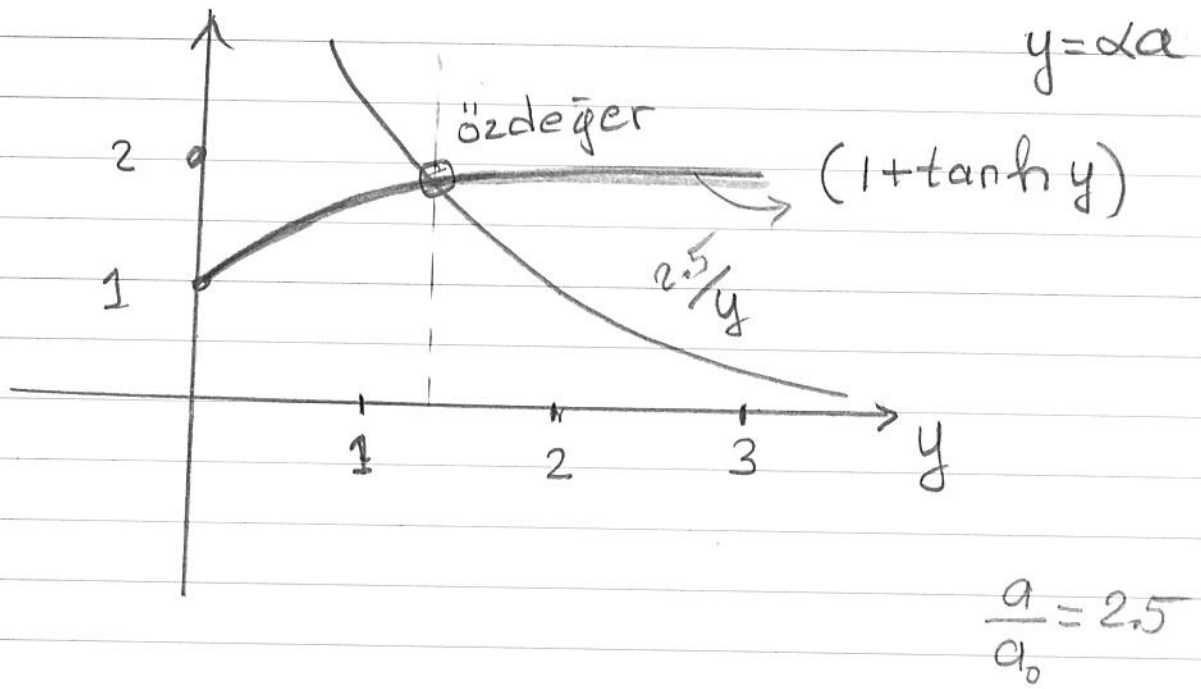
tek fonksiyon çözümü için
özdeğer denklemi

$$\Phi_I(x) = A_1 e^{\alpha x}$$

$$\Phi_{II}(x) = D_1 \sinh \alpha x$$

$$\Phi_{III}(x) = -A_1 e^{-\alpha x}$$

$$D_1 = \frac{-A_1 e^{-\alpha a}}{\sinh \alpha a}$$



Boylandırma :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi|^2 dx = 1$$

Çift fonksiyon çözümü

$$A^{\pm} = \frac{\alpha e^{2\alpha a}}{2} \left[\frac{\cosh 2\alpha a + 1}{\cosh 2\alpha a + \alpha a} \right] = A$$

Tek fonksiyon çözümü

$$A^{\mp} = \frac{\alpha e^{2\alpha a}}{2} \left[\frac{\cosh 2\alpha a - 1}{\sinh 2\alpha a - \alpha a} \right] = A_1$$

Bölüm-6

Spin; Fermiyonlar ve Bozonlar

Klasik fizikte açısal momentum

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (3\text{-boyutta tanımlı})$$

Atomların elektronlarında açısal momentum (Yörüngesel kısım) kuantumladır. 3-Boyutta:

$$|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad l=0, 1, 2, 3, \dots$$

l : Yörüngesel açısal momentum kuantum sayısı

$\hbar$: (enerji - zaman): açısal momentum boyutu

Yörüngesel açısal momentum uzaya bağlıdır.

İç Açısal Momentum: Spin

Uzaydan bağımsız



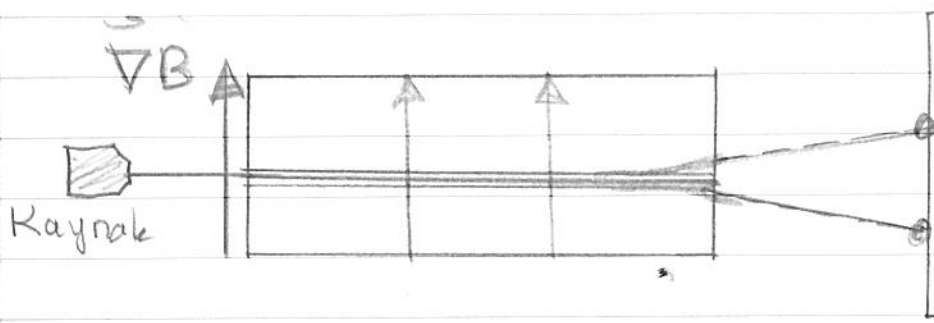
$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar$$

s : spin kuantum sayısı

Durgun sistemde
parçacık

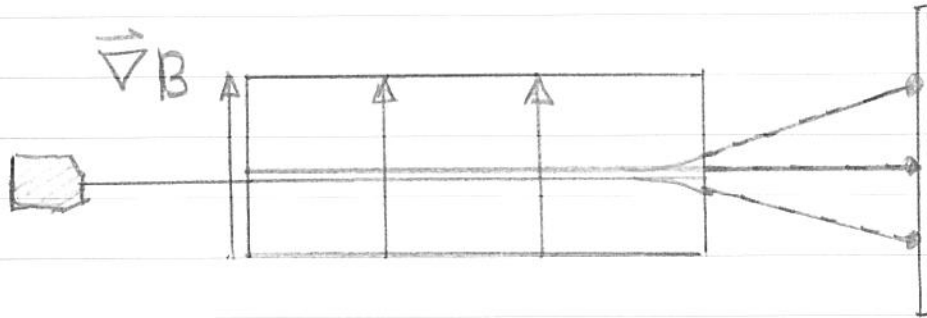
Spin	parçacık
0, 1, 2 .	Bozonlar
$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$	Fermiyonlar

Stern - Gerlach Deneyi



Elektronlar
spin = $\frac{1}{2}$

$$|\vec{S}| = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar$$



Bozonlar
spin = 1

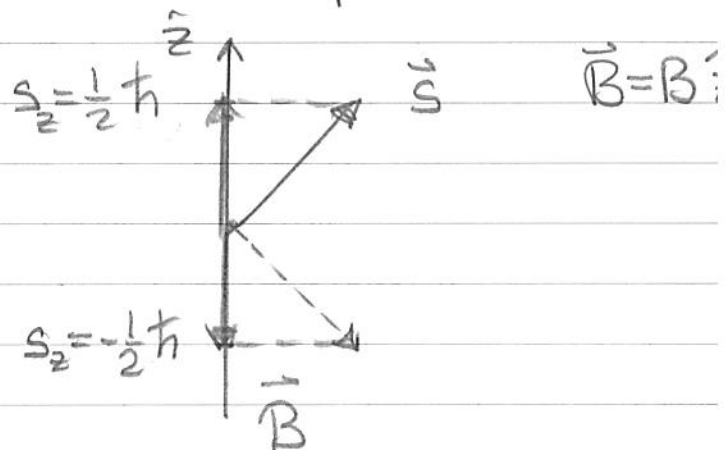
- Spinin klasik fizikte karşılığı yoktur. Sadece kuantum fizikine özgüdür.
- Her parçacığın sadece bir tane spin kuantum sayısı vardır.

Manyetik alan içinde Spin

$$s = \frac{1}{2}$$

$$S_z = m_s \hbar$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$



m_s : manyetik kuantum sayısı

$$s = \frac{3}{2}$$

$$m_s = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$$

$$|\vec{S}| = \sqrt{\frac{3}{2}(\frac{5}{2})} \hbar$$

$$s = 1$$

$$m_s = \pm 1, 0$$

$$|\vec{S}| = \sqrt{2} \hbar$$

Fermiyonlar : elektron, proton, nötron

Pauli Dışarlama İlkesi

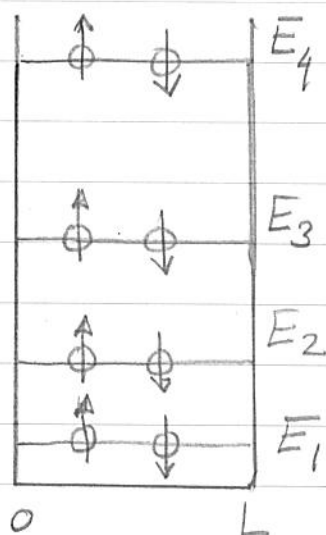
Birden fazla fermiyon (elektron) aynı kuantum durumunda bulunamaz

Pauli ilkesi Evrenin Yapısını Nasıl Etkiler?

Bir Boyutlu Sonsuz Kuyu:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2}$$

Kuyuda N_e tane elektron olsun.



Elektronların toplam enerjisi:

$$E_{\text{top}} = \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \right) N_e$$

Dışarlama ilkesi dikkate alınmaz ise tüm elektronlar temel durumda olur

$$E_{\text{top}} = 2 \sum_{n=1}^{N_{\text{max}}} E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{mL^2} \sum_{n=1}^{N_{\text{max}}} n^2, \quad N_{\text{max}} = \frac{N_e}{2}$$

$$\sum_{n=1}^{N_{\text{max}}} n^2 = \frac{N_{\text{max}}(N_{\text{max}}+1)(2N_{\text{max}}+1)}{6} \approx \frac{N_{\text{max}}^3}{3} \quad N_{\text{max}} \gg 1$$

$$E_{\text{top}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{mL^2} \left(\frac{N_{\text{mx}}^3}{3} \right) = \boxed{\frac{\hbar^2 \pi^2}{24 mL^2} N_e^3} \quad \text{Dışarlama ilkesi ile}$$

Elektron başına ortalama enerji

$$\bar{E} = \frac{E_{\text{top}}}{N_e} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{24 mL^2} N_e^2$$

Dolu olan son düzeyin enerjisi

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2 N_{\text{mx}}^2}{2 mL^2} = \boxed{\frac{\hbar^2 \pi^2}{8 mL^2} N_e^2} \quad (\text{Fermi enerjisi})$$

$$\bar{E} = \frac{E_F}{3}$$

PDI: Pauli Dışarlama İlkesi

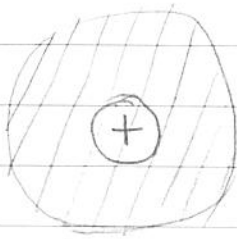
$$\frac{E_{\text{top}}(\text{PDI ile})}{E_{\text{top}}(\text{PDI yok})} \sim \frac{N_e^2}{12}$$

3-B için toplam enerji

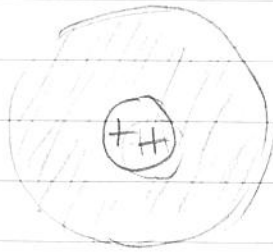
$$E_{\text{top}} = \frac{\hbar^2 \pi^3}{10 m V^{2/3}} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{5/3} N_e^{5/3}$$

$$\frac{E_{\text{top}}(\text{PDI ile})}{E_{\text{top}}(\text{PDI yok})} \sim \boxed{N_e^{2/3}}$$

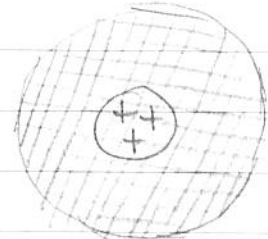
Atomların Kabuk Yapısı:



1 elektronlu Atom

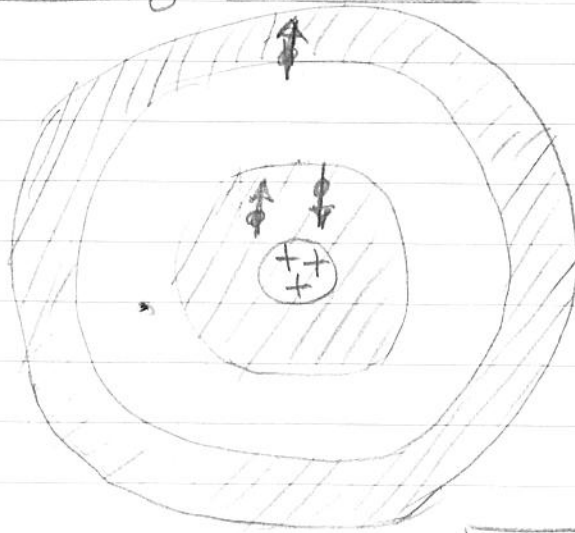


2 elektronlu Atom



3 elektronlu Atom

PDI Yoksa



3-elektronlu Atom

PDI ile

Metallerde Elektron Basıncı

$$P(V) = - \frac{\partial E_{top}}{\partial V} \quad \frac{P_e(PDI)}{P_e(PDI)} \approx N_e^{\frac{2}{3}} \approx 10^{15} \text{ V}$$

$$n_e = 2,6 \times 10^{22} \frac{1}{\text{cm}^3} \quad (\text{Na - isin})$$

$$B = V \frac{\partial P_e}{\partial V} = \frac{5}{3} P_e \quad (\text{Bulk Modülüs})$$

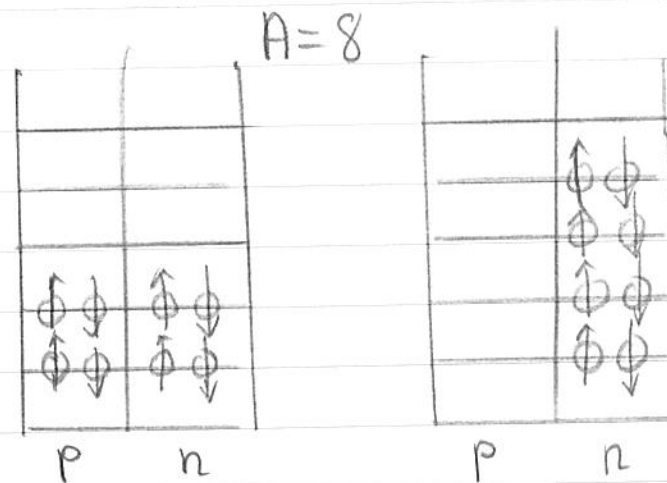
Sıkıştırılabilirlik / sertlik

— o —

Atom Çekirdeklerinde Toplam Enerji ve Kararlılık

$$A = Z + N$$

$Z \approx N$ durumu
en düşük toplam
enerjiye sahip.



Astrofizik

Beyaz Cüce

Bir yıldızın kütle çekim öz enerjisi

$$V_G = -\frac{3}{5} \frac{GM_*^2}{R}$$

Kütle çekimi nedeni ile gökmeyi engelleyen basınç termo-nükleer füzyon ile oluşan sıcak gazların termal basıncıdır. Dışarıya EM ışıma ve nötrinolar yayılır.

Termo-nükleer füzyon sona erdiğinde (Yıldızın yakıtı biterse) yıldız isine gökmeye başlar.

Yıldızın gökme basıncı kütle çekimi kuvveti veya potansiyel enerjisinden hesaplanır:

$$P_G = \frac{F_G}{A} = \frac{-dV_G/dR}{4\pi R^2} = -\frac{dV_G}{d\Omega}$$

$$\Omega = \frac{4}{3}\pi R^3$$

$$P_G = -\frac{1}{5} \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/3} \frac{GM_*^2}{\Omega^{4/3}}$$

Bu gökmeye karşı serbest elektronların oluşturduğu basıncı elektronların toplam enerjisinden (PDI ile) hesaplayalım:

$$E_{\text{top}} = \frac{\hbar^2 \pi^3}{10m_e} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{5/3} \frac{N_e^{5/3}}{\Omega^{2/3}}$$

$$P_E = - \frac{dE_{top}}{d\Omega} = \frac{\hbar^2 \pi^3}{15 m_e} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{5/3} \frac{N_e^{5/3}}{\Omega^{5/3}}$$

Elektron basıncı dışarıya doğru olduğundan çökmeyi durdurabilir.

$P_G + P_E = 0$ olduğunda çökme durur.

Bu koşul ile çökmenin durduğu yıldızın yarıçapı bulunur.

$$R = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2 N_e^{5/3}}{m_e G M_*^2}$$

Yıldızın hidrojenden oluştuğunu varsayalım. Proton sayısı elektron sayısına eşit olacak

$$N_e = N_p$$

$$M_* = N_p m_p$$

$$N_p = N_e = \frac{M_*}{m_p}$$

$$R = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{m_e m_p^{5/3} G M_*^{1/3}}$$

$$M_* = 2 M_\odot \text{ olsun}$$

$$M_\odot = \text{Güneş Kütlesi}$$

$$M_\odot \approx 2 \times 10^{30} \text{ kg} \rightarrow N_p = \frac{M_*}{m_p} = 2.5 \times 10^{57}$$

$$R_{WD} \approx 1.8 \times 10^4 \text{ km}$$

$$R_E = 0.6 \times 10^4 \text{ km}$$

Dünya yarıçapı

Kütle yoğunluğu

$$\rho_{WD} \approx 2 \times 10^5 \text{ gr/cm}^3 = 200 \text{ kg/cm}^3$$

Eğer PDI kullanılmazaydı

$$\frac{P_e(\text{PDI})}{P_e(\text{PDI})} \approx N_e^{2/3} \approx 2 \times 10^{38}$$

$$R_{\text{WD}} \approx 10^{-34} \text{ cm} \quad \text{olurdu.}$$