5.111 Ders Özeti #6
Bugün için okuma: Bölüm 1.9 (3. Baskıda 1.8) – Atomik Orbitaller.
Ders #7 için okuma: Bölüm 1.10 (3. Baskıda 1.9) – Elektron Spini, Bölüm 1.11 (3. Baskıda 1.10*)* – Hidrojenin Elektronik Yapısı

Konular: **Hidrojen Atomu Dalga Fonksiyonları**
I. Hidrojen atomu için dalga fonksiyonları (orbitaller) ($H\underline{\Psi}=E\underline{\Psi}$**)**
II. H atomu dalga fonksiyon şekilleri: s orbitalleri
III. Radyal Olasılık Dağılımı

ENERJİ DÜZEYLERİ (Ders #5' in devamı)

Herhangi 1 elektronlu atom veya iyon tarafından soğurulan veya yayınlanan ışığın frekansını (ayrıca E = hν veya λ = c/ν eşitliklerini kullanarak, ışığın E veya λ sını) hesaplamak için Rydberg formülleri kullanılabilir.

$$\nu = \frac{Z^2 R_H}{h}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \qquad \nu = \frac{Z^2 R_H}{h}\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right)$$

$n_i > n_s$ $\qquad$ $n_s > n_i$ için

$n_s > n_i$ ____________________'da. Elektronlar düşük E seviyesinden daha yüksek E seviyesine inerken enerji soğurur.

$n_i > n_s$ ____________________'da. Elektronlar yüksek E seviyesinden daha düşük E seviyesine giderken enerji yayar.

I. HİDROJEN ATOMU İÇİN DALGA FONKSİYONLARI (ORBİTALLER)

H Ψ =EΨ çözerseniz, çözümler E_n ve Ψ(r,θ,φ) dir.
Ψ(r,θ,φ) ≡ dalga fonksiyonunun durgun hali: zamandan bağımsız

Ψ(r,θ,φ) çözümünde, iki yeni kuantum sayısı ortaya çıkar! Dalga fonksiyonunu 3 boyutlu tanımlamak için toplam 3 kuantum sayısı gerekir.

1. n ≡ baş kuantum sayısı
   n = 1, 2, 3… … ∞
   bağlanma enerjisini belirler.

2. *l* ≡ açısal momentum kuantum sayısı
   l = ________________________________
   l, n ile ilişkilidir.
   en büyük değeri *l* = n – 1'dir.
   açısal momentumu belirler.

3. m ≡ manyetik kuantum sayısı

m = ____

m, l ile ilişkilidir.

en büyük değeri $+l$, en küçük değeri $-l$ dir.

manyetik alanda atomun davranışını belirler.

Bir orbitali tam olarak tanımlamak için, üç kuantum sayısının da kullanılması gerekir:

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$$

Temel hali tanımlayan dalga fonksiyonu ________________dir.
Kimya terminolojisi kullanılırsa, Ψ_{100} orbitaline "_____" orbitali adı verilir.

Bir orbital bir dalga fonksiyonunun (uzaydaki parçası) dır ; **n(kabuk)** ***l*(altkabuk)** **m(orbital)**

$\ell = 0 \Rightarrow$ __ orbitali $\ell = 1 \Rightarrow$ __ orbitali $\ell = 2 \Rightarrow$ __ orbitali $\ell = 3 \Rightarrow$ __ orbitali

$\ell = 1$ için: m = 0 ____ orbitali, m = ± halleri ___ ve ___ orbitallerini vermek için birleşir.

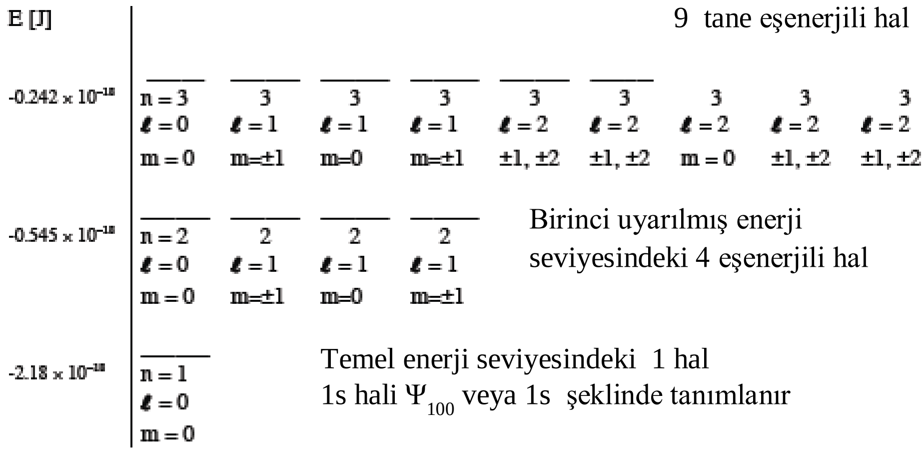
	Hal simgesi	Dalga fonksiyonu	Orbital	E_n	E_n[J]
n = 1 ℓ = 0 m = 0		ψ_{100}		$-R_H/1^2$	-2.18×10^{-18}J
n = 2 ℓ = 0 m = 0					-5.45×10^{-19}J
n = 2 ℓ = 1 m = +1					-5.45×10^{-19}J
n = 2 ℓ = 1 m = 0	210	ψ_{210}		$-R_H/2^2$	-5.45×10^{-19}J
n = 2 ℓ = 1 m = -1	21-1	ψ_{21-1}		$-R_H/2^2$	-5.45×10^{-19}J

Bir ________için, aynı n değerine sahip orbitaller aynı enerjiye sahiptir: $E = -R_H/n^2$.

- **Eşenerjili (Dejenere)** ≡ aynı enerjiye sahip
- Herhangi bir kuantum sayısı için, n, hidrojen atomunda (veya herhangi 1 elektronlu atomda) _______ eşenerjili orbitaller vardır.

Enerji Seviyesi Diyagramı

İkinci uyarılmış enerji seviyesindeki 9 tane eşenerjili hal



Birinci uyarılmış enerji seviyesindeki 4 eşenerjili hal

Temel enerji seviyesindeki 1 hal
1s hali Ψ_{100} veya 1s şeklinde tanımlanır

II. H ATOMU DALGA FONKSİYONLARININ ŞEKLİ: S ORBİTALLERİ

BİR DALGA FONKSİYONUNUN FİZİKSEL YORUMU

Max Born (Alman fizikçi, 1882-1970). Belli bir bölgede bir parçacığın (elektron!) bulunma olasılığı, dalga fonksiyonunun karesi ile orantılıdır.

$$[\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)]^2 = \text{OLASILIK YOĞUNLUĞU}$$

r,θ,φ de bir elektronun birim hacimde bulunma olasılığı

Orbitallerin şekillerini belirlemek için, dalga fonksiyonunu, radyal dalga fonksiyonu $R_{nl}(r)$ ile açısal dalga fonksiyonu $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ nun çarpımı şeklinde yeniden yazalım.

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)] = \_\_\_\_\_\_\_\_\_ \times \_\_\_\_\_\_\_\_\_$$

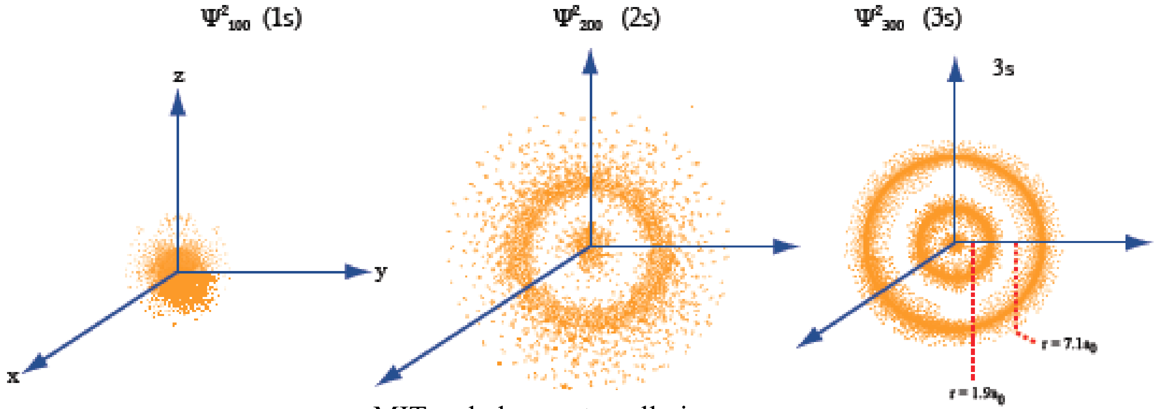
H-atomunun temel hali için:

$$\Psi_{100}\,(r,\theta,\phi) = \underbrace{\frac{2e^{-r/a_0}}{{a_0}^{3/2}}}_{\text{R(r)}} \times \underbrace{\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}}_{\text{Y}(\theta,\,\phi)} = \frac{e^{-r/a_0}}{(\pi {a_0}^3)^{1/2}}$$

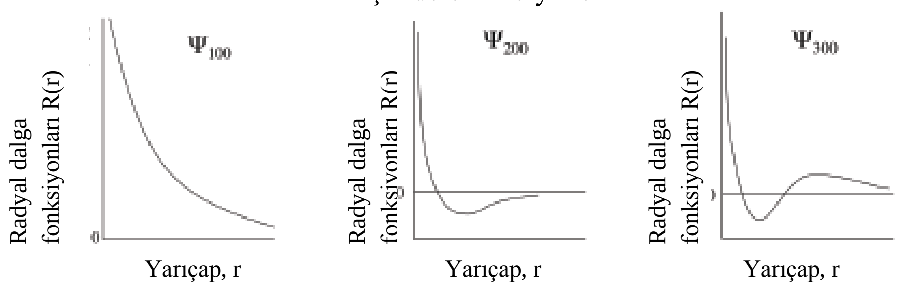
burada a_0 = ______________________________ (bir sabit) = 52.9 pm

- Bütün s orbitalleri için (1s, 2s, 3s, vs.), açısal dalga fonksiyonu, Y_________dir.
- s-orbitalleri **küresel simetrik**tir, _____ ve_____ den bağımsızdır.

s orbitallerinin olasılık yoğunluğu grafiği: noktaların yoğunluğu, olasılık yoğunluğunu temsil eder.



MIT açık ders materyalleri



DÜĞÜM: r, θ, veya φ için Ψ (ve Ψ^2) değeri = ______. Genel olarak, bir orbitalde n -1 tane düğüm bulunur.

RADYAL DÜĞÜM: ______ için Ψ (ve Ψ^2) değeri = 0. Diğer bir deyişle, radyal düğüm elektronun bulunma olasılığının sıfır olduğu bir uzaklıktır.

Genel olarak, bir orbitalde n -1 – ℓ tane radyal düğüm bulunur.

1s: 1– 1– 0= 0 radyal düğüm

2s: ____ – ____ – ____ = ____ radyal düğüm

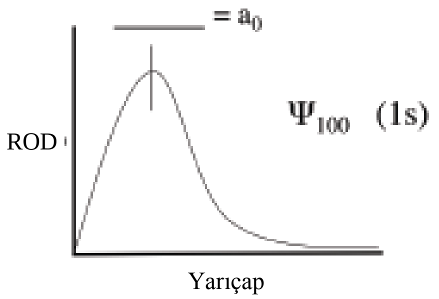
3s: ____ – ____ – ____ = ____ radyal düğüm

III. RADYAL OLASILIK DAĞILIMI

Çekirdekten r uzaklığında ve dr kalınlığında bir küresel kabukta elektronun bulunma olasılığı

Radyal Olasılık Dağılımı (SADECE s orbitali için) = $4\pi r^2\Psi^2$ dr

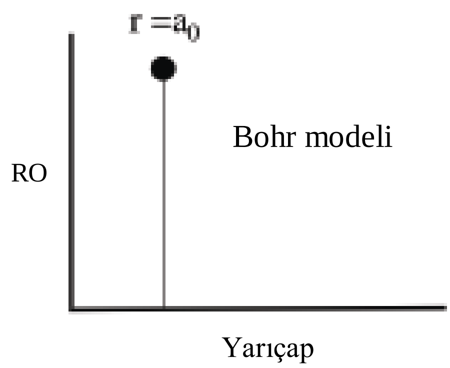
Radyal olasılık dağılımını (ROD) yarıçapın fonksiyonu olarak çizebiliriz.
Hidrojenin 1s orbitali için radyal olasılık dağılımı:



Maksimum olasılık veya r’ nin en olası değeri r_{eo} ile gösterilir.

1s H atomu için $r_{eo} = a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ m = 0.529 Å $\qquad$ $a_0 \equiv$ BOHR yarıçapı

1913 Niels Bohr (Danimarkalı bilim adamı) Kuantum Mekaniği (KM) geliştirilmeden önce



H atomu için kuantlı (belirli) seviyeler öngördü, elektron kesin olarak belirlenmiş bu dairesel yörüngelerde hareket ediyordu.

Yandaki, tam olarak hareketsiz bir e^- nun tanecik resmiydi.

Fakat, bir elektron kesin olarak belirlenmiş bir orbitale sahip değildir! Yapacağımız en iyi şey belli bir r uzaklığında é nun bulunma olasılığını tayin etmektir.

Sadece olasılığın bilinmesi, Kuantum Mekaniğinin esas sonuçlarından biridir. Klasik mekaniğin aksine, KM deterministik değildir. Belirsizlik ilkesi, bize, r değerinin tam olarak bilinmesini yasaklar.