



ATOM FİZİĞİ

BÖLÜM 1
HİDROJEN ATOMUNDA
MERKEZCİL ALAN
ÇÖZÜMLERİ



BÖLÜM 2
ATOMİK
HAMİLTONİYENİN BAZI
TERİMLERİ

Rutherford

Bohr

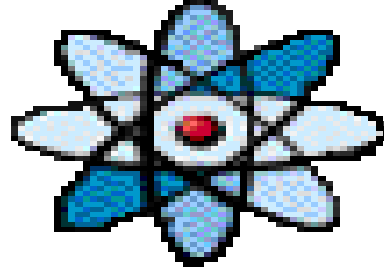
Compton

Pauli

Fermi

Feynman

BÖLÜM 3
ATOMİK
SPEKTROSKOPİ



BÖLÜM 4
TEMEL PARÇACIKLAR

ATOM FİZİĞİ-1

BÖLÜM-1

HİDROJEN ATOMUNDA MERKEZCİL ALAN ÇÖZÜMLERİ

1)ATOM MODELLERİ: a)Thomson Modeli:1898 yılında J.J.Thomson, atomları, içlerinde elektronlar gömülü olan pozitif yüklü düzgün maddesel küreler olarak varsaydı. Model bu şekliyle bir karpuzu ya da bir **üzümlü keki** andırmaktadır. Bu modelin ömrü 13 yıl sürmüştür.

b)Rutherford Modeli: 1911 yılında Rutherford'un önerisi ile Geiger ve Marsden, radyoaktif elementler tarafından salınan hızlı **alfa parçacıklarını** ince altın yaprağı üzerine göndererek bir deney yaptılar. Deney sonucunda alfa parçacıklarının çoğunun yaprak içinden doğrudan geçtiğini ve çok az bir kısmının ise sapmalara uğradığını belirlediler. Bu durum Thomson modelinin yanlışlığını ortaya koymaktaydı. Bundan yola çıkarak Rutherford yeni bir atom modeli geliştirdi. Bu modele göre; **atomun merkezinde pozitif yüklü çekirdek, çekirdek çevresinde, çekirdekten oldukça uzak yörüngelerde dolanan elektronlar** vardır. Bu modele **uydu modeli** de denmektedir. Klasik elektrodinamiğe göre çekirdek çevresinde ivmelenen elektronun, ışına yaparak (enerji kaybederek) hızla çekirdeğe düşmelidir. İşte bu durumu model açıklayamamıştır. Rutherford saçılması, yani alfa parçacıklarının çekirdeğin Coulomb

alanından saçılması
$$N(\theta) = \frac{N_i n_i Z^2 e^4}{(8\pi\epsilon_0)^2 r^2 \sin^4(\theta/2)}$$
, çekirdek fiziğinde önemli bir yer tutar.

c)Bohr Modeli:Kuantum kavramını atom modeline ilk katan kişi Niels Bohr oldu. 1913 yılında üç postülayı (Bohr postülatları) temel alan bir model geliştirdi. Bohr modeli, tek elektronlu atomlara uygulanabilmektedir. Bu modele göre elektron çekirdek çevresinde kararlı ve kuantumlu yörüngelerde hareket etmektedir. Bu durumda yarıçap, hız ve enerji kuantumludur (ayrıntı için kuantum fiziğine bakınız). Elektron bir seviyeden başka bir seviyeye geçebilir. Bu geçişte ışına yapar veya soğurur. Bu

ışımının dalga boyu;
$$\frac{1}{\lambda} = \tilde{\lambda} = \frac{E_i}{ch} \left(\frac{1}{n_s^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$
 dir. $E_i/ch=R=109740 \text{ cm}^{-1}$ teorik **Rydberg sabitidir**. Hidrojen atomunun spektrum serileri; $n_s=1$ ve $n_i=2,3,\dots$ **Lyman**, $n_s=2$ ve $n_i=3,4,5,\dots$ **Balmer**, $n_s=3$ ve $n_i=4,5,6,\dots$ **Paschen**, $n_s=4$ ve $n_i=5,6,7,\dots$ **Brackett**, $n_s=5$ ve $n_i=6,7,8,\dots$ **Pfund** serileri şeklindedir. Bir serideki geçişleri belirten çizgiler sırasıyla; $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \dots$ şeklinde adlandırılır. Bohr modeline **Sommerfeld** tarafından yörünge ve enerji düzeltilmesi yapılmıştır. Yörünge düzeltilmesi ile baş kuantum sayısı çizgisel (çapsal) ve aşılal kuantum sayılarının toplamı, $n=n_r+n_\theta$ şeklindedir. Düzeltilmiş bohr enerjisi ise
$$E_n = -\frac{\mu k^2 Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{1}{n_\theta} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$
 şeklindedir. Burada $\alpha = \frac{ke^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ **ince yapı sabiti**, k Coulomb sabiti, μ indirgenmiş kütedir.

d)Atomun kuantum modeli : Bohr atom modeli çok elektronlu atomları açıklayamamaktadır. 1920'li yıllarda geliştirilen kuantum fiziği, çok elektronlu atomları da kapsayacak şekilde, bir modern atom modeli oluşturdu. Kuantum fiziği maddenin ikili karakterinden söz eder ve olasılıklara dayalıdır. Buna göre; çekirdek çevresindeki elektronlar, orbitaller denilen bir olasılık bulutu içinde hareket ederler. Elektronlara eşlik eden dalğanın Schrödinger denklemi yazılıp çözümlenerek atom hakkında teorik bilgi elde edilir.

Tek elektronlu hidrojen atomunun Schrödinger denklemi küresel koordinatlarda, $U(r)=-Ze^2/r$ olmak üzere;

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Psi}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Psi}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{d^2\Psi}{d\phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)]\Psi = 0$$

şeklindedir. Bu denklem

$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ şeklinde dalga fonksiyonu değişkenlerine ayrılarak çözülür (çözüm için kuantum fiziğine bakınız). Burada birinci değişken dalga fonksiyonunun **çapsal**, ikinci değişken **yörünge açısıl**, üçüncüsü ise **azimutal** (kutupsal açı) kısımlarını göstermektedir. Çapsal çözüm (n, l) şeklinde iki kuantum sayısına, yörüngesel çözüm (l, m) şeklinde iki kuantum sayısına, azimutal çözüm ise sadece m kuantum sayısına bağlıdır. Açılara bağlı çözümlerin bileşik dalga fonksiyonlarına **küresel harmonikler** denir ve $Y_{lm}(\theta, \phi)$ ile gösterilir. Schrödinger denkleminin yarıçapa bağlı kısmının çözümü;

$$R_{nl}(\rho) = - \left\{ \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} e^{-\frac{\rho}{2}} (\rho)^l L_{qj}(\rho) \quad \rho = \left(\frac{2Z}{na_0} \right) r$$

şeklinde. Burada $L_{qj}(\rho)$ ise **Asosiy Laguerre polinomlarıdır**. Buradaki alt indislerden $j=2l+1$, $q=n+l$ şeklinde kuantum sayılarıdır. Asosiy

Laguerre polinomları, Normal Laguerre polinomlarından $L_{qj}(\rho) = \frac{d^j}{d\rho^j} L_q(\rho)$ formülü yardımı ile

türetilirler. Buradaki normal Laguerre polinomu ise, $L_q(\rho) = e^\rho \frac{d^q}{d\rho^q} (\rho^q e^{-\rho})$ şeklindedir.

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} (-1)^{(m+|m|)/2} \left[\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_{lm}(\xi)$$

Küresel harmonikler ise; $\xi = \cos\theta$, $P_{lm}(\xi)$ ise **Asosiy Legendre polinomlarıdır**. Bu polinomlar normal Legendre polinomlarına,

$$P_{lm}(\xi) = (1-\xi^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\xi^m} P_l(\xi)$$

şeklinde bağlıdır. Normal Legendre polinomu için **Rodrigues formülü**

$$P_{lm}(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l$$

olarak verilir.

Yarıçapa ve açılara bağlı çözümlerin bileşimi hidrojen atomu için zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin genel çözümüdür. Çözümün zamana ve spine bağlı kısımları da eklendiğinde, genel çözüm $\Psi_{nlm,sm_s}(r, \theta, \varphi, t) = \Psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) T(t) \mathcal{N}_{sm_s}$ şeklinde olur. Buradaki çözümde rölativistik etki, elektron perdelemeleri,... gibi etkiler göz önüne alınmamıştır.

2)ORBİTALLER: Bir küresel harmoniğin mutlak değer karesi, elektronun söz konusu θ ve φ yönünde birim hacimde bulunma olasılığını verir. φ 'ye bağlı olasılık (elektron) yoğunluğu $1/2\pi$ olup, m 'den bağımsızdır. Bu durumda olasılık yoğunluğu $\rho_{lm}(\theta, \varphi) = (1/2\pi) \rho_{lm}(\theta)$ şeklindedir. Bunun grafiğine kutupsal grafik denir. Düzlemsel ya da üç boyutlu kutupsal grafikler, yörüngeye yerleşmiş elektron bulutlarını temsil eder. Bunlara **orbital** denir ve spektral dilde **yörünge kuantum sayısının değerine göre** kodlanırlar ($l=0$ için s, $l=1$ için p, $l=2$ için d, $l=3$ için f). Orbital grafikleri üç boyutlu olup, matematiksel olarak dalga fonksiyonu demektir. Bir l altkabuğunda $2l+1$ tane orbitali (dalga fonksiyonu) vardır. Yani, m kuantum sayısının $m=+l, +(l-1), \dots, 0, \dots, -(l-1), -l$ olmak üzere her değerine bir orbital karşılık gelir. Orbital indislemeleri dik koordinat sisteminin değişkenleri ile yapılır. İndisin anlamı küresel harmoniğin reel kısmının dik koordinat sisteminin eksenlerine göre yönelmelerini ifade eder.

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm im\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (\cos m\varphi \pm i \sin m\varphi)$$

Orbitallerin fonksiyon ifadeleri bağıntısından elde edilir. Örneğin; ($l=0, m=0$ için $s = 1/\sqrt{4\pi}$), ($l=1, m=0, \pm 1$ için $P_z = (3/4\pi)^{1/2} \cos\theta$, $P_x = (3/4\pi)^{1/2} \sin\theta \cos\varphi$, $P_y = (3/4\pi)^{1/2} \sin\theta \sin\varphi$) dir.

3)ATOMLARDA BEKLENEN DEĞER FORMÜLLERİ:

Bir A operatörünün beklenen değeri $\langle A \rangle_{nlm} = \langle nlm | A | nlm \rangle = \int_{\text{tümuzay}} \Psi_{nlm}^* A \Psi_{nlm} dV$ ile tanımlıdır. Bunu herhangi bir yarıçap değerine

$$\langle r^k \rangle_{nlm} = \int_0^{\infty} r^{2+k} [R_{nl}(r)]^2 dr$$

uyguladığımızda; elde edilir. Burada $k=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ dir. Buna göre yarıçap, potansiyel enerji, momentum, kinetik enerji için beklenen değerler şöyledir:

$$\langle r \rangle_{nlm} = \frac{a_0}{2Z} [3n^2 - l(l+1)] \quad , \quad \langle \frac{1}{r} \rangle_{nlm} = \frac{Z}{n^2 a_0} \quad , \quad \langle r^2 \rangle_{nlm} = \frac{n^2 a_0^2}{2Z^2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] \quad ,$$

$$\langle \frac{1}{r^2} \rangle_{nlm} = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right)}$$

$$\langle U \rangle_{nlm} = -Ze^2 \langle \frac{1}{r} \rangle_{nlm} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{n^2 \hbar^2} \quad , \quad \langle P^2 \rangle_{nlm} = \left(\frac{\mu Z^2 e^2}{n \hbar} \right)^2 \quad , \quad \text{hızın kok değeri de}$$

$$v_{kok} = \sqrt{\langle v^2 \rangle_{nlm}} = \frac{Ze^2}{n \hbar}$$

şeklindedir. Açısal momentum operatörlerinin beklenen değerleri ise matris elemanlarıyla da yazılabilmektedir (kuantum mekaniğine bakınız). Örneğin bir yörünge açısal momentum yükseltme operatörü olan $L_+ = L_x + iL_y$ 'nin beklenen değeri $\langle lm | L_+ | lm \rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \hbar \delta_{m', m+1}$

$$\langle L_+ \rangle_{m'm} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} \hbar & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \hbar \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ matrisi ile}$$

şeklindedir. Yörünge kuantum sayısı $l=1$ için beklenen değer; belirlenir.

4)BEKLENEN DEĞERİN ZAMANA BAĞLILIĞI:

Kuantum fiziğinde, fiziksel büyüklükler lineer ve Hermitik operatörlerle gösterilebilmektedir. Bir A operatörünün hermitik olması demek, $\int (A\Psi)^* \Psi dV = \int \Psi^* A \Psi dV$ olması demektir. q ve p kanonik eşlenik koordinat ve momentum olmak üzere klasik mekanikte bir sistemin hareket denklemi $\frac{d}{dt} A(q, p) = [A, H]$ şeklindedir. Bu denklem

kuantum mekaniğinde ise, A'nın Hermitik özelliği de kullanılarak, $\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int \langle [A, H] \rangle$ şeklinde yazılabilir. Bu denklem **kuantum mekanişel hareket denklemdir**.

Bir sistemin kinetik enerjisi ile içinde bulunduğu potansiyel enerji arasında genel bir bağıntı vardır. Bu bağıntı **virial teorem** olarak bilinir. Bu teorem zamandan bağımsız ve rölativistik olmayan bir kuantum

sistemi için, $2 \langle K \rangle = \left\langle r \frac{\partial U}{\partial r} \right\rangle$ olarak verilir.

BÖLÜM-2

ATOMİK HAMILTONİYENİN BAZI TERİMLERİ

1)ATOMİK HAMILTONİYENİN BAZI TERİMLERİ:Buraya kadar atom için yapılmış olan çözüme, **pertürbe olmamış Hamiltoniyenin tam çözümü** denir. Ancak Hamiltoniyenin kinetik ve potansiyel enerjiden başka **pertürbasyon** teimi denen pek çok terimi vardır. Buna göre Hamiltoniyen;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + U(r) + \xi(r)\vec{S}\cdot\vec{L} + a\vec{\mu}_j\cdot\vec{\mu}_i - \vec{\mu}_j\vec{B}_0 - \vec{\mu}_i\vec{B}_0 - \vec{D}\cdot\vec{\epsilon}_0 + \dots$$

terimlerinden oluşur. Buradaki terimlerin anlamları şöyledir: birinci terim kinetik enerji, ikinci terim potansiyel enerji, üçüncü terim **spin yörünge etkileşmesi** (ince yapı terimi), dördüncü terim çekirdekle elektronun **dipol-dipol etkileşmesi** (aşırı inceyapı), beş ve altıncı terimler **Zeeman** terimleri, yedinci terim ise **Stark** terimi olarak bilinir.

2)HİDROJEN ATOMUNDA İNCEYAPI TERİMİ:Atomların spektrumları incelendiğinde, tüm nS seviyelerinin **tekli** (singlet) yapıda ve tüm S-dışı (P,D,F,...) seviyelerin **ikili** (doublet) yapıda olduğu görülür. Bu durum, nS seviyelerinde spin yörünge etkileşmesinin söz konusu olmadığını, diğer tüm seviyelerde ise bunun söz konusu olduğunu belirtir. Bu etkileşmede, etkileşme enerjisi atomik

Hamiltoniyende $\Delta E_{SL} = \xi(r)\vec{S}\cdot\vec{L}$ olarak verilmişti. Bu etkileşme enerjisi, elektronun spin dipol momentini ve yörünge manyetik alanına bağlı olarak, $\Delta E_{SL} = -\vec{\mu}_s\cdot\vec{B}_l$ şeklinde de yazılabilir. $\xi(r)$ terimi klasik

elektrodinamik teori kullanılarak, $\xi(r) = \frac{1}{2m^2c^2r} \frac{dU(r)}{dr}$ olarak bulunur. Burada c ışık hızı, m kütle, r

yörünge yarıçapı, U(r) ise $U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$ şeklinde Coulomb potansiyelidir. Bu durumda ince yapı

enerji yarılmaları için beklenen değer, $(\vec{S}\cdot\vec{L})_{1,2} = \frac{1}{2}(J_2^2 - J_1^2)$ olmak üzere, herhangi bir nl seviyesi için,

$\langle \Delta E_{SL} \rangle_{nl} = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 m^2 c^2} \langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nl} \frac{\hbar^2}{2} [j_2(j_2 + 1) - j_1(j_1 + 1)]$ şeklindedir. Buradaki $1/r^3$ ün beklenen değeri

$$\langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nl} = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+1) \left(l + \frac{1}{2} \right)}$$

ise; formülüyle bulunur. Örneğin hidrojen atomunun 2P-seviyesinin ince yapı yarılmaları $\langle \Delta E_{SL} \rangle_{2p} \approx 5,3 \cdot 10^{-5} \text{eV}$ kadardır.

3)AŞIRI İNCEYAPI TERİMİ: Atomik hamiltoniyende elektrona ait toplam dipol moment ile çekirdeğin spin dipol momentinin etkileşmesinden kaynaklanan ve spektroskopideki **aşırı inceyapıyı**

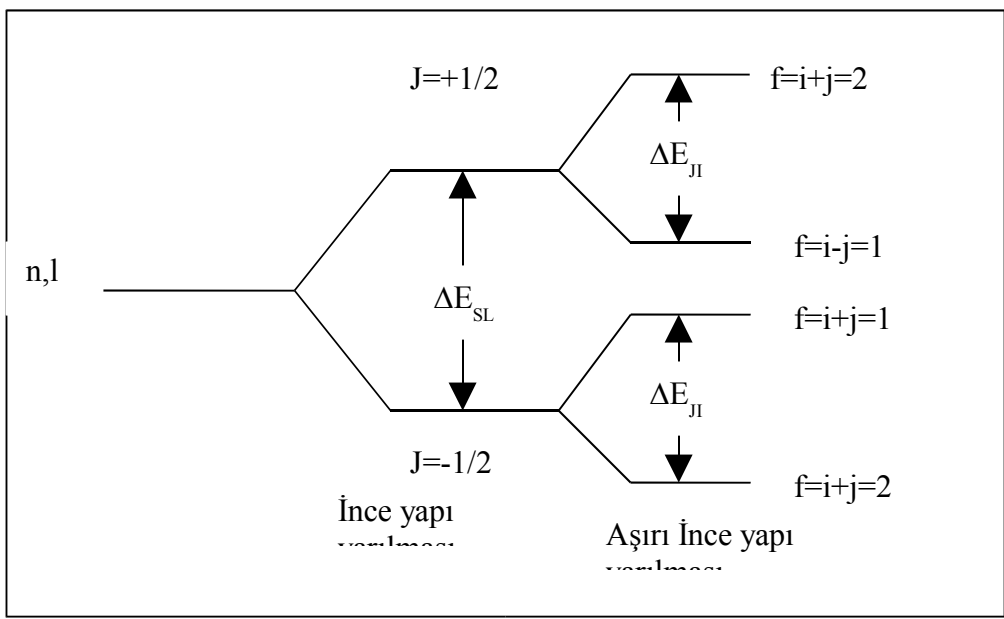
temsil eden terim, literatürde farklı görünümle $\Delta E_{IJ} = a\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j = A\vec{I} \cdot \vec{J} = -\vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_{el}$ şeklinde yazılır. Buradaki a ve A sabitleri **dipolar etkileşme sabitleridir**. Dipol-dipol etkileşme enerjisi $\Delta E_{IJ} = \Delta E_{IL} + \Delta E_{IS}$ şeklinde iki terimden oluşur. Kuantum elektromanyetizmada

$\Delta E_{SL} = -\frac{i\hbar e}{m} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} = \frac{e}{m} \vec{A} \cdot \vec{P} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{\hbar^2} g_i \mu_N \mu_B \frac{1}{r^3} \vec{L} \cdot \vec{I}$ olarak yazılır. Burada μ_0 manyetik geçirgenlik, g_i çekirdek Lande çarpanı, μ_N nükleer manyeton, μ_B Bohr manyetonudur. Çekirdek spin dipolü ile elektronun spin dipolünün etkileşme enerjisi ise,

$\Delta E_{IS} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_i = -\vec{\mu}_s \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \frac{-\mu_0}{4\pi} \left[\vec{\mu}_i \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) - \vec{\nabla} (\vec{\mu}_i \cdot \vec{\nabla}) \frac{1}{r} \right]$ şeklindedir. Bu ifade açık olarak,

$\Delta E_{IS} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{\hbar^2} g_i \mu_N \mu_B \left[\vec{S} \cdot \vec{I} \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) - (\vec{S} \cdot \vec{\nabla})(\vec{I} \cdot \vec{\nabla}) \frac{1}{r} \right]$ şeklinde de yazılabilir. Buradan da **aşırı ince yapı enerjisinin beklenen değeri** i, j ve f kuantum sayılarına bağlı olarak

$\langle \Delta E_{IJ} \rangle = \frac{\mu_0}{4\pi} 2g_i \mu_N \mu_B \frac{Z^3}{a_0^3 n^3} \frac{1}{j(j+1)(2l+1)} [f(f+1) - i(i+1) - j(j+1)]$ şeklinde yazılır.



a)Normal Zeeman Olayı:Atomun elektronunun yörünge dipol momentinin dış manyetik alanla etkileşimi olayıdır. Bu durumdaki etkileşim enerjisi $\Delta E_{NZ} = -\vec{\mu}_l \cdot \vec{B}_0 = \frac{e}{2m} L_Z B_0 = m_l \mu_B B_0$ şeklindedir.

Normal Zeeman yarılmasından önceki enerji E_0 ise, yarılmadan sonraki enerji $E = E_0 + m_l \mu_B B_0$ şeklinde olur. Görüldüğü gibi, Zeeman yarılmalarını belirleyen yörünge manyetik kuantum sayısı m_l dir. Dolayısıyla S-seviyelerinde Zeeman yarılması olmaz, P-seviyeleri üçe, D-seviyeleri beşe yarırlılar.

Zeeman seviyeleri arasındaki geçişlere Zeeman geçişleri denir. Bu durumda ilk (i) ve son (s) seviyeler arasındaki enerji farkı $E^i - E^s = E_0^i - E_0^s + (m_l^i - m_l^s) \mu_B B_0$ olur. Bu bağıntı frekanslar cinsinden,

$\nu = \nu_0 + \frac{\Delta m_l \mu_B B_0}{\hbar}$ şeklinde yazılabilir. $\Delta m_l = 1, 0, -1$ için Zeeman geçişleri $\nu = \nu_0 + \frac{eB_0}{4\pi m}$, $\nu = \nu_0$, $\nu = \nu_0 - \frac{eB_0}{4\pi m}$ şeklinde olup, spektroskopideki bu üç çizgiye **Zeeman üçlüsü** (tripleti) denir. Bunlar sırasıyla, σ^+ , π , σ^- geçişleri olarak adlandırılır. B_0 la orantılı Zeeman yarımaları hep eşit aralıklı olur, bu nedenle olaya **lineer Zeeman olayı** da denir. B_0^2 ile orantılı olan yarımalara da **kuadratik Zeeman olayı** denir.

b) Anomal Zeeman Olayı: Yörünge ve spin dipol momentlerinin bileşkesi olan toplam dipol momentin dış manyetik alana göre yönelmelerine **anomal Zeeman olayı** denir. Bu durumda etkileşim enerjisi $\Delta E_{AZ} = -\vec{\mu}_l \cdot \vec{B}_0$ ile belirlidir. Bu bağıntı Lande çarpanlarına bağlı olarak, $\Delta E_{AZ} = \frac{\mu_B B_0}{\hbar} (g_l L_z + g_s S_z) = g_j \mu_B m_j B_0$ şeklinde yazılabilir.

Anomal zeeman olayına spektral bir örnek sodyumun $3P \rightarrow 3S$ geçişleri spektrumudur. İnce yapı ile sodyumun P seviyesi $3^2P_{3/2}$ ve $3^2P_{1/2}$ şeklinde ikiye ayrılır. Bu durumda P'nin iki durumundan da geçiş söz konusudur. Bu durum anomal Zeeman olayını belirtir.

5) STARK TERİMİ: Atomun elektronunun bir dış elektrik alanı ile etkileşmesi olayına **Stark olayı** denir. Olayı hidrojen atomu için, pertürbasyon teorisi içerisinde inceleyelim. Hidrojen atomu üzerine homojen ve sabit bir $\vec{\epsilon}_0$ alanı uygulandığında, ortaya çıkan Stark etkileşim enerjisi, operatör olarak $H^{(1)} = e\vec{r} \cdot \vec{\epsilon}_0 = e\epsilon_0 r \cos\theta = e\epsilon_0 z$ şeklindedir.

a) Temel seviyenin pertürbasyonu: Bu durumda $n=1$ temel seviyenin pertürbasyonu, birinci mertebeden $E_1 = E_1^{(0)} + e\epsilon_0 \langle \psi_{100} | r \cos\theta | \psi_{100} \rangle = 0$ dir. Temel seviyenin ikinci mertebeden pertürbasyonu ise (ayrıntı için

kuantum fiziğine bakınız), $E_1 \cong E_1^{(0)} + e^2 \epsilon_0^2 \sum_{n \neq 1} \frac{|\langle \Psi_{nlm}^{(0)} | r \cos\theta | \Psi_{100}^{(0)} \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}$ şeklindedir. Buradaki ikinci terim $\frac{9}{4} a_0^3 \epsilon_0^2$ için hidrojen dalga fonksiyonları kullanılarak, $n \rightarrow \infty$ iken Stark enerjisi; $E_1 = E_1^{(0)} + E_2^{(2)} = E_1^{(0)} - \frac{9}{4} a_0^3 \epsilon_0^2$ olarak bulunur. Buradaki ikinci terim **kuadratik Stark terimidir**. Temel seviyede ($n=1$) **Lineer Stark olayı** ise gözlenmez.

b) İlk uyarılma seviyesinin pertürbasyonu: Hidrojen atomunun ilk uyarılma seviyesi $n=2$ olduğundan atom $n^2=4$ katlı dejeneredir. Bunun için Hamiltoniyen $H = H^{(0)} + H^{(1)}$ şeklindedir. $H^{(0)}$ 'ın $n=1$ ve $n=2$ olan

$E_1^{(0)} = \langle 100 | H^{(0)} | 100 \rangle = -\frac{e^2}{2a_0}$, $E_2^{(0)} = \langle 2.. | H^{(0)} | 2.. \rangle = -\frac{e^2}{8a_0}$ dalga fonksiyonları için beklenen değerleri; $E_1^{(0)} = -\frac{e^2}{2a_0}$, $E_2^{(0)} = -\frac{e^2}{8a_0}$ şeklindedir. Burada $n=2$ için dört değer de aynıdır, dolayısıyla dört fonksiyondan herhangi biri kullanılabilir. 4 katlı dejenerelikten dolayı $H_{m'm}^{(1)}$ pertürbasyon matrisi 4×4 boyutundadır. Matris elemanlarına (beklenen değerlere) $\int (\text{çift pariteli}) \neq 0$ ve $\int (\text{tek pariteli}) = 0$ kuralları uygulandığında ,

$$H^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -3a_0e\epsilon_0 \\ -3a_0e\epsilon_0 & 0 \end{pmatrix}$$

matrisi elde edilir. Dejenere pertürbasyon tekniği ile ψ_1, ψ_2 baz vektörleri kullanılarak elde edilen denklemler için katsayılar determinantı sıfıra eşitlenir ve birinci mertebeden düzeltmeler bulunur. Buradan n=2 seviyesinde düzeltilmiş, yani pertürbe olmuş enerjileri

$$(E_2)_1 = -\frac{e^2}{8a_0} - 3a_0e\epsilon_0 \quad \text{ve} \quad (E_2)_2 = -\frac{e^2}{8a_0} + 3a_0e\epsilon_0$$

şeklinde olur. Görüldüğü gibi bu seviyede **lineer Stark olayı görülür**. Kuadratik stark olayını görebilmek için ikinci mertebeden düzeltmeler hesaplanır.

6)VARYASYON METODUYLA HELYUMUN TABAN ENERJİSİ: Varyasyon metodunda sadece pertürbasyonun beklenen değerini hesaplamak yerine, Hamiltoniyenin kendisinin beklenen değerini hesaplarız. Hamiltoniyenin beklenen değeri ise sistemin uygun bir parametrik fonksiyonu ile ifade edilir (ayrıntı için kuantum fiziğine bakınız).

Çok elektronlu atomlarda elektronların perdelemesinden dolayı atom numarasının etkin değeri değişir. Bunun için, σ elektronların perdeleme parametresi olmak üzere, etkin değer $Z_{et}=(Z-\sigma)=Z'$ dir. Helyumun

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{Z'^3}{\pi a_0^3} e^{-Z'(r_1+r_2)/a_0}$$

n=1 seviyesi için dalga fonksiyonu, r_1, r_2 konum vektörleri olmak üzere,

dır. İki

$$H = \frac{-\hbar^2}{2\mu} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - 2e^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{r_{12}}$$

elektronlu bu atomun toplam hamiltoniyeni ise, Hamiltoniyenin

beklenen

değeri,

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = 2Z'^2 R^{(0)} + (Z'-2)e^2 \iint_{r_1 r_2} \Psi^* \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \Psi dv_1 dv_2 + e^2 \iint_{r_1 r_2} \Psi^* \left(\frac{1}{r_{12}} \right) \Psi dv_1 dv_2$$

dır. Burada $dv_1=4\pi r_1^2 dr_1$

ve $dv_2=4\pi r_2^2 dr_2$ hacim elemanları, $R^{(0)}=-13,6 \text{ eV}=-1 \text{ Rydberg}$ tir. Beklenen değerdeki **ilk terim** -

$2Z'^2 \text{Rydberg}$, **ikinci terim** $E^{(1)}_1 = -4Z'(Z'-2)R^{(0)}$, **üçüncü terim** ise $E^{(1)}_1 = \frac{-5}{4} Z' R^{(0)}$ dir. Bu durumda hamiltoniyenin toplam beklenen değeri, Z' parametresine bağlı olarak

$$E(Z') = \left[2Z'^2 - \frac{5}{4} Z' - 4Z'(Z'-2) \right] R^{(0)}$$

şeklinde yazılabilir. Buradan varyasyon ilke denklemiyle (ayrıntı

için kuantum fiziğine bakınız) Z' nün maksimum ve minumum değeri hesaplanarak, Hamiltoniyenin beklenen değerinin maksimum ve minumum değerleri bulunabilir. Z' nün minumum değeri $Z'=27/16$,

Hamiltoniyenin minumum değeri $E_1=5,695R^{(0)}$, elektronların perdeleme parametresi ise $\sigma=5/16$ bulunur.

Bu enerji değeri helyumun taban enerji değeridir.

Mehmet TAŞKAN

KAYNAKLAR:

1) **"Kuantum Fiziği"** –Prf.Dr.Erol AYGÜN-Doç.Dr.D.Mehmet Zengin, Ankara Üniversitesi Yayınları-2.Baskı-1992

2) **"Atom ve Molekül Fiziği"**- Prf.Dr.Erol Aygün-Doç.Dr.D.Mehmet Zengin-Ankara Üniversitesi yayınları-1992

3) **"Çağdaş Fiziğin Kavramları"**-Arthur Beiser-Çev:Doç.Dr.M.Çetin-Doç.Dr.H.yıldırım-Prf.Dr.Z.Gülsün. Dicle Ün.v.yayınları-2,baskı-1989.....

4) **Atom ve Molekül Fiziği**, Prf Dr B:H:Bransden, Prf Dr C.J.Joachain, **Çevirenler:**Prf Dr F.Köksal, Prf Dr H.Gümüş, On dokuz Mayıs Ün.v.

5) **Fizikte matematik metotlar** ,Prf Dr C.Önem, Erciyes Ün.v, 3.baskı, Birsen Yay.

6) **Physics-part 2**, Prf Dr D.Halliday, Prf Dr R.Resnick, Wiley International Edition.

7) **Katıhal fiziğine giriş**, Prf Dr T.Nuri Durlu, Ankara Ün.v, 1992 2.Baskı.