T.C.
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ

FEN EDEBİYAT FAKÜLTESİ

Fizik Bölümü

FİZ302 Kuantum Mekaniği II

Hidrojen Atomu

4-8. Haftalar

özenilen üniversite

Kurupelit Kampüsü 55139 SAMSUN Tel: +90 362 312 19 19 Faks: +90 362 457 60 91 iletisim@omu.edu.tr www.omu.edu.tr

Ders Kitabı: Köksal, F., Köseoğlu, R. (2006). Fenciler için Kuantum Mekaniği. Ankara Nobel Yayınevi.

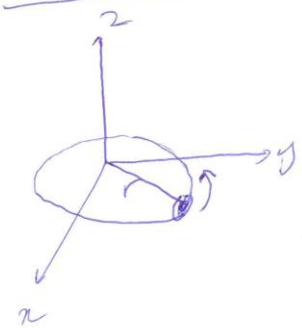
Ders kitabının özeti niteliğinde çalışma notlarıdır.

(1)

BÖLÜM 5

Dönme Hareketi, Dairesel Halka Üzerinde Hareket, Katı Döneç ve Hidrojen Atomu

1. Dairesel Bir Halka Üzerinde Hareket



xy düzleminde, r yarıçaplı bir daire üzerinde hareket eden m kütleli parçacığı ele alalım. Parçacığın potansiyel enerjisi sabittir ve sıfır da alınabilir.

Sch. Denklemi:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi = E\psi$$

kutupsal koordinatlar da yazalım.

$x = r\cos\phi$, $y = r\sin\phi$

$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{d^2}{d\phi^2}$ 'dir.

$$\Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2mr^2}\frac{d^2\psi}{d\phi^2} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2\psi}{d\phi^2} = E\psi$$

$I = mr^2$: eylemsizlik momenti.

$$\frac{d^2\psi}{d\phi^2} = -\frac{2IE}{\hbar^2}\psi$$

$$\Rightarrow \psi(\phi) = Ae^{im_l\phi} + Be^{-im_l\phi} \; ; \; m_l = \sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}$$

(2)

— Sınır şartlarını uygulayalım.

$$\psi(\phi+2\pi)=\psi(\phi)$$

$$\Rightarrow A e^{im_l(\phi+2\pi)}+B e^{-im_l(\phi+2\pi)}=A e^{im_l\phi}+B e^{-im_l\phi}$$

$$\Rightarrow m_l=0,\pm1,\pm2,\dots$$

$$\Rightarrow E=\frac{m_l^2\hbar^2}{2I}$$

— $E=\frac{J^2}{2I}$ 'idi. Buna göre $J^2=m_l^2\hbar^2$ olur.

Bu açısal momentumun kuantumlandığını gösterir.

— $\hat{J}_z=xP_y-yP_x=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ } Açısal momentumun z bileşeni.

$$=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$A\neq0$ ve $B=0$ için;

$$J_z\psi(\phi)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\left(Ae^{im_l\phi}\right)=m_l\hbar\,\psi(\phi)$$

$A=0$ ve $B\neq0$ için;

$$J_z\psi(\phi)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\left(Be^{-im_l\phi}\right)=-m_l\hbar\,\psi(\phi)$$

olur.

$Ae^{im_l\phi}$'yi normalize edelim.

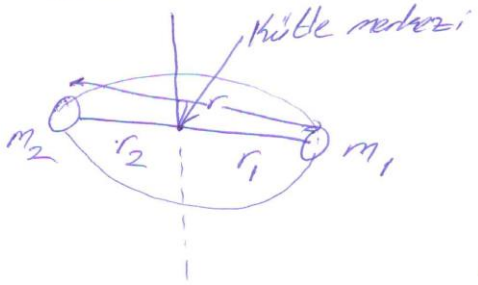
$$\int_0^{2\pi}A^2e^{-im_l\phi}e^{im_l\phi}=A^2\int_0^{2\pi}d\phi=2\pi A^2=1\Rightarrow A=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$$

$\Rightarrow \psi(\phi)=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\,e^{im_l\phi}$; normalize olmuş dalga fonksiyonu.

$e^{im_l\phi}\rightarrow$ saat yönünün tersi; $e^{-im_l\phi}\rightarrow$ saat yönünde dönmeyi temsil eder.

(3)

2. Katı Döneç



$$E_k = \frac{1}{2}\mu r^2 w^2 = \frac{1}{2} I w^2$$

$$\underset{\text{in. kütle}}{\mu} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \; ; \; \underset{\text{eş. mom.}}{I} = \mu r^2$$

Açısal momentum $\Rightarrow L = I w$

$$\Rightarrow E_k = \frac{L^2}{2I} \text{ dur.}$$

Katı Döneç için; $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I}\nabla^2$ 'dir.

$\nabla^2 \rightarrow$ Laplacien işlemcisi. Küresel kutupsal koordinatlarda yazarsak; (r: sabit)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \text{ dur.}$$

$$\Rightarrow \hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

– Katı döneç için Sch. Denklemi:

$Y(\theta,\phi)$: küresel harmonik

$$\hat{H}Y(\theta,\phi) = EY(\theta,\phi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y(\theta,\phi) = EY(\theta,\phi)$$

Denklemi $\sin^2\theta$ ile çarpalım $\beta = \frac{2IE}{\hbar^2}$ olsun.

(4)

$$\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} + \beta \sin^2\theta\, Y = 0$$

$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\cdot\Phi(\phi)$ olsun. (Yerine yaz ve Y'ye böl.)

$$\Rightarrow \frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \beta\sin^2\theta + \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} = 0 \text{ olur.}$$

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \beta\sin^2\theta = m^2 \quad (\sin^2\theta \text{ ile böleliim})$$

$$\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -m^2$$

$$\Rightarrow \boxed{\Phi_m(\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{im\varphi}} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

– Θ'lı denklemi $\sin^2\theta$'ya bölelim ve düzenleyelim.

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}\right) - \frac{m^2\Theta}{\sin^2\theta} + \beta\Theta = 0$$

– $x = \cos\theta$ olsun.

$\sin\theta = \sqrt{1-x^2}$ olur.

$\Theta(\theta) = P(x)$ olacak şekilde bir $P(x)$ fon. olsun.

$$\frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{dP(x)}{d\theta} = \frac{dP}{dx}\frac{dx}{d\theta} = \frac{dP}{dx}\frac{d(\cos\theta)}{d\theta} = -\sin\theta \frac{dP}{dx}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{d\theta} = -\sin\theta \frac{d}{dx} \text{ dur.}$$

(5)

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)-\frac{m^2\Theta}{\sin^2\theta}+\beta\Theta=0$$

$$\frac{1}{\sqrt{1-z^2}}\left(\sqrt{1-z^2}\frac{d}{dz}\right)\left[\sqrt{1-z^2}\cdot\left(\sqrt{1-z^2}\right)\frac{dP}{dz}\right]-\frac{m^2P}{(1-z^2)}+\beta P=0$$

$$\frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\frac{dP}{dz}\right]+\left[\beta-\frac{m^2}{1-z^2}\right]P=0$$

$$(1-z^2)\frac{d^2P}{dz^2}-2z\frac{dP}{dz}+\left[\beta-\frac{m^2}{1-z^2}\right]P=0$$

$l=0,1,2,\dots \Rightarrow \beta=l(l+1)$ olur.

$$(1-z^2)\frac{d^2P}{dz^2}-2z\frac{dP}{dz}+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{1-z^2}\right]P=0$$

— Bu denklem Legendre denklemidir ve çözümleri Legendre polinomları olarak adlandırılır.

$$\beta=l(l+1)=\frac{2IE}{\hbar^2}\Rightarrow \boxed{E=\frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)}$$

— Legendre (ilişkili) polinomları:

$$P=P_l^{|m|}(z)=(1-z^2)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{dz^{|m|}}P_l(z)$$

— Legendre pol.:

$$P_l(z)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l$$

l: derece
m: mertebe

$\Rightarrow m\le l$ olmalıdır.

(6)

— $P_l^{|m|}(z)$ 'yi normalize edelim.

$$N_{lm}^2 \int_{-1}^{1} P_l^{|m|}(z)\, P_l^{|m|}(z)\, dz = 1$$

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{(2l+1)}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}$$

— Katı döneçin tam dalga fonksiyonu:

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\, \Phi_m(\varphi)$$

$$= (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\, P_l^{|m|}(\cos\theta)\, e^{im\varphi}$$

— Bu fonksiyonlara küresel harmonikler denir ve $\hat{L}^2$ işlem cisinin öz fonksiyonlarıdırlar.

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} \quad : \text{döneme için.}$$

$$\hat{H}\, Y_l^m(\theta\varphi) = \frac{\hbar^2}{2I}\, l(l+1)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$\hat{L}^2\, Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar^2\, l(l+1)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

(7)

Katı Döneç ve İki Atomlu Molekül

— $\Delta l = \pm 1$ seçim kuralı. Geçiş olması için bu kuraldan başka molekül devamlı dipol momentine sahip olmalıdır.

$$\Delta E = E_{l+1} - E_l = \frac{\hbar^2}{2I}\left[(l+1)(l+2) - l(l+1)\right]$$

$$= \frac{\hbar^2}{I}(l+1) = \frac{h^2}{4\pi^2 I}(l+1)$$

$$\Delta E = h\nu = \frac{h^2}{4\pi^2 I}(l+1)$$

$$\nu = \frac{h}{4\pi^2 I}(l+1) \quad , \; l = 0, 1, 2, \ldots$$

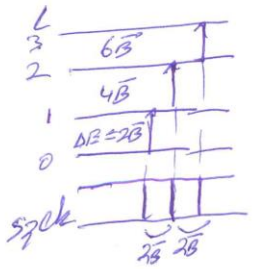
— İki atomlu bir molekülün ~~radyogramış~~ dönme geçişleri mikrodalga bölgesinde yer alır. Bu nedenle bu geçişleri inceleyen spektroskopi dalına mikrodalga spektroskopisi denir.

$$B = \frac{h}{8\pi^2 I} \; (Hz) \Rightarrow \nu = 2B(l+1)$$

↳ dönme sab.tı.

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{c} = 2\bar{B}(l+1) \quad \{cm^{-1} \text{ birimlerinde.}$$

— Buna göre, iki atomlu bir molekülün mikrodalga spektrumunun eşit $2B$ veya $2\bar{B}$ aralıklı çizgilerden oluşmaktadır.



— İki atomlu bir molekülün pentipsi küçük titreşimler yaptığı için tam anlamıyla bir katı döneç değildir. Bu nedenle spektrumda aralıklar tam eşit olmayabilir. Bu takdirde katı olmayan döneç yaklaşımları yapılır.

Hidrojen Atomu

(8)

— Hidrojen atomunu orjinde sabit duran bir proton ve onun etrafında r uzaklığında indirgenmiş kütlesi μ olan bir elektondan ibaret olduğu kabul edilir. Protonla e arasındaki Coulomb potansiyeli:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Tek e lu Z atom numaralı atomlar için

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad \text{olur.}$$

Sch. Denklemi:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi) + V(r)\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi)$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

($2\mu r^2$ ile çarp)

$$-\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) - \hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi + 2\mu r^2[V(r)-E]\psi = 0$$

$$\Rightarrow \quad -\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \hat{L}^2\psi + 2\mu r^2[V(r)-E]\psi = 0$$

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) - E\right]R(r) = 0$$

(9)

— Bu dif. denklemin çözümünden $R(r)$ elde edilir.

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

$$\rho = 2\alpha r = \left(\frac{2Z}{na_0}\right) r$$

$$L_{n+l}^{2l+1} = \frac{d^{2l+1}}{d\rho^{2l+1}} L_{n+l}(\rho) \qquad L_{n+l}(\rho) = e^{\rho} \frac{d^{n+l}}{d\rho^{n+l}} \rho^{n+l} \cdot e^{-\rho}$$

— Bu denklemlerden $l \leq n-1$ olduğu ve $n = 1, 2, \ldots +\infty$ olduğu bulunur. Daha önce, açısal kısımdan, $-l \leq m_l \leq l$ elde etmiştik. Sonuç olarak kuantum sayıları (n, l, m_l) Sch. denkleminin çözümünden elde edilmiş olur.

Baş kuantum Sayısı (n) ve Enerji Düzeyleri

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2}, \quad n = 1, 2, 3$$

— Bu sonuç, hidrojen tipi bir iyonun veya hidrojen atomunun kütle merkezi etrafındaki hareket enerjisinin kuantlandığını ve n, l, m kuantum sayılarından sadece n'ye bağlı olduğunu göstermektedir. Baş kuantum sayısının sadece yarıçapa bağlı $R(r)$ fonksiyonunda çözülmesi ve Φ_m, Θ_{lm} fonksiyonlarında çözülmemesi atomun relatif hareketinin elektronun çekirdekten olan uzaklığına bağlı olduğunu ve herhangi bir açısal yönelime bağlı olmadığını göstermektedir. Bu sonuç potansiyelin küresel simetrik olmasından da çıkarılabilir.

— n^2 katlanırlık: Bir düzey ne kadar çok katlı katlanırlı ise istatistiksel olarak bu düzeyde bulunma olasılığı büyük olduğundan buradan geçişler şiddetli olurlar.

(10)

Hidrojen Atomunun Toplam Dalga Fonksiyonu

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\,\Theta_{lm}(\theta)\,\Phi_m(\varphi)$$
$$= R_{nl}(r)\,Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{+\infty} \psi^*_{nlm}(r,\theta,\varphi)\,\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)\, r^2 dr = 1$$: Normalizasyon koşulu.

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{+\infty} \psi^*_{nlm}(r,\theta,\varphi)\,\psi_{n'l'm'}(r,\theta,\varphi)\, r^2 dr = \delta_{nn'}\,\delta_{ll'}\,\delta_{mm'}$$: Ortogonallik koşulu.

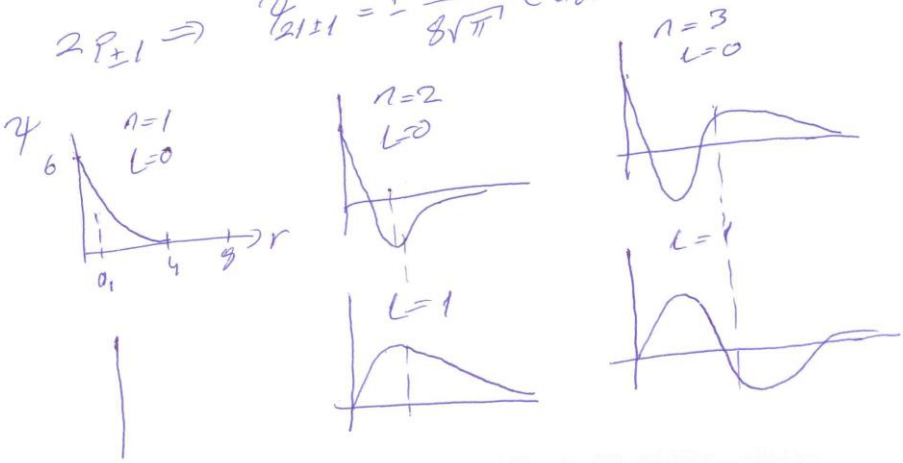
$l = 0$ ise s yörüngeninsisi
$l = 1$ " p "
$l = 2$ " d "

$$1s \Rightarrow \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$2s \Rightarrow \psi_{200} = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(1-\frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$2p_0 \Rightarrow \psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}\cos\theta$$

$$2p_{\pm 1} \Rightarrow \psi_{21\pm 1} = \pm\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$$



(11)

— r, θ, φ noktasında yerleşmiş $d\tau$ hacminde bulunma olasılığı:

$$|\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 d\tau = \psi^*_{nlm}(r,\theta,\varphi)\,\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)\, r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$= |R_{nl}(r)|^2 (2\pi)^{-1} |\Theta_{lm}(\theta)|^2 r^2 dr \sin\theta\, d\theta$$

$D_{nl}(r) = r^2 |R_{nl}(r)|^2$: radyal bulunma yoğunluğu.

$\frac{1}{2\pi} |\Theta_{lm}(\theta)|^2$: açısal dağılım yoğunluğu.

— $D_{nl}(r)$; elektronun çekirdekten r uzaklığında birim uzunluk başına bulunma olasılığını verir. (θ, φ'den yani yönden bağımsız)

$$P_{nl}(r) = \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, |\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 r^2 dr$$

$$= r^2 |R_{nl}(r)|^2 dr \underbrace{\int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, |Y_l^m(\theta,\varphi)|^2}_{1}$$

$$= r^2 |R_{nl}(r)|^2 dr$$

$$= D_{nl}(r)\, dr$$

— $l=0$ için $r=0$'da $\psi_{n00}(r=0) \neq 0$ dır. Yani s durumlarının $r=0$'da dalga fonksiyonları sıfır değildir, diğer tüm fonksiyonlar sıfırdır. Öte yandan

$$|\psi_{n00}(0)|^2 = |Y_0^0(\theta,\varphi)|^2 R_{n0}^2 = \frac{R_{n0}^2}{4\pi} = \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3}$$

dır. Bu da s yörüngelerinin çekirdekte bulunma olasılığının olduğunu gösterir.

— Bununla birlikte elektronun yarıçapsal olasılık dağılımları ise bu ifadelerdeki r^2 çarpanı nedeniyle $r=0$ da sıfırdır.

— 1s için $D_{1s}(r) = r^2 R_{1s}^2 = \frac{4r^2}{a_0^3} e^{-2r/a_0}$ dır. r'nin en muhtemel değeri D'yi maksimum yapan değerdir.

$$\left.\frac{dD_{1s}(r)}{dr}\right|_{r=} = 0$$

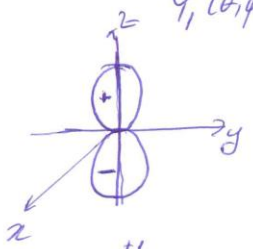
$$\frac{4}{a_0^3}\left(2r - \frac{2}{a_0} r^2\right) e^{-2r/a_0} = 0$$

$$2r = \frac{2}{a_0} r^2 \Rightarrow \boxed{r = a_0} \text{ dır.}$$

— Açısal kısma dönelim.

$l=1$ için $m = 0, \pm 1$ 'dir. $Y_1^0(\theta,\varphi)$ ve $Y_1^{\pm 1}(\theta,\varphi)$ küresel harmonikleri vardır.

$Y_1^0(\theta,\varphi) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$ dır. ∴ P_z veya P_0 denir.



$$Y_1^{+1}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{i\varphi} \qquad |Y_1^{+1}(\theta,\varphi)|^2 = \frac{3}{8\pi}\sin^2\theta$$

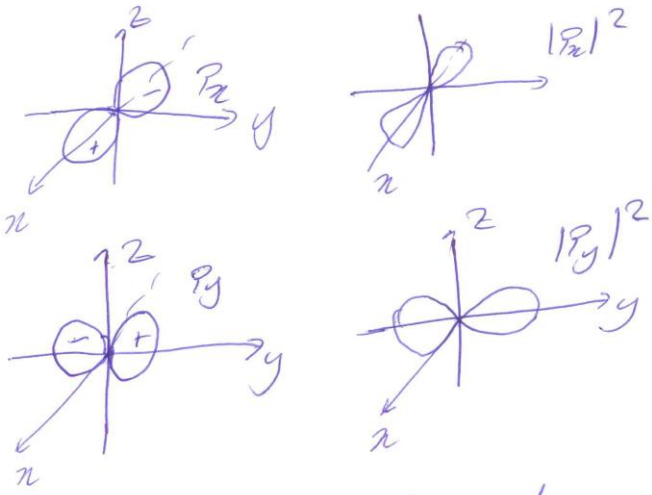
$$Y_1^{-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{-i\varphi} \qquad |Y_1^{-1}(\theta,\varphi)|^2 = \frac{3}{8\pi}\sin^2\theta$$

— Bu fonksiyonlar aynı enerjiye karşılık gelebilirlerden bunların doğrusal bileşimleri de aynı enerjiye karşılık gelen bir özfonksiyondur. Bunu dolayısıyla bunların doğrusal bileşimlerinin grafiğini çizmek daha kolaydır.

(13)

$$P_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-Y_1^1 + Y_1^{-1}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\varphi$$

$$P_y = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(Y_1^1 + Y_1^{-1}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\varphi$$



— P_x, P_y ve P_z hidrojen atomunun $l=1$'e karşılık gelen dalgafonksiyonunun açısal kısmı için kullanılırlar. Çünkü, bu fonksiyonlar gerçeldir ve gözle görülebilen yönlüm özellikleri lerine sahiptir.

— $l=2$ için $m = 0, \pm 1, \pm 2$ dir.

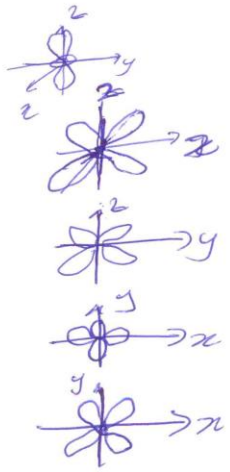
$$d_{z^2} = Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta - 1\right) = d_0$$

$$d_{xz} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_2^1 - Y_2^{-1}\right) = -\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi$$

$$d_{yz} = \frac{-i}{\sqrt{2}}\left(Y_2^1 + Y_2^{-1}\right) = -\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi$$

$$d_{x^2-y^2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_2^2 + Y_2^{-2}\right) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin^2\theta\cos 2\varphi$$

$$d_{xy} = -\frac{i}{\sqrt{2}}\left(Y_2^2 - Y_2^{-2}\right) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin^2\theta\sin 2\varphi$$



Manyetik Alanın Hidrojen Atomunun Enerji Düzeylerine Etkisi

— Bir elektrik yükünün kapalı bir yörünge üzerinde hareketi bir manyetik dipol oluşturur. Bu dipol momentin değeri:

$$\mu = i A \text{ 'dır.}$$

i: Akım (Amper) $\quad A$: Alan (m^2)

Dairesel bir yörünge için;

$$A = \pi r^2 \qquad i = \frac{qv}{2\pi r} \Rightarrow \mu = \frac{qv}{2\pi r}\pi r^2 = \frac{qrv}{2}$$

Dairesel olmayan yörüngeler için;

$$\mu = \frac{q}{2}(\vec{r}\times\vec{v})$$

$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ ve $\vec{p} = m\vec{v}$ olduğundan;

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2m}\vec{L} \text{ dır.}$$

μ ve L hareket düzlemine diktir.

e^- için; $q = -e$ ve $m = m_e$ olduğundan;

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e}\vec{L}$$

— Man. dipol bir dış man. alana maruz kalırsa $V = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$ kadarlık bir pot. enerji kazanır.

$\vec{B} = B_z\hat{z}$ ise $V = \frac{eB_z}{2m_e}L_z$ olur.

— Bir dış man. alanda bulunan hidrojen atomunun Hamiltonieni:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{eB_z}{2m_e}\hat{L}_z \text{ olur.}$$

$\hat{H}_0$: Dış man. alan yokluğundaki hidrojen atomunun Hamiltonie,

— Hidrojen atomunun dalga fonksiyonları hem $\hat{H}_0$'nın, hem de $\hat{L}_z$'nın özfonksiyonları olduğundan $\hat{H}$'nın da özfonksiyonlarıdır.

$$\hat{H}_0 R_{nl}(r) Y_l^m(\theta,\varphi) = -\frac{\mu e^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2} R_{nl}(r) Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$\hat{L}_z R_{nl}(r) Y_l^m(\theta,\varphi) = m\hbar R_{nl}(r) Y_l^m(\theta,\varphi) \qquad \left(\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\Rightarrow \hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H}_0\psi + \frac{eB_z}{2m_e}\hat{L}_z\psi = E\psi$$

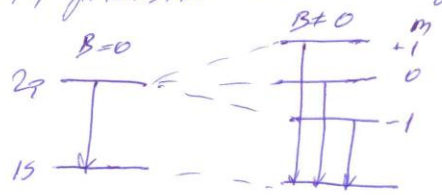
$$-\frac{\mu e^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2} + \frac{eB_z}{2m_e} m\hbar = E \text{ dır.}$$

$\beta = \frac{e\hbar}{2m_e}$: Bohr manyetonu

$= 9{,}279\times10^{-24}\ J/T$

$\Rightarrow E = -\frac{\mu e^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2} + \beta m B_z$: Man. danda bulunan hidrojen atomunun enerjisi.

— Buna göre verilen bir n, l düzeyinin bir dış man. alanda $2l+1$ düzeye ayrılmaktadır. Atomların man. alanda enerji düzeylerinin yarılmasına Zeeman olayı denir.



Helyum Atomu Problemi

(16)

— Çekirdeğin kütlesini elektronların yanında çok büyük ve durgun varsayarsak Sch. denklemi

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_e}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1}-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2}+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}\right]\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=E\,\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$$

olur.

— Sch. denkleminde elektronlar arasındaki etkileşme enerjisi dikkate alınmadığında problem, çekirdek yükü 2e olan iki hidrojen atomu problemine dönüşür.

$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\psi_{n_1l_1m_1}(\vec{r}_1)\,\psi_{n_2l_2m_2}(\vec{r}_2)$$

$$E=-\frac{4\mu e^4}{8\varepsilon_0^2h^2}\left(\frac{1}{n_1^2}+\frac{1}{n_2^2}\right)\qquad n_1,n_2=1,2,\ldots$$

— Problemi zor hale getiren elektronlar arasındaki etkileşme terimidir. Bu terim dikkate alındığında, helyum atomunun Sch. denklemini tam olarak çözmek imkansızdır. Bu problem ancak yaklaşık hesap yöntemleri ile (perturbasyon yöntemi, varyasyon yöntemi veya özuyumlu alan yöntemi) çözülür.

ÖZDEŞ PARÇACIKLAR

(17)

— İki parçacık için dalgafonksiyonu $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ dir. Hamiltonyen aşağıdaki gibi yazılır (zamandan bağımsız potansiyel için,

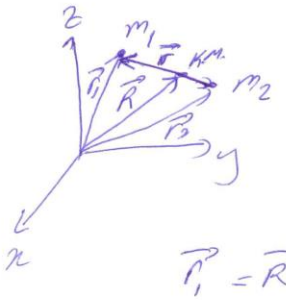
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(r)$$

$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 d\tau_1 d\tau_2$ olasılığı 1. parçacığı $d\tau_1$ ve 2. parçacığı $d\tau_2$ hacim elemanında bulunma olasılığıdır.

$$\int |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 d\tau_1 d\tau_2 = 1 \text{ dir.}$$

Kütle merkezinin koordinatları:

$$\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$



$$(m_1+m_2)\vec{R} = m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2$$
$$= m_1\vec{r}_1 + m_2(\vec{r}_1 - \vec{r})$$
$$= (m_1+m_2)\vec{r}_1 - m_2\vec{r}$$

$$\vec{r}_1 = \vec{R} + \frac{m_2}{m_1+m_2}\vec{r} = \vec{R} + \frac{\mu}{m_1}\vec{r}$$

$$\vec{r}_2 = \vec{R} - \frac{m_1}{m_1+m_2}\vec{r} = \vec{R} - \frac{\mu}{m_2}\vec{r}$$

$\vec{R} = (X, Y, Z)$ ve $\vec{r} = (x, y, z)$ ise.

x_1, bileşeni için; $(\nabla_1)_{x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\mu}{m_2}(\nabla_R)_X + (\nabla_r)_x$

y_1 ve z_1 bileşenleri içinde aynı işlemler yapılırsa;

$$\vec{\nabla}_1 = \frac{\mu}{m_2}\vec{\nabla}_R + \vec{\nabla}_r$$

elde edilir.

— İkinci parçacık için de aynı işlemler yapıldığında (12

$$\vec{\nabla}_2 = \frac{\mu}{m_1}\vec{\nabla}_R - \vec{\nabla}_r \quad \text{elde edilir.}$$

$$\nabla_1^2\psi = \vec{\nabla}_1\cdot(\vec{\nabla}_1\psi) = \vec{\nabla}_1\left(\frac{\mu}{m_2}\vec{\nabla}_R\psi + \vec{\nabla}_r\psi\right)$$

$$= \frac{\mu}{m_2}\vec{\nabla}_R\left(\frac{\mu}{m_2}\vec{\nabla}_R\psi + \vec{\nabla}_r\psi\right) + \vec{\nabla}_r\left(\frac{\mu}{m_2}\vec{\nabla}_R\psi + \vec{\nabla}_r\psi\right)$$

$$= \left(\frac{\mu}{m_2}\right)^2\nabla_R^2\psi + 2\frac{\mu}{m_2}(\vec{\nabla}_r\cdot\vec{\nabla}_R)\psi + \nabla_r^2\psi$$

$$\nabla_2^2\psi = \left(\frac{\mu}{m_1}\right)^2\nabla_R^2\psi - 2\frac{\mu}{m_1}(\vec{\nabla}_r\vec{\nabla}_R)\psi + \nabla_r^2\psi$$

elde edilir. Bu ifadeleri sch. denklemizde yerine koyalım.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\mu^2}{m_2^2}\nabla_R^2\psi - \cancel{\frac{\hbar^2}{m_1}\frac{\mu}{m_2}(\vec{\nabla}_r\cdot\vec{\nabla}_R)\psi} - \frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_r^2\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\mu^2}{m_1^2}\nabla_R^2\psi + \cancel{\frac{\hbar^2}{m_2}\frac{\mu}{m_1}(\vec{\nabla}_r\cdot\vec{\nabla}_R)\psi} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_r^2\psi + V(\vec{r})\psi = E\psi$$

$$\frac{m_1^2 m_2^2}{(m_1+m_2)^2}\frac{-\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\nabla_R^2\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\psi + V(r)\psi = E\psi$$

$\psi = \psi(\vec{R},\vec{r}) = \psi_R(\vec{R})\cdot\psi_r(\vec{r})$ denklemde yerleştirilirse;

$$\frac{-\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\nabla_R^2\psi_R = E\psi_R \;,\quad \frac{-\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\psi_r + V(r)\psi_r = E_r\psi_r$$

olur. İlk eşitlik kütle merkezinin, ikinci hareket ise kütle merkezi etrafındaki hareket denklemidir.

— Hidrojen atomunda protonla elektronun kütle merkezinin hareketi ile ilgilenmediğimiz için yalnız kütle merkezi etrafındaki hareketi incelediik.

— İki parçacıkta elektron veya protonsa:

Birbirleriyle etkileşmeyen iki parçacık için;

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_a(\vec{r}_1)\,\psi_b(\vec{r}_2)$$

yazalım. 1. parçacık ψ_a durumunda 2. parçacık ψ_b durumunda olsun. Fakat parçacıklar ayırdedilemediklerinden 1. parçacık "1. elektron" veya 2. parçacık "2. elektron" demenin bir anlamı olmaz.

— $\hat{P}$: yerdeğiştirme işlemcisi olsun.

$$\hat{P}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

$$\hat{P}^2\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{P}\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \text{ dur.}$$

$P^2 = 1$ olduğundan $\hat{P}$'nin özdeğerleri ± 1 dir. Parçacıklar özdeş ise $m_1 = m_2$ ve $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ dir. Bu nedenle $\hat{P}$ işlemcisi Hamiltonien ile komüte dur.

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0$$

— Birbirini komüte eden işlemcilerin özfonksiyonları ortak olduğundan ve $\hat{P}$'nin özdeğeri ∓ 1 olduğundan bu fonksiyonlar simetrik veya antisimetrik olmalıdır.

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \pm\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

$$\left.\begin{array}{l}(+) \rightarrow \text{bozonlar} \\ (-) \rightarrow \text{fermiyonlar}\end{array}\right\} \psi_\pm(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A\left[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) \pm \psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1)\right]$$

$A = \frac{1}{\sqrt{2}}$: Normalizasyon katsayısı

— Örnek olarak sonsuz yüksekliktli duvarları olan bir kuyu içerisinde birbirleriyle etkileşmeyen ve ikisinin de kütlesi m olan iki parçacık bulunsun. Kuyu için;

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \text{ ve } E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = n^2 B \text{ idi.}$$

* parçacıklar ayırd edilebilirse;

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) \; ; \; E_{n_1 n_2} = (n_1^2 + n_2^2) * B \text{ dur.}$$

— Taban durumu $(n_1 = n_2 = 1)$

$$\psi_{11}(x) = \frac{2}{L}\sin(\pi x_1/L)\sin(\pi x_2/L) \; , \; E_{11} = 2B$$

— Birinci uyarılmış durum $(n_1 = 1, n_2 = 2$ veya $n_1 = 2, n_2 = 1)$

$$\left.\begin{aligned} \psi_{12}^{(x)} &= \frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right) , \; E_{12} = 5B \\ \psi_{21}^{(x)} &= \frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) , \; E_{21} = 5B \end{aligned}\right\} \text{iki kez katlanmış}$$

* parçacıklar iki özdeş boson ise;

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)\right] \; ; \; E_n = (n_1^2 + n_2^2)B$$

— Taban durumu $(n_1 = 1, n_2 = 1)$

$$\psi_{11}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) + \frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right)\right]$$

$$= \frac{4}{\sqrt{2}\,L}\sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) \; ; \; E = 2B$$

— Birinci uyarılmış durum: $(n_1 = 1, n_2 = 2$ veya $n_1 = 2, n_2 = 1)$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right) + \frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right)\right]$$

$$= \frac{4}{\sqrt{2}\,L}\left[\sin(\pi x_1/L)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right)\right]$$

$E = 5B \Rightarrow$ katlanmış değil.

21

* İki parçacık özdeş fermiyon ise;

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)-\psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)\right],\quad E=(n_1^2+n_2^2)$$

$n_1=n_2=1$ durumu olamaz zira $\psi_{11}(x_1,x_2)=0$ olur. Dolayısı ile taban durumu $n_1=1$ ve $n_2=2$ veya $n_1=2$ ve $n_2=1$ dan durum olur.

$$\psi(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right)-\frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right)\right]$$

$$=\frac{4}{\sqrt{2}\,L}\left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right)-\sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right)\right]$$

Yerdeğiştirmenin Etkisi

— Bir boyutlu bir durumda bir parçacığın $\psi_a(x)$, diğerinin ise $\psi_b(x)$ de olduğunu ve bu durumların birbirine dik ve normalize olduklarını varsayalım.

* Parçacıklar ayırdedilebilir ise: $\psi(x_1,x_2)=\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)$
* Parçacıklar bozonlar ise: $\psi_+(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)+\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\right]$
* Parçacıklar fermionlar ise: $\psi_-(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)-\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\right]$

— Şimdi bu parçacıklar için iki parçacığın arasındaki uzaklığın karesinin beklenen değerini bulalım:

$$\langle(x_1-x_2)^2\rangle=\langle x_1^2\rangle+\langle x_2^2\rangle-2\langle x_1\rangle\langle x_2\rangle$$

* Ayırdedilebilir parçacıklar durumunda:

$$\langle x_1^2\rangle=\int x_1^2|\psi_a(x_1)|^2dx_1\int|\psi_b(x_2)|^2dx_2=\langle x^2\rangle_a$$

$$\langle x_2^2\rangle=\int|\psi_a(x_1)|^2dx_1\int x_2^2|\psi_b(x_2)|^2dx_2=\langle x^2\rangle_b$$

$$\langle x_1 \cdot x_2 \rangle = \int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$ 22

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\text{ayrdedilir}} = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2 \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

* Ayrıdedilemez parçacıklar bozon ve fermionlar için;

$$\langle x_1^2 \rangle = \frac{1}{2} \Big\{ \int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \underbrace{\int |\psi_b(x_2)|^2 dx_2}_{1} + \int x_1^2 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \underbrace{\int |\psi_a(x_2)|^2 dx_2}_{1}$$

$$\pm \int \underbrace{x_1^2 \psi_a^*(x_1) \psi_b(x_1) dx_1}_{0} \int \underbrace{\psi_b^*(x_2) \psi_a(x_2) dx_2}_{0}$$

$$\pm \int \underbrace{x_1^2 \psi_b^*(x_1) \psi_a(x_1) dx_1}_{0} \int \underbrace{\psi_a^*(x_2) \psi_b(x_2) dx_2}_{0} \Big\}$$

$$\langle x_1^2 \rangle = \frac{1}{2} \left[\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b \right]$$

benzer biçimde

$$\langle x_2^2 \rangle = \frac{1}{2} \left[\langle x^2 \rangle_b + \langle x^2 \rangle_a \right]$$

$$\Rightarrow \langle x_1^2 \rangle = \langle x_2^2 \rangle \text{ dır.}$$

$$\langle x_1 \cdot x_2 \rangle = \frac{1}{2} \Big[\int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2$$

$$+ \int x_1 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_a(x_2)|^2 dx_2$$

$$\pm \int x_1 \psi_a^*(x_1) \psi_b(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_b^*(x_2) \psi_a(x_2) dx_2$$

$$\pm \int x_1 \psi_b^*(x_1) \psi_a(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_a^*(x_2) \psi_b(x_2) dx_2 \Big]$$

$$= \frac{1}{2} \left[\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b + \langle x \rangle_b \langle x \rangle_a \pm \langle x \rangle_{ab} \langle x \rangle_{ba} \pm \langle x \rangle_{ba} \langle x \rangle_{ab} \right]$$

$$= \langle x \rangle_a \langle x_b \rangle \pm \left| \langle x \rangle_{ab} \right|^2$$

$$\langle x\rangle_{ab} = \int x\, \psi_a^*(x)\, \psi_b(x)\, dx$$

$$\Rightarrow \langle (x_1-x_2)^2\rangle_{\pm} = \langle x\rangle_a^2 + \langle x\rangle_b^2 - 2\langle x\rangle_a \langle x\rangle_b \mp 2\,|\langle x\rangle_{ab}|^2$$

$$\langle (\Delta x)^2\rangle_{\pm} = \underbrace{\langle (\Delta x)^2\rangle}_{\text{ayırdedilir}} \mp 2\,|\langle x\rangle_{ab}|^2$$

— Özdeş bozonlar için (−) işareti olduğundan ayırdedilir şar. göre daha ge
" fermiyonlar " (+) " " " " " " " uza

$\langle x\rangle_{ab}$ niceliği iki dalga fonksiyonunun örtüşmesi yoksa sıfır olur.

— Dalga fonksiyonları örtüştüğü zaman; özdeş bozonlar arasında çekici, özdeş fermiyonlar arasında itici bir etki oluşur. Bu etkiye gerdeğiştirme etkisi diyoruz.

— H_2 molekülünde elektronların protonlar arasında yoğunlaşmasını protonları çekmesini, dolayısıyla bağ oluşturmasını anlamak için yörüngesel dalgafonksiyonunun simetrik ve spin dalgafonksiyonunun antisimetrik olur.

Serbest Elektron Gazı

— Katılarda, her atomun gevşek bağlı değerlik elektronlarının ayrıldığını ve kendi atomlarının Coulomb çekimine bağlı olmadığını düşünelim. Bu elektronlar sadece tüm kristalin bileşik potansiyeline bağlı olurlar. Bu madde serbest elektron gazı modeli denir.

— Boyutları L_1, L_2, L_3 dan sonsuz yüksekliktek pot. kuyusu için.

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x,y,z) = \left(\frac{8}{L^3}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_1\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{n_2\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{n_3\pi}{L}z\right)$$

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\, n^2$$

$$n_1^2+n_2^2+n_3^2 = n^2$$

— Kuyu kenarları $L_1 = L_2 = L_3 = L$ olsun. Enerji düzeylerinin yaklaşık sürekli gibi olduğunu düşünürsek - O zaman yörüngelerin ve aynı şey olan durumların yoğunluklarından söz edebiliriz. 24

$D(E)$; durum yoğunluğu : birim enerji aralığında parçacıkların kuantum durumları sayısı.

$D(E)dE$; E ile $E+dE$ aralığında bulunan parçacık sayısı.

n_1, n_2 ve n_3 pozitif olduğundan durumlar yarıçapı $n=(n_1^2+n_2^2+n_3^2)^{1/2}$ olan kürenin $1/8$'indedir.

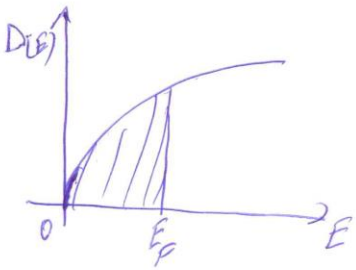
O halde E enerjisine kadar bireysel durumların toplam sayısı ;

$$N_S = \underbrace{2}_{\text{spin durumları.}} \cdot \frac{1}{8}\,\frac{4}{3}\pi n^3 = \frac{1}{3}\pi\,(n_1^2+n_2^2+n_3^2)^{3/2}$$

$$n = \left(\frac{2mL^2E}{\hbar^2\pi^2}\right)^{1/2} \qquad V = L^3$$

$$\rightarrow N_S = \frac{1}{3}\pi\left(\frac{2mL^2E}{\hbar^2\pi^2}\right)^{3/2} = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} V \cdot E^{3/2}$$

$$D(E) = \frac{dN_S}{dE} = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} V\, E^{1/2} \,//$$



— Taban durumunda ($T=0$'da - Fermi gazı), N fermiyonla dolu en düşük toplam enerjisinin olduğu durumdaki enerjiye Fermi enerjisi denir. $E > E_F$ enerjili olan yörüngemsiler boştur. Bu durum fermiyonlar için geçerlidir. Bozonlar için, parçacıkların hepsi en düşük enerji seviyesine gelebilirdi. Parçacıklar ayırdedilebilir olduğunda da yine Fermi durumunda olduğu gibi olurdu.

(25)

— Toplam parçacık sayısı:

$$N = \int_0^{E_F} D(E)\, dE$$

$$N = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} V \int_0^{E_F} E^{1/2} dE = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} V E_F^{3/2}$$

$\rho = \frac{N}{V}$: birim hacimdeki parçacık sayısı ; (yoğunluğu)

$$\Rightarrow E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 \rho\right)^{2/3} \text{ dır.}$$

— Taban durumunda ($T=0$ da) Fermi gazının toplam enerjisi

$$E_t = \int_0^{E_F} E D(E)\, dE = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} V \int_0^{E_F} E^{3/2} dE$$

$$= \frac{3}{5} N E_F$$

— $T=0$'da parçacık başına ortalama enerji:

$$E_{or} = \frac{3}{5} E_F$$

— Serbest elektron gazı içinde bulunduğu kuyunun sonsuz yükseklikteki duvarlarına basınç uygular. Eğer gazın hacmi dV kadar artırılırsa o zaman $E_{n_1 n_2 n_3}$ biraz azalır ve Fermi enerjisi ve toplam enerji de azalır. Gazın toplam enerjisindeki değişme çevresinin gaz üzerinde yaptığı $-PdV$ işine eşittir. Burada P gazın basıncıdır.

$$P = -\frac{dE_t}{dV} = \frac{2NE_F}{5V} = \frac{2}{3}\frac{E_t}{V} \text{ olur.}$$