Bölüm 9: Atomun Elektron Yapısı

İçindekiler

9-1 Elektromanyetik Işıma

9-2 Atom Spektrumları

9-3 Kuantum Teorisi

9-4 Bohr Atom Modeli

9-5 Yeni Bir Kuantum Mekaniğine Yol Açan İki Kavram

9-6 Dalga Mekaniği

9-7 Kuantum Sayıları ve Elektron Orbitalleri

İçindekiler

9-8 Hidrojen Atomunda Orbitallerin Yorumu ve Gösterimi

9-9 Elektron Spini: Dördüncü Kuantum Sayısı

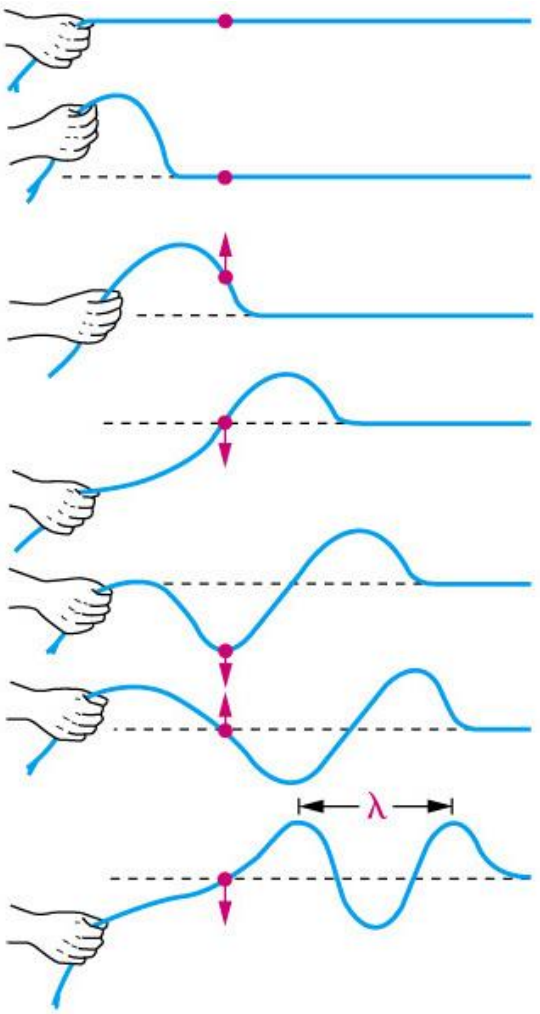
9-10 Çok Elektronlu Atomlar

9-11 Elektron Dağılımı

9-12 Elektron Dağılımları ve Periyodik Tablo

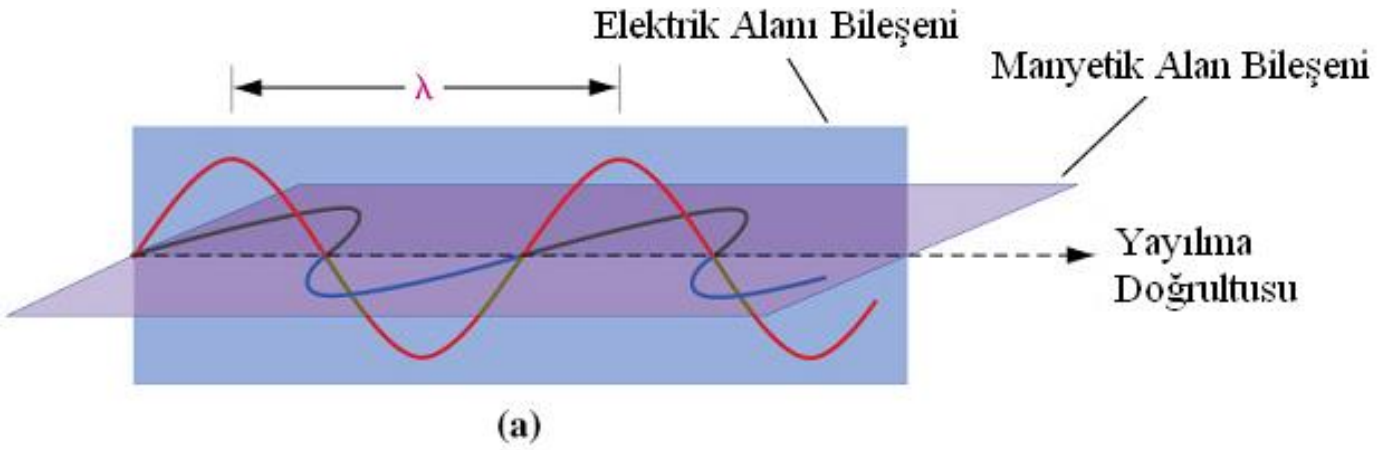
9-1 Elektromanyetik Işıma

- Elektromanyetik ışıma, elektrik ve manyetik alanların dalgalar şeklinde yayıldığı bir ortam (örneğin cam) veya vakumdan yayınlanan enerji şeklidir.
- Dalga, bir ortamda enerji taşıyan bir uyarıcıdır.



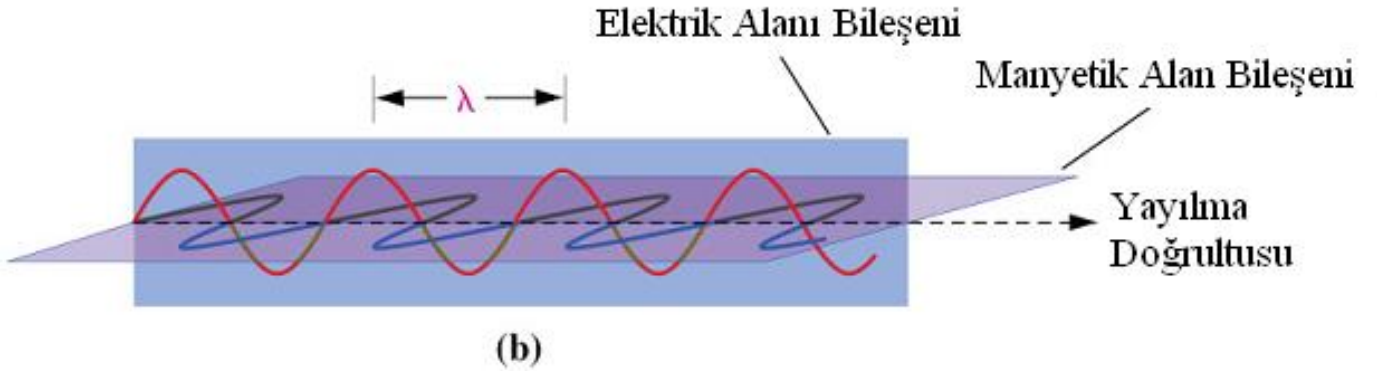
Elektromanyetik Dalgalar

Düşük ν



(a)

Yüksek ν



(b)

Frekans, Dalgaboyu ve Elektromanyetik Işımanın Hızı

- SI biriminde frekans (ν) birimi s^{-1} Hertz (Hz),
- Dalgaboyu (λ) birimi metredir (m).
  - cm (10^{-2} m) μm (10^{-6} m) nm (10^{-9} m) Å (10^{-10} m) pm (10^{-12} m)

- Işık Hızı (c), 2,997925 x 10^{8} m s^{-1}.

$$c = \lambda\nu \qquad \lambda = c/\nu \qquad \nu = c/\lambda$$

Örnek: Bir sodyum buharı lambasından yayılan ışığın büyük bir bölümü 589 nm dalga boyuna sahiptir. Bu ışığın frekansı nedir?

$589\ nm = 589 \times 10^{-9}\ m$

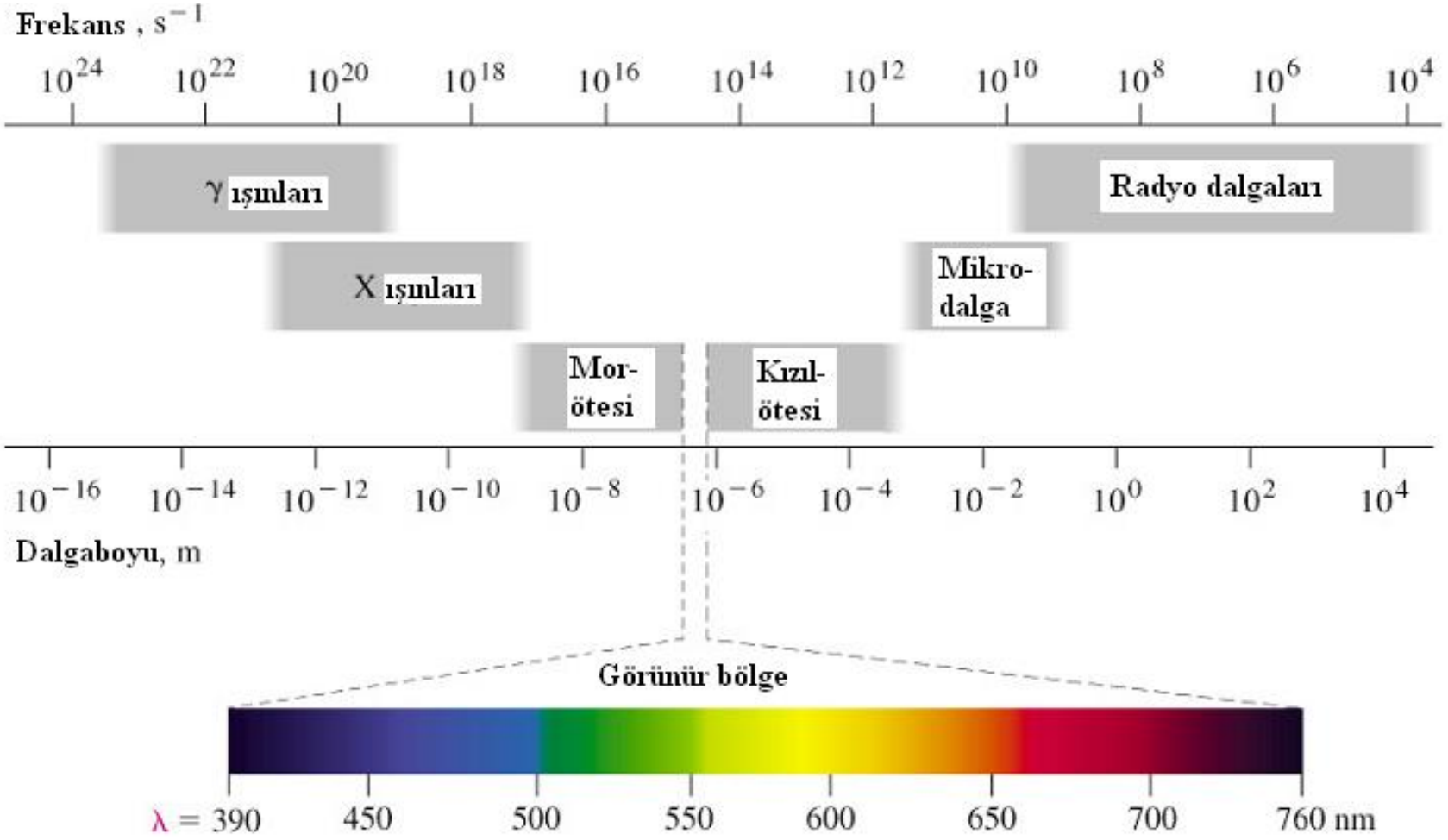
$(1\ nm = 10^{-9}\ m)$

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

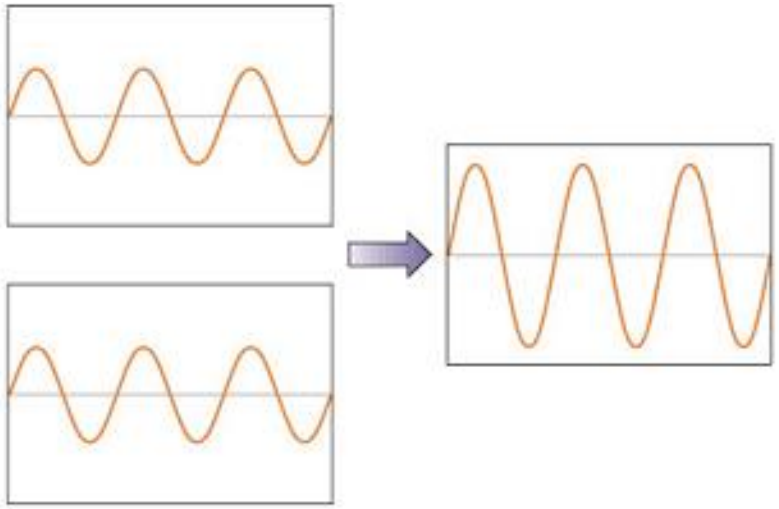
$$\nu = \frac{2,998 \times 10^{8}\ m/s}{5,89 \times 10^{-9}\ m}$$

$$\nu = 5,090 \times 10^{14}\ s^{-1} = Hz$$

Elektromanyetik Spektrum



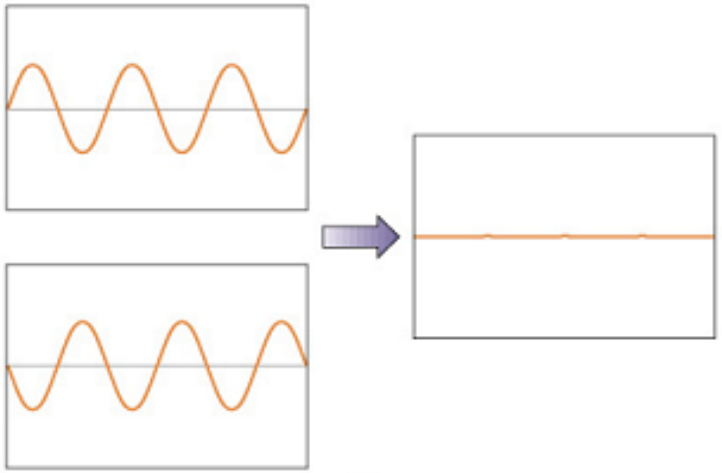
Birbiri Üzerine Binen İki Işık Dalgasında Girişim



(a)

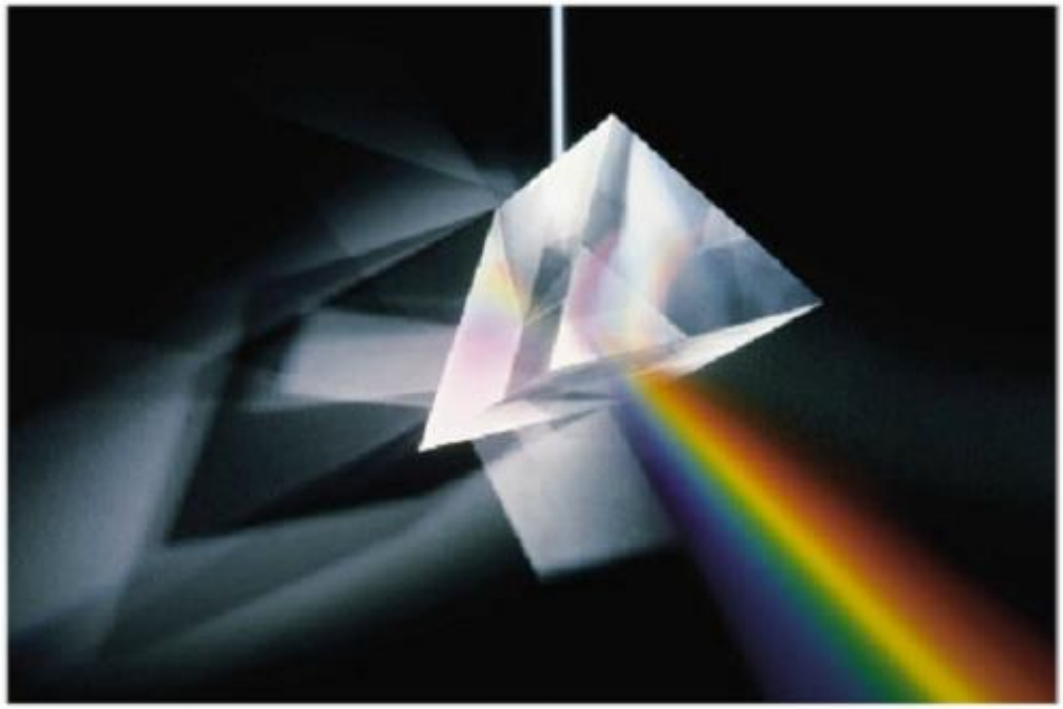
Şiddetlendirici girişimde, her iki dalganın tepeleri ve çanakları birbiri ile çakışmıştır (aynı fazda) ve bunun sonucu iki dalganın tepe ve çanakları birbirine eklenmiştir.

Yok edici girişimde iki dalganın tepe ve çanakları birbiriyle çakışmaz (aynı fazda değil) ve dalgalar söner.



(b)

Görünür Bölge Spektrumu



(a)

Beyaz ışık bir cam prizmadan geçirildiğinde, kırmızıdan mora kadar tüm dalga boyu bileşenlerinin karşılığı olan renkleri içeren sürekli bir band halinde dağılır. Bu görünür bölge spektrumudur.

Işığın Yansıması



(b)

Bir şelalenin önündeki “gök kuşağı”.
Güneş ışığını görünür bölgede dağıtan ortam atmosferdeki su damlacıklarıdır.

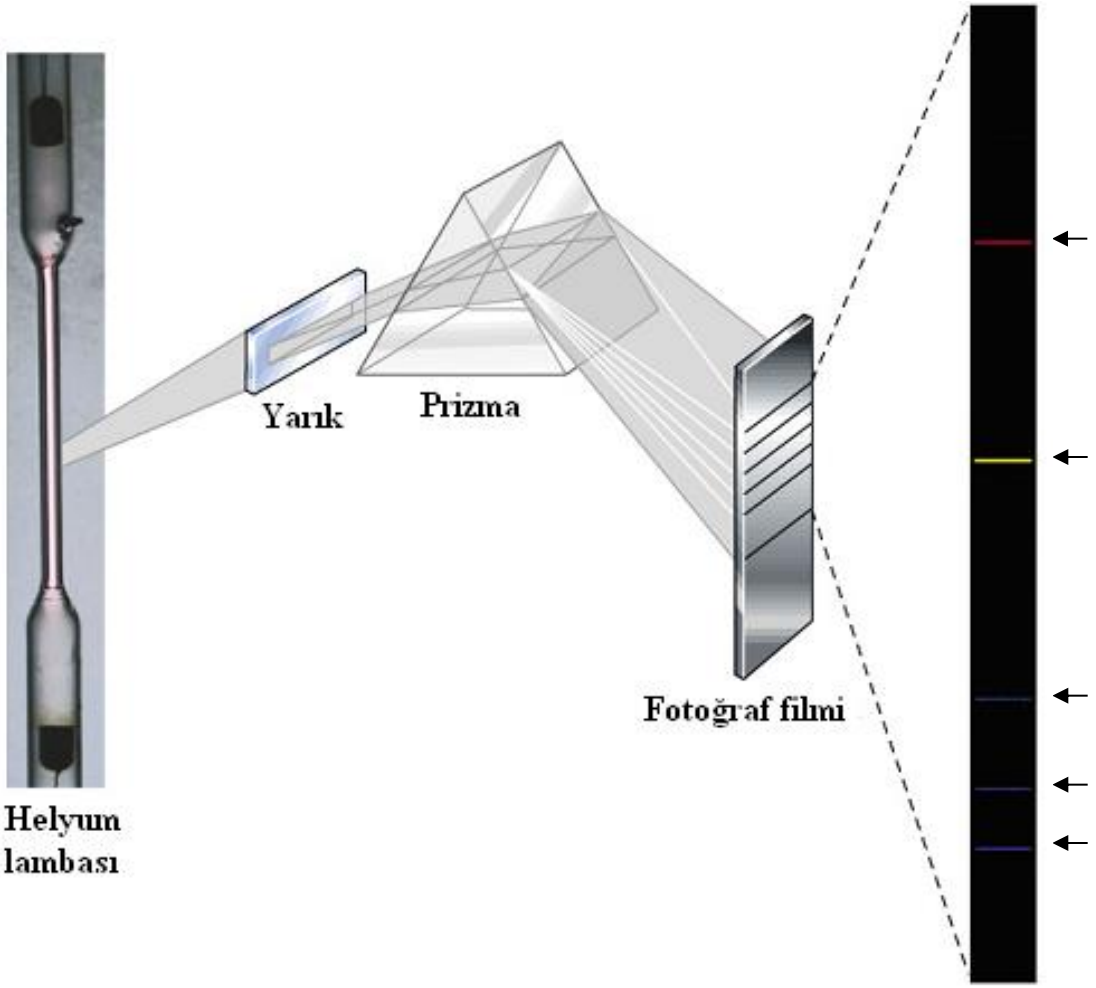
9-2 Atom Spektrumları

- Kırınıma uğrayan ışık çok sayıda dalgaboyu bileşeninden oluştuğundan, görünür bölge spektrumu *"sürekli spektrum"* olarak tanımlanabilir.

- Eğer spektrumu meydana getiren ışık göreli olarak az sayıda dalgaboyu bileşeni içerirse *"kesikli spektrum"* gözlenir.

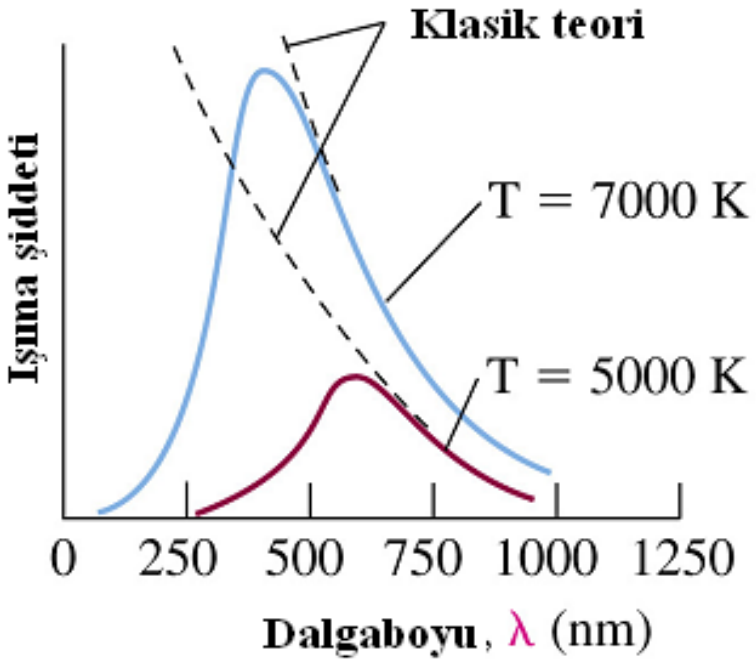
- Eğer ışık kaynağı bir gaz içerisinden geçen elektrik boşalımından oluşuyorsa, spektrumda yalnızca belirli renkler gözlenebilir. Ya da ışık kaynağı, içerisinde bir iyonik bileşik bulunan gaz alevi ise alev, ortamdaki metal iyonuna özgü bir renge boyanır. Bu durumlarda spektrumlar sınırlı sayıda kesikli dalgaboyu bileşeninden oluşur ve aralarında karanlık boşluklar bulunan renkli çizgiler gözlenir. Bu spektrumlar *"atom"* ya da *"çizgi spektrumları"* olarak adlandırılır.

Helyumun Atom ya da Çizgi Spektrumları



9-3 Kuantum Teorisi

Siyah Cisim Işıması:



Max Planck, 1900:

Enerji de madde gibi sürekli değildir.

$\epsilon = nh\nu$ Є:Enerji, n:Pozitif bir tamsayı,
h:Planck sabiti, $6{,}62 \times 10^{-34}$ Js, ν:Osilatörün frekansı

$$E = h\nu$$

Kuantum Teorisi

- Akkor sıcaklığa ısıtılmış bir cisim görünür bölgenin tüm dalgaboylarında dikkate değer şiddete sahip bir spektruma sahipken, kızıl dereceye ısıtılmış bir cisim 675 nm de pik veren bir spektruma sahiptir.

- Güneşin siyah cisim sıcaklığı yaklaşık 5750 K dir.

- Cisimler yalnızca yüksek sıcaklıklarda değil, her sıcaklıkta ışıma yaparlar. Örneğin, cisimler tarafından yayınlanan kızılötesi ışıma, onların karanlıkta, gece görüş gözlüğü ile görülebilmesini sağlar.

Fotoelektrik Olayı

- 1888'de H.Herz, belirli metallerin yüzeyine ışık çarptığında metalden elektron boşalımı olduğunu keşfetti. Bu olgu *fotoelektrik olayı* olarak adlandırılır ve bu olayda göze çarpan olgular şunlardır:
  - Elektron yayınlanması, yalnızca gelen ışığın frekansı belirli bir eşik değerin üzerine çıktığında gerçekleşir $(\nu > \nu_o)$
  - Yukarıdaki koşul sağlandığında yayınlanan e^- sayısı gelen ışığın şiddetine bağlıdır $(e^- \approx I)$
  - Yayınlanan e^-'ların kinetik enerjisi ışığın frekansına bağlıdır $(e_k \approx \nu)$

Işık Fotonları ve Kimyasal Tepkimeler

- Işık etkisi ile gerçekleşen tepkimelere fotokimyasal tepkimeler adı verilir. Bu tür tepkimelerde fotonlar tepkendir ve $h\nu$ ile simgelenir. Buna göre oksijenden ozon oluşumu şu şekilde yazılabilir.

$$O_2 + h\nu \rightarrow O + O$$

$$O_2 + O + M \rightarrow O_3 + M$$

M: Enerji fazlasını ortamdan alarak O_3 moleküllerinin anında ayrışmasını önlemek için gereklidir (örn; N_2)

9-4 Bohr Atom Modeli

1. Elektron çekirdeğin çevresindeki dairesel yörüngede, klasik fiziğin tarif ettiği şekilde hareket eder.

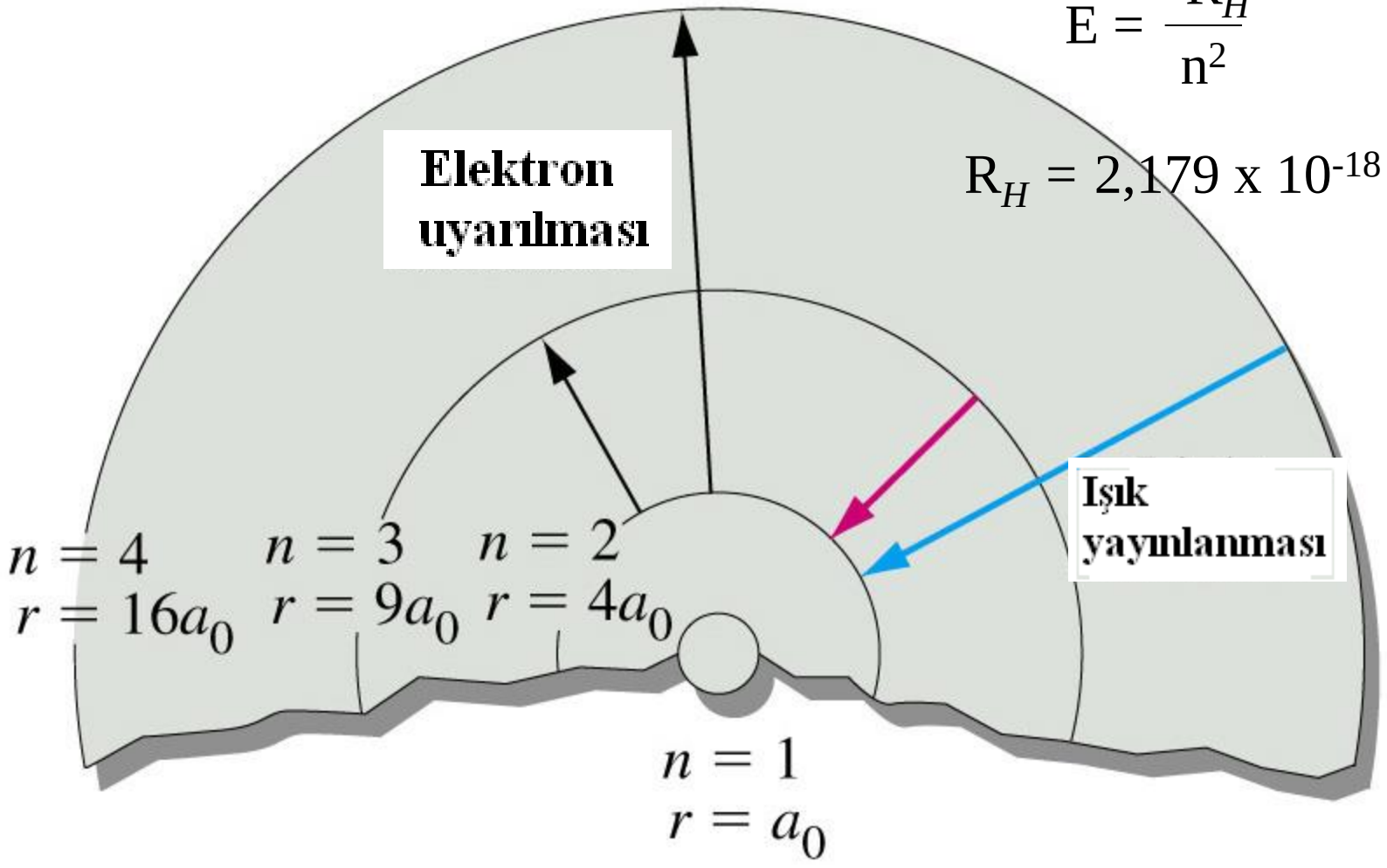
2. Elektron izin verilen sabit bir yörünge dizisinde bulunabilir ve buna "durağan hal" denir. İzin verilen yörüngeler, elektronun belirli özelliklerinden kendine özgü değerler aldığı yörüngelerdir. Bir elektron belirli bir yörüngede ne kadar kalırsa kalsın, enerji yayınlamaz ve enerjisi sabit kalır. Elektronun belirli yörüngeler dizisine yol açan ve sadece izin verilen değerleri alabilen özelliğine "açısal momentum" denir.

3. Elektron yalnızca izin verilen bir yörüngeden, izin verilen diğer bir yörüngeye geçebilir. Bu tür geçişte Planck eşitliği ile hesaplanabilen, belirli değere sahip bir enerji paketi (kuanta) alınır ya da verilir.

Bohr Atom Modeli

$$E = \frac{-R_H}{n^2}$$

$R_H = 2{,}179 \times 10^{-18}$ J

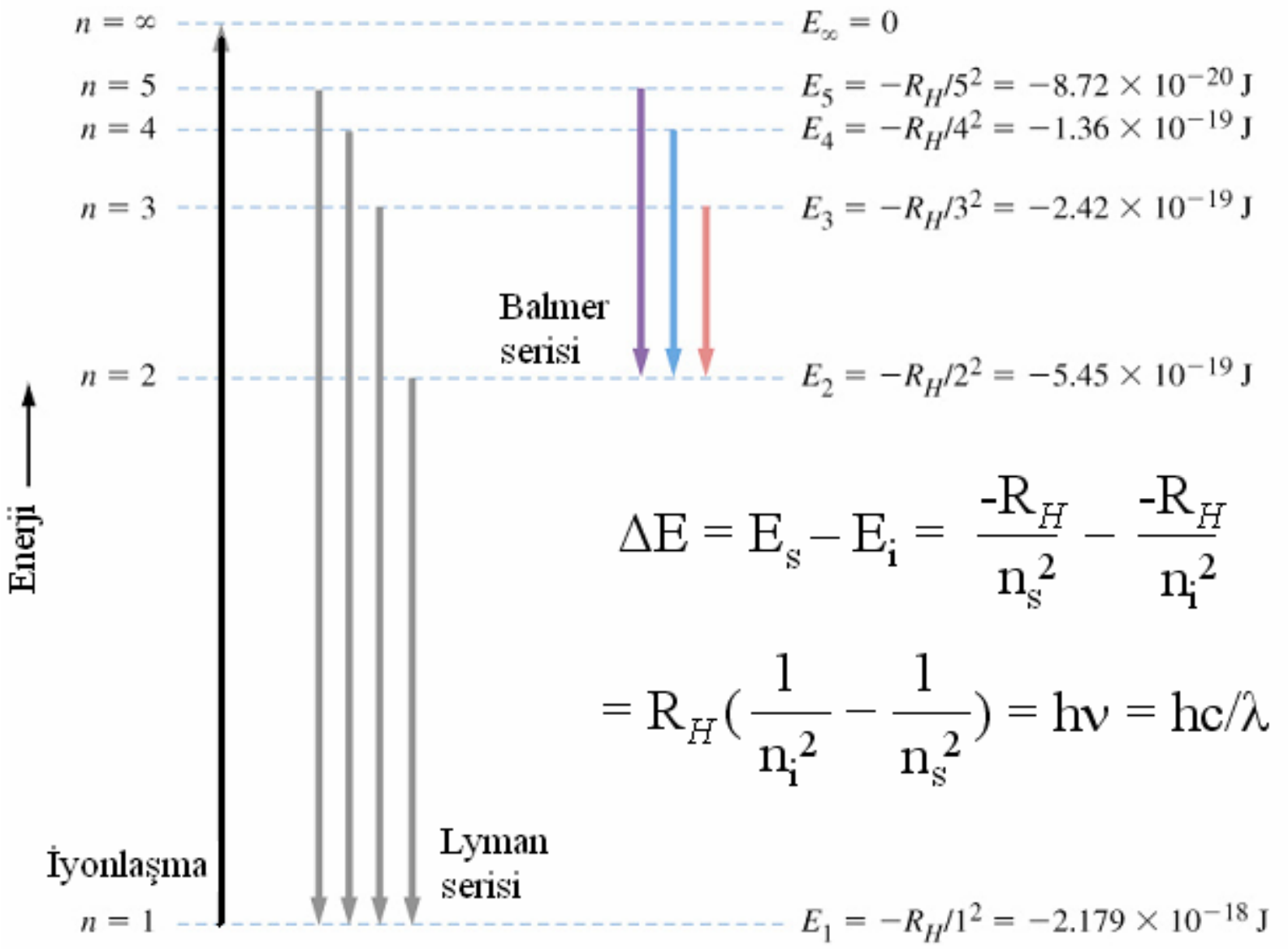


$r_n = n^2 . a_0$ $a_0 = 0{,}53$ Å

Bohr Atom Modeli

- Çekirdek merkezde, elektron ise bağımsız yörüngelerden n = 1,2,… birinde bulunur.
- Atom uyarıldığında elektron siyah oklarla gösterildiği gibi, daha yüksek sayılı yörüngelere çıkar. Elektron tekrar daha düşük sayılı bir yörüngeye dönerken ışık yayınlanır.
- Hidrojen spektrumunun Balmer serilerindeki çizgileri meydana getiren iki elektron geçişi, spektrum çizgilerini temsil eden renklerle şekilde gösterilmiştir.

^{1}H Atomunun Enerji Düzeyi Diyagramı



^{1}H Atomunun Enerji Düzeyi Diyagramı

- Eğer elektron 2,179 x 10^{-18} J değerinde bir enerji kazanırsa, n=∞ yörüngesine geçer, yani hidrojen atomu iyonlaşır (siyah ok).

- Elektron yüksek sayılı bir yörüngeden n=1 yörüngesine inerse morötesi ışık şeklinde enerji yayınlar ve bu da Lyman serisi olarak adlandırılan bir spektral seri meydana getirir (gri çizgiler).

- Elektron geçişi n=2 yörüngesinde olursa, meydana gelen çizgiler Balmer serisinde olur. Bu çizgilerden üçü burada görülmektedir (renkli).

- n=3 yörüngesine geçişler ise, kızılötesi bölgede spektrum çizgileri oluşturur.

Hidrojenin İyonlaşma Enerjisi

- Normal olarak, hidrojen atomundaki elektron çekirdeğe en yakın yörüngede bulunur (n=1). Bu, en düşük izin verilen enerji düzeyi, yani "temel hal"dir.

- Elektron bir enerji kuantumu kazandığında daha yüksek enerji düzeyine geçer (n=2,3,..) ve hidrojen atomu "uyarılmış hal"e gelir.

- Elektron çekirdeğe yakın bir yörüngeye indiği zaman, iki enerji düzeyi arasındaki fark kadar enerji yayınlanır.

Hidrojenin İyonlaşma Enerjisi

$$\Delta E = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_s^2}\right) = h\nu$$

*n_s son, n_i ise ilk enerji düzeyi*dir. Yayınlanan ve soğurulan fotonun enerjisi Planck eşitliği ile hesaplanır.

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

Bohr atom modeli, hidrojen gibi tek elektron içeren He^+ ve Li^{2+} gibi iyonlar için de geçerlidir.

$$E = \frac{-Z^2 R_H}{n^2}$$

Z: Etkin çekirdek yükü

9-5 Yeni Bir Kuantum Mekaniğine Yolaçan İki Kavram

- Dalga-Tanecik İkiliği
  - Einstein fotoelektrik olayını açıklayabilmek için, ışığın fotonlardan oluşan tanecikli bir yapıya sahip olduğunu ileri sürmüştü.
  - Oysa, örneğin ışığın bir prizma tarafından spektrum şeklinde saçılması gibi olaylar, ışığı dalga olarak kabul etmekle daha iyi açıklanıyordu.

- de Broglie, 1924 yılında;

Küçük tanecikler bazen dalgaya benzer özellikler gösterebilirler, şeklinde bir düşünce ileri sürdü.

deBroglie ve Madde Dalgaları

de Broglie, maddesel taneciklerle bir arada kabul edilen dalgalara "*madde dalgaları*" adını verdi.

$$E = mc^2$$

$$h\nu = mc^2$$

$$h\nu/c = mc = p$$

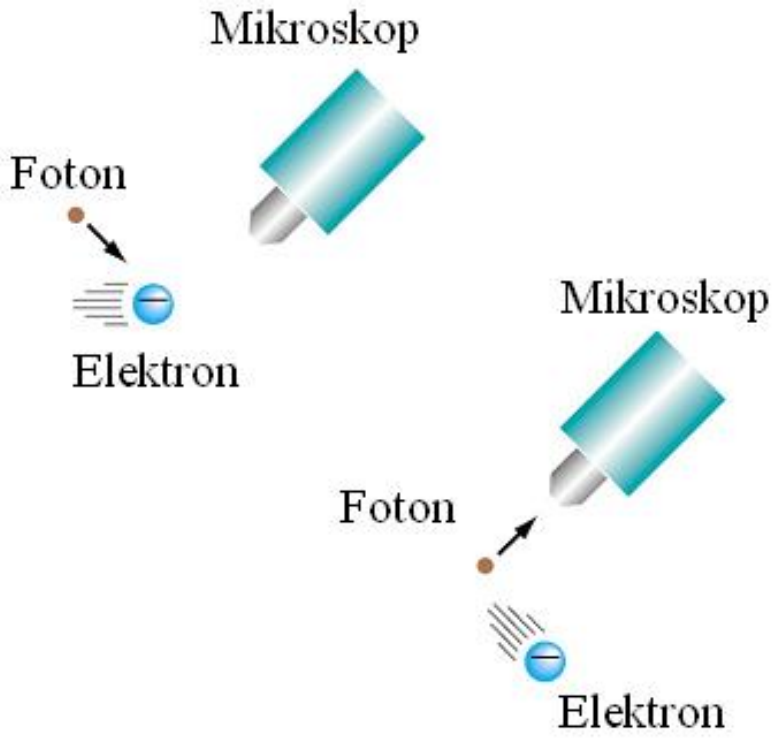
$$p = h/\lambda$$

$$\lambda = h/p = h/mu$$

Heisenberg Belirsizlik İlkesi

- Werner Heisenberg

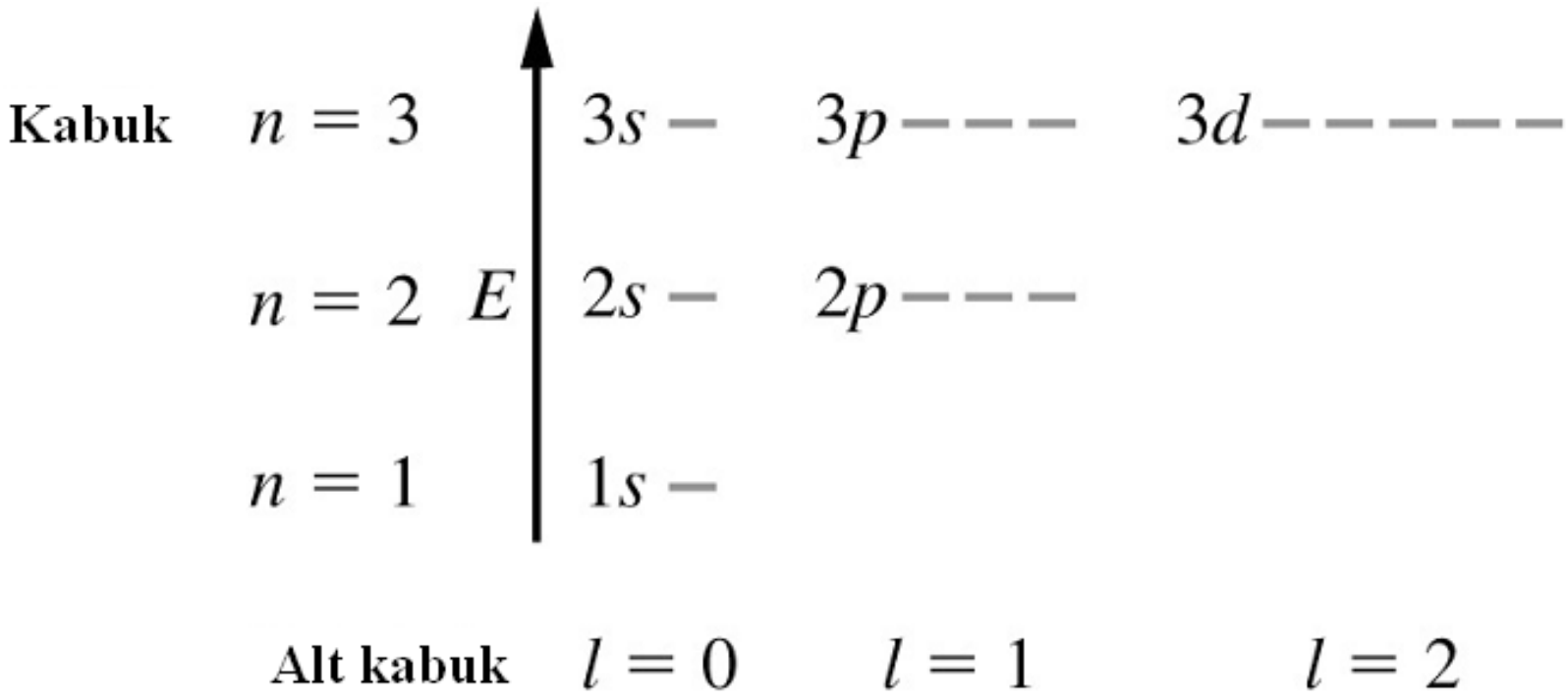
$$\Delta x \, \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$



9-7 Kuantum Sayıları ve Elektron Orbitalleri

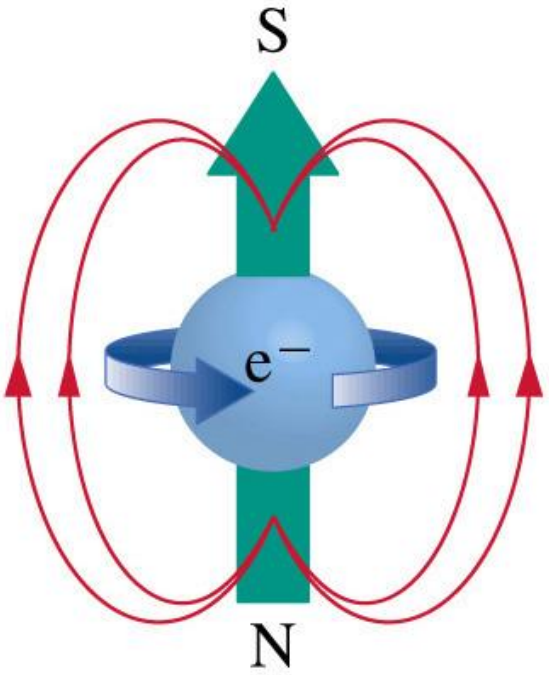
- Baş kuantum sayısı, n = 1, 2, 3…
- Açısal momentum kuantum sayısı,
  ℓ = 0, 1, 2…(n-1)
  - ℓ = 0, s
  - ℓ = 1, p
  - ℓ = 2, d
  - ℓ = 3, f
- Manyetik kuantum sayısı,
  m_l = - ℓ…-2, -1, 0, 1, 2…+ℓ

Orbital Enerjileri

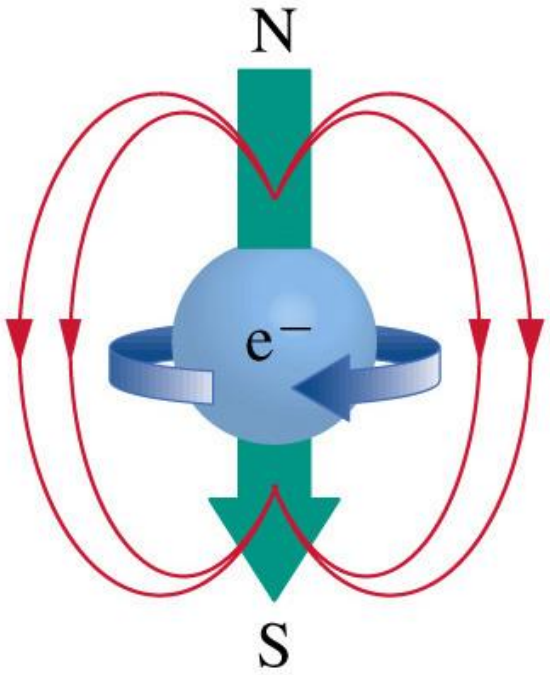


Bir alt kabuktaki toplam orbital sayısı $(2l + 1)$'dir.

9-9 Elektron Spini: Dördüncü Kuantum Sayısı



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



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

n (Baş kuant. say.)	Tabaka	(n-1) ℓ	Alt Tabaka	$-\ell$ .... $+\ell$ m_ℓ
1	K	0	1s	0
2.	L	0	2s	0
		1	2p	-1, 0, +1
3	M	0	3s	0
		1	3p	-1, 0, +1
		2	3d	-2, -1, 0, +1, +2
4	N	0	4s	0
		1	4p	-1, 0, +1
		2	4d	-2, -1, 0, +1, +2
		3	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3

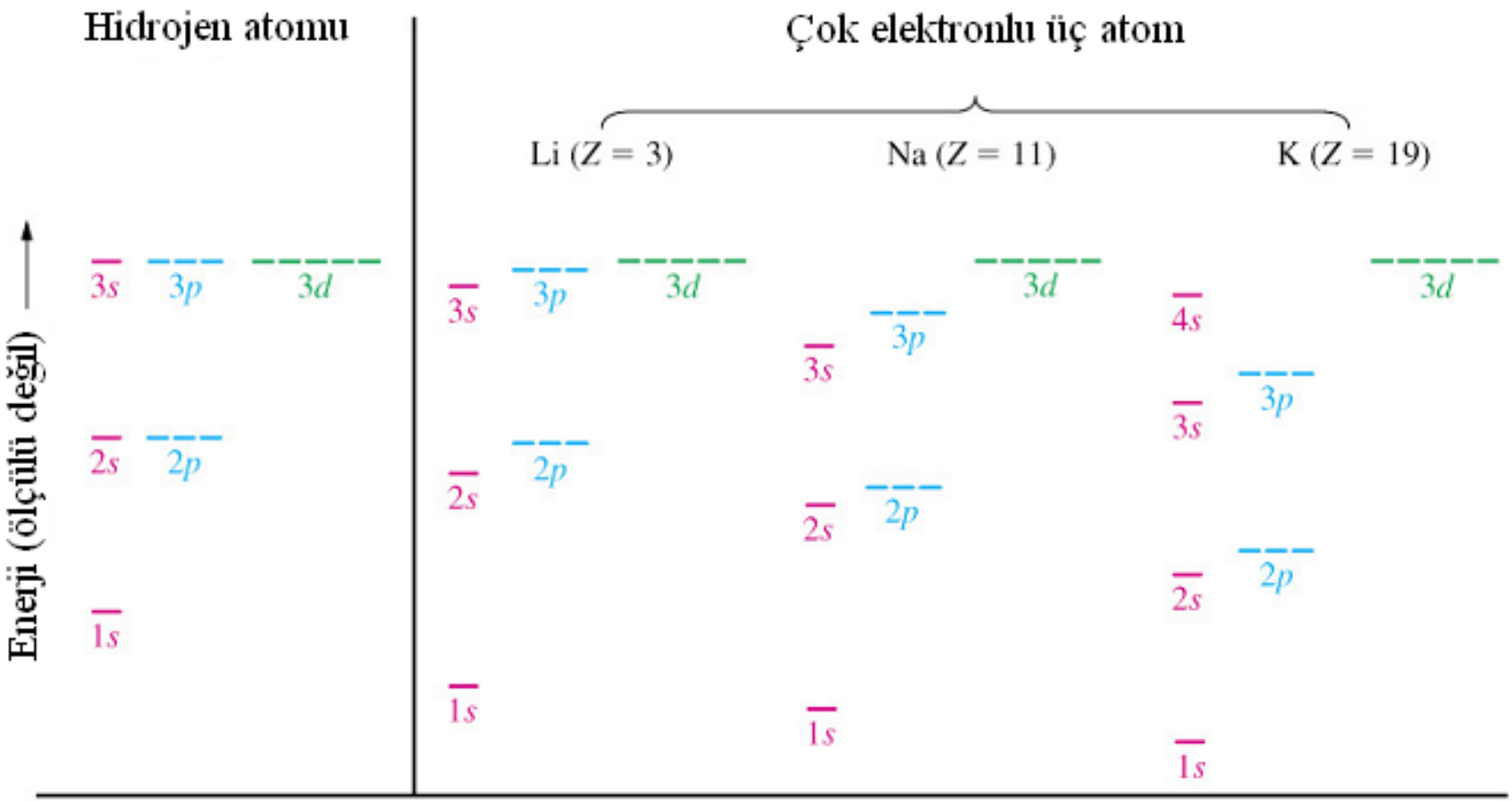
9-11 Elektron Konfigürasyonları

Elektronların Orbitallere Yerleşim Kuralları

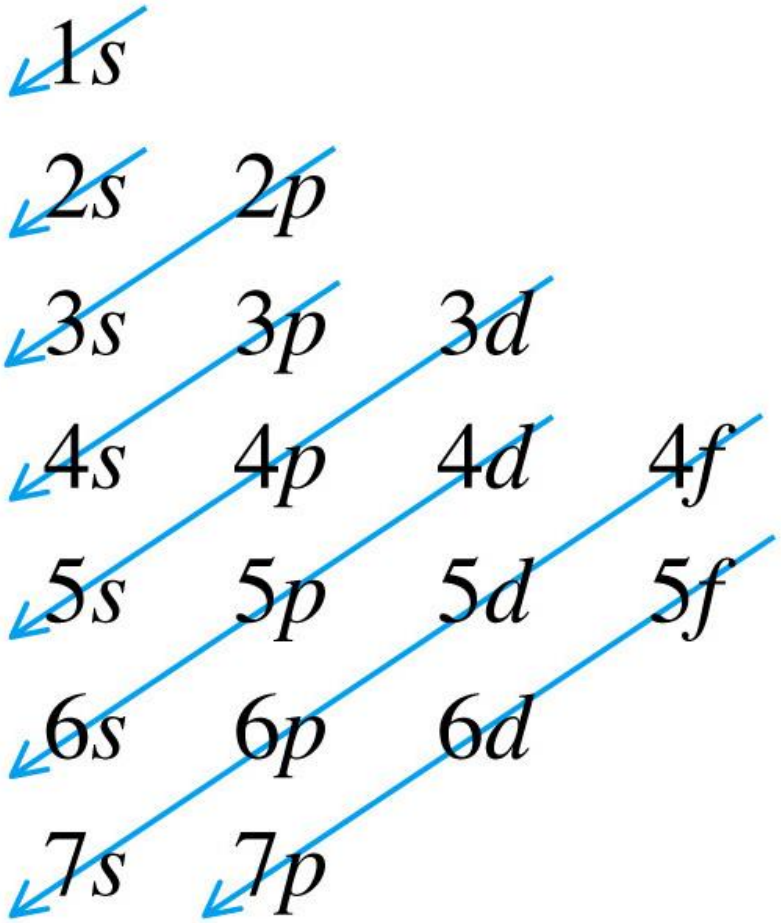
- Elektronlar orbitallere, atomun enerjisini en aza indirecek şekilde yerleşirler *(Aufbau işlemi)*.
- Bir atomda hiçbir zaman dört kuantum sayısı da aynı olan iki elektron bulunamaz *(Pauli dışlama ilkesi)*.

  - *Bir orbitalde yalnızca iki elektron bulunabilir ve bu elektronlar zıt spinlere sahip olmalıdırlar*.
- Elektronlar eşenerjili orbitallere öncelikle birer birer yerleşirler *(Hund kuralı)*.

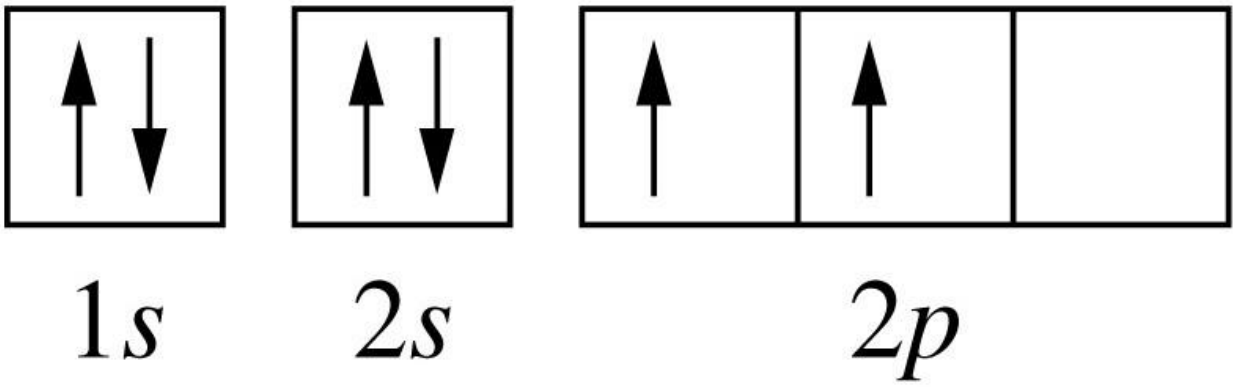
İlk Üç Elektron Kabuğunun Orbital Enerji Diyagramı



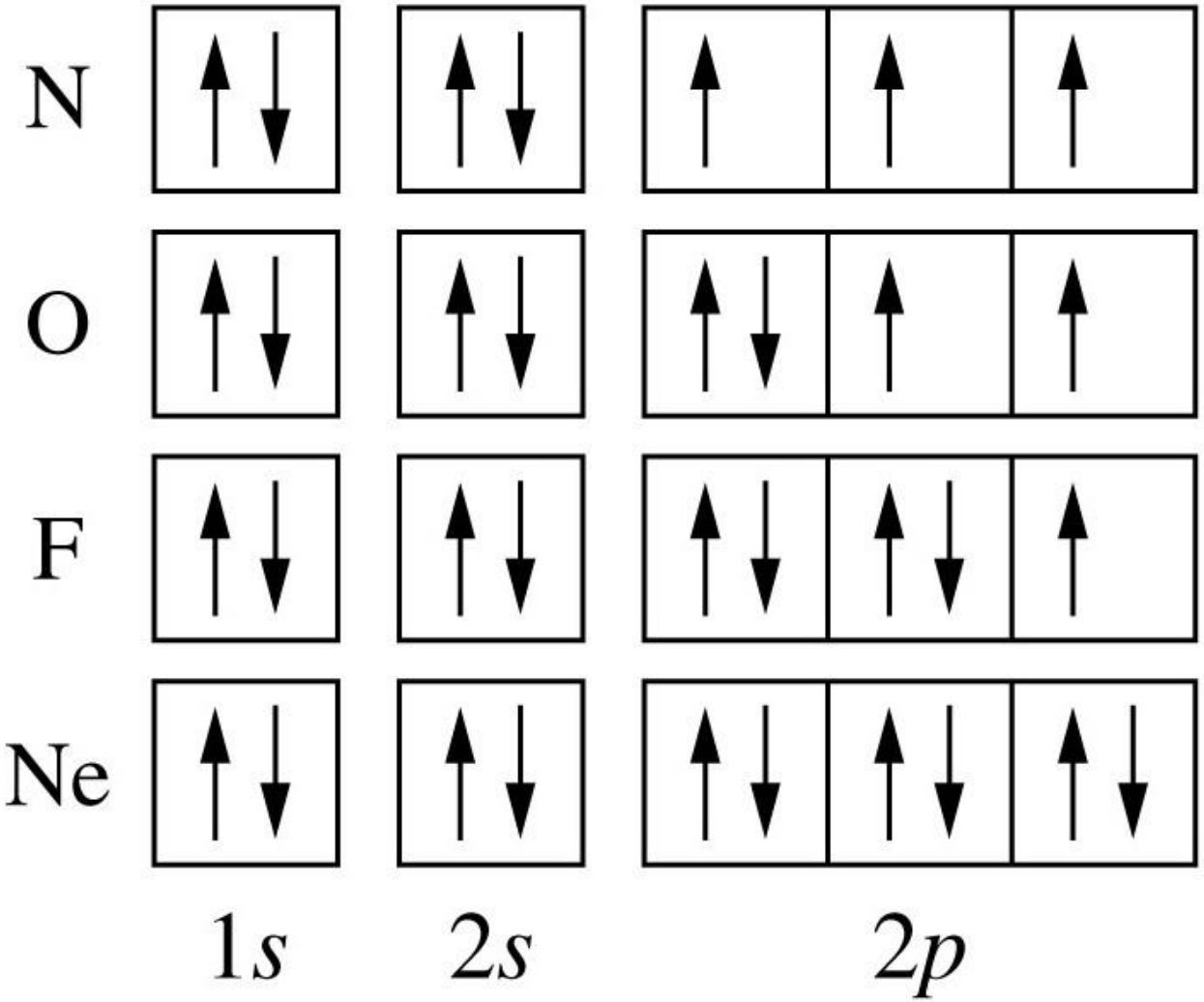
Elektron Alt Kabuklarının Dolma Sırası



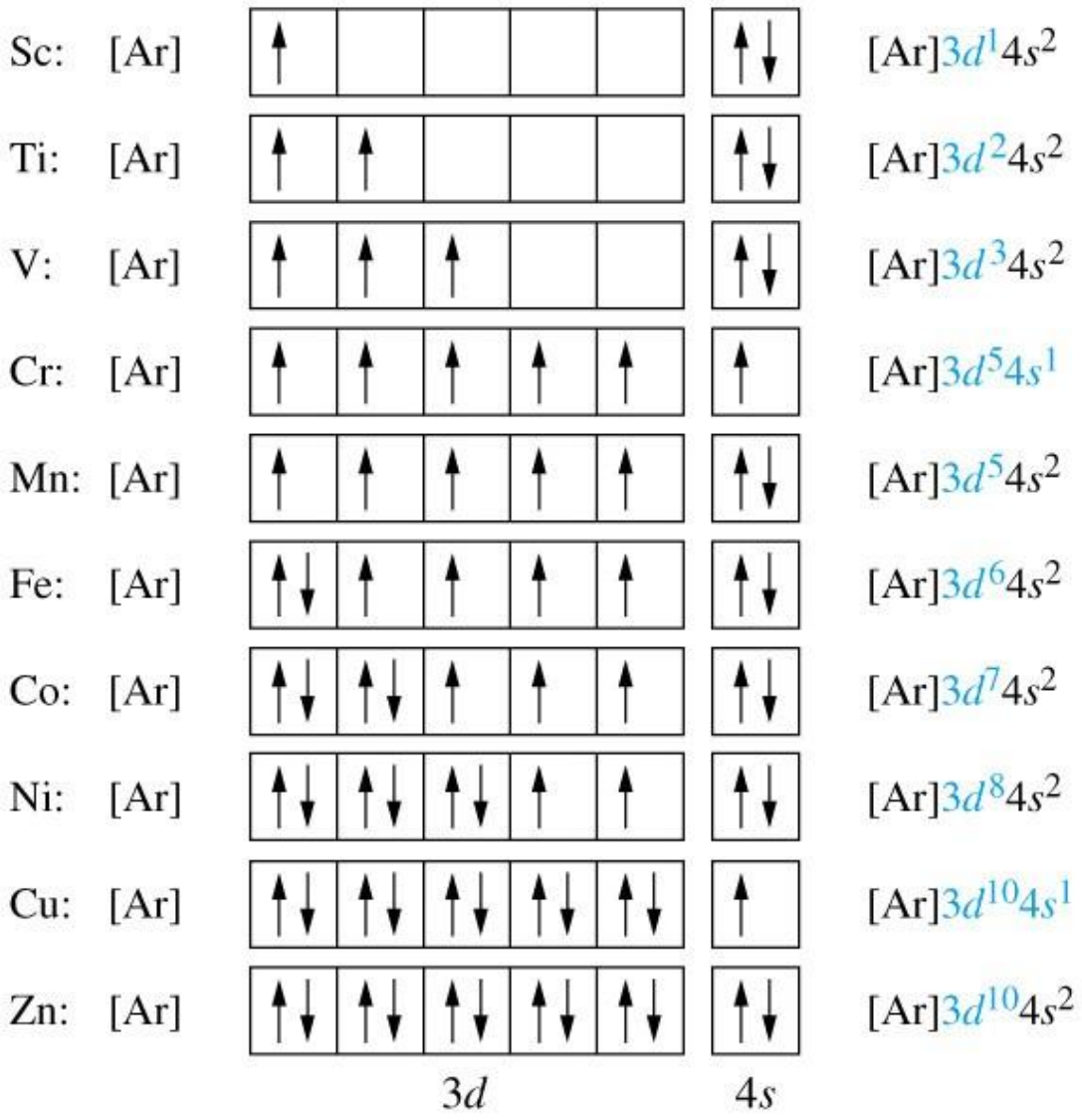
Aufbau İşlemi ve Hund Kuralı



p Orbitallerinin Doldurulması



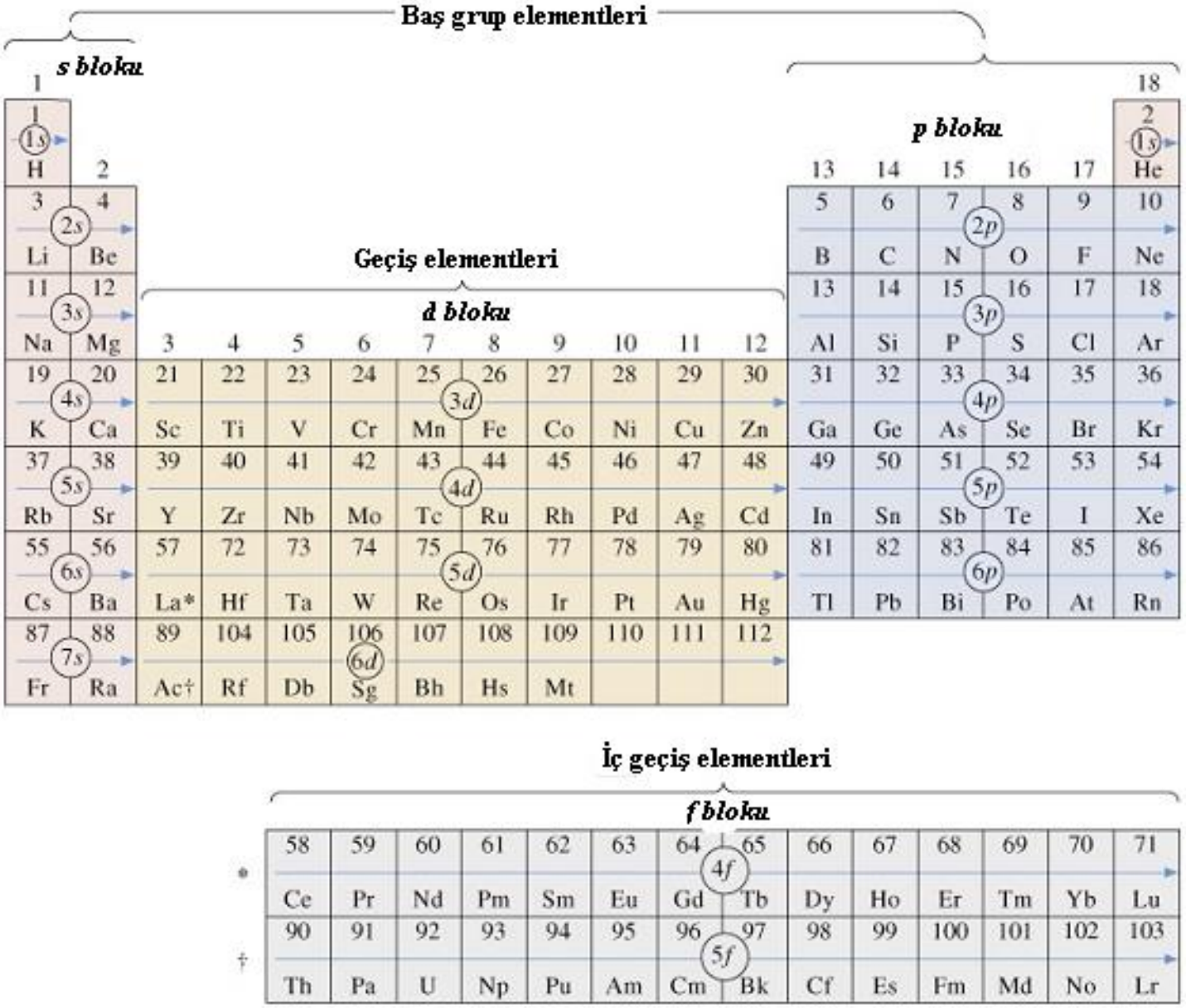
d Orbitallerinin Doldurulması



TABLO 9.2 Bazı Element Gruplarının Elektron Dağılımı

Grup	Element	Elektron Dağılımı
1	H	$1s^1$
	Li	$[He]2s^1$
	Na	$[Ne]3s^1$
	K	$[Ar]4s^1$
	Rb	$[Kr]5s^1$
	Cs	$[Xe]6s^1$
	Fr	$[Rn]7s^1$
17	F	$[He]2s^2 2p^5$
	Cl	$[Ne]3s^2 3p^5$
	Br	$[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^5$
	I	$[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^5$
	At	$[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^5$
18	He	$1s^2$
	Ne	$[He]2s^2 2p^6$
	Ar	$[Ne]3s^2 3p^6$
	Kr	$[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^6$
	Xe	$[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^6$
	Rn	$[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$

9-12 Elektron Dağılımları ve Periyodik Çizelge



Örnek: O_2'nin fotoayrışmasını sağlayacak en uzun dalga boylu ışımanın dalgaboyu 242,4 nm' dir. Bu ışığın

a) Bir fotonunun

b) Bir mol fotonunun enerjisi nedir?

a) $\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{2,998 \times 10^{8}\ m/s}{242,4 \times 10^{-9}\ m} = 1,237 \times 10^{15}\ s^{-1}$

$E = h\nu = 6,626 \times 10^{-34}\ Js \times 1,237 \times 10^{15}\ s^{-1} = 8,196 \times 10^{-19}\ J/foton$

b) $E = 8,196 \times 10^{-19}\ J/foton \times 6,022 \times 10^{23}\ foton/mol = 4,936 \times 10^{5}\ J/mol$

Örnek: Hidrojenin Balmer serisinde $n=5$ ten $n=2$ ye geçiş sırasındaki spektrum çizgisinin dalgaboyunu hesaplayınız.

$n_i = 5 \quad n_s = 2$

$$\Delta E = 2{,}179 \times 10^{-18}\,J \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{2^2} \right) = -4{,}576 \times 10^{-19}\,J$$

(-) işaret enerjinin yayıldığını gösterir

$$|\Delta E| = h\nu = \nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{4{,}576 \times 10^{-19}\,J}{6{,}626 \times 10^{-34}\,Js} = 6{,}906 \times 10^{14}\,s^{-1}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3.10^8\ m/s}{6{,}906.10^{14}\ s^{-1}} = 4{,}341 \times 10^{-7}\,m = 434{,}1\ nm$$

Örnek: Hidrojen atomunda $E_n = -1{,}00 \times 10^{-20}\ J$ değerinde bir enerji düzeyinin bulunma olasılığı var mıdır?

$$E_n = -\frac{R_H}{n^2} \Rightarrow n^2 = \frac{-R_H}{E_n} = \frac{-2{,}179 \times 10^{-18}\ J}{-1{,}00 \times 10^{-20}\ J} = 14{,}76$$

Tam sayı değil. İzin verilen enerji düzeyi değildir.

Örnek: Be^{3+} iyonunda bir elektronun n=5 den n=3'e geçişi sırasında yayınlanan ışığın dalga boyunu hesaplayınız.

$_4Be$ $\quad E_n = \dfrac{-Z^2 \cdot R_H}{n^2}$

$$E_i = \frac{-4^2 \cdot 2{,}179 \cdot 10^{-18} J}{5^2} = -1{,}395 \cdot 10^{-18} J$$

$$E_s = \frac{-4^2 \cdot 2{,}179 \cdot 10^{-18} J}{3^2} = -3{,}874 \cdot 10^{-18} J$$

$$\Delta E = E_s - E_i = -3{,}874 \cdot 10^{-18} - (-1{,}395 \cdot 10^{-18}) = -2{,}479 \cdot 10^{-18}$$ enerji yayılır

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{h \cdot c}{E} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34} Js \; (2{,}998 \cdot 10^{8} m/s)}{2{,}479 \cdot 10^{-18} J}$$

$$\lambda = 8{,}013 \cdot 10^{-8} m = 80{,}13 \; nm$$

Örnek : Işık hızının onda biri kadar hızla hareket eden elektronlara eşlik eden dalganın dalga boyu nedir? (elektron kütlesi : $9,109 \cdot 10^{-31}$ kg , c: 3.10^8 m/s)

Elektronun hızı = $u = c \times 0,1 = 3.10^8 \times 0,1 = 3.10^7$ m/s

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m.u} = \frac{6,626.10^{-34}\ kg\ m^2 s^{-1}}{(9,109.10^{-31} kg)(3.10^7 m/s)} = 2,42.10^{-11} m = 242\ nm$$

Örnek: Aşağıdaki serilerde soru işaretleri ile gösterilmiş olan kuantum sayılarının alabileceği değerleri bulunuz.

a) $n = 3$ $\ell = 1$ $m_\ell = ?$

b) $n = 4$ $\ell = ?$ $m_\ell = -1$

c) $n = ?$ $\ell = 1$ $m_\ell = +1$

"Örnek: Aşağıdaki elementlerin elektron dizilişlerini spdf gösterimi ile yazın.

$_{26}Fe$:

$_{36}Kr$:

$_{47}Ag$:

$_{25}Mn^{2+}_{23}$:

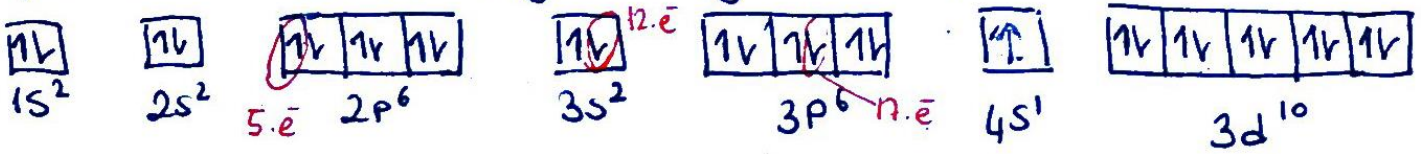
$_{30}Zn^{2+}_{28}$:

S nin iyonlaşma enerjisi d'den daha düşük. Bu geçiş metallerinin özelliğidir. e^- koparmak için daha az enerji gerekir.

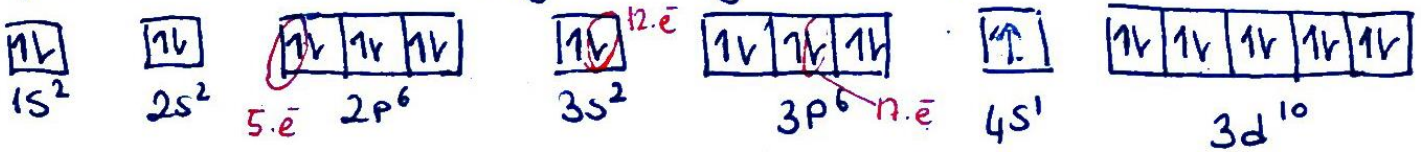
Örnek: $^{64}_{29}X$ atomunun elektron dağılımını orbital diyagramında gösteriniz. e^-, proton ve nötron sayılarını yazınız. 5, 12 ve 17. ē ların kuantum sayıları?

Örnek: $^{64}_{29}X$ atomunun elektron dağılımını orbital diyagramında gösteriniz.

e^-, proton ve nötron sayılarını yazınız. 5, 12 ve 17. ē ların kuantum sayıları?



Örnek: $^{64}_{29}X$ atomunun elektron dağılımını orbital diyagramında gösteriniz. e^-, proton ve nötron sayılarını yazınız. 5, 12 ve 17. $\bar{e}$ ların kuantum sayıları?



	5.ē	12.ē	17.ē
n	2	3	3
ℓ	1	0	1
m_ℓ	−1	0	0
m_s	+1/2	−1/2	−1/2