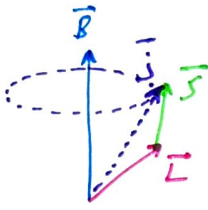
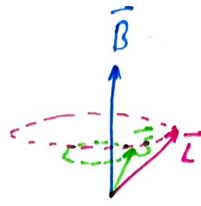


9.1. Sodyum atomunun (Na) $D_1 (^2P_{1/2} \rightarrow ^2S_{1/2})$ ve $D_2 (^2P_{3/2} \rightarrow ^2S_{1/2})$ çizgilerinin kuvvetli ($B_{\text{dış}} > B_{\text{is}}$) bir manyetik alan altında oluşacak yarımlarını ve ilgili geçişler enerji diyagramında gösteriniz.

Büyük bir manyetik alan ($B_{\text{dış}} > B_{\text{is}}$) uyguladığında L-S koplması ortadan kalkar ve $\vec{L}$ ile $\vec{S}$ bağının olaak parçalanır hareketi yapar. (Paschen-Back olması)



$B_{\text{dış}} < B_{\text{is}}$
zeeman olması
 $\Delta E = -\vec{\mu}_J \cdot \vec{B}$
 $\Delta E = g_J \mu_B B m_J$



$B_{\text{dış}} > B_{\text{is}}$
Paschen-Back olması

$L_z = m_L \hbar$
 $S_z = m_S \hbar$

$$\Delta E = -\vec{\mu}_J \cdot \vec{B}$$

$$\Delta E = -(\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S) \cdot \vec{B}$$

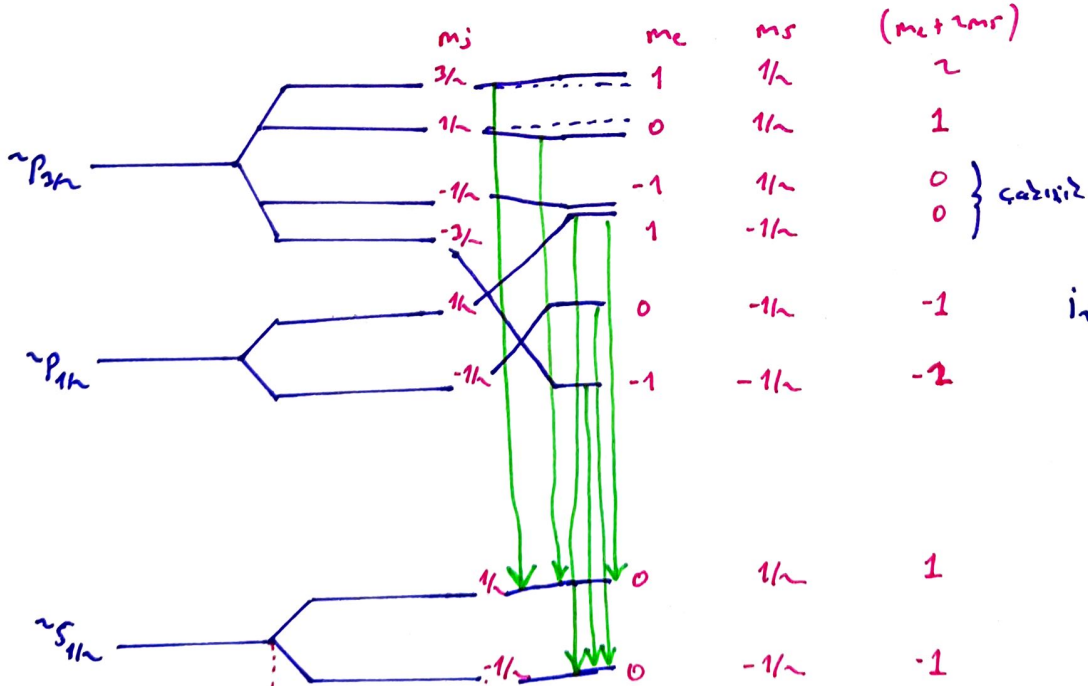
$$\Delta E = -\left(-g_L \mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar} - g_S \mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar}\right) \cdot \vec{B}$$

$g_L = 1$ $g_S = 2$

$$\Delta E = \frac{\mu_B}{\hbar} \left(\underbrace{\vec{L} \cdot \vec{B}}_{L_z B} + 2 \underbrace{\vec{S} \cdot \vec{B}}_{S_z B} \right)$$

$$\Delta E = \frac{\mu_B B}{\hbar} (m_L \hbar + 2m_S \hbar)$$

$$\Delta E = \mu_B B (m_L + 2m_S) //$$



İvrit geçişler;
 $\Delta m_L = 0, \pm 1$
 $\Delta m_S = 0$

L-S koplması var!
 J 'lere göre yarımlar
 $B_{\text{dış}} < 0$

$B_{\text{dış}} \neq 0$
 $B_{\text{dış}} < B_{\text{is}}$
zeeman yarımları

$B_{\text{dış}} > B_{\text{is}}$
 $\Delta E = \mu_B B (m_L + 2m_S)$
Paschen-Back olması

3.2. İki atomlu bir molekülün harmonik yaklaşımlar altında etkileşim potansiyel enerjisi $V(x) = \frac{1}{2} k x^2$ 'dir. Schrödinger denklemini oluşturan ve momentum ve konum operatörlerinin "matris operatörleri" cinsinden verilmiş hallerini kullanarak harmonik yaklaşımlar altında iletken enerji seviyelerini hesaplayınız.

$$\begin{aligned}
 x &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} (a_+ + a_-) & \begin{cases} a_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1} \\ a_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \end{cases} & \begin{aligned} H \psi_n &= E_n \psi_n \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi_n &= E_n \psi_n \\ \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2 \right) \psi_n &= E_n \psi_n \end{aligned} \\
 p &= i \left(\frac{\hbar m \omega}{2} \right)^{1/2} (a_+ - a_-) & [x, p] = i\hbar, [a_-, a_+] = 1
 \end{aligned}$$

$$\hat{p} = i \left(\frac{\hbar m \omega}{2} \right)^{1/2} (a_+ - a_-) = -\frac{\hbar m \omega}{2} (a_+^\dagger - a_+ a_- - a_- a_+ + a_-^\dagger)$$

$$\hat{x} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} (a_+ + a_-) = \frac{\hbar}{2m\omega} (a_+^\dagger + a_+ a_- + a_- a_+ + a_-^\dagger)$$

$$\Rightarrow H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$H = -\frac{\hbar \omega}{4} (a_+^\dagger - a_+ a_- - a_- a_+ + a_-^\dagger) + \frac{\hbar \omega}{4} (a_+^\dagger + a_+ a_- + a_- a_+ + a_-^\dagger)$$

$$H = \frac{\hbar \omega}{4} (-\cancel{a_+^\dagger} + a_+ a_- + a_- a_+ - \cancel{a_-^\dagger} + \cancel{a_+^\dagger} + a_+ a_- + a_- a_+ + \cancel{a_-^\dagger})$$

$$H = \frac{\hbar \omega}{2} (a_+ a_- + \underline{a_- a_+}), \quad [a_-, a_+] = 1 \Rightarrow a_- a_+ - a_+ a_- = 1 \\ a_- a_+ = 1 + a_+ a_-$$

$$\Rightarrow H = \frac{\hbar \omega}{2} (a_+ a_- + \underline{1 + a_+ a_-})$$

$$H = \hbar \omega \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \right) \text{ veya } H = \hbar \omega \left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \right)$$

$$\Rightarrow H \psi_n = E_n \psi_n \Rightarrow \hbar \omega (a_- a_+ - \frac{1}{2}) \psi_n = E_n \psi_n$$



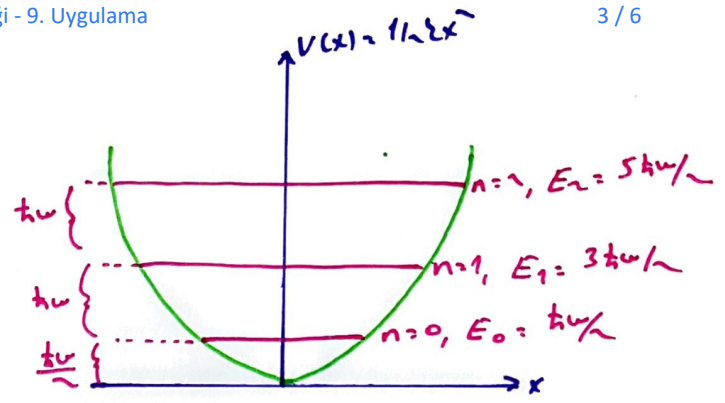
$$\hbar\omega(a-a^\dagger)\psi_n = \frac{\hbar\omega}{2}\psi_n = E_n\psi_n$$

$$\hbar\omega a_- \sqrt{n+1}\psi_{n+1} - \frac{\hbar\omega}{2}\psi_n = E_n\psi_n$$

$$\hbar\omega \sqrt{n+1} a_- \psi_{n+1} - \frac{\hbar\omega}{2}\psi_n = E_n\psi_n$$

$$\hbar\omega \sqrt{n+1} \sqrt{n+1}\psi_n - \frac{\hbar\omega}{2}\psi_n = E_n\psi_n$$

$$\hbar\omega(n+1-\frac{1}{2})\psi_n = E_n\psi_n \Rightarrow E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega, n=0,1,2,3..$$



9.3. Harmonik yalıtırlı altıda bir molekül söz an söğütüldüğünde yay sabiti $k \rightarrow k' = (1+\epsilon)k$ şeklinde değişiyor. ($\epsilon \ll 1$) Bu durumda molekülün titreşim enerjisi serilerine gelen 1. dereceden düzeltmesi perturbation teorisini kullanarak hesaplayınız.

$$H^0 = \underbrace{\frac{-\hbar^2}{2m}}_T + \underbrace{\frac{1}{2}kx^2}_{U(x)}, E_n^0 = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$k \rightarrow k' = (1+\epsilon)k$$

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \rightarrow \frac{1}{2}kx^2(1+\epsilon)$$

$$V(x)' = \frac{1}{2}kx^2 + \epsilon \frac{1}{2}kx^2 \quad \epsilon \ll 1$$

$$H = \underbrace{\frac{-\hbar^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2}_{H^0} + \underbrace{\frac{\epsilon}{2}kx^2}_{H'}$$

$$\Rightarrow E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle = \langle n | \frac{\epsilon}{2}kx^2 | n \rangle$$

$$x = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} (a_+ + a_-)$$

$$x^2 = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right) \left[a_+^2 + a_+a_- + a_-a_+ + a_-^2 \right]$$

$$a_+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$a_- |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$a_+a_- \neq a_-a_+$$

$$\Rightarrow E_n^1 = \frac{\epsilon}{2}k \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right) \left[\langle n | (a_+^2 + a_+a_- + a_-a_+ + a_-^2) | n \rangle \right]$$

$$E_n^1 = \frac{\epsilon k \hbar}{4m\omega} \left[\underbrace{\langle n | a_+^2 | n \rangle}_{(1)} + \underbrace{\langle n | a_+a_- | n \rangle}_{(2)} + \underbrace{\langle n | a_-a_+ | n \rangle}_{(3)} + \underbrace{\langle n | a_-^2 | n \rangle}_{(4)} \right]$$

$$\begin{aligned} (1) \rightarrow \langle n | a_+a_+ | n \rangle &= \langle n | a_+ \sqrt{n+1} | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} \langle n | a_+ | n+1 \rangle \\ &= \sqrt{n+1} \langle n | \sqrt{n+2} | n+2 \rangle = \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} \langle n | n+2 \rangle \\ &= 0 // \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 ② \rightarrow \langle n | a_+ a_- | n \rangle &= \langle n | a_+ \sqrt{n} | n-1 \rangle = \sqrt{n} \langle n | a_+ | n-1 \rangle \\
 &= \sqrt{n} \langle n | \sqrt{n} | n \rangle = n \underbrace{\langle n | n \rangle}_1 \\
 &= n //
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 ③ \rightarrow \langle n | a_- a_+ | n \rangle &= \langle n | a_- \sqrt{n+1} | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} \langle n | a_- | n+1 \rangle \\
 &= \sqrt{n+1} \langle n | \sqrt{n+1} | n \rangle = n+1 \underbrace{\langle n | n \rangle}_1 \\
 &= n+1 //
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 ④ \rightarrow \langle n | a_-^2 | n \rangle &= \langle n | a_- a_- | n \rangle = \langle n | a_- \sqrt{n} | n-1 \rangle \\
 &= \sqrt{n} \langle n | a_- | n-1 \rangle = \sqrt{n} \langle n | \sqrt{n-1} | n-2 \rangle \\
 &= \sqrt{n} \sqrt{n-1} \langle n | n-2 \rangle \\
 &= 0 //
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow E_n^1 = \frac{\xi \hbar \omega}{4m\omega} \left[0 + n + n+1 + 0 \right] = \frac{\xi \hbar \omega}{4m\omega} (n+1) = \frac{\xi \hbar \omega}{2m\omega} (n+1/2)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{\xi}{m}} \Rightarrow E_n^1 = \frac{1}{2} \xi \hbar \omega (n+1/2) = \xi \frac{E_n^0}{2} //$$

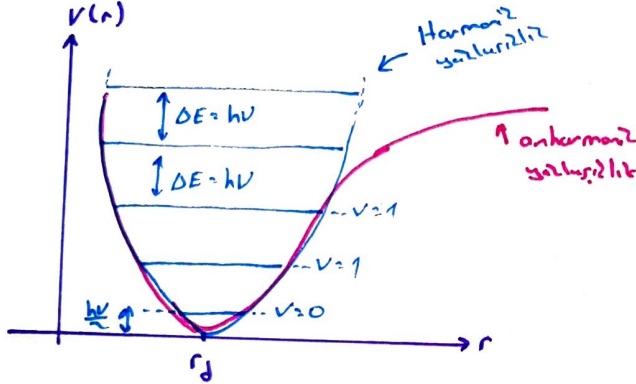
$$\begin{aligned}
 \langle V \rangle &= \langle T \rangle \Rightarrow \langle V \rangle = \frac{E_n^0}{2}, \quad \langle T \rangle = \frac{E_n^0}{2} \\
 \langle V \rangle + \langle T \rangle &= E_n^0
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow E_n^1 = \frac{\xi}{2} E_n^0 //$$



9.4. İki atomlu bir molekülde enerji seviyeleri 0,5 eV ile ayrılmaktadır. 0 noktası ayrışma enerjisi 50 eV ($D_0 = 50 \text{ eV}$) olduğuna göre,

- Molekülün 0 nokta enerjisini,
- 0 noktası enerji seviyesi ile ayrışma enerji seviyesi arasındaki seviye sayısını bulunuz.
- Molekülün klasik ayrışma (spektroskopik ayrışma) enerjisini bulunuz.



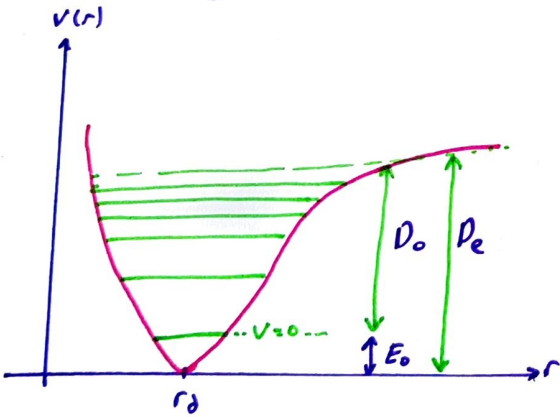
$$V(r) = D_e \left[1 - e^{-a(r-r_0)} \right]^2 \quad \text{Morse Potansiyeli}$$

$$V(r) = \frac{1}{2} k \tilde{x}^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 \tilde{x}^2, \quad E_v = (v+1/2) h\nu$$

D_e : Klasik (spektroskopik) ayrışma enerjisi

E_0 : Sifir nokta enerjisi

D_0 : Sifir noktası ayrışma enerjisi



$$D_e = D_0 + E_0, \quad E_0 = ?, \quad D_e = ?, \quad D_0 = 50 \text{ eV}$$

$$E_v = (v+1/2) h\nu - (v+1/2)^2 h\nu x_e, \quad \Delta E = 0,5 \text{ eV}$$

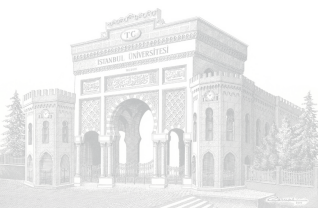
$$E_0 = E_{v=0} = (0+1/2) h\nu - (0+1/2)^2 h\nu x_e \quad x_e \ll 1$$

$$E_0 = \frac{h\nu}{2} \Rightarrow E_0 = \frac{\Delta E}{2} = 0,25 \text{ eV} \quad (a)$$

$$\Delta E = (E_{v=2} - E_{v=1}) = (2+1/2) h\nu - (1+1/2) h\nu = h\nu = 0,5 \text{ eV} //$$

$$b: \quad N = \frac{D_0}{\Delta E} = \frac{50 \text{ eV}}{0,5 \text{ eV}} = 100 \text{ seviye}$$

$$c: \quad D_e = D_0 + E_0 = (50 + 0,25) \text{ eV} = 50,25 \text{ eV} //$$



3.5. İki atomlu harmonik titreşimi modellerinden anharmonik yalıtılıltı altında, BH mole-
külünün anharmoniklik katrasyonu $\omega_e x_e = 49 \text{ cm}^{-1}$ ve $\omega_e = 2368 \text{ cm}^{-1}$ olarak bulunuyor.

- Molekölün ilk 3 titreşim seviye enerjisini,
- $0 \rightarrow 1$ ve $1 \rightarrow 2$ geçişleri için foton frekansını hesaplayınız.

$$E_v = (v+1/2) h\nu - (v+1/2)^2 h\nu x_e \quad \text{birim: Joule veya eV}$$

$$\frac{E_v}{hc} = \frac{1}{\lambda} = \bar{\nu} = \bar{E}_v = \bar{E}_{\text{tit}}$$

$$\bar{E}_v = \bar{E}_{\text{tit}} = (v+1/2) \frac{\nu}{c} - (v+1/2)^2 \frac{\nu}{c} x_e, \quad \frac{\nu}{c} = \omega_e \text{ [cm}^{-1}\text{]}$$

$$\bar{E}_v = \bar{E}_{\text{tit}} = (v+1/2) \omega_e - (v+1/2)^2 \omega_e x_e \quad \text{birim: cm}^{-1}$$

Ödev: Sayısal işlemleri kendiniz yapınız ve bulduğunuz sonuçları birbiriniz ile karşılaştırınız.

