

**T.C.
BİNGÖL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**FİZİK PROBLEMLERİNDEN BAZILARININ
VİRİAL TEOREMİNE GÖRE ÇÖZÜMLERİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

BÜŞRA ÇİÇEK

FİZİK ANABİLİM DALI

**TEZ DANIŞMANI
DR. ÖĞR. ÜYESİ HASAN ARSLAN**

BİNGÖL-2021

**T.C.
BİNGÖL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**FİZİK PROBLEMLERİNDEN BAZILARININ
VİRİAL TEOREMİNE GÖRE ÇÖZÜMLERİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

BÜŞRA ÇİÇEK

FİZİK ANABİLİM DALI

**TEZ DANIŞMANI
DR. ÖĞR. ÜYESİ HASAN ARSLAN**

BİNGÖL-2021



T.C.
BİNGÖL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



FİZİK PROBLEMLERİNDEN BAZILARININ VİRİAL TEOREMİNE GÖRE ÇÖZÜMLERİ

Dr. Öğr. Üyesi Hasan Arslan danışmanlığında, Büşra Çiçek tarafından hazırlanan bu çalışma 10/11/2021 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Fen Bilimleri Anabilim Dalı'nda Yüksek Lisans Tezi olarak **oybirliği** ile kabul edilmiştir.

Başkan :	İmza :
Üye :	İmza :
Üye :	İmza :

Yukarıdaki sonuç;

Enstitü Yönetim Kurulunun// tarih ve/
nolu kararı ile onaylanmıştır.

Prof. Dr. Zafer ŞİAR
Enstitü Müdürü

Not: Bu tezde kullanılan özgün ve başka kaynaklardan yapılan bildirişlerin, çizelge, şekil ve fotoğrafların kaynak olarak kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunundaki hükümlere tabidir.

ÖNSÖZ

Tez çalışma sürecinde yol gösterici olan, moral ve motivasyonu ile beni cesaretlendiren, yardımları ve bilgi birikimi ile çalışmama farklı açılardan bakmamı sağlayan, çalışmamın tamamlanabilmesi için gerekli desteği veren, beraber çalışmaktan ve öğrencisi olmaktan gurur duyduğum değerli danışman hocam Dr. Öğr. Üyesi Hasan ARSLAN'a teşekkür ederim.

Yüksek Lisans sürecimde yaptığı yönlendirmeler ve katkılarından dolayı değerli hocam Doç. Dr. Kamuran DİLSİZ'e ve bu süreçte desteğini her zaman hissettiren değerli arkadaşım Sibel LAÇINKAYA'ya teşekkür ederim.

Son olarak hayatım boyunca tüm kararlarımın arkasında olan, bende büyük emekleri olan, benim için hiçbir fedakârlıktan kaçınmayan ve dualarını esirgemeyen annem Nihayet ÇİÇEK'e, babam Osman ÇİÇEK'e, ablalarım ve arkadaşlarıma tezin hazırlanma sürecinde gösterdikleri sabır, fedakârlık ve desteklerinden dolayı sonsuz şükranlarımı sunar ve teşekkür ederim.

Büşra ÇİÇEK

Bingöl 2021

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	ii
İÇİNDEKİLER.....	iii
ŞEKİLLER LİSTESİ	v
ÖZET.....	vi
ABSTRACT	vii
1. GİRİŞ	1
1.1. İki ve Üç Boyutlu Plazmalar.....	4
2. MATERYAL VE YÖNTEM	10
2.1. Virial Teoreminin Klasik Mekaniksel Çıkarımı.....	10
2.1.1. Virial Teoreminin Kütle Çekim Kuvvetine Uygulanışı.....	12
2.1.2. Virial Teoreminin Yay Kuvvetine Uygulanışı	12
2.1.3. Virial Teoreminin Harmonik – Osilatör Yaklaşımına Uygulanışı	13
2.1.4. Virial Teoreminin Ters Sarkaca Uygulanışı.....	16
2.1.5. Virial Teoreminin Coulomb Yasasına ve Hidrojen Atomuna Uygulanışı	18
2.1.6. Virial Teoreminin Elektromanyetik Alana Uygulanışı	20
2.1.7. Virial Teoreminin İdeal Gaz Denklemine Uygulanışı	21
2.1.7.1. İdeal Gaz Denklemi Problemi	22
2.1.8. Virial Teoremi İle İki Yıldız Arasındaki Mesafe	24
2.1.9. Virial Teoremi ile Yıldızlar Arası Kütleler (Yıldız Kütleleri)	25
2.1.10. Virial Teoreminin Bir Yıldızın İç Sıcaklığına Uygulanışı	26
2.1.11. Virial Teoreminin Basınç Altındaki Katılara Uygulanışı	27
2.2. Virial Teoreminin Kuantum Mekaniksel Çıkarımı.....	29
2.2.1. Virial Teoreminin Hidrojen Atomuna Uygulanışı	34
2.2.2. Virial Teoreminin r Radyal Mesafesinde Hidrojen Atomunun Temel Durumuna Uygulanması	36

2.2.3. Virial Teoreminin Heisenberg Hareket Denkleminden Çıkarımı	37
2.2.4. Virial Teoremine Göre Heisenberg Yaklaşımının Kuantum Mekaniksel Çıkarımı.....	39
2.2.5. Virial Teoreminin Helyum Atomuna Uygulanışı.....	40
2.2.6. Virial Teoremi İle Tek Değerli Metallerin Enerji Bağlılığı	42
2.2.7. Virial Teoremi İle İki Atomlu Moleküllerin Potansiyel Enerjisi	44
2.2.8. Virial Teoremi İle Parametrik Azaltılmış Kütle ile Hellmann-Feynman Teoremi	46
3. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	47
KAYNAKLAR	48
ÖZGEÇMİŞ	51

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1.1. Salınımlı bir ters sarkacın l uzunluğunda P eksenli R vektörü	17
--	----

FİZİK PROBLEMLERİNDEN BAZILARININ VİRİAL TEOREMİNE GÖRE ÇÖZÜMLERİ

ÖZET

Virial, Latince güç, kuvvet ya da enerji anlamına gelen “vis” kelimesinden türetilmiştir. Virial Teoremi Rudolf Julius Emanuel Clausius tarafından yaklaşık 20 yıl süren çalışmalar sonucu bulunmuştur. Bu teorem kapalı (kararlı) sistemlerde kinetik enerji ve potansiyel enerji arasında bir ilişkiyi verdiği için, hem klasik fizikte hem de kuantum fiziğinde hareket eden parçacıklar sistemi için önemli bir teoremdir. Virial teoremi; galaksiler, nükleer fizik, kozmoloji, astrofizik, gazların kinetik enerjisi, atom ve metallerdeki elektron tepkileri gibi birçok alanda uygulanabilmektedir. Bu tezde kapalı (kararlı) sistemlerde var olan kütle çekimi potansiyeli, yay potansiyeli gibi bazı fizik problemlerini ele alarak virial teoremini uygulayacağız. Ayrıca Schrödinger Denklemi gibi bazı denklemlerin çözümlerinde de virial teoremini uygulayacağız.

Anahtar Kelimeler: Virial teoremi, virial teoreminin uygulanışı, virial teoremine göre problem çözümleri, kapalı (kararlı) sistemler.

SOLUTIONS OF SOME OF THE PHYSICS PROBLEMS ACCORDING TO THE VIRIAL THEOREM

ABSTRACT

Virial is derived from the Latin word “vis” meaning power, force or energy. The Virial Theorem was discovered by Rudolf Julius Emanuel Clausius as a result of nearly 20 years of work. Since this theorem gives a relationship between kinetic energy and potential energy in closed (stable) systems, it is an important theorem for systems of moving particles in both classical and quantum physics. Virial theorem; It can be applied in many fields such as galaxies, nuclear physics, cosmology, astrophysics, kinetic energy of gases, electron reactions in atoms and metals. In this thesis, we will apply the virial theorem by considering some physics problems such as gravitational potential and spring potential in closed (stable) systems. We will also apply the virial theorem to the solutions of some equations, such as the Schrödinger equation.

Keywords: Virial theorem, application of the virial theorem, closed (stable) systems, problem solutions according to the virial theorem.

1. GİRİŞ

Virial, Latince güç, kuvvet ya da enerji anlamına gelen “vis” kelimesinden gelmektedir (Arslan, 2013). Virial Teoremi Termodinamiğin kurucularından olan Rudolf Julius Emanuel Clausius (1822-1888) tarafından bulunmuştur.

“Sistemin ortalama vizyonu, virialine eşittir.” –Clausius (Clausius, 1870)

Yukarıdaki alıntıda Rudolf Clausius, ilk kez 1870’de yayınlanan virial teoreminin özünü özetlemiştir. Büyük ölçüde Carnot’un ısı motorları üzerindeki çalışmalarından ilham alan Rudolf Clausius, 1851’de ısıнын mekanik doğası üzerinde uzun bir çalışma başlatmıştır (Chandrasekhar & Tooper, General Relativistic Polytropic Fluid Spheres, 1964). Bu çalışma onu yirmi yıl boyunca, şu anda görebildiğimiz teoremi en açık sunumu olarak formüle etmesine götürdü. Virial teoremi, 13 Haziran 1870 tarihinde Clausius, Aşağı Ren Doğa ve Tıp Bilimleri Derneği (Association for Natural and Medical Sciences) önünde, ısıya uygulanabilen mekanik bir teorem üzerine bir konferans vermiştir (Meltzer & Thorne, 1966). Bu konferansı verirken Clausius virial teoremini şöyle ifade etmiştir: “Sistemin ortalama değeri, virialine eşittir.” 19. Yüzyılda, bir sistemin herhangi bir özelliğine Latince bir isim vermek olağandı. Clausius, bir sistemin ortalama kinetik enerjisinin, o sistemdeki her bir parçacığa etki eden kuvvet ile o parçacığın yer vektörünün skaler çarpımı toplamının $-1/2$ katına eşit olduğunu ifade etmiştir. Burada kuvvetten potansiyel enerji türetilmektedir. Böylece Clausius 1870 yılında 20 yıllık bir çalışma sonucunda virial teoreminin teknik tanımını yapmış olmaktadır. Ayrıca Lord Rayleigh (1905) virial teoreminin gaz basıncı üzerine genelleştirilmesini yaparak yayımlamıştır (Çankaya, 2008). Clausius ayrıca, teoremin ikinci yarısında yer alan terim için ise güç anlamına gelen Latince virias sözcüğünden almıştır (Collins, 1977). Bugün “ortalama vis viva” daha çok ortalama kinetik enerji olarak biliniyor, ancak “Virial” terimi hala güçlü ve genel olan teorem olarak korunuyor ve kullanılıyor (Marc & McMillian, 1983, s. 216). Clausius’un virial olarak adlandırdığı sistemin karakteristiğine

artık fiziksel bir kavram olarak fazla önem verilmesine de, isim teoreme ve onun evrimleşmiş formuna iliştilmiştir. Clausius'un çalışması İngilizceye altı hafta gibi kısa bir sürede tercüme edilip yayınlanmış olsa da, teoremin gücü kabul edilmekte yavaştı (Collins, 1977). Bu kavramın girişinden itibaren Clausius ve Villarceau arasında tartışmalar ortaya çıkmıştır. Günümüzde bile hala kuantum mekaniksel virial teoreminin geçerliliği hakkında bazı zorluklar dikkat çekiyor (Villarceau, 1872). James Clerk Maxwell dört yıl sonra, "bu ülkede bu teoremin önemi pek anlaşılamayacak gibi, biraz daha ayrıntılı açıklamak iyi olabilir." demiştir (Collins, 1977). Maxwell'in gözlemi, bir asır sonra hala geçerlidir ve gerçekten bu çalışmanın yapılmasının en önemli sebeplerinden biridir.

20. yüzyılın başından sonra teoremin uygulamaları daha çeşitli ve yaygın hale gelmiştir. Lord Rayleigh, 1903'te teoremin bir genellemesini formüle etti; burada, Parker (Tooper, 1965) tarafından yeniden canlandırılan ve daha sonra 1960'larda Chandrasekhar çok kapsamlı bir şekilde geliştirilen tensör virial teoreminin başlangıcını görebilmiştir (Chandrasekhar, An Introduction to the Study of Stellar Structure, 1957). Poincare, farklı kozmolojik teorilerdeki yapıların kararlılığını araştırmak için 1911'de virial teoreminin bir formunu kullanmıştır. 1940'larda Paul Ledoux, yıldızların titreşim dönemlerini elde etmek ve kararlılıklarını araştırmak için teoremin değişik bir formunu geliştirmiştir. Chandrasekhar ve Fermi, virial teoremini 1953'te manyetik alanların varlığını içerecek şekilde genişletmiştir (Collins, 1977).

Marc ve McMillan'a göre ise Virial Teoremi, doğrusal momentumun yani Newton'un ikinci yasasının, kuantum mekaniksel karşılığındaki hareket denkleminin bir sonucudur. Momentum, açısal momentum ve enerjinin korunum yasalarıyla hemen hemen aynı düzleme yerleştirilebilecek çok temel ve genel bir ilişkidir. Bu korunum yasalarında olduğu gibi, Virial teoreminin geçerlilik aralığı fiziğin tüm alanlarını içerir: Klasik mekanik, kuantum mekaniği ve hem özel hem de genel görelî sistemler dâhil olmak üzere istatistiksel mekaniği de kapsar. Bu nedenle Virial teoremi, galaksiler, nükleer fizik, kozmoloji gibi çeşitli fiziksel problemlerde çok sayıda uygulama bulan dikkate değer bir teoremdir (Marc & McMillan, 1983).

Virial teoremi, hem klasik fizik hem de kuantum fiziğinde hareket eden parçacıklar sistemi için önemli bir teoremdir. Virial Teoremi, merkezi kuvvet hareketi için özel bir öneme sahiptir (Çankaya, 2008). Klasik virial teoreminin mekanik ve termodinamik ile ilgili çalışmaları günümüze kadar olan literatürde yer almaktadır. Plazma, viskozite, sürtünme ve çeşitli potansiyel etkileşimler de virial teoremi ile bağlantılı olarak incelenmiştir (Weislinger & Olivier, 1974, s. 389). Aynı zamanda Clausius'un virial teoremi, gazların kinetik teorisi, atom ve metallerdeki elektron tepkisi ve astrofizik gibi fiziğin birçok alanında kullanılan güçlü bir araçtır.

Genel olarak sistem dinamikleri hakkındaki ders kitapları virial teoremi ile ilgili kanıtlayıcı bilgiler verir ve moleküller arası çok parçacıklı sistemlerde Coloumb kuvvetine uygulanır (Sivardiere, 1986). Kuantum mekaniksel virial teoremi, Born-Oppenheimer ve statik yaklaşımlarla, Hellmann-Feynman teoremi ile bağlantılıdır.

Virial teoremi, rölativistik olmayan kuantum mekaniğinde yalnızca ölçek dönüşümlerinin tüm grubunu uygulayarak değil, aynı zamanda sonsuz küçük üreteçlerini kullanarak da kanıtlanabilir. Bu yöntem Finkelstein'a kadar uzanmaktadır ve fizik kitaplarında "komütatör varyantı" olarak belirtilmiştir. Bununla birlikte, "komütatör kanıtı", sürekliliğe gömülü özdeğerlere ait özfonksiyonlar için genel olarak doğru değildir. Bu tür fonksiyonların sonsuzda yavaş yavaş azalması nedeniyle Albeverio tarafından vurgulanmıştır (Albeverio, 1972, s. 173).

Virial Teoremi çekirdeği sabit tutmak için dış kuvvetlerin uygulandığını varsayarak bir moleküle uygulanabilir. Ortalama elektronik kinetik enerji, ortalama toplam iç enerjinin eksi, artı dış kuvvetin virial teoreminden kaynaklanan bir terimdir. Dış kuvvet, nükleer konumun fonksiyonu olarak toplam iç enerji bilgisinden türetilibildiğinden, bu teorem toplam enerjiyi öğrenir öğrenmez, çekirdeklerin tüm konfigürasyonları için ayrı ayrı kinetik ve potansiyel enerjiyi bulmanın yolunu verir (Slater, 1933). Marc ve McMillian'ın da kitaplarında belirttiği gibi 1950'lerin başındaki bazı araştırmacıların ifadelerinin aksine, virial teoreminden hesaplanan kuantum mekaniği basıncı, istatistiksel mekanikten hesaplanan sonuç ile aynıdır. Üç ve iki boyutlu plazmalar için durum denklemleri de sırasıyla taranmış Coulomb ve logaritmik fonksiyon potansiyelleri ile elde edilir (Marc & McMillian, 1983, s. 215).

1.1. İki ve Üç Boyutlu Plazmalar

Durum Plazma Denklemi: Bir plazma için durum denklemi genellikle istatistiksel mekanikten türetilmiş olsa da burada ayrıca virial teoremi, küme integralleri veya yayıcılar gibi karmaşık istatistiksel-mekanik araçlar gerektirmeyen pedagojik avantajı olan alternatif bir kanıt sağlar (Kelly, 1963). Devam etmek için, $Z_s e$ yükünü taşıyan bir plazma iyonunu çevreleyen ortalama potansiyel $\Phi_s(r)$ için Debye-Hückel teorisini kullanıyoruz; Böylelikle gösterilen bir Coulomb potansiyeli elde edilir (Debye & Hückel, 1923).

$$\langle \Phi_s(r) \rangle = \frac{Z_s e}{r} e^{-r/D} \quad (1.1)$$

Burada D , Debye (koruma) tarafından verilen uzunluktur.

$$D^2 = \frac{k\theta}{4\pi e^2 \sum n_s Z_s^2} \quad (1.2)$$

Burada n_s , s türünün iyonlarının sayı yoğunluğudur ve toplam, tüm s türlerinin üzerindedir.

Coulomb potansiyeli için virial teoremini hatırlarsak:

$$3PV = 2\langle T \rangle + \langle U \rangle \quad (1.3)$$

$\langle T \rangle$ eşbölme teoremi ile verildiğinde

$T = \frac{3Nk\theta}{2}$ ile ifade edilir ve buradan şu denklem yazılır;

$$2\langle T \rangle = 3k\theta V \sum n_s \quad (1.4)$$

ve U toplam potansiyel enerjidir.

$$U = \frac{1}{2} \sum Z_i e \Phi'_i \quad (1.5)$$

Diğer tüm i plazma iyonlarının Coulomb alanı nedeniyle Φ_i iyonunun deneyimlediği potansiyel şöyle ifade edilir:

$$\Phi'_i = \sum_{j(\neq i)} \frac{Z_j e}{r_{ij}} \quad (1.6)$$

Denklem (1.5)'e göre U toplam potansiyel enerji üzerindeki iyonların toplamının değiştirilmesi, s türlerinin toplamı ve ortalama U olur:

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} \langle \sum_i Z_i e \Phi'_i \rangle = \frac{1}{2} \sum_s n_s V Z_s e \langle \Phi'_s \rangle \quad (1.7)$$

Ortalama potansiyel $\langle \Phi'_s \rangle$

$$\langle \Phi'_s \rangle = \left[\langle \Phi_s(r) \rangle - \frac{Z_s e}{r} \right]_{r=0} \quad (1.8)$$

Yani, $Z_s e$ yüklü bir iyona etki eden ortalama potansiyel, Debye-Hückel potansiyeli, eksi iyonun öz potansiyelidir (Kirkwood & Poirier, 1954).

$$\langle \Phi'_s \rangle = -\frac{Z_s e}{D} \quad (1.9)$$

Böylece Denklem (1.2)'yi kullanarak U ,

$$\langle U \rangle = -\frac{e^2 V}{2D} \sum n_s Z_s^2 \quad (1.10)$$

Denklem (1.4) ve (1.10)'da virial teoremi denlemi yerine koyarsak Denklem (1.3)'de bir plazma için istenen durum denklemini verir:

$$P = k \theta \sum n_s - \frac{e^3}{3} \left(\frac{\pi}{k \theta} \right)^{1/2} (\sum n_s Z_s^2)^{3/2} \quad (1.11)$$

Denklem (1.2)'yi kullanılarak Denklem (1.12) de yazılabilir.

$$P = k\theta \sum n_s [1 - (18N)^{-1}] \quad (1.12)$$

$$\mathcal{N} = \frac{4\pi}{3} D^3 \sum n_s \quad (1.13)$$

“Debye küresi” içindeki toplam iyon sayısıdır. Bu form, ideal gaz yasasında sapmaların büyük olduğunda küçük olduğunu gösterir. Örnekleme için tek - tek değerlikli bir (uni-univalent) plazmada, $D^2 \sim 1/n$ ve $\mathcal{N} \sim D^3 n \sim n^{-1/2}$; dolayısıyla büyük $\mathcal{N}$, düşük iyon yoğunluğunu ifade eder. Debye kalkan bulutu kavramının anlamlı olması için aynı koşulun sağlanması gerektiğini hatırlatır (Kelly, 1963).

Virial teoremi, sistemin ortalama toplam kinetik ve potansiyel enerjileri arasındaki ilişkiyi vermektedir. Toplam kinetik enerji, tek parçacığın kinetik enerjisine göre önemli nicelikleri içerdiğinden daha karmaşıktır. Bu sebeple virial teoremi bize karmaşık sistemleri ve bu sistemlerin oluşumu sırasında ortaya çıkan enerji değişimlerini anlatmaktadır. Virial teoremi, sabit bir sistemin kinetik ve potansiyel enerjilerini rölativistik olmayan mekanik ve astrofizikte, büyüklük ve hızlarının dağılımına bağlı olarak uzay sistemlerinin kütle hesaplamalarında yaygın olarak kullanılmaktadır. Aynı zamanda yerçekimi alanına ek olarak elektromanyetik alan ve basınç alanı gibi diğer alanları da içermektedir (Çankaya, 2008). Virial teoremi, sabit bir sistemin kinetik ve potansiyel enerjilerini reaktif olmayan mekanik ve astrofizikte yaygın olarak kullanılan karanlık sistemlerin kütlesi, boyutları ve hızlarının dağılımını inceleyen teoremdir (Saslaw, 1985). Yerçekimi alanına ek olarak bu teorem elektromanyetik alan ve basınç alanı gibi diğer alanları da içermektedir (Thornton & Marion, 2014).

Henri Poincaré'nin (1911) virial teoremini kozmolojik kararlılığı belirleme problemine uygulaması, Fritz Zwicky'nin (1933) karanlık maddenin keşfi için kullanması, Ledoux'un (1945) virial teoreminin değişik formunu geliştirmesi, Parker'ın (1954) virial teoreminin tensor formunu geliştirmesi, virial teoreminin ilk kullanım alanları olarak sayılabilir. Ayrıca virial teoremi, istatistiksel mekanikte, eşbölüşüm teoreminde, ortalama toplam kinetik enerji ile ilgili sistemin sıcaklık hesaplamaları gibi çok karmaşık hesaplamalarda,

astrofizikle ilgili olarak ise iç sıcaklık, kütle, yıldızların yarıçapı ve yıldızların kararlılık durumları ile ilgili bilgileri elde etmede kolaylık sağlamaktadır. Atom ve moleküllere ait hesaplamaların doğruluğunun kontrolünde, bazı hesaplamaların daha kolay yapılması gibi birçok alanda bize yardımcı olacak bir teoremdir (Reed, 1993).

Virial Teoreminin klasik mekaniksel çıkarımı geçen yüzyıllar boyunca başarılı bir şekilde ilgili fizik problemleri üzerinde uygulanmıştır. Özellikle astrofizikte, kozmoloji, moleküler fizik, kuantum mekaniği ve istatistiksel mekanikte kullanılmaktadır (Schmidt, 1979).

Sınırlamalar göz önüne alındığında, virial teoremin bağlı durumları ve genel olarak kuantum mekanik sistemleri incelemede kullanılan uygulanabilir bir teorem olduğu görülmektedir. Virial teoremi tarihte kabul görmüş kuantum ve klasik mekanikteki benzer teoremler ile kıyaslandığında, bu teoremin onlardan türetildiği görülmektedir. Reaktif olmayan formdaki kuantum mekaniksel virial teoremi kinetik enerjinin değerleri ve potansiyel enerjinin yönlü türevi ile ilişkilidir. Bir sistem için Relativistik Hamiltonian tarafından tanımlanan kuantum mekaniksel virial teoremi arasındaki ilişki kinetik ve potansiyel enerjinin yönlü türevlerinin beklenen değerlerini hesaplanmaktadır. Hesaplama görelî ve ilişkisiz Hamilton denklemleri dahil olmak üzere kuantum mekaniğinde virial teoremler ve dalga denklemlerinde de (Schrödinger, Salpeter, Dirac, Klein-Gordon) bulunmaktadır (Lucha, 1990).

Teoremin görelî modifikasyonu, parçacığın momentumu ve kinetik enerjisine karşılık gelen Lorentz dönüşümü de Virial teoreminin vasıtasıyla bir tensör formundaki kinetik enerji mikroskobik düzeyde stres tensörü (Eshelby stresi) ile ilişkilidir. Basınç etkilerini klasik fizik çerçevesinde kütle ve enerji akışlarının değişkenlikleri üzerinde de kullanılmaktadır (Ganghoffer, 2010).

Esasen Clausius tarafından verilen orijinal kanıt şu şekildedir:

$\vec{F}_a$, m_a kütle değeri olan a parçacığına etki eden toplam kuvvet olsun. $\vec{r}_a$ konum vektörü olmak üzere Newton'un ikinci yasası şöyledir;

$$\vec{F}_a = m_a \ddot{\vec{r}}_a = \dot{\vec{p}}_a \quad (1.14)$$

Bu denklemin konum vektörü $\vec{r}_a$ ile skaler çarpımı F_a parçacığının kinetik enerjisi T_a yı içerir:

$$\vec{r}_a \cdot \vec{F}_a = \vec{r}_a \cdot \dot{\vec{p}}_a = \frac{d}{dt} (\vec{r}_a \cdot \vec{p}_a) - m_a \dot{\vec{r}}_a^2 \quad (1.15)$$

veya

$$\frac{d}{dt} (\vec{r}_a \cdot \vec{p}_a) = \vec{r}_a \cdot \vec{F}_a + 2T_a \quad (1.16)$$

Bu denklem zamana bağlı veya dinamik Virial teoremi olarak adlandırılabilir ve basitçe $\vec{r}_a \cdot \vec{p}_a$ hareket denklemdir.

Herhangi bir f fonksiyonu için tanımlanan zaman ortalamasına başvurmak verimli olmaktadır.

$$\bar{f} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau f dt \quad (1.17)$$

τ rastgele bir zaman aralığıdır. Ancak genellikle sistemin karakteristik süresiyle karşılaştırıldığından uzun olduğu varsayılır. Bu zaman üzerinde ortalama alınırsa

$$\frac{1}{\tau} [\vec{r}_a \cdot \vec{p}_a]_0^\tau = \overline{\vec{r}_a \cdot \vec{F}_a} + 2\bar{T}_a \quad (1.18)$$

denklemini elde edilir. Sol taraftaki entegre terim, hareket periyodik ise (yani belli bir süre sonra $\vec{r}_a \cdot \vec{p}_a$ gibi tüm dinamik miktarlar tekrar ediyorsa) ve τ , hareketin herhangi bir periyodunun katı olarak seçilirse kaybolur. $\vec{r}_a \cdot \vec{p}_a$ 'nın sonlu sınırlar içinde kalması koşuluyla, periyodik olmayan hareket içinde kaybolur. Çünkü τ terimi, istenen kadar küçük yapmak uzun sürebilir. Böylece a parçacığı için Virial Teoremini elde ederiz.

$$-2\bar{T}_a = \overline{\vec{r}_a \cdot \vec{F}_a} \quad (1.19)$$

veya tüm parçacıkların toplanmasıyla, tüm sistem için Virial Teoremi şu hale gelir:

$$-2\bar{T} = \sum_a \overrightarrow{r_a} \cdot \overrightarrow{F_a} \quad (1.20)$$

Burada $T (\equiv \sum T_a)$ sistemin toplam kinetik enerjisidir. Denklem (1.20)'nin sağ tarafındaki terim kuvvet anlamına gelen Latince vis (vires) kelimesi virial olarak anılmaktadır (Marc & McMillian, 1983, s. 217).

Milne (1925), süratle orantılı sürtünme kuvvetlerinin viriale hiçbir katkı yapmadığını, çünkü F 'nin skaler çarpımı $\overrightarrow{r_a}$, hız ile $-\dot{\overrightarrow{r_a}}$ verimi $-\overrightarrow{r_a} \cdot \dot{\overrightarrow{r_a}} = -d(\overrightarrow{r^2} / 2) / dt$ olduğu için, ortalamaya göre yok olduğuna dikkat çekti. (Ancak, sisteme sürekli olarak enerji eklenmediği sürece herhangi bir hareket uzun süreli ortalamada sürtünme ile sönümlenir.) (Milne, 1925).

Daha genel olarak, herhangi bir kuvvetin virial teoremi, sınırlı bir niceliğin toplam zaman türevi olarak yazılabildiğinde, bu kuvvetin virial teoremine hiçbir katkısı olmaz.

Tek bir parçacık için bir Virial teoremi formunun elde edilebileceği açık olsa da Denklem (1.19) veya tek bir parçacığın tek bir Kartezyen koordinatı için bile bu tür durumlar yalnızca özel durumlarda yararlıdır. Çünkü parçacık üzerindeki toplam kuvvet genellikle sistemdeki diğer parçacıklardan gelen kuvvet katkılarını içerir. Denklem (1.20) tüm parçacıkların toplamını, örneğin bir moleküldeki atomlar veya bir küme içindeki yıldızlar gibi parçacıkların alt kümeleri üzerindeki toplamlara ayrılabilir (Marc & McMillian, 1983, s. 218).

Virial teoremi kapalı (kararlı) sistemlerde kinetik enerji ve potansiyel enerji arasında bir ilişki verir (Arslan, 2013). Bu tezde kapalı (kararlı) sistemlerde var olan kütle çekimi potansiyeli, yay potansiyeli gibi bazı problemleri virial teoremine göre yeniden ele alıp çözeceğiz. Ayrıca Schrödinger denklemi gibi bazı denklemlerin çözümlerini virial teoremini uygulayacağız. Kapalı sistemlerde mekanik enerji korunumludur. Dolayısıyla kuvvet korunumludur. Virial teoremi korunumlu (kararlı) sistemlerde geçerli bir teoremdir. Kapalı sistemlere uygulandığında doğru sonuçlar vermektedir.

2. MATERYAL VE YÖNTEM

2.1. Virial Teoreminin Klasik Mekaniksel Çıkarımı

Bir G büyüklüğü şöyle ifade edilsin;

$$G = \sum \vec{p}_i \cdot \vec{r}_i \quad (2.1)$$

G , konum vektörü ile momentumun skaler çarpımı olan bir büyüklüktür. Eğer Denklem (2.1)'in her iki tarafının da türevini alırsak

$$\frac{dG}{dt} = \sum \frac{d\vec{p}_i}{dt} \cdot \vec{r}_i + \sum \vec{p}_i \cdot \frac{d\vec{r}_i}{dt} = 0 \quad (2.2)$$

denklemini elde ederiz. Eğer G verilen bir zaman aralığında periyodik ve sınırlanmış bir büyüklük ise:

$$\frac{1}{\tau} \int_0^\tau \frac{dG}{dt} dt = \frac{G(\tau) - G(0)}{\tau} = 0 \quad (2.3)$$

olmalıdır.

$$\frac{d\vec{p}_i}{dt} = \vec{F}_i \quad \text{kuvvet,}$$

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \quad \text{hız,}$$

$m\vec{v}_i = \vec{p}_i$ momentum olarak ifade edilir.

$$\sum \vec{F}_i \cdot \vec{r}_i + \sum m\vec{v}_i \cdot \vec{v}_i = 0 \quad (2.4)$$

Bu denklemde $m\vec{v}_i \cdot \vec{v}_i = m v_i^2$ ve kinetik enerji T ,

$$T = \frac{1}{2} m v_i^2 \quad (2.5)$$

olduğundan

$$\sum \vec{F}_i \cdot \vec{r}_i = -2T \quad (2.6)$$

olur. Denklem (2.6) virial teoreminin klasik mekaniksel çıkarımıdır. Korunumlu bir kuvvet ile V potansiyel enerjisi arasındaki bağıntı

$$F_i = -\frac{dV}{dr} \quad (2.7)$$

yazılıp Denklem (2.6)'da yerine konulursa, $V(r)$ potansiyel enerji olmak üzere aşağıdaki denklemle tanımlanan virial teorem elde edilir;

$$-r \frac{dV}{dr} = -2T \quad (2.8)$$

Bunu şöyle de ifade edebiliriz;

$$\vec{r} \cdot \vec{\nabla} V = +2T \quad (2.9)$$

2.1.1. Virial Teoreminin Kütle Çekim Kuvvetine Uygulanışı

Kütle çekim kuvveti

$$F_G = G \frac{Mm}{r^2} \quad (2.10)$$

ile verilir. Potansiyel enerji ise

$$U = G \frac{Mm}{r} \quad (2.11)$$

denklemleri ile tanımlanır. Virial denkleminin

$$\sum \vec{F} \cdot \vec{r} = - \vec{r} \cdot \vec{\nabla} U \quad (2.12)$$

olduğunu daha önce gördük. Potansiyel enerjiyi virial denkleminde yerine koyarak kütle çekim kuvvetinin konumla skaler çarpımını aldığımızda

$$\sum \vec{F} \cdot \vec{r} = + \frac{GMm}{r} \quad (2.13)$$

sonucunu elde ederiz.

2.1.2. Virial Teoreminin Yay Kuvvetine Uygulanışı

Bir yay uygulanan kuvvet $-kx$ ile verilir. Bu yayın üzerindeki potansiyel enerjiyi veren bağlantıyı virial teoremi ile çıkarın.

Yine virial teoremini kullanarak ve $r = x$ alarak

$$-kx(x) = -2T \quad (2.14)$$

eşitliğini yazarız. Yayın potansiyel enerjisi

$$V = \frac{1}{2} kx^2 \quad (2.15)$$

olduğunu biliyoruz. Virial teoreminden Denklem (2.9) da yine

$$\vec{r} = x \text{ olarak}$$

$$\frac{dV}{dx} = \frac{2T}{x} = kx \quad (2.16)$$

eşitliğini yazarız. Buradan da

$$\int \frac{dV}{dx} dx = \int_0^x kx dx \quad (2.17)$$

integral denklemini yazabiliriz. Bunun sonucu

$$V = \frac{1}{2} kx^2 \quad (2.18)$$

olur.

2.1.3. Virial Teoreminin Harmonik – Osilatör Yaklaşımına Uygulanışı

$R - R_e = q$ ile $V(R) = V(R_e) + \frac{1}{2} k_e q^2$ elde ederiz.

$$R \frac{dV}{dR} = R_e k_e q + k_e q^2 \quad (2.19)$$

Harmonik osilatör için çözümler tam olarak bilinmektedir. Titreşim kuantum sayısı v ($v = 0, 1, 2, \dots$) için, bunlar

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (2.20)$$

$$|v\rangle \equiv \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4} (2^v v!)^{-1/2} e^{-aq^2} H_v(a^{1/2} q) \quad (2.21)$$

Burada $a = \mu\omega/\hbar$; ω klasik titreşim frekansdır

$$\omega = \left(\frac{k_e}{\mu}\right)^{1/2} \quad (2.22)$$

H , özyineleme ilişkisine uyan Hermite polinomlarıdır.

$$xH_v(x) = vH_{v-1}(x) + \frac{1}{2}H_{v+1}(x) \quad (2.23)$$

İlk birkaç yapı

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2x, \quad H_2 = 4x^2 - 2$$

Dalga fonksiyonları $|v\rangle$ tam bir ortonormal küme oluşturur ve Hermite polinomları gibi v eşitliğine sahiptir. $|v\rangle$ 'yi Denklem (2.19) ile birlikte nükleer dalga fonksiyonu olarak kullanarak, $|v\rangle$ durumu üzerinden ortalama virial elde edilir.

$$\langle R \frac{dV}{dR} \rangle_n = R_e k_e \langle v|q|v \rangle + k_e \langle v|q^2|v \rangle \quad (2.24)$$

Sağdaki ilk terim, simetrik aralıktaki $(-\infty, +\infty)$ tek bir fonksiyonun integrali olduğu için yok olur. Şimdi ikinci integrali hesaplıyoruz. $\langle v|q^2|v \rangle$ denklem'in özyineleme bağlantısını kullanarak Denklem (2.23) ile $x = a^{1/2}q$:

$$q|v\rangle = \left(\frac{v}{2a}\right)^{1/2} |v-1\rangle + \left[\frac{v+1}{2a}\right]^{1/2} |v+1\rangle \quad (2.25)$$

ve bitişik ilişki (bütün değerler gerçektir),

$$\langle v|q = \left(\frac{v}{2a}\right)^{1/2} \langle v-1| + \left[\frac{v+1}{2a}\right]^{1/2} \langle v+1| \quad (2.26)$$

Dalga fonksiyonlarının ortonormalitesini hesaba katan bu son iki ilişkinin sonucu,

$$\langle v|q^2|v\rangle = \left(v + \frac{1}{2}\right) a^{-1} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar\omega}{k_e} \quad (2.27)$$

Böylece Harmonik osilatör yaklaşımında,

$$\langle R \frac{dV}{dR} \rangle_n = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega = E_v \quad (2.28)$$

sonucunu elde ederiz.

Bu sonucu Denklem (2.171)'e eklersek Denklem (2.29)'u elde ederiz:

$$\frac{\partial E_v}{\partial \mu} = -\frac{E_v}{2\mu} \quad (2.29)$$

veya frekans açısından

$$\frac{\partial \ln \omega}{\partial \ln \mu} = -\frac{1}{2} \quad (2.30)$$

Bu sonuç, Denklem (2.22) ifadesinin frekansını verir. Böylece Denklem (2.171)'in tutarlılığını doğrulamış oluruz.

Denklem (2.30) üzerinde daha fazla hesaplama yapmadan, $v(r)$ 'nin gelişimine başka bir terim dahil ederek bir iyileşme elde etmeyi umabiliriz.

$$V(R) = V(R_e) + \frac{1}{2} k_e q^2 + \frac{1}{6} l_e q^3 \quad (2.31)$$

ve aynı harmonik osilatör dalga donksiyonlarını korur. Eşitlik nedenleriyle $\langle v|q^3|v\rangle = 0$ ve $\langle v|q|v\rangle = 0$ olduğundan, hesaplanacak başka bir integralimiz yoktur.

$$R \frac{dV}{dR} = R_e k_e q + \left[k_e + \frac{R_e l_e}{2} \right] q^2 + \frac{l_e q^3}{2} \quad (2.32)$$

Denklem (2.171) olur.

$$\frac{\partial \ln \omega}{\partial \ln \mu} = -\frac{1}{2} \left(1 + \frac{R_e l_e}{2k_e} \right) \quad (2.33)$$

Kendinden negatif nicelik $R_e l_e / 2k_e$, Denklem (2.30)'a bir düzeltme terimi olarak görünür. Ancak deneysel sabitlerle yapılan karşılaştırmalar, bu terimin küçük bir düzeltme olarak kabul edilemeyecek kadar büyük olduğunu göstermektedir. Genellikle sıfırıncı mertebeden dalga fonksiyonları, enerjiye (veya frekansa) doğru birinci mertebeden düzeltmeler verir.

Denklem (2.171) doğru görünüyor ve belirli durumlarda integralin sayısal hesaplamaları, azaltılmış kütledeki değişiklik verilen izotopik enerji kayması veya enerji kayması verilen bir izotop kütlesi hakkında iyi tahminler verir (örneğin, bant spektrumlarından) (Marc & McMillian, 1983).

2.1.4. Virial Teoreminin Ters Sarkaca Uygulanışı

Birkaç yıl önce Mata ve Pestana, Şekil 1'de gösterdiği gibi m kütleli ve l uzunluğundaki hareketli bir ters sarkacın bir salınımının hızlı zamana bağlı Hamiltonian ortalamasını buldu (Ladera & Eduardo Alomá y , 2010, s. 264).

Şekil 1'de gösterilen geometriden aşağıdaki denklemleri yazabiliriz:

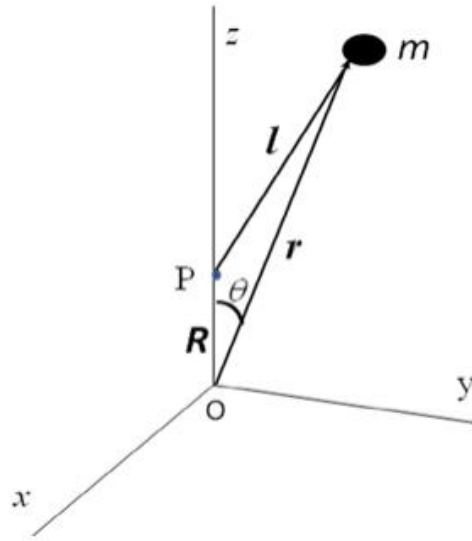
$$\vec{r} = \vec{R} + \vec{l} \quad (2.34)$$

$$\vec{R} = z(t) \hat{k} \quad (2.35)$$

$$\vec{l} = l \sin \theta \hat{j} + l \cos \theta \hat{k} \quad (2.36)$$

Sarkaç v hızında y - z düzleminde hareket eder.

$$\vec{v} = l \dot{\theta} \cos \theta \hat{j} + (\dot{z} - l \dot{\theta} \sin \theta) \hat{k} \quad (2.37)$$



Şekil 1.1: Salınımlı bir ters sarkacın l uzunluğunda P eksenli R vektörü (Ladera & Eduardo Alomá y , 2010)

Kinetik ve potansiyel enerji için ifadeler sırasıyla şöyledir:

$$T = \frac{m}{2} [(l \dot{\theta} - \dot{z} \sin \theta)^2 + \dot{z}^2 \cos^2 \theta] \quad (2.38)$$

$$V = mg (z + l \cos \theta) \quad (2.39)$$

Ortalamaları ise:

$$\langle T \rangle = \frac{m}{2} [l^2 \langle \dot{\theta}^2 \rangle - 2 l \langle \dot{\theta} \dot{z} \sin \theta \rangle + \langle \dot{z}^2 \rangle] \quad (2.40)$$

$$\langle V \rangle = mg (\langle z \rangle + l \cos \langle \theta \rangle) \quad (2.41)$$

Küçük salınımlar için, $V \propto 1/r^a$ potansiyeli $V \propto 1/r^2$ biçimindedir.

Eğer $2 \langle T \rangle = -a \langle V \rangle$ denkleminde $a = -2$ olarak alırsak ve küçük açı yaklaşımlarını kullanırsak: $\cos \theta \approx 1 - \theta^2/2$ ve $\sin \theta \approx \theta$ küçük sarkaç salınımları için Denklem

(2.40)'ı ve Denklem (2.41)'i elde ederiz.

$$\langle \dot{z}^2 \rangle = 2gl \left(1 - \frac{\langle \theta^2 \rangle}{2} \right) - l^2 \langle \dot{\theta}^2 \rangle \quad (2.42)$$

$\theta = 0$ durumu için yerçekimi potansiyeli maksimumdur ve denklemde $\langle \dot{z}^2 \rangle$ ile gösterilen kararlı nokta koşulu şu şekildedir:

$$\langle \dot{z}^2 \rangle = 2gl \quad (2.43)$$

Bu sonuç, eksen hareketi sinüzoidal olduğundan Mata ve Pestana tarafından elde edilen sonuçla tutarlıdır (Ladera & Eduardo Alomá y , 2010, s. 265).

Mata ve Pestana aşağıdaki durumlarda kararlı bir nokta buldular:

$$\langle \dot{z}^2 \rangle > gl \quad (2.44)$$

Hamiltonian veya Lagrangian sistemleri kullanılmadan da sonuç alınabileceği açıklanmıştır (Mata & Pestana, 2004). Bunun yerine, genel fizikte ve Virial Teoreminde tanıtılan basit kavramlar kullanılabilir. Teorem açısından sisteme ulaşan maksimum ortalama potansiyel enerji, ortalama kinetik enerjiye eşittir (Ladera & Eduardo Alomá y , 2010, s. 265).

2.1.5. Virial Teoreminin Coulomb Yasasına ve Hidrojen Atomuna Uygulanışı

Virial teoremi yaygın olarak kullanılan ders kitaplarında kuantum mekaniği problemlerinde sıklıkla uygulanmaktadır. Ayrıca moleküler fizikte de standart kullanımdadır. Örnek olarak aşağıdaki hidrojen atomunun radyal öz fonksiyonlarının ortalama boyutunu bulmanın oldukça basit durumunu ele alalım. Çok basit olmayan ve daha kullanışlı olan diğer uygulama durumları referanslarda bulunabilir (Griffiths & Schroeter, 1997).

Hidrojen atomunun herhangi bir özfonksiyonu φ – özenerjisi E için hidrojen atomu kuantum beklenti değeri $\langle \varphi | H | \varphi \rangle$, Hamiltonian kuantum beklenti değerinin toplamına $\langle T \rangle_\varphi, \langle V \rangle_\varphi$ eşittir.

$$\langle H \rangle_{\varphi} = E = \langle T \rangle_{\varphi} + \langle V \rangle_{\varphi} \quad (2.45)$$

$$= \langle P^2/2m \rangle - \langle e^2/r \rangle \quad (2.46)$$

Virial teoreminin niceleştirilmiş versiyonu şu şekilde olabilir:

$$\langle T \rangle_{\varphi} = -1/2 \langle V \rangle_{\varphi} \quad (2.47)$$

Okuyucunun kuantum beklenen değerlerini klasik ortamlar olarak alması gerekir. Denklem (2.45)'i düzenlersek:

$$E = \frac{\langle V \rangle}{2} = \langle e^2/r \rangle \quad (2.48)$$

Ayrıca, eğer atom n'ininci öz durumunda ise, enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$E_n = -\frac{2m\pi^2 e^4}{(n^2 \hbar^2)} = E \quad (2.49)$$

Son iki denklem atomun yarıçapı için aranan sonucu verir.

$$\langle 1/r \rangle_n = 1/(a_0 n^2) \quad (2.50)$$

Burada a_0 Bohr modelinin atomunun yarıçapıdır.

Her ne kadar $\langle 1/r \rangle$ farklı olsa da $1/\langle r \rangle$ den, iki ortalamanın aynı büyüklükte olduğunu ve sonucunda aşağıdaki denklemi elde ederiz.

$$\langle r_n \rangle \approx n^2 a_0 \quad (2.51)$$

Bu, hidrojen atomunda elektron bulma olasılığının maksimum değerine ulaştığı radyal mesafedir (Killingbeck, 1970).

2.1.6. Virial Teoreminin Elektromanyetik Alana Uygulanışı

Virial Teoremi, elektirik ve manyetik alanları içerecek şekilde genişletilebilir.

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 I}{dt^2} + \int_V x_k \frac{\partial G_k}{\partial t} d^3 r = 2(T + U) + W^E + W^M - \int x_k (p_{ik} + T_{ik}) dS_i \quad (2.52)$$

burada eylemsizlik momenti I , elektromanyetik alan momentum yoğunluğu G , “sıvının” kinetik enerji T , parçacıklarının rastgele termal enerjisi U ile gösterilir. W^D ve W^M ise dikkate alınan hacmin elektrik ve manyetik enerji içeriğidir. Son olarak p_{ik} yerel hareketli koordinat sisteminde ifade edilen sıvı basıncı tensörüdür.

$$p_{ik} = \sum n^\sigma m^\sigma \langle v_i v_k \rangle^\sigma - V_i V_k \sum m^\sigma n^\sigma \quad (2.53)$$

ve T_{ik} , elektromanyetik gerilim tensörüdür.

$$T_{ik} = \left(\frac{\epsilon_0 E^2}{2} + \frac{B^2}{2\mu_0} \right) \delta_{ik} - \left(\epsilon_0 E_i E_k + \frac{B_i B_k}{\mu_0} \right) \quad (2.54)$$

Bir plasmoid manyetik alanların ve plazmanın sonlu bir biçimidir. Virial teoremi ile, dışarıdan gelen kuvvetler tarafından tutulmadığı takdirde böyle bir konfigürasyonun genişleyeceğini görmek kolaydır. Basınç taşıyan duvarlar veya manyetik bobinlerin olmadığı sonlu bir konfigürasyonda, yüzey integrali kaybolacaktır. Sağ taraftaki diğer tüm terimler pozitif olduğu için eylemsizlik momentinin ivmesi de pozitif olacaktır. Genişleme süresini τ tahmin etmek de kolaydır. Toplam kütle M , bir yarıçap R ile sınırlıysa, eylemsizlik momenti kabaca MR^2 ve Virial teoremi sol taraftaki $\frac{MR^2}{\tau^2}$ ile gösterilir. Sağ taraftaki terimlere pR^3 eklenir, burada p plazma basıncından veya manyetik basınçtan daha büyüktür. Bu iki terimi eşitlenmek için τ çözülmelidir.

$$\tau \sim \frac{R}{c_s}$$

burada c_s iyon ses dalgasının hızıdır (veya manyetik basınç plazma basıncından yüksekse, Alfvén dalgasıdır). Bu nedenle, bir plazmoidin ömrünün ses (veya Alfvén) geçiş süresine göre olması beklenir (Schmidt, 1979) .

2.1.7. Virial Teoreminin İdeal Gaz Denkleminin Uygulanışı

İstatiksel nitelikteki önemli sonuçlar kayda değerdir. Konum vektörleri r_α ve momentleri p_α olan parçacıkların toplamı sınırlıdır yani zamanın tüm değerleri için sonlu kalır. (Thornton & Marion, 2014, s. 277)

$$S \equiv \sum_{\alpha} p_{\alpha} \cdot r_{\alpha} \quad (2.55)$$

S 'nin zaman türevi

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{\alpha} (p_{\alpha} \cdot \dot{r}_{\alpha} + \dot{p}_{\alpha} \cdot r_{\alpha}) \quad (2.56)$$

dS/dt 'nin ortalama değerini periyodik zaman aralığında hesaplırsak, Denklem (2.57)'yi buluruz:

$$\langle \frac{dS}{dt} \rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} \frac{dS}{dt} dt = \frac{S(\tau) - S(0)}{\tau} \quad (2.57)$$

Sistemin hareketi periyodik ise ve eğer periyodun tam sayısı τ ise $S(\tau) = S(0)$ olur ve $\langle \dot{S} \rangle$ kaybolur. Ancak, sistem herhangi bir periyodiklik göstermese bile, o zaman hipotez gereği S sınırlı bir fonksiyon olduğu için zamanın yeterince uzun olmasına izin vererek $\langle \dot{S} \rangle$ 'i istediğimiz kadar küçük yapabiliriz. Bu nedenle yukarıdaki Denklemin sağ tarafının zaman ortalaması her zaman kaybolacak (veya en azından sıfıra yaklaşacak şekilde) yapılabilir. Dolayısıyla biz bu sınırdaki

$$\langle \sum_{\alpha} p_{\alpha} \cdot \dot{r}_{\alpha} \rangle = - \langle \sum_{\alpha} \dot{p}_{\alpha} \cdot r_{\alpha} \rangle \quad (2.58)$$

bu denklemin sol tarafında $p_a \cdot \dot{r}_a$ kinetik enerjinin iki katıdır. Sağ tarafta, $\dot{p}_a \propto$ parçacığın üzerindeki F_a kuvvetidir. Bu nedenle,

$$\langle 2 \sum_a T_a \rangle = - \langle \sum_a F_a \cdot r_a \rangle \quad (2.59)$$

T_a üzerinde ki toplam, sistemin toplam kinetik enerjisi T 'dir. Bu yüzden genel sonucu bu şekilde belirtebiliriz.

$$\langle T \rangle = - \frac{1}{2} \langle \sum_a \vec{F}_a \cdot \vec{r}_a \rangle \quad (2.60)$$

Bu denklemin sağ tarafı Clausius tarafından sistemin viriali olarak adlandırılmıştır (Weislinger & Olivier, 1974). Virial teoremi, bir parçacık sisteminin ortalama kinetik enerjisinin virialine eşit olduğunu belirtir (Thornton & Marion, 2014, s. 278).

2.1.7.1. İdeal Gaz Denklemi Problemi

Hacim V , basınç P ve mutlak sıcaklık T olan bir kapta N atomlar içeren ideal bir gaz düşünün (kinetik enerji T ile karıştırılmamalıdır). Mükemmel bir gaz denklemini türetmek için virial teoremini kullanın (Thornton & Marion, 2014, s. 278).

Eş bölüşüm teorisine göre, ideal gazlardaki her atomun ortalama kinetik enerjisi $(3/2)kT_1$ 'dir. Burdaki k , Boltzmann sabitidir. Toplam ortalama kinetik enerji şu şekildedir.

$$\langle T \rangle = \frac{3}{2} NkT_1 \quad (2.61)$$

Virial teoreminin sağ tarafı Denklem (2.60) F kuvvetini içerir. İdeal mükemmel bir gaz için, atomlar arasında hiçbir etkileşim kuvveti oluşmaz. Tek kuvvet, duvarların sınırlama kuvveti ile temsil edilir. Atomlar, duvarlara basınç uygularken duvarlar elastik olduğu için atomlar duvarlardan seker.

Basınç, birim alan başına kuvvet olduğundan, bir diferansiyel alan üzerindeki anlık farklı kuvvet

$$dF_a = -nPdA \quad (2.62)$$

ile gösterilir. Burada n yüzey dA 'ya dik olan ve dışa dönük bir birim vektördür. Virial teoremin sağ tarafı,

$$-\frac{1}{2} \langle \sum_a F_a \cdot r_a \rangle = \frac{P}{2} \int \vec{n} \cdot \vec{r} dA \quad (2.63)$$

Yüzey integralini bir hacim integrali ile ilişkilendirmek için diverjans teoremini kullanıyoruz.

$$\int \vec{n} \cdot \vec{r} dA = \int \nabla \cdot \vec{r} dV = 3 \int dV = 3V \quad (2.64)$$

Virial teoreminin sonucu şu şekildedir.

$$\frac{3}{2} NkT = \frac{3PV}{2} \quad (2.65)$$

$$NkT = PV \quad (2.66)$$

İdeal gaz yasasıdır.

Eğer F_a kuvvetleri U_a potansiyellerinden türetilabiliyorsa, Denklem (2.60) olarak yeniden yazılır (Thornton & Marion, 2014, s. 279).

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2} \langle \sum_a r_a \cdot \nabla U_a \rangle \quad (2.67)$$

Merkezi bir güç (kontral güç) yasası kuvvetine göre etkileşen iki parçacık durumu özellikle ilgi çekicidir: $F \propto r^n$.

$$U = kr^{n+1} \quad (2.68)$$

Bu nedenle

$$r \cdot \nabla U = \frac{dU}{dr} = k (n+1) r^{n+1} = (n+1) U \quad (2.69)$$

Virial teorem olur.

$$\langle T \rangle = \frac{n+1}{2} \langle U \rangle \quad (2.70)$$

Parçacıkların yerçekimi etkileşimi varsa $n = -2$ ve

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2} \langle U \rangle, \quad n = -2 \quad (2.71)$$

Bu ilişki, örneğin gezegenlerin enerjinin hesaplanmasında kullanışlıdır.

2.1.8. Virial Teoremi İle İki Yıldız Arasındaki Mesafe

İki yıldız arasındaki mesafe r ve kütleleri M_1 ve M_2 'dir. Arasındaki potansiyel enerji $U = G \frac{M_1 M_2}{r}$ ile veriliyor. Sistemin üzerindeki kuvveti bulunuz.

Virial teoremini kullanarak

$$2T = r \frac{dU}{dr} = - \frac{GM_1 M_2}{r} \quad (2.72)$$

denklemini yazabiliriz. Buradan kinetik enerjiyi

$$T = - \frac{GM_1 M_2}{2r} \quad (2.73)$$

olarak yazarız. Yine virial teoreminden

$$Fr = -2T \quad (2.74)$$

eşitliğinden kuvveti

$$F = - \frac{2T}{r} = \frac{GM_1M_2}{r^2} \quad (2.75)$$

olarak elde ederiz.

2.1.9. Virial Teoremi ile Yıldızlar Arası Küteller (Yıldız Kütelleri)

Sıradan yıldızların çoğunda N nükleon sayısının büyüklük sırası, temel sabitlerin şaşırtıcı derecede basit bir kombinasyon ile verilir.

$$N = sN_0, \quad N_0 = \left(\frac{\hbar c}{GM^2} \right)^{3/2} = 2.2 \times 10^{57}$$

Burada M protonunun kütlesi, G evrensel yerçekimi sabitidir ve s 0.1 ile 100 arasında bir sayısal faktördür (güneş için oldukça küçük bir yıldız, $s=0.54$). Weisskopf'u izleyerek bu denklemi niteliksel olarak türeteceğiz.

Bir yıldız için model olarak, yalnızca hidrojenden oluşan, aynı yoğunlukta, R yarıçaplı dönmeyen bir küreyi ele alıyoruz. Ayrıca, sıcaklığın tüm N hidrojen atomunun iyonize olması ve toplamda $2N$ parçacık vermesi için yeterince yüksek olduğunu varsayıyoruz (Gerçekte, yıldızlar neredeyse tamamen (kütle olarak %96-99) hidrojen ve helyumdan oluşur. Bunun %50 – 80'i hidrojendir ve çekirdekte yoğunluk ortalama değerinin 100 katına yaklaşabilir). Kütlesi NM olan bir yıldızın kütleçekimsel daralma yoluyla R yarıçapına kadar oluşumunda, parçacık başına yerçekimi potansiyel enerjisi şu şekilde azalır:

$$-\frac{U_g}{2N} \sim \frac{GM^2N}{2R} \quad (2.76)$$

Güneş için bu enerji $\sim 1 \text{ keV}$ – ki bu elbette yıldız çekirdeğinin sıcaklığının termonükleer reaksiyonları destekleyecek kadar yüksek hale gelmesidir. Bu değerle karşılaştırıldığında, Coulomb potansiyel enerjisi ihmal edilebilir ve bundan böyle göz ardı edilebilecektir.

Yerçekimi tarafından bir arada tutulan N elektron ve N protonun bu kümelenmesinde virial teoremi $2\bar{T} = -\bar{U}$ denklemi kinetik enerjisinin eksi (daima negatif) yerçekimi potansiyel enerjisinin yarısı olmasını gerektirir. Elektron gazında bozulma olmadığı sürece, kinetik enerji termal hareketten kaynaklanır. Sıcaklıktaki eşbölme teoreminde parçacık başına $\bar{T}/2N = 3k\theta/2$ elde ederiz. Böylece virial teoreminde parçacık başına,

$$-\frac{U_g}{2N} = \frac{GM^2N}{2R} = \frac{2T}{2N} = 3k\theta \quad (2.77)$$

$$3Nk\theta = \frac{GM^2N^2}{2R} = -E \quad (2.78)$$

2.1.10. Virial Teoreminin Bir Yıldızın İç Sıcaklığına Uygulanışı

Güneş'in yüzeyindeki sıcaklığını bulmak, Planck Kuantum Radyasyon teorisinin bir uygulaması olarak tüm modern fizik derslerinde sunulan standart bir örnektir. Daha az bilinen bir yıldızın iç sıcaklığının hesaplanmasıdır. Bu durum Virial teoremi kullanılarak hesaplanmıştır (Ladera & Eduardo Alomá y , 2010, s. 262).

Bir yıldızın yarıçapı R ve kütlesi M olan bir küre olduğu varsayıldığında, toplam yerçekimi potansiyel enerjisi V , genel fizik derslerinin en iyi bilinen ilişkisi kullanılarak bulunur.

$$V = -\frac{3GM_S^2}{5R} \quad (2.79)$$

Yıldızın içinde hareket eden tek bir atomun, enerji eşbölümü tarafından verilen bir ortalama kinetik enerjiyle $\langle K_e \rangle$ sahip olduğu güvenli bir varsayım

$$\langle K_e \rangle = \frac{3}{2} k \langle T_s \rangle \quad (2.80)$$

Buradaki $\langle T_s \rangle$ yıldızın iç kısmındaki ortalama sıcaklıktır k ise Boltzmann Sabitidir.

Eğer yıldızdaki toplam atom sayısı N ise, Virial Teorem uygulaması şunu verir:

$$-\frac{\langle V \rangle}{2} \approx \frac{3GM_s^2}{10R} = N \frac{3k\langle T_S \rangle}{2} \quad (2.81)$$

Bu nedenle

$$\langle T_S \rangle \approx \frac{GM_s^2}{5kNR} = \frac{GM_s m}{5kR} \quad (2.82)$$

Burada $m = M_s / N$, yıldızın bir atomunun ortalama kütlesidir. Güneş gibi tipik yıldızlar çoğunlukla hidrojen atomları (% ~61) ve helyum atomları (%38) içerir. Bu nedenle $m=2.2 \times 10^{-27}$ atom kütlesini yaklaşık olarak tahmin edebiliriz. Güneş'in kütlesi $M_e = 2 \times 10^{30}$ kg civarındadır ve yarıçapı 70 milyon kilometre olarak alınabilir. Bu sabitleri Denklem (2.82)'ye dahil ederek, yıldızda yer alan diğer fizik olaylarını (örneğin nükleo sentezi) kullanan tahminlerle çakışan Güneş iç sıcaklığımızın (10^7 K) tahminini elde ederiz. Bu hesaplama ve talep edilen az miktarda deneysel veri göz önüne alındığında dikkate değer bir sonuçtur. Bunların tamamı kendi gezegenimizdeki ölçümlerden kolayca elde edilebilir.

2.1.11. Virial Teoreminin Basınç Altındaki Katılara Uygulanışı

Bir madde sıkıştırıldığında kuantum mekaniksel enerji seviyeleri daha yüksek değerlere kayar ve kinetik enerjisi artar. Bu davranış Coulomb kuvvetleri için virial teoreminde $3PV = 2T + U$ cinsinden açıklanabilir. $E = T + U$ ile

$$\bar{T} = -E + 3PV \quad (2.83)$$

$$\bar{U} = 2E - 3PV \quad (2.84)$$

Yani hem $\bar{T}$ hemde $\bar{U}$ deneysel olarak ölçülebilir miktarlar cinsinden ifade edilir. Bu sonuç, katılarda sıkıştırma ile T ve U 'daki değişimi elde etmek için Denklem (2.83) ve moleküler dinamikte stres hesaplamaları için Denklem (2.84) kullanılmıştır. Birçok yaklaşık hesaplamada da geçerlidir. Değişim ve korelasyon etkilerini içeren kendi kendine tutarlı olan Hartree-Fock yöntemi, kek kalıbı yaklaşımı Thomas-Fermi modeli ve yoğunluk fonksiyonel teorisi. Esas olarak geçiş metalleri için sayısal hesaplamalar

yapılmıştır. Burada denklemin sadece bir uygulamasını tanımlayacağız. Metaller ve diğer bazı katılar için geçerli olan tek parametrelili bir durum denklemi sağladığı için geniş bir ilgi alanına sahiptir (McMillian & Latter, 1958).

Helmholtz serbest enerjisi A 'yı örneğin $\bar{T} = -E + 3PV$ ve $\bar{U} = 2E - 3PV$ denklemlerinde E yerine tanımlıyoruz

$$3PV = 2(A + \theta S) - U = 2A - (U - 2\theta S) \quad (2.85)$$

ve bir asal sayı ile gösterilen izotermal hacim türevini $(\partial/\partial V)_\theta$ alırsak;

$$-A' = P' \text{ 'yi}$$

elde ederiz.

$$3P'V + 3P = -2P - (U - 2\theta S)' \quad (2.86)$$

veya yeniden düzenleme yaparsak

$$(PV^{5/3})' = -\frac{V^{2/3}}{3}(U - 2\theta S)' \quad (2.87)$$

denklemini elde ederiz. Şimdi, iki varsayımda bulunuyoruz.

1- Sıkıştırma potansiyel enerji U , atom mesafesiyle ters orantılı olarak artar; yani,

$$U = U_0 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{1/3} \quad (2.88)$$

bu denklemde kastedilen

$$U' = \frac{U_0 V_0^{1/3}}{3V^{4/3}} \text{ 'dir.} \quad (2.89)$$

Burada alt simge sıfır sıkıştırılmamış durumu ifade eder.

Sıkıştırmanın S entropisi üzerinde küçük bir etkisi vardır, böylece S 'yi ihmal edebiliriz. (Bu, elbette mutlak sıfırda kesindir.)

1.ve 2. varsayımlar yerine getirildiğinde, Denklem (2.87)'ye eklenmeleri entegrasyon üzerine istenen durum denklemimizi verir.

$$P = \frac{U_0}{3V_0} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{5/3} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{4/3} \right] \quad (2.90)$$

olarak tanımlanan izotermal yığın modülü

$$B_\theta = - \left(\frac{\partial P}{\partial \ln V} \right)_\theta \quad (2.91)$$

(2.90) denkleminde hesaplanır.

$$3B_{\theta_0} = \frac{U_0}{3V_0} \quad (2.92)$$

Sıfır basınçta kütle modülü açısından B_{θ_0} , Denklem (2.90) tek parametrelili bir durum denklemi olarak görülür,

$$P = 3B_{\theta_0} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{5/3} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{4/3} \right] \quad (2.93)$$

(McMillian & Latter, 1958) Denklem (2.93) uygulamasını alkali ve toprak alkali metallerle sınırlandırmıştır.

2.2. Virial Teoreminin Kuantum Mekaniksel Çıkarımı

Kuantum mekaniği için virial teoremi, (Slater, 1933) tarafından çıkarıldı ve yöntemi Hirsch-felder, Curtiss ve Bird' in kitaplarında ayrıca Eyring, Walter ve Kimball'ın ders kitaplarında verildi. Kuantum mekaniksel virial teoremi genellikle belirtildiği gibi,

yalnızca sınırlandırılmamış bir sistemin bağlı durumu için doğrudur. Çünkü, kanıt yalnızca ψ dalga fonksiyonunun değil, aynı zamanda $\partial\psi / \partial\psi_a$ 'nın da yok olmasına bağlıdır. Sınırlayıcı yüzeyde doğru form verilir ve durum denklemini çıkarmak için kullanılır. Virial teoreminin genelleştirilmiş bir formu, hem kuantum hem de klasik mekanik için çıkarılmıştır (McLellan, 1974). Çıkarım, sınır yüzeyinde bir miktarın kaybolmasına bağlıdır. Yukarıda belirtilen referanslar da bu terimin, sistemin kapatılması veya sınırlayıcı yüzeyde dalga fonksiyonunun yok olması şartıyla ortadan kalktığını belirtiyor (Hirschfelder, Curtiss, & Bird, 1955). Bu, bir kap içinde sınırlandırılmamış bir atom, molekül veya kristalin bağlı durumları için doğrudur fakat sistemin sınırlı bir kapta sınırlı olduğu durumlarda, kuantum mekaniksel virial teoremi farklı ifade edilir (Eyring, Walter, & Kimball, 1944).

Kuantum mekaniksel virial teoremi için zamana bağımlı Schrödinger denklemini kullanacağız;

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = H\psi \quad (2.94)$$

Problemi bir A işlemcisi seçerek çözeceğiz. A 'nın beklenen değerleri;

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (2.95)$$

denklemleriyle hesaplanır.

Şimdi A 'nın beklenen değerinin zamana göre türevini alalım

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{d\psi}{dt} \middle| A \middle| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \middle| A \middle| \frac{d\psi}{dt} \right\rangle \quad (2.96)$$

(2.94) numaralı denklemden

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{H\psi}{i\hbar} = \frac{-iH\psi}{\hbar} \quad (2.97)$$

$$\frac{d\psi^*}{dt} = \frac{iH^+\psi^*}{\hbar} \quad (2.98)$$

eşitlikleri elde edilir. H hermityen bir işlemcidir. Bu eşitlikleri Denklem (2.96)'da yerine koyarak

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle \psi | \frac{iH}{\hbar} A | \psi \rangle - \langle \psi | A \frac{iH}{\hbar} | \psi \rangle = 0 \quad (2.99)$$

denklemini elde ederiz. Bu denklemi yeniden düzenlersek

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | HA - AH | \psi \rangle \quad (2.100)$$

denklemine ulaşırız. Eğer A işlemcisi zamana bağlı değilse bu eşitlik

$$\frac{i}{\hbar} \langle \psi | [H, A] | \psi \rangle = 0 \quad (2.101)$$

olur. A işlemcisi

$$A = \vec{r} \cdot \vec{p} \quad (2.102)$$

olsun. Hamilton işlemcisi

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (2.103)$$

ile verilir. Bunu Denklem (2.101) de yerine koyalım

$$\frac{i}{\hbar} \langle \psi | \left[\frac{p^2}{2m} + V(r), \vec{r} \cdot \vec{p} \right] | \psi \rangle = 0 \quad (2.104)$$

$[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$ olduğundan yukarıdaki denklemi yeniden düzenlersek

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \left[\frac{p^2}{2m}, \vec{r} \cdot \vec{p} \right] + [V(r), \vec{r} \cdot \vec{p}] | \psi \rangle \quad (2.105)$$

denklemini elde ederiz.

$$\left[\frac{p^2}{2m}, \vec{r} \cdot \vec{p} \right] = \frac{p^2}{2m} (\vec{r} \cdot \vec{p}) - (\vec{r} \cdot \vec{p}) \left(\frac{p^2}{2m} \right) \quad (2.106)$$

p işlemcisi

$$p = -i\hbar \frac{d}{dr} \quad \text{yada} \quad \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (2.107)$$

ile verilir. (2.105) numaralı denklemde işlem yaparsak

$$\left[\frac{p^2}{2m}, \vec{r} \cdot \vec{p} \right] = \frac{p}{2m} (-i\hbar \cdot \vec{p}) + \frac{p}{2m} (-i\hbar \cdot \vec{p}) + (\vec{r} \cdot \vec{p}) \frac{p^2}{2m} - (\vec{r} \cdot \vec{p}) \frac{p^2}{2m} = -\frac{i\hbar}{m} p^2 \quad (2.108)$$

denklemini elde ederiz. Bunları aşağıdaki denklemde yerine koyalım;

$$[V(r), \vec{r} \cdot \vec{p}] = V(r)(\vec{r} \cdot \vec{p}) - (\vec{r} \cdot \vec{p})V(r) \quad (2.109)$$

İşlemci işlemlerini yaptığımız zaman aşağıdaki denkleme ulaşırız;

$$= V(r)(\vec{r} \cdot \vec{p}) - \vec{r}(-i\hbar) \cdot \vec{\nabla} V(r) - V(r)(\vec{r} \cdot \vec{p}) \quad (2.110)$$

yukarıdaki denklemi sadeleştirdiğimiz zaman aşağıdaki denklemi elde ederiz;

$$= i\hbar \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(r) \quad (2.111)$$

Bunların değerlerini yerine koyduğumuzda şu denkleme ulaşırız;

$$\frac{i}{\hbar} \langle \psi | -\frac{\hbar^2 p^2}{2m} + i\hbar \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(r) | \psi \rangle = 0 \quad (2.112)$$

A'nın zamandan bağımsız olduğunu kabul edersek Denklem (2.66)'da yapılan bazı hesaplamalardan sonra

$$\langle \psi | \frac{p^2}{m} - \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(r) | \psi \rangle = 0 \quad (2.113)$$

olur. Bu denklemi

$$\left\langle \frac{p^2}{m} \right\rangle - \langle \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(r) \rangle = 0 \quad (2.114)$$

$$\frac{p^2}{m} = 2T \quad (2.115)$$

olarak elde ederiz. Burada T sistemin kinetik enerjisi ve V sistemin potansiyel enerjisidir. Böylece klasik mekanikteki gibi kuantum mekaniksel virial teoremini de aşağıdaki gibi elde ederiz;

$$2\langle T \rangle = \langle \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(r) \rangle \quad (2.116)$$

2.2.1. Virial Teoreminin Hidrojen Atomuna Uygulanışı

Hidrojen atomunu ele alarak, temel durumun tek bir parametre ile yani radyal boyutu r ile karakterize edilmesine izin verirse potansiyel enerji ancak o zaman önemli olur.

$$U \sim - \frac{e^2}{r} \quad (2.117)$$

Elektron dalga boyu λ kabaca mesafe boyunca uzanır.

$$\lambda \sim r \quad (2.118)$$

De Broglie momentumuna karşılık gelen

$$p \sim \frac{\hbar}{r} \quad (2.119)$$

ve böylece kinetik enerji

$$T \sim \frac{\hbar^2}{2mr^2} \quad (2.120)$$

burada m elektronun kütlesidir. Kesinlikle söylemek gerekirse, elektron-proton sisteminin azaltılmış kütlesi kullanılmalıdır, ancak mevcut amaçlar için fark önemsizdir. Dolayısıyla toplam enerji ortalama

$$E \sim - \frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2} \quad (2.121)$$

$r = a$ yarıçapı için minimum değere sahiptir. Burada

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.53 \text{ \AA} \quad (2.122)$$

yani sadece bohr yarıçapı olur.

Bu değeri tekrar potansiyel enerjiye ekledikten sonra Denklem (2.117) ve kinetik enerji Denklem (2.120), virial teoremi $2\bar{T} = -\bar{U}$ otomatik olarak sağlanır. Temel durum enerjisi Denklem (2.121) tam olarak hidrojenik değere karşılık gelir: Burada R , rydberg'dir.

$$E_0 = -\frac{e^2}{2a} = -R = -13.6eV \quad (2.123)$$

Hidrojen tüm atomların en küçüğü olmasına rağmen, boyutu ve iyonlaşma enerjisi tüm atomlar için karakteristik büyüklük sınırlarını temsil eder.

Uyarılmış durumlar için potansiyel enerji fonksiyonu hala Coulombic'tir. Ancak kinetik enerji değiştirilmelidir çünkü dalga donksiyonunda düğümler vardır; $n-1$ düğüm için dalga boyu $\lambda \sim r/n$ ve kinetik enerji

$$T \sim \frac{\hbar^2 n^2}{2mr^2} \quad (2.124)$$

Toplam enerjiyi daha önce olduğu gibi en aza indirerek şunu elde ediyoruz.

$$r \sim n^2 a = \frac{n^2 \hbar^2}{me^2} \quad (2.125)$$

Bu yarıçap ile $2\bar{T} = -\bar{U}$ tekrar yerine getirilir ve H atomunun enerji sevyeleri tam olarak geri kazanılır.

$$E_0 = -\frac{e^2}{2n^2 a} = -\frac{R}{n^2} \quad (2.126)$$

2.2.2. Virial Teoreminin r Radyal Mesafesinde Hidrojen Atomunun Temel Durumuna Uygulanması

Coulomb potansiyeli

$$V(r) = k \frac{q_1 q_2}{r} \quad (2.127)$$

ile verilir. $q_1 = q_e$ ve $q_2 = q_p$ sırasıyla elektron ve protonun yükleri olmak üzere değerleri

$$q_e = -e, \quad q_p = +e \quad (2.128)$$

ile verilir, e elementer yük birimidir. Bunları Denklem (2.127) de yerine yazarak

$$V(r) = - \frac{ke^2}{r} \quad (2.129)$$

elde ederiz. Denklem (2.9)'u kullanarak

$$2T = r \left(- \frac{ke^2}{r^2} \right) = \frac{ke^2}{r} \quad (2.130)$$

eşitliğini elde ederiz. Buradan da kinetik enerjiyi

$$T = \frac{1}{2} \frac{ke^2}{r} \quad (2.131)$$

olarak buluruz. Denklem (2.6) kullanılarak kuvveti

$$F = - \frac{ke^2}{r^2} \quad (2.132)$$

olarak elde ederiz.

2.2.3. Virial Teoreminin Heisenberg Hareket Denkleminde Çıkarımı

Merzbacher'in uygulaması, zamandan bağımsız bir operatör A için Heisenberg hareket denklemini kullanır (Merzbacher, 1970).

$$d\langle A \rangle / dt = \left(1/i\hbar\right) \int \psi^* (AH - HA) \psi d\tau \quad (2.133)$$

Bunun ancak birleşim tüm alanın üzerindeyse, bir yüzey integralinin sonsuza dek yüzey üzerinde kaybolacağı şekilde doğru olduğunun farkına varmak önemlidir. Denklem (2.133)'ün çıkarılmasında HA operatörü, bilindiği gibi H 'nin Hermityen karakterini nitelendirirse aşağıdaki denklemden ortaya çıkar (McLellan, 1974).

$$\int (H\psi)^* A\psi d\tau = \int \psi^* HA\psi d\tau \quad (2.134)$$

Denklem (2.135)'in kanıtında fonksiyonun H için olası değişkenlik göstermesinde engel yoktur. Ancak T kinetik enerji operatörünün değişkenlik göstermesi Green teoreminin kullanılmasını gerektirmektedir. Böylece Denklem (2.134) aşağıdaki gibi yazılmalıdır.

$$\int_V H\psi^* A\psi d\tau = \int_V \psi^* HA\psi d\tau \quad (2.135)$$

$$- \left(\frac{\hbar^2}{2m_\mu}\right) \int_\sigma n_a \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial x_a^{(\mu)}} (A\psi) - \left(\frac{\partial}{\partial x_a^{(\mu)}} A\psi \right) \psi^* \right] d\sigma \quad (2.136)$$

Burada $\mathbf{n}$, V bölgesini sınırlayan σ yüzeyinden dışa doğru çizilen normaldir. Böylelikle Denklem (2.133) aşağıdaki gibi yazılmalıdır.

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \left(\frac{1}{i\hbar}\right) \int \int_V \psi^* (AH - HA) \psi d\tau \quad (2.137)$$

$$- \left(\frac{i\hbar}{2m_\mu}\right) \int_\sigma n_a \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial x_a^{(\mu)}} (A\psi) - \left(\frac{\partial}{\partial x_a^{(\mu)}} A\psi \right) \psi^* \right] d\sigma \quad (2.138)$$

Örneğin A operatörünü sabit bir bütün olarak alırsak, Denklem (2.134), bir parçacık için Denklem (2.139)'daki gibi indirgenir.

$$d\langle 1 \rangle / dt = \int_{\sigma} (n \cdot J) d\sigma = (d/dt) \int v \psi^* \psi d\tau \quad (2.139)$$

Burada $J = -(i\hbar / 2m)(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$ iyi bilinen olasılık akım yoğunluğudur.

Denklemden (2.138) nolu σ yüzeyinin sonsuza gitme eğiliminde olduğu için integralinin kaybolabileceğini ve bu gereksinimin genel olarak A , ψ ve $\partial\psi/\partial x_a$ 'ya bağlı olacağını görmekteyiz. Sonlu bir bölge için yüzey integrali dikkate alınmalıdır; ψ varsa mutlaka ortadan kaybolmadığına dikkat edilmelidir. Ancak örneğin ψ ve $\nabla\psi$ bunu yaparsa (veya ψ ve $A\psi$) ortadan yok olacaktır.

Böylece bunun doğruluğunu temel olarak (Merzbacher'i izleyerek yüzey integrali dahil) gösterecek olursak

$$2\langle T \rangle - \langle C \rangle = \left(\frac{\hbar^2}{2m_\mu} \right) \int_{\sigma} n_a \frac{\partial \psi^*}{\partial x_a^{(\mu)}} x \beta^{(v)} \frac{\partial \psi}{\partial x_\beta^{(v)}} d\sigma \quad (2.140)$$

C virial operatörüdür. C virial operatörü $C = x_a (\partial \Phi / \partial x_a)$ ile verilir. Φ kabın duvarlarındaki sonlu potansiyeller hariç sistemin potansiyel enerjisidir.

$$= -3V (\partial E / \partial V) \quad (2.141)$$

işlemleri yapılır. Burada son eşitlik $3V (\partial E / \partial V) = -2\langle T \rangle + \langle C \rangle$ ile karşılaştırılarak Denklem (2.141) elde edilir. Bu denklemde ortalamalar V hacmi üzerinden alınır ve yüzey integralinde, V 'nin katı duvarlarla çevrelendiği durumda, σ üzerinde sıfır olduğu gerçeğini dikkate alınır. Bu nedenle, yüzey integralini çıkarmak istiyorsak, yalnız ψ sıfır olduğunda değil $\partial\psi/\psi x_a$ 'ın da sıfır olacağı zaman, duvardan kaynaklanan potansiyeli de virial'e dahil etmemiz gerektiği anlamına gelmektedir. Böylece yüzey integralinin $-3V(\partial E/\partial V)$ eşit olduğu kanıtlanmış olur.

Kübik bir kaptaki serbest bir parçacığın özfonksiyonlarını kullanarak yüzey integralini değerlendirmek ve bu durumun sonucunda $-3V(\partial E/\partial V)$ 'nin $2E$ 'ye eşit olduğunu göstermek bu konu için ilginç bir örnektir (McLellan, 1974).

2.2.4. Virial Teoremine Göre Heisenberg Yaklaşımının Kuantum Mekaniksel Çıkarımı

Heisenberg Yaklaşımı kuantum görüşüne uygulanamaz. Kuantum görüşü için zaman ortalaması uygulanamaz, ancak klasik hareket denklemleri ile Heisenberg operatör hareket denklemleri arasındaki iyi bilinen bağlantı, operatör $Q = \sum m_j r_j \cdot r_j$ 'nin kullanılmasını önerir. Heisenberg hareket denklemleri daha sonra Q 'nun beklenen değerinin zamana göre değişim oranını verir (Killingbeck, 1970).

$$\begin{aligned} (d/dt)\langle Q \rangle &= (i\hbar)^{-1} \langle [Q, H] \rangle \\ &= (i\hbar)^{-1} \langle [\sum_i m_j r_j \cdot r_j, \sum_i p_i^2 / 2m_j] \rangle \end{aligned} \quad (2.142)$$

Komutatör, Q 'nun H 'nin potansiyel enerji kısmı ile yer değiştirdiği yazılarak basitleştirilmiştir. Denklem (2.142), koordinatlar ve momentum arasındaki standart kanonik komütasyon ilişkileri kullanılarak değerlendirilebilir. Bu değerlendirmenin sonucu

$$\begin{aligned} (d/dt)\langle Q \rangle &= \langle \sum_i r_j \cdot p_j + p_j \cdot r_j \rangle \\ &= \langle 2 \sum_i r_j \cdot p_j + 3 \sum_i \hbar / i \rangle \end{aligned} \quad (2.143)$$

ile gösterilir.

Durağan bir durum için $\langle Q \rangle$ zamandan bağımsızdır, dolayısıyla $\omega^2 = (\sum_k A k^2 \omega k^2 E k) / \sum_k A k^2 E k$ terimleri sıfır olmalıdır. Aslında bu denklem, Denklem (2.144)'teki gibi bağımsız olarak da kurulabilir. Potansiyel fonksiyonu gerçekse, özleşen E 'nin yörünge fonksiyonları gerçek olarak alınabilir. $r \cdot p + p \cdot r$

operatörü Hermitian olduğundan, gerçek bir beklenti değerine sahip olmalıdır. Bununla birlikte, momentum operatörü $p_j = -i\hbar\nabla_j$; de meydana gelen i faktörünü alırsak, $r \cdot p + p \cdot r$ 'nin beklenen değerinin saf, hayali olduğu sonucu çıkar.

$$\langle \sum_i r_j \cdot p_j \rangle = \frac{3}{2} i\hbar n \quad (2.144)$$

Herhangi bir özgün durum için geçerli olan, n sistemdeki parçacıkların sayısıdır. Denklem (2.144) radyasyon teorisindeki atomik osilatör kuvvetleri için toplam kuralın oluşturulmasında kullanılan sonuca benzer.

Klasik mekanikteki koordinat dönüşümlerinde komütasyon ilişkilerinin kullanılması daha ileri sonucu verir.

$$\begin{aligned} (d^2/dt^2)\langle Q \rangle &= (d/dt)\langle \sum_i r_j \cdot p_j + p_j \cdot r_j \rangle \\ &= (i\hbar)^{-1} \langle [\sum_i r_j \cdot p_j + p_j \cdot r_j, H] \rangle \end{aligned} \quad (2.145)$$

$$\langle 4 \sum_i p_j^2 / 2m_j - 2 \sum_i r_j \cdot \text{grad}_j V \rangle = 0 \quad (2.146)$$

Burada V , Hamiltonian H 'deki potansiyel enerji fonksiyonudur. Açısız parantezler için sıfır değeri yine $\langle Q \rangle$ 'nin durağan bir durum için zamandan bağımsız olduğuna dikkat edilerek takip edilir. Son denklem için manyetik etkilerin yokluğunda çok parçacıklı bir sistem için kuantum virial teoreminin genel şeklidir.

Eğer sistem yüklü parçacıkları içeriyor ise H Hamiltonian operatörüne $B \sum a_j l_{zj} + B^2 \sum \beta_j (x_j^2 + y_j^2)$ dağılımı z eksenine boyunca bir düzgün manyetik alana uygulanır.

2.2.5. Virial Teoreminin Helyum Atomuna Uygulanışı

Helyum atomunda iki elektron vardır ve Denklem (2.120) de de görüldüğü gibi kinetik enerji eşitliğin iki katıdır. Nükleer çekimin potansiyel enerjisi Denklem (2.117)'nin dört katıdır. Çünkü çift yüklü bir çekirdeğe tabi iki elektron vardır.

Potansiyel enerjinin hesaplandığı elektron-elektron itmesi de hesaba katılmalıdır.

$$V_{ee} \sim \frac{ze^2}{r} \quad (2.147)$$

Burada r/z elektronlar arasındaki ortalama mesafedir. Toplam enerji böylece şeklini alır.

$$E \sim - (4 - z)e^2/r + \hbar^2/mr^2 \quad (2.148)$$

Minimizasyondan sonra Denklem (2.149)'u elde ederiz

$$E_0 \sim - 2 \left(2 - \frac{z}{2}\right)^2 R \quad (2.149)$$

Deneysel değer -5.81 rydberg'dir.

$$\frac{z}{2} = 0.296 \quad (2.150)$$

Denklem'deki nükleer yükün $z/2$ miktarı Denklem (2.148) de etkin bir şekilde indirgenir. Bu nedenle alternatif olarak her elektron tarafından çekirdeğin kısmi perdelenmesinin sonucu $5/16$ olarak görülebilir. Gerçekten de deneysel değeri, bilinen kuantum mekaniği yük değişimi yöntemi ile elde edilen taramaya yakındır.

Kregar ve Weisskopf L-kabuk atomları için daha ayrıntılı fakat yinede basit modeller sunmuştur. Ancak iyonlaşma enerjilerinin ve elektron ilgilerinin deneysel değerleriyle şaşırtıcı derecede iyi bir uyum bulmuştur. (Kregar & Weisskopf, 1982)

Her durumda, atomun toplam enerjisi şu şekilde yazılabilir:

$$E \sim - \frac{A}{r} + \frac{B}{2r^2} \quad (2.151)$$

Minimizasyon verimleri

$$r \sim \frac{B}{A}$$

$2\bar{T} = -\bar{U}$ denklemi sağlanır ve temel durum (minimum) enerji şu şekilde verilir:

$$E_0 = -\frac{A^2}{2B} = \frac{U_0}{2} = -T_0 \quad (2.152)$$

Virial teoremi zıt etkiler arasındaki dengenin sonucu olarak atom kararlılığını açıklar. Yarıçapı azaltmaya çalışan Coulomb kuvvetinin iki etkisi vardır.

Bir yandan potansiyel enerji $-A/r$ 'nin azalmasıyla daha negatif hale geldiğinden enerjiyi azatma eğilimindedir. Öte yandan, daha kısa bir dalga boyu daha yüksek momentum ve dolayısıyla daha yüksek kinetik enerji anlamına geldiğinden, enerjiyi artırma eğilimindedir. Weisskopf bu ikinci etkiyi sıkıştırmaya karşı kuantum direncini Schrödinger basıncı olarak adlandırır (Weisskopf, 1975).

2.2.6. Virial Teoremi İle Tek Değerli Metallerin Enerji Bağlılığı

Bir metalin kohezyon enerjisi, metal kütlelerini (m) kendisini oluşturan atomlardan oluşan bir gaza (g) ayırmak için gereken enerji, yani esasen süblimleşme enerjisi ΔE^s olarak tanımlanır.

$$\Delta E^s = E^g - E^m \quad (2.153)$$

Hem serbest atomlarda hem de metalde işleyen tek kuvvet Coulomb olduğundan Virial teoremi denklemi'nin ($2\bar{T} = -\bar{U}$) kohezyon enerjisini kinetik enerjilerdeki (negatif) farka basitçe eşitlemek için kullanılabilir.

$$\Delta E^s = T^m - T^g \quad (2.154)$$

Tek değerli metallerle sınırlandırılmış çalışmalarda odak noktası yalnızca elektronların kinetik enerjisindeki değişiklikler üzerindedir. Aslında değerlik elektronlarından kaynaklanan değişiklikler iki bölge ile ilişkilendirilebilir. Çekirdeğin dışında, serbest atomdaki değerlik elektron dalga fonksiyonunun üstel bir bozulmadan metalik iletim elektronlarının karakteristik kafes dalga fonksiyonlarına değiştiği yerdir. Çekirdek

elektronlarının değerlik elektronunun dalga fonksiyonundaki değişiklikten yalnızca dolaylı olarak etkilendiği yer ise çekirdeğin içidir (Marc & McMillian, 1983).

Çekirdeğin dışında, kinetik enerjiye baskın katkı, seviyeleri maksimum elektron momentumu P cinsinden verilen Fermi enerjisi μ_F , doldurulan "elektron gazı"nın dejenerasyonundan gelir.

$$\mu_F = \frac{p^2}{2m} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \left(\frac{a}{r}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (2.155)$$

$$= 50.165 \left(\frac{a}{r}\right)^2 eV \quad (2.156)$$

Burada r , değerlik elektronu başına eşdeğer hacimli kürenin yarıçapıdır (yani tek değerli bir metalin atomu başına hacmi) ve a , Bohr yarıçapıdır. Fermi denizinde elektron başına düşen ortalama kinetik enerji $3\mu_F/5$ 'dir. Bununla birlikte, sıfırıncı yaklaşım, temel kuantum sayısı olan n değerlik elektronunun serbest atom dalga fonksiyonunun kuyruğundaki kinetik enerjinin çekirdeğin dışındaki bölgeye çıkarılmasıyla geliştirilebilir.

$$\psi \sim e^{-r/\lambda} \text{ ile } \lambda = na \quad (2.157)$$

Bu kinetik enerji

$$\frac{p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2n^2} \sim \frac{A}{n^2} \quad (2.158)$$

Ayrıca, serbest atomdan metale geçerken valans elektronlarının çekirdek elektronlarını perdelemesindeki azalma da hesaba katılmalıdır. Çünkü iletim elektronları atom küresi boyunca daha düzgün bir şekilde dağıldığından, metaldeki çekirdek elektronları potansiyel enerjisini serbest atomdan daha negatif yapan ve buna bağlı olarak kinetik enerjilerini artıran bir şekilde daha büyük bir etkili nükleer yük yaşarlar. Bu etki, valans elektronunun temsil ettiği, örneğin B/Z 'nin temsil ettiği nükleer yük Ze 'nin kesriyle

kabaca orantılı olmalıdır. Ancak, en azından bu etkinin en büyük olduğu düşük $-Z$ elemanları için $Z \sim n^2$, böylece bu terim Denklem (2.158) ile birleştirilebilir.

$$\Delta E^s \sim 0.6\mu_F + \frac{Q}{n^2} \quad (2.159)$$

2.2.7. Virial Teoremi İle İki Atomlu Moleküllerin Potansiyel Enerjisi

Birçok deneysel potansiyel fonksiyon önerilmiştir ve bunların çoğu değerlendirilirken spektroskopik veriler ile ilişkilendirilen üç parametreyi içerir.

$$V(\infty) - V(R_e) = D_e \quad (2.160)$$

$$V'(R_e) = 0 \quad (2.161)$$

$$V''(R_e) = k_e \quad (2.162)$$

Burada D_e ayrışma enerjisi ve k , ikinci dereceden (veya harmonik) kuvvet sabitidir. V için ampirik denklemlerin en ünlüsü Mors fonksiyonudur.

$$V(R) = D_e \left\{ 1 - \exp \left[- \left(\frac{k_e}{2D_e} \right)^{\frac{1}{2}} (R - R_e) \right] \right\}^2 \quad (2.163)$$

Ayrıca deneysel verilerden $V(R)$ 'yi değerlendirmek için Rydberg, Kein ve Rees tarafından geliştirilen sayısal bir yöntem (RKR yöntemi) mevcuttur. Sınırlaması, yeterli titreşim seviyelerinin spektroskopik olarak belirlenmiş olduğu moleküler durumları gerektirmesidir. (Steele, Lippincott, & Vanderslice, 1962), 19 atomlu elektronik durum için RKR eğrilerine karşı birkaç deneysel potansiyel enerji fonksiyonunun tahminlerini test etmiştir. Böylece Mors fonksiyonunun Varshin fonksiyonundan daha az doğru olduğu ortaya çıkmıştır.

$$V(r) = D_e \left\{ 1 - \frac{R_e}{R} \exp[-\beta(R^2 - R_e^2)] \right\}^2 \quad (2.164)$$

Mevcut uygulamada daha çekici olan, sadeliği nedeniyle, Fues potansiyelidir (Fues, 1926). Fues potansiyeli şu şekildedir:

$$V(R) = w_0 + \frac{w_1}{R} + \frac{w_2}{R^2} \quad (2.165)$$

Bu potansiyel pertübasyon teorisi (Parr & White, Toward Understanding Vibrations of Polyatomic Molecules, 1968) ile pertübasyon parametresi $\lambda = 1 - R_e/R$ ile türetilir, seri açılımı λ^2 teriminden sonra kesilir. Bu potansiyel lehine ikna edici bir argüman olarak elektronik virial teoremini kullanarak, w_1 ve w_2 parametrelerine fiziksel bir yorum yapılabilir. Kolaylaştıracak olursak

$$\langle U \rangle = 2w_0 + \frac{w_1}{R} \quad (2.166)$$

$$\langle T_e \rangle = -w_0 + \frac{w_2}{R^2} \quad (2.167)$$

Bu nedenle Coulomb benzeri terim x_1/R potansiyel enerjiye karşılık gelirken, w_2/R^2 sadece kinetik enerji kısmına aittir. Ayrıca, Fues potansiyelinden tahmin edilen spektroskopik kuvvet sabitleri (kuadratik k_e , kübik l_e , quartic m_e , ...) arasındaki ilişkiler deneysel değerlerle iyi bir uyum içindedir (Parr & White, Perturbation Theoretic Approach to Potential Energy Curves of Diatomic Molecules, 1968). Fues potansiyeli şu anlama gelir

$$\left(\frac{k_e m_e}{l_e^2} \right)^{1/2} = 1 \quad (2.168)$$

Probleme geri dönersek: $\langle R(dV/dR) \rangle_n$ 'nin sayısal entegrasyonu, ilgilenilen durum için $V(R)$ eğrisinin bilindiği belirli durumlarda mümkündür; ancak orijinal formülümüzün geçerliliğini kontrol etmek için, Denklem (2.171)'deki hesaplamayı analitik olarak gerçekleştirmek için harmonik osilatörün dalga fonksiyonlarını ve potansiyelini kullanıyoruz; yani, ikinci türev teriminden sonra kesilen bir Taylor serisinde $V(R)$ 'yi R hakkında genişletiriz.

2.2.8. Virial Teoremi İle Parametrik Azaltılmış Kütle ile Hellmann-Feynman Teoremi

Bu uygulamadaki diğer temel fikir, Hellmann-Feynman teoremi ($\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = \langle \psi(\lambda) \left| \frac{\partial H(\lambda)}{\partial \lambda} \right| \psi(\lambda) \rangle$) denkleminden yararlanmaktadır. İndirgenmiş kütlenin varyasyon parametresi olarak kullanılması; bu sonucu verir

$$\frac{\partial E}{\partial \mu} = \langle \frac{\partial T_\mu}{\partial \mu} \rangle_n \quad (2.169)$$

Çünkü elektronik enerji V , μ 'dan bağımsızdır. Ayrıca $T_\mu = -(\hbar^2/2\mu)\nabla^2$ ile,

$$\frac{\partial T}{\partial \mu} = -\frac{T_\mu}{\mu} \quad (2.170)$$

Bu sonucu Denklem (2.169) ve ardından virial teoreminde $2\langle T_\mu \rangle_n = \langle R \frac{dV}{dR} \rangle_n$ denklemine eklersek, iki atomlu moleküllerde izotop etkisi için ilgi ilişkisi elde ederiz.

$$\frac{\partial E}{\partial \mu} = -\frac{\langle R (dV/dR) \rangle_n}{2\mu} \quad (2.171)$$

İki izotopik molekülün farklı indirgenmiş kütleleri ve farklı enerjileri vardır (yani, bant spektrumlarına yansıyan farklı titreşim ve dönme enerji seviyeleri). Belirli bir nükleer dalga fonksiyonu için bu formül, E 'nin indirgenmiş kütle ile değişimini verir. E ve μ 'nin küçük değişiklikleri için Denklem (2.171) yazılabilir.

$$\frac{\Delta E}{\Delta \mu} = -\frac{\langle R (dV/dR) \rangle_n}{2\mu} \quad (2.172)$$

Şimdi sorun, denklemin sağ tarafını değerlendirmektir. Denklem (2.170) veya Denklem (2.171), nükleer dalga fonksiyonu ve potansiyel V hakkında bir bilgi olduğunu varsayar.

3. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Virial teoreminin; galaksiler, nükleer fizik, kozmoloji, astrofizik, gazların kinetik enerjisi, atom ve metallerdeki elektron tepkileri, moleküler fizik, kuantum mekaniği, istatistiksel mekanik gibi birçok alana uygulanabildiğini bilinmekteydi. Bu tezde ise kapalı (kararlı) sistemlerde var olan kütle çekimi potansiyeli, yay potansiyeli, hidrojen atomu, Coulomb kuvveti gibi bazı fizik problemleri ve Schrödinger denklemi gibi bazı denklemlerin çözümleri de ele alınarak virial teoremi uyguladı. Sonuç olarak bu teoremin incelediğimiz fizik problemlerinin çözümünde doğru sonuçlar verdiği saptandı. Bu nedenle bu teoreme daha fazla önem gösterilmelidir. Günümüzde lisans ve lisans üstü derslerinde virial teoremine de yer verilmelidir.

KAYNAKLAR

Albeverio S (1972) On bound states in the continuum of N-body systems and the virial theorem. *Annals of Physics* 71: 167-276

Arslan H (2013) The Distances in the Stable Systems Due to the Virial Theorem. *Applied Mathematics* 4(4): 688-689

Chandrasekhar S (1957) An Introduction to the Study of Stellar Structure. Dover Publications 2: 360-361

Chandrasekhar S, Tooper RF (1964) General Relativistic Polytropic Fluid Spheres. *Astrophysical Journal* 140: 434-460

Clausius RE (1870) On a mechanical theorem applicable to heat. *Philosophical Magazine* 40: 122

Collins GW (1977) The Virial Theorem in Stellar Astrophysics. Columbus, The Ohio State University 2: 1-116

Çankaya Y (2008) Virial Teoreminin Kuantum Nokta Yapılara Uygulanması. Yüksek Lisans Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Selçuklu Üniversitesi, Konya, 146

Debye P, Hückel E (1923) Zur Theorie der Elektrolyte. *Physikalische Zeitschrift* 24: 185

Eyring H, Walter J, Kimball GE (1944) Quantum Chemistry. *Journal of Chemical Education* 21: 8-415

Fowler WA (1966) The Stability of Supermassive Stars. *Astrophysical Journal* 144: 180

Fues E (1926) Das Eigenschwingungsspektrum zweiatomiger Moleküle in der Undulationsmechanik. *Annalen der Physik* 385(12): 367-396

Ganghoffer JF (2010) On the generalized virial theorem and Eshelby tensors. *International Journal of Solids and Structures* 47(9): 1209-1220

Griffiths D, Schroeter D (1997) Introduction to Quantum Mechanics. New York: Cambridge University Press 3: 25-90

Hirscfelder JO, Curtiss CF, Bird BR (1955) Molecular Theory of Gases Liquids. Journal of Polymer Science 17: 116

Kelly DC (1963) Plasma Equation of State. American Journal of Physics 31: 827

Killingbeck J (1970) Methods of Proof and Applications of the Virial Theorem in Classical and Quantum Mechanics. American Journal of Physics 38: 590-611

Kirkwood JG, Poirier JC (1954) The Statistical Mechanical Basis of the Debye–Hückel Theory of Strong Electrolytes. The Journal Of Physical Chemistry 58: 591-596

Kregar M, Weisskopf J (1982) Ionization Energies And Electron Affinities Of Atoms Up To Neon. American Journal of Physics 50: 213

Ladera C, Eduardo Alomá y P (2010) The Virial Theorem and its applications. Latin-American Journal of Physics Education 4(2): 260-266

Lucha W (1990) Relativistic Virial Theorems. Austria: Modern Physics Letters A1050 5: 1-13

Marc G, McMillian WG (1983) The Virial Theorem. Los Angeles: Advance in Chemical Physics 58: 209-361

Mata GJ, Pestana E (2004) Effective Hamiltonian and dynamic stability of the inverted pendulum. European Journal of Physics 25: 717-721

McLellan AG (1974) Virial Theorem Generalized. American Journal of Physics 42: 239-243

McMillian WG, Latter AL (1958) On the Compressibilities of Simple Metals. The Journal of Chemical Physics 29: 15

Meltzer DW, Thorne KS (1966) Normal Modes of Radial Pulsation of Stars at the End Point of Thermonuclear Evolution. Astrophysical Journal 145: 514-542

Merzbacher E (1970) Quantum Mechanics. New York: Wiley 3: 25-47

Milne EA (1925) XXVII. Rational electrodynamics. IV. The “Radius“ of a point charge. *Philosophical Magazine* 50: 409

Parr R, White J (1968) Toward Understanding Vibrations of Polyatomic Molecules. *The Journal of Chemical Physics* 49: 1059

Parr R, White R (1968) Perturbation-Theoretic Approach to Potential-Energy Curves of Diatomic Molecules. *The Journal of Chemical Physics* 49: 1059-1062

Reed MA (1993) Quantum Dots. *Scientific American* 268(1): 118-123

Saslaw W (1985) *Gravitational Physics of Stellar and Galactic Systems*. Cambridge University Press 1: 512

Schmidt G (1979) *Physics of High Temperature Plasmas (Second Edition)*. New York: Academic Press 2: 422

Sivardiere J (1986) Using the virial theorem. *American Association of Physics Teachers* 54(12): 1100-1103

Slater JC (1933) The Virial and Molecular Structure. *The Journal of Chemical Physics* 1: 687

Steele D, Lippincott E, Vanderslice J (1962) Comparative Study of Empirical Internuclear Potential Functions. *Reviews Of Modern Physics* 34: 239

Thornton ST, Marion JB (2014) *Classical Dynamics Of Particles And Systems*. Hindistan: Cengage Learning 5: 660

Tooper RF (1965) Adiabatic Fluid Spheres in General Relativity. *The Astrophysical Journal* 142: 1541-1562

Villarceau Y (1872) *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences* 232-240

Weislinger E, Olivier G (1974) The Classical and Quantum Mechanical Virial Theorem. *International Journal Of Quantum Chemistry* 8: 389-401

Weisskopf V (1975) *Of Atoms, Mountains, and Stars: A Study in Qualitative Physics*. Science 187: 605

