Ασκήσεις

1. Κατά τη διέγερση ενός ατόμου υδρογόνου, ηλεκτρόνιο μεταπηδά από την ενεργειακή στάθμη με n= 1 στην ενεργειακή στάθμη με n = 4. Ποια από τα παρακάτω δεδομένα είναι εσφαλμένο;

i. Η ενεργειακή στάθμη με n = 4 αποτελεί την πρώτη διεγερμένη κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου.

ii. Χρειάζεται λιγότερη ενέργεια για να ιονιστεί ένα διεγερμένο άτομο υδρογόνου από ότι όταν το άτομο είναι στη θεμελιώδη του κατάσταση.

iii. Το ηλεκτρόνιο όταν βρίσκεται σε κατάσταση διέγερσης είναι κατά μέσο όρο πιο μακριά από τον πυρήνα.

iv. Η συχνότητα της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας κατά την μετάπτωση ηλεκτρονίου από n = 4 σε n = 3 είναι μικρότερη αυτής που προκύπτει κατά την μετάπτωση ηλεκτρονίου από n = 3 σε n = 2.

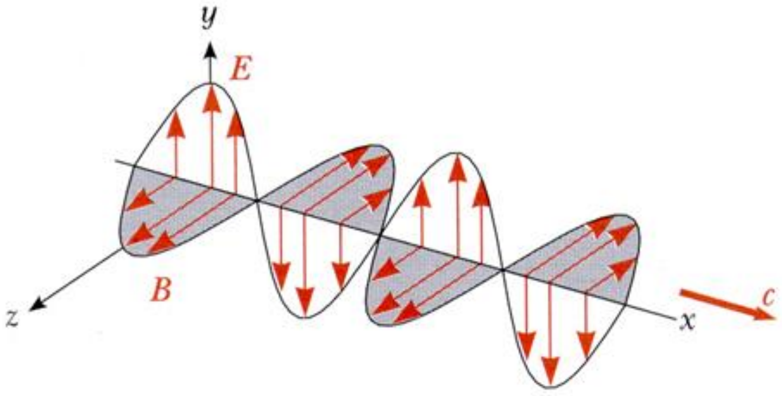
Ασκήσεις

2) Το άτομο του υδρογόνου βρίσκεται στη θεμελιώδη κατάσταση. Πόση ενέργεια πρέπει να απορροφήσει ώστε να μεταβεί στην τροχιά που αντιστοιχεί σε κβαντικό αριθμό n = 3; ($1{,}9377 \times 10^{-18}$ J)
3) Να υπολογιστεί το μήκος κύματος της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας κατά τη μετάπτωση του ηλεκτρονίου από την τροχιά με n = 4 στην τροχιά με n = 2 στο άτομο του υδρογόνου. Δίνονται: $h = 6{,}63\ 10^{-34}$ J s, $c = 3\ 10^{8}$ m/s. (486 nm)
4) Πόση είναι η ελάχιστη ενέργεια που απαιτείται για τον ιοντισμό: α) του ατόμου του υδρογόνου, β) 1 mol ατόμων υδρογόνου. ($2{,}18 \times 10^{-18}$ J) (1313014 J)
5) Ποια ηλεκτρονιακή μετάπτωση στο άτομο H, που καταλήγει στην τροχιά n=5, θα δώσει φωτόνια μήκους κύματος 3740nm; (n = 8)
6) Για το ηλεκρόνιο του ατόμου του υδρογόνου δίνονται οι μεταπτώσεις: (α) από την στοιβάδα με n=4 στην στοιβάδα με n=2 και (β) από την στοιβάδα με n= 5 στην στοιβάδα με n=3. Σε ποια περίπτωση εκπέμπεται περισσότερη ενέργεια; ($\Delta E_{4\rightarrow 2} = 0{,}4087 \times 10^{-18}$ J) ($\Delta E_{5\rightarrow 3} = 0{,}155 \times 10^{-18}$ J)

Από τι αποτελείται το Φως (1873)

- Ο James Maxwell έδειξε θεωρητικά ότι το ορατό φως αποτελείται από ηλεκτρομαγνητικά κύματα.

- Ηλεκτρομαγνητικό κύμα είναι η ταυτόχρονη διάδοση, μέσω της ταχύτητας του φωτός (c), ενός ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου. Τα διανύσματα του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου είναι κάθετα μεταξύ τους και κάθετα στη διεύθυνση διάδοσης του κύματος.



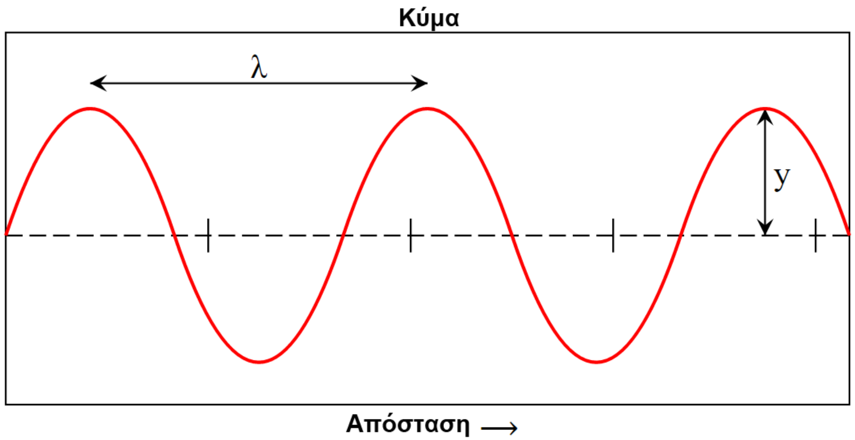
Φως

- ✓ Φως είναι ένα είδος ακτινοβολίας.
- ✓ Ακτινοβολία είναι η εκπομπή και διάδοση ενέργειας μέσα στο χώρο υπό τη μορφή κυμάτων.
- ➢ Το φως μπορεί να θεωρηθεί είτε σαν κύμα ή σαν σωματίδιο (διττή φύση του φωτός).
- ➢ Τα σωματίδια του φωτός ονομάζονται φωτόνια και αποτελούν μικροσκοπικά ενεργειακά πακέτα (κβάντα)

Κύμα - Μήκος Κύματος (λ)

- Κύμα ονομάζεται κάθε μηχανισμός διάδοσης μιας διαταραχής που μεταφέρει ενέργεια και ορμή με ορισμένη ταχύτητα

- Το μήκος κύματος (λ) είναι: η απόσταση που διανύει το κύμα για χρόνο ίσο με την περίοδο



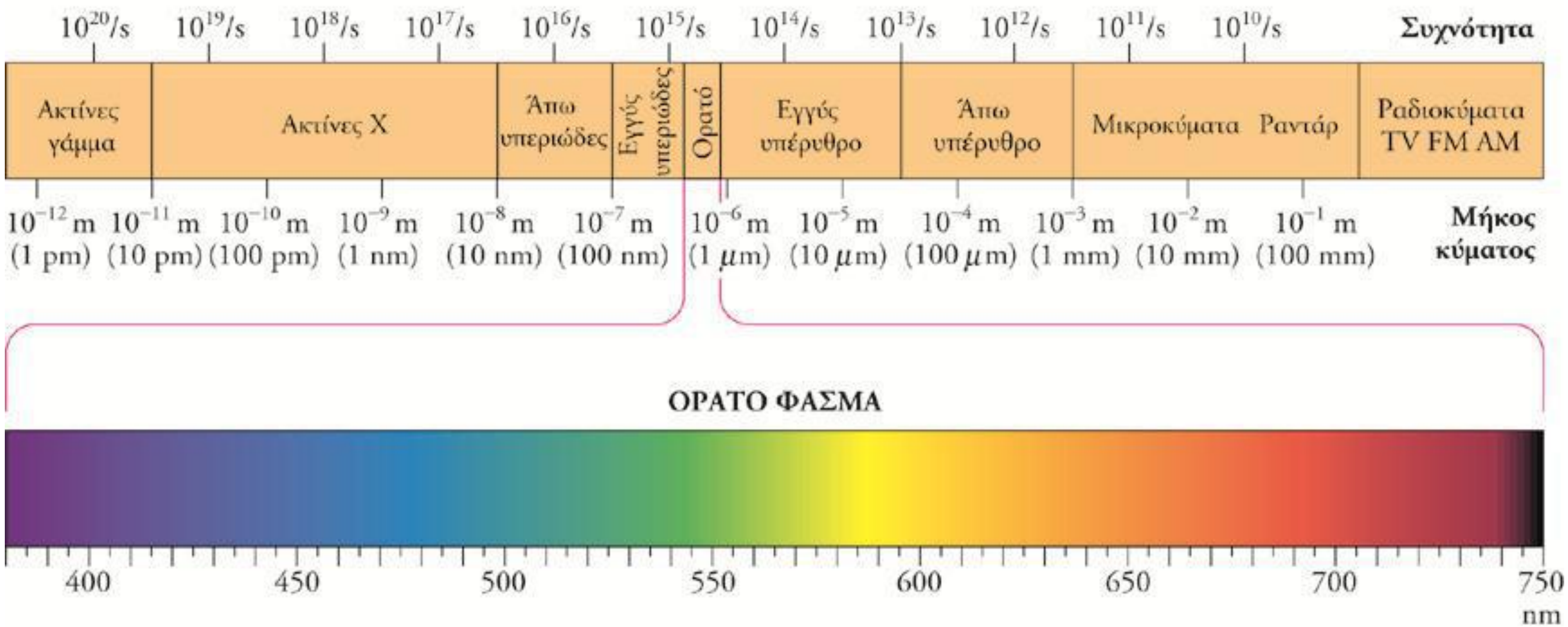
ταχύτητα διάδοσης
$c = 2{,}997925 \times 10^{10}$ cm/s

- Συνδέεται με τη συχνότητα (ν) μέσω της ταχύτητας του φωτός

$$\nu = c/\lambda$$

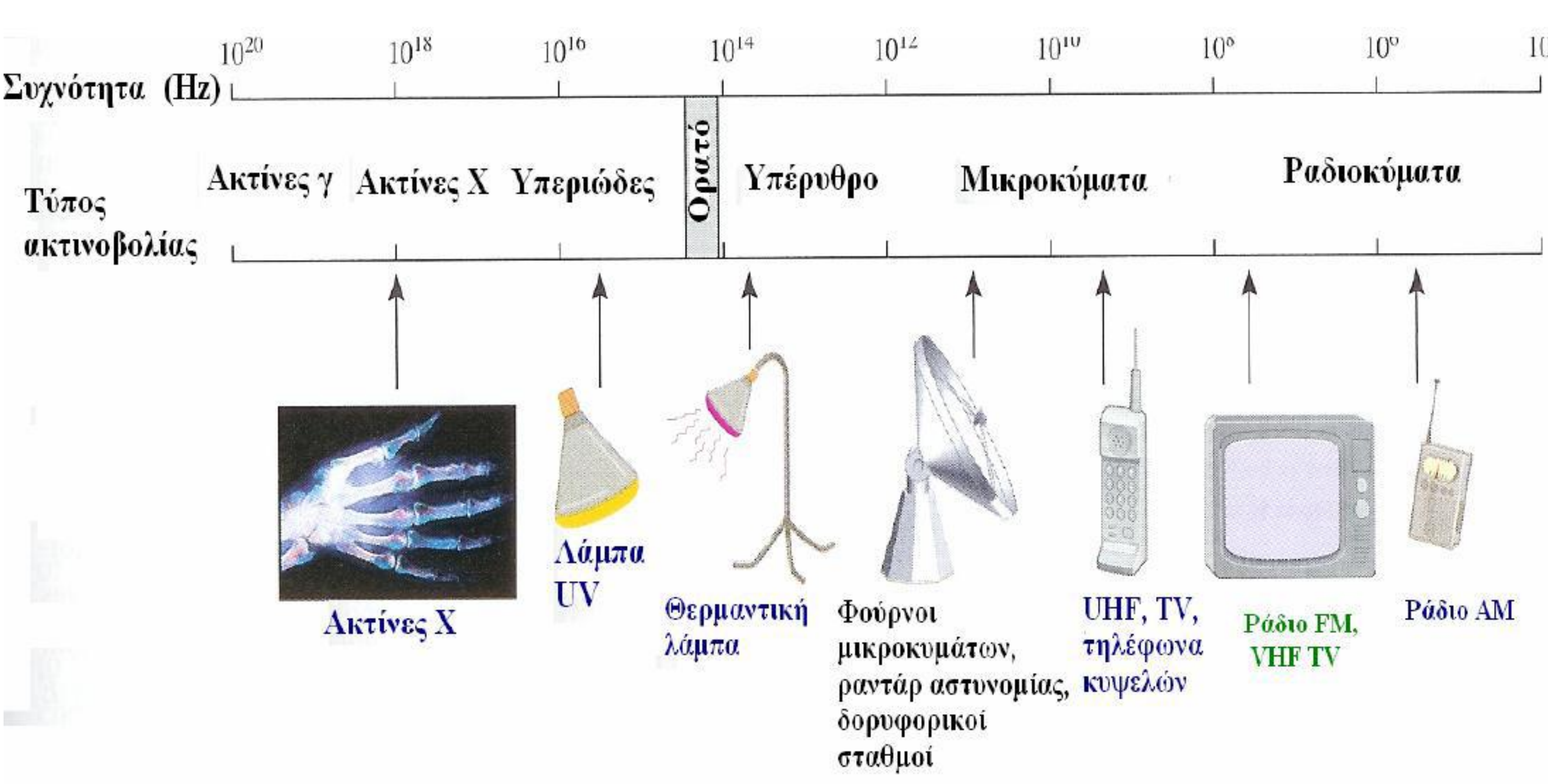
- Συχνότητα (ν) είναι ο αριθμός των εναλλαγών της ταλάντωσης ανά s, μονάδες: s^{-1} ή Hz
- Περίοδος (Τ), το χρονικό διάστημα στο οποίο η κυματική εικόνα επαναλαμβάνεται, $T = 1/\nu$

Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία

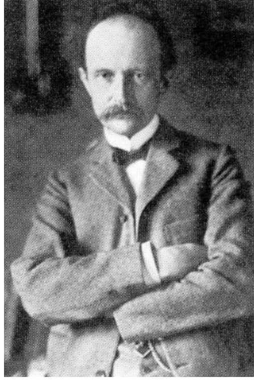


- ✓ Το ορατό φάσμα (Vis) αποτελεί ένα ελάχιστο τμήμα του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος.
- ✓ Ηλεκτρομαγνητικά κύματα υψηλών συχνοτήτων (μεγάλες ενέργειες) έχουν μικρά μήκη κύματος και αντίστροφα
- ✓ Τα όρια των διαφόρων περιοχών δεν καθορίζονται επακριβώς

Εφαρμογές


Συχνότητα (Hz)
10^{20} 10^{18} 10^{16} 10^{14} 10^{12} 10^{10}
Τύπος ακτινοβολίας
Ακτίνες γ
Ακτίνες Χ
Υπεριώδες
Ορατό
Υπέρυθρο
Μικροκύματα
Ραδιοκύματα
Ακτίνες Χ
Λάμπα UV
Θερμαντική λάμπα
Φούρνοι μικροκυμάτων, ραντάρ αστυνομίας, δορυφορικοί σταθμοί
UHF, TV, τηλέφωνα κυψελών
Ράδιο FM, VHF TV
Ράδιο ΑΜ

Η κβάντωση της ενέργειας του Planck (1900)

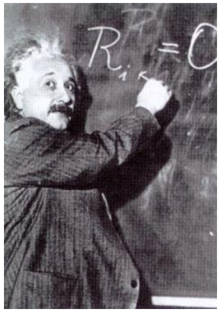


- Παρατηρώντας την ένταση της ακτινοβολίας που εκπέμπεται από ένα θερμό σώμα, το οποίο βρίσκεται σε διαφορετικές θερμοκρασίες, κατέληξε στον τύπο για την ενέργεια της ακτινοβολίας που εκπέμπεται από ένα υλικό:

$$\mathbf{E = n}\boldsymbol{hv}\mathbf{, \ n = 1,2,3,4,\ldots}$$

• Όπου ***h*** = 6,63 x 10^{-34} J s και ***v*** η συχνότητα της ακτινοβολίας.

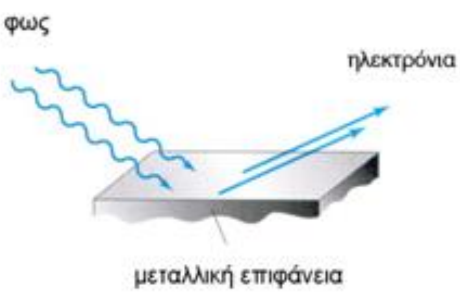
• Η ακτινοβολία από ένα υλικό εκπέμπεται όχι με συνεχή τρόπο, αλλά σε «πακέτα» ενέργειας *hv* (κβάντα), η τιμή των οποίων εξαρτάται από την v της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας.

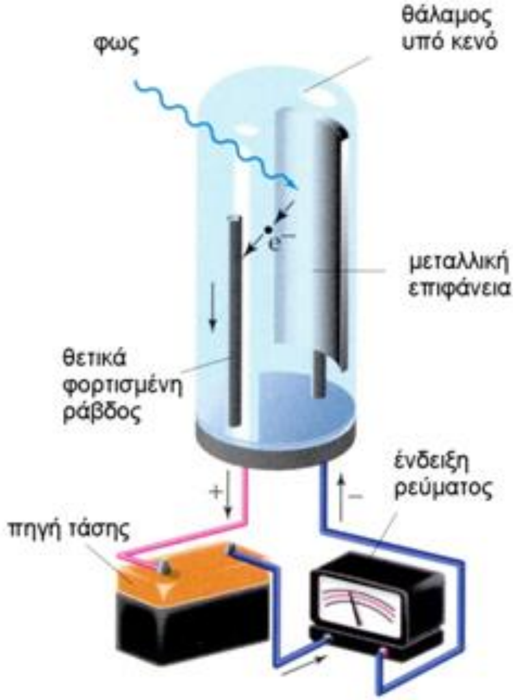


Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο του Einstein (1921)

Ο Einstein επέκτεινε τη θεωρία του Planck.

- Όταν πάνω σε μία επιφάνεια ενός μετάλλου προσπίπτει φως (φωτόνια) συγκεκριμένης συχνότητας τότε εκπέμπονται ηλεκτρόνια.





Διττή φύση του φωτός: σωματιδιακή και κυματική

- Υπέθεσε ότι εάν για οποιοδήποτε λόγο μεταβληθεί η ενέργεια ενός ατόμου κατά $h\nu$, τότε αυτή η μεταβολή της ενέργειας θα εκπεμφθεί υπό τη μορφή φωτεινής ενέργειας.
- Το φως αποτελείται από κβάντα ενέργειας (φωτόνια), δηλαδή από σωματίδια ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας με ενέργεια ίση με: $E = h\nu$.

✓ Για να γίνει πλήρης περιγραφή του φωτός απαιτείται να λάβουμε υπόψη μας τόσο την σωματιδιακή όσο και την κυματική του φύση.

➢ Ενέργεια του σωματιδίου φωτός (φωτόνιο), $E = mc^2$

➢ Συχνότητα του κύματος αυτής της ενέργειας, $E = h\nu$

Κυματική θεωρία της ύλης του de Broglie (1924)

- Κάθε κινούμενο μικρό σωματίδιο, π.χ. ηλεκτρόνιο, παρουσιάζει διττή φύση, σωματιδίου και κύματος.

$$\lambda = \frac{h}{m\,u} = \frac{h}{p}$$

εξίσωση de Broglie

- όπου
  m: ιδιότητα σωματιδίου
  λ: ιδιότητα κύματος
  u: κοινή ιδιότητα σωματιδίου και κύματος (ταχύτητα σωματιδίου, ταχύτητα διάδοσης κύματος).

Απόδειξη της εξίσωσης de Broglie

$E = h\,v$ ή $E = h\,c/\lambda$ (1)

η εξίσωση του Einstein: $E = m\,c^2$ (2)

Από τις σχέσεις (1) ^ (2) προκύπτει:

$$h\,c/\lambda = m\,c^2$$

οπότε, $\lambda = h/(mc)$

ή $\lambda = h/(mu) = h/p$, *για το ηλεκτρόνιο*

Τι είναι το ηλεκτρόνιο; Σωματίδιο ή κύμα;

- Η απάντηση είναι: ούτε σωματίδιο, ούτε κύμα, αλλά μια σύνθεση που εμπεριέχει ταυτόχρονα και τις σωματιδιακές και τις κυματικές ιδιότητες.

Αρχή της αβεβαιότητας (απροσδιοριστίας) του Heisenberg (1927)

- **Είναι αδύνατο να προσδιορισθεί με ακρίβεια συγχρόνως η θέση και η ορμή ενός μικρού σωματιδίου, π.χ. ηλεκτρονίου.**

➢ Όσο μεγαλύτερη ακρίβεια υπάρχει στον προσδιορισμό της θέσης ενός σωματιδίου τόσο μεγαλύτερο είναι το σφάλμα (μεγαλύτερη η αβεβαιότητα) στον προσδιορισμό της ορμής του.

$$\Delta x \,.\, \Delta p \;\geq\; h \,/\, 4\pi$$

- ***Αν υποθέσουμε ότι γνωρίζουμε με απόλυτη ακρίβεια τη θέση ενός μικρού σωματιδίου, δηλαδή $\Delta x=0$, τότε έχουμε απόλυτη άγνοια για την ορμή αυτού, δηλαδή $\Delta p=\infty$.***
- ***Επίσης, αν γνωρίζουμε με απόλυτη ακρίβεια την ορμή ενός μικρού σωματιδίου, δηλαδή $\Delta p=0$, τότε έχουμε απόλυτη άγνοια για τη θέση που βρίσκεται το σωματίδιο, δηλαδή $\Delta x=\infty$.***

Άσκηση

- Να υπολογισθεί η αβεβαιότητα στη θέση του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου. Δίνονται: η μέση ταχύτητα κίνησης του ηλεκτρονίου, $5x10^6$ m/s, με μία αβεβαιότητα 1% και η μάζα του ηλεκτρονίου $9{,}11x10^{-31}$ Kg. Σταθερά Planck, $6{,}63x10^{-34}$ J s.
- Να υπολογισθεί η αβεβαιότητα στον προσδιορισμό της ταχύτητας ενός σώματος μάζας 1g και ενός ηλεκτρονίου, όταν η αβεβαιότητα της θέσεως είναι 10^{-8} cm. Ποιο συμπέρασμα εξάγεται από το αποτέλεσμα; θέση του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου. Δίνονται: η μάζα του ηλεκτρονίου $9{,}11x10^{-31}$ Kg. Σταθερά Planck, $6{,}63x10^{-34}$ J s.

Κυματική εξίσωση του Schrödinger (1926)

- *Για την περιγραφή του ηλεκτρονίου χρησιμοποίησε μια* **κυματοσυνάρτηση** *σε αναλογία με την εξίσωση κύματος που χρησιμοποιείται για την περιγραφή ενός μηχανικού ή ηλεκτρομαγνητικού κύματος.*

$$H\,\Psi = E\,\Psi$$

- *Η κυματοσυνάρτηση αυτή συμβολίζεται με Ψ και είναι μια συνάρτηση της θέσης, του χρόνου και του μήκους κύματος*

$$\Psi = f(x, y, z, t, \lambda).$$

Κυματική εξίσωση του Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου (1926)

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2\mathrm{m\,E\kappa}}{\mathrm{h}^2}\Psi=0$$

- Η πιο πάνω εξίσωση προκύπτει από την

$$\frac{-\mathrm{h}^2}{8\pi^2\mathrm{m}}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)+\mathrm{V}\Psi=\mathrm{E}\Psi$$

Κυματική εξίσωση του Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου (1926)

$$\frac{-h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)+V\Psi=E\Psi$$

$$H=\underbrace{\boxed{\frac{-h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)}}_{\text{κινητική ενέργεια e}}-\underbrace{\boxed{\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}}}_{\text{δυναμική ενέργεια e}}$$

όπου

m: μάζα του ηλεκτρονίου
E: συνολική ενέργεια του ηλεκτρονίου
V: η δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου
Eκ: η κινητική ενέργεια του ηλεκτρονίου
h: η σταθερά του Planck

r: απόσταση e πυρήνα
ε_o: διηλεκτρική σταθερά
Z: το φορτίο του πυρήνα
e: το φορτίο του e

Εξίσωση του Schrödinger

- *Για να είναι αποδεκτή μία λύση Ψ, οι κυριότερες προϋποθέσεις που πρέπει να πληρούνται είναι:*

- *να είναι μονότιμη, να έχει δηλαδή μόνο μία τιμή για κάθε σημείο του χώρου.*
- *να είναι συνεχής, να μην αλλάζει απότομα τιμή σε κοντινά σημεία.*
- *να είναι πεπερασμένη, να μη γίνεται άπειρη σε κανένα σημείο του χώρου.*
- *να είναι κανονικοποιημένη, το άθροισμα δηλαδή όλων των πιθανοτήτων να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε κάποιο σημείο του χώρου να ισούται με μονάδα.*

Εξίσωση του Schrödinger

- *Η ολική ενέργεια του ηλεκτρονίου μπορεί να πάρει μόνο κάποιες συγκεκριμένες τιμές, οι οποίες αντιστοιχούν στις αποδεκτές λύσεις Ψ.*
- *Ακριβείς λύσεις μπορούν να προκύψουν μόνο για το άτομο του υδρογόνου καθώς και για τα υδρογονοειδή ιόντα (He^+, Li^{2+} κλπ.)*
- *Οι αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης ονομάζονται κυματικές συναρτήσεις ή ατομικά τροχιακά (Ψ).*
- *Το τροχιακό Ψ, δεν έχει καμία φυσική σημασία και μπορεί να λάβει θετικές, αρνητικές, μηδέν, φανταστικές ή μιγαδικές τιμές. Ωστόσο, μπορούμε να πούμε ότι εκφράζει την παρουσία (όταν $\Psi \neq 0$) ή την απουσία του ηλεκτρονίου (όταν $\Psi = 0$) σε μια ορισμένη περιοχή του χώρου γύρω από τον πυρήνα.*

Εξίσωση του Schrödinger

- *Το τετράγωνο της κυματοσυνάρτησης, Ψ^2, μας δίνει την πιθανότητα να βρούμε το ηλεκτρόνιο σε αυτό το σημείο και επομένως μπορεί να μας δώσει την πυκνότητα του φορτίου (ηλεκτρονιακού νέφους) $(-e\ \Psi^2)$ σε κάθε σημείο του χώρου.*

- *Το γινόμενο $\Psi^2\ dV$, μας δίνει την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε ένα σημείο ενός στοιχειώδους χώρου* dV.

- *Για σφαιρική δομή (άτομο) $V = 4/3\ \pi r^3$, άρα $dV/dr = 4\pi r^2$ και έτσι $\Psi^2\ dV/dr = 4\pi r^2\ |\Psi|^2$ είναι η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε ένα στοιχειώδη χώρο* dV

Ασκήσεις

1. Ποια από τα παρακάτω είναι υδρογονοειδή; $_1H^+$, $_2He^-$, $_2He^+$, $_3Li^+$, $_3Li^{2+}$

2. Η κυματοσυνάρτηση Ψ για το άτομο του υδρογόνου έχει τις τιμές Ψ=0.1 στο σημείο Α και Ψ=-0.3 στο Β. Που υπάρχει μεγαλύτερη πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο;

3. Σε μια περιοχή γύρω από ένα σημείο Α η πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους είναι μεγαλύτερη από αυτή που είναι γύρω από ένα σημείο Β. Τι σημαίνει αυτό;

Α. Στην περιοχή Β κινούνται λιγότερα ηλεκτρόνια από ότι στην περιοχή Α.

Β. Τα ηλεκτρόνια ξοδεύουν λιγότερο χρόνο στην περιοχή Β.

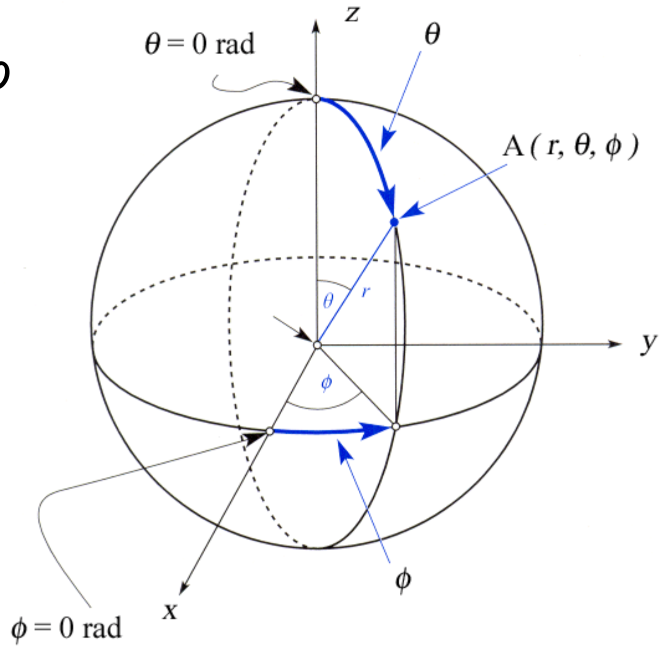
Γ. Το σημείο Β βρίσκεται πιο μακριά από τον πυρήνα του ατόμου.

Δ. Η τιμή της κυματοσυνάρτησης Ψ στο σημείο Α είναι μεγαλύτερη από ότι η αντίστοιχη τιμή στο σημείο Β.

Εξίσωση Schrödinger με πολικές συντεταγμένες

- *Σχετικώς εύκολη επίλυση για το άτομο του υδρογόνου και τα υδρογονοειδή, όπου η επίδραση του πεδίου του πυρήνα σε συγκεκριμένο ηλεκτρόνιο δεν επηρεάζεται από την παρουσία άλλων ηλεκτρονίων.*
- *Αλλά η επίλυση διευκολύνεται περαιτέρω αν αντί των καρτεσιανών συντεταγμένων χρησιμοποιηθούν οι πολικές.*
- *Σχέσεις μεταξύ καρτεσιανών και πολικών:*

$$x = r.\eta\mu\theta.\sigma\upsilon\nu\varphi$$
$$y = r.\eta\mu\theta.\eta\mu\varphi$$
$$z = r.\sigma\upsilon\nu\theta$$



όπου Α: το πολικό σημείο και r, η απόσταση του από το μηδέν.
r: πολική ακτίνα
θ: ζενιθιακή γωνία
φ: αζιμουθιακή γωνία

Εξίσωση Schrödinger με πολικές συντεταγμένες

- Με την αλλαγή του συστήματος των συντεταγμένων η εξίσωση παίρνει την παρακάτω μορφή:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2\mathrm{m\,E\kappa}}{\mathrm{h}^2}\Psi=0$$

$$\Downarrow$$

$$\underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)}_{R(r)}+\underbrace{\frac{1}{r^2\eta\mu\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\eta\mu\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)}_{\Theta(\theta)}+\underbrace{\frac{1}{r^2\eta\mu^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}}_{\Phi(\varphi)}+\frac{8\pi^2\mathrm{m\,E\kappa}}{\mathrm{h}^2}\Psi=0$$

Εξίσωση Schrödinger με πολικές συντεταγμένες

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r).\Theta(\theta).\Phi(\varphi)$$

R(r): η αρχική κυματοσυνάρτηση η οποία δίνει την εξάρτηση της *Ψ* από την απόσταση από τον πυρήνα, *r*.

Θ(θ).Φ(φ): η γωνιακή κυματοσυνάρτηση η οποία δίνει την εξάρτηση της *Ψ* από τις γωνίες θ και φ.

Θ(θ): η γωνιακή ζενιθιακή συνιστώσα.

Φ(φ): η αζιμουθιακή συνιστώσα.

Οι Κβαντικοί Αριθμοί

Για να προκύψει ηλεκτρονικό νέφος με παραδεκτό μέγεθος, σχήμα και προσανατολισμό θα πρέπει να δοθούν σωστές τιμές ενέργειας στην εξίσωση Schrödinger. Οι πραγματικές τιμές ενέργειας των ηλεκτρονίων δίνονται από τους συνδυασμούς των τριών κβαντικών αριθμών, n, l και m_l.

Οι κβαντικοί αριθμοί, n, l και m_l προκύπτουν από τις λύσεις των εξισώσεων *R*, *Θ* και *Φ*, αντίστοιχα, ως συνέπεια των απαιτήσεων που πρέπει να ικανοποιούν οι κυματοσυναρτήσεις, ώστε να είναι παραδεκτές.

Κύριος κβαντικός αριθμός (*n*)

- Ο **κύριος κβαντικός αριθμός *n*,** παίρνει ακέραιες τιμές n = 1, 2, 3, …, ∞.

- Καθορίζει:
- ✓ την στιβάδα στην οποία κινείται το ηλεκτρόνιο
- ✓ το μέγεθος του ηλεκτρονιακού νέφους (ή τροχιακού).
- ✓ Σε μεγάλο βαθμό και την ενέργεια του ηλεκτρονίου σε ένα άτομο.
- Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή του *n* τόσο πιο απομακρυσμένο από τον πυρήνα είναι, κατά μέσο όρο, το ηλεκτρονιακό νέφος.

Κύριος κβαντικός αριθμός *n*	**1**	**2**	**3**	**4**	**…..**
στιβάδα ή φλοιός	K	L	M	N	…..

Δευτερεύων ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός (*l*)

- Ο **δευτερεύων κβαντικός αριθμός *l*,** παίρνει τιμές ανάλογα με την τιμή που έχει ο *n*, δηλαδή, *l* = 0, 1, 2, 3, …, n-1.

- Καθορίζει:

✓ Το σχήμα του ηλεκτρονιακού νέφους (τροχιακού)

Αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός *l*	**0**	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**…..**
υποστοιβάδα	s	p	d	f	g	h	…..
τροχιακό	s	p	d	f	g	h	…..
αριθμός τροχιακών (2*l* +1)	1	3	5	7	9	11	…..

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l)

- Ο **μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_l,** παίρνει τιμές ανάλογα με την τιμή που έχει ο l, δηλαδή, $-l$, $(-l+1)$, …, 0, …,$(l-1)$, $+l$.

- Καθορίζει:

✓ τον προσανατολισμό του ηλεκτρονιακού νέφους (τροχιακού)

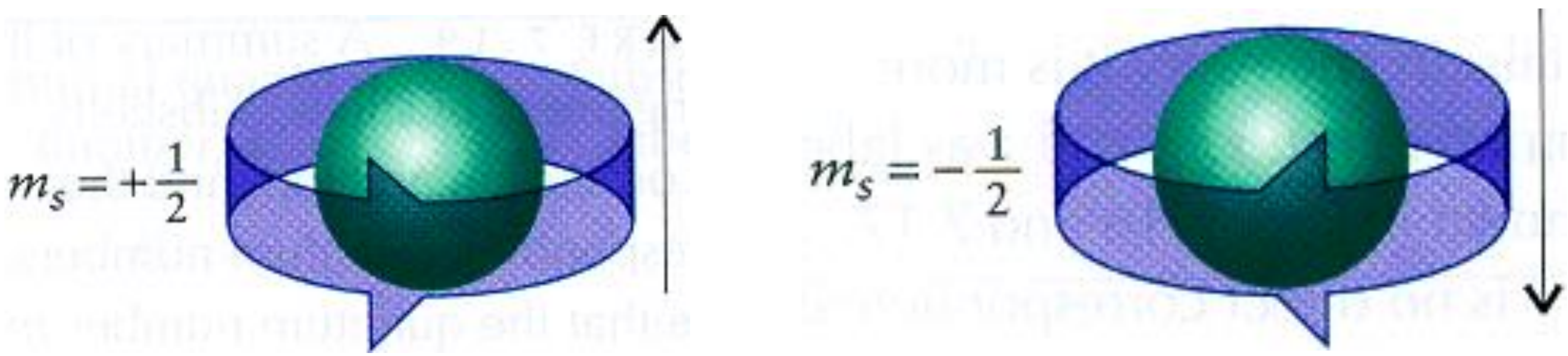
❖ *Η ονομασία «μαγνητικός» οφείλεται στη δημιουργία μαγνητικού πεδίου λόγω της κίνησης του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα του ατόμου.*

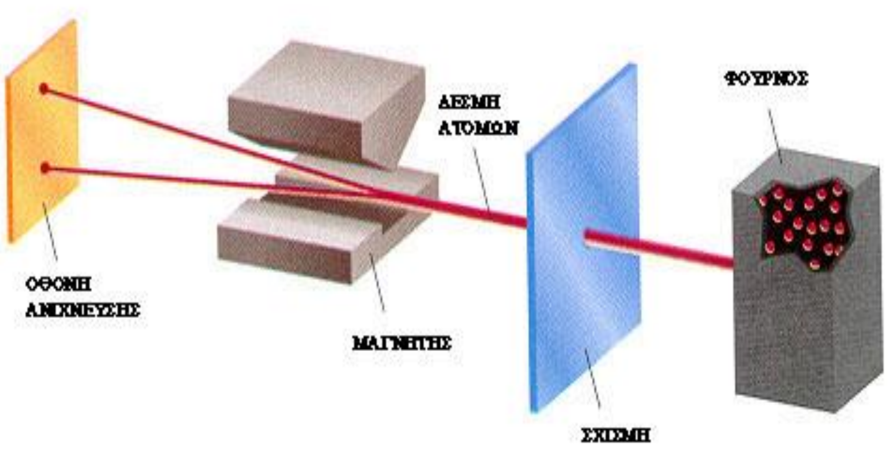
Μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_l	**+1**	**0**	**-1**
τροχιακά p	p_x	p_z	p_y

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_l	**+2**	**+1**	**0**	**-1**	**-2**
τροχιακά d	d_{x2-y2}	d_{xz}	d_{z2}	d_{yz}	d_{xy}

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός του spin (m_s)

- Ο **μαγνητικός κβαντικός αριθμός spin m_s**, παίρνει τιμές +1/2 ή -1/2, είναι δηλαδή ανεξάρτητος από τις τιμές των άλλων κβαντικών αριθμών.
- Λόγω της ιδιοπεριστροφής του ηλεκτρονίου.





Πείραμα Stern-Gerlach για την απόδειξη του spin:

Δέσμη ατόμων με μονήρες ηλεκτρόνιο (π.χ. αλκαλίων) περνά από μια λεπτή σχισμή και στη συνέχεια από μαγνητικό πεδίο, οπότε διαχωρίζεται σε δύο επιμέρους δέσμες.

Η μια αντιστοιχεί σε άτομα με αριστερόστροφο spin ηλεκτρονίων και η άλλη σε δεξιόστροφο.

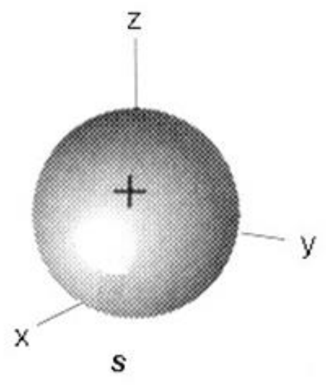
1^{η} Στιβάδα (Κ) – *1s*

- Το ατομικό τροχιακό που προκύπτει από τον ακόλουθο συνδυασμό *n* =1, *l* = 0 και m_l = 0, των κβαντικών αριθμών ονομάζεται *1s* ατομικό τροχιακό.

- Η εξίσωση Schrödinger με τις πολικές συντεταγμένες για το τροχιακό *1s* παίρνει την ακόλουθη μορφή:

$$\psi_{1s} = 2\left(\frac{z}{\alpha_0}\right)^{3/2} e^{-\rho} \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$, όπου $$\alpha_o = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2}$$ και $$\rho = \frac{zr}{\alpha_0}$$

- Δεν υπάρχει εξάρτηση της Ψ_{1s} από τις γωνίες θ και φ. Επομένως, η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο κάπου στο χώρο είναι η ίδια προς όλες τις κατευθύνσεις. Γι' αυτό το ηλεκτρονιακό νέφος του *1s* τροχιακού παριστάνεται με σφαίρα.



2^{η} Στιβάδα (L) – *2s και 2p*

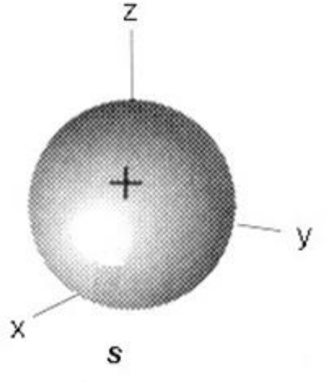
❖ Όταν ο *n* = 2, ο δευτερεύοντας κβαντικός αριθμός μπορεί να πάρει τιμές 0 και 1. Επομένως έχουμε τις παρακάτω περιπτώσεις συνδυασμών.

❖ **Περίπτωση $n = 2$, $l = 0$, $m_l = 0$**. Το ατομικό τροχιακό που προκύπτει ονομάζεται *2s* ατομικό τροχιακό.

➢ Η εξίσωση Schrödinger με τις πολικές συντεταγμένες για το τροχιακό *2s* παίρνει την ακόλουθη μορφή:

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

❖ Δεν υπάρχει εξάρτηση της Ψ_{2s} από τις γωνίες θ και φ. Επομένως, η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο κάπου στο χώρο είναι η ίδια προς όλες τις κατευθύνσεις. Γι' αυτό το ηλεκτρονιακό νέφος του *2s* τροχιακού παριστάνεται με σφαίρα.



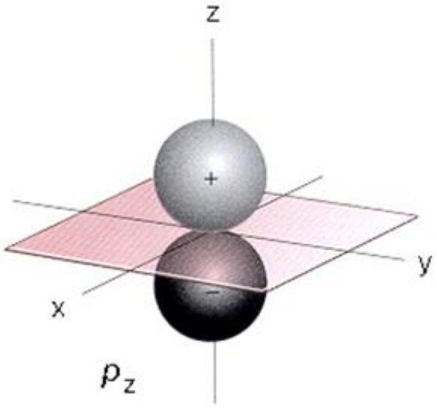
2^{η} Στιβάδα (L) – *2s και 2p*

❖ **Περίπτωση *n* = 2, *l* = 1, *m*$_l$ = 0**. Το ατομικό τροχιακό που προκύπτει ονομάζεται ***2p$_z$*** ατομικό τροχιακό.

➢ Η εξίσωση Schrödinger με τις πολικές συντεταγμένες για το τροχιακό *2p$_z$* παίρνει την ακόλουθη μορφή:

$$\psi_{2p_z} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho\, e^{-\rho/2}\, \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\, \sigma\upsilon\nu\, \theta$$

❖Υπάρχει εξάρτηση της Ψ_{2pz} από το συνημίτονο της γωνίας θ. Επομένως, η πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους δεν είναι ανεξάρτητη της κατεύθυνσης. Η απεικόνιση του τροχιακού *2p$_z$* φαίνεται στο διπλανό σχήμα.



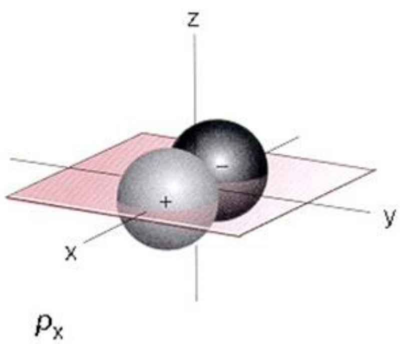
2^{η} Στιβάδα (L) – *2s και 2p*

❖ **Περίπτωση *n* = 2, *l* = 1, m_l = 1**. Το ατομικό τροχιακό που προκύπτει ονομάζεται ***2p$_\chi$*** ατομικό τροχιακό.

➤ Η εξίσωση Schrödinger με τις πολικές συντεταγμένες για το τροχιακό *2p$_\chi$* παίρνει την ακόλουθη μορφή:

$$\Psi_{2p_x} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho\, e^{-\rho/2}\, \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\ \sigma\upsilon\nu\,\varphi \cdot \eta\mu\,\theta$$

❖Υπάρχει εξάρτηση της Ψ_{2px} από το συνημίτονο της γωνίας φ και το ημίτονο της γωνίας θ. Επομένως, η πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους δεν είναι ανεξάρτητη της κατεύθυνσης. Η απεικόνιση του τροχιακού *2p$_\chi$* φαίνεται στο διπλανό σχήμα.



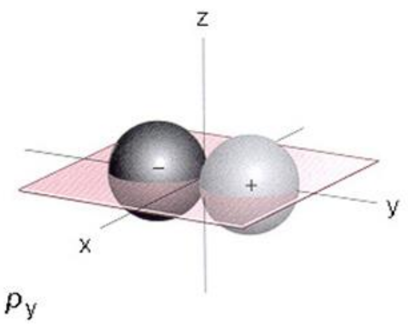
$2^{η}$ Στιβάδα (L) – *2s2p*

❖ **Περίπτωση $n = 2$, $l = 1$, $m_l = -1$**. Το ατομικό τροχιακό που προκύπτει ονομάζεται $2p_y$ ατομικό τροχιακό.

➢ Η εξίσωση Schrödinger με τις πολικές συντεταγμένες για το τροχιακό $2p_y$ παίρνει την ακόλουθη μορφή:

$$\psi_{2p_y} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho\, e^{-\rho/2} \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\, ημ\,θ \cdot ημ\,φ$$

❖Υπάρχει εξάρτηση της $Ψ_{2py}$ από το ημίτονο της γωνίας θ και το ημίτονο της γωνίας φ. Επομένως, η πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους δεν είναι ανεξάρτητη της κατεύθυνσης. Η απεικόνιση του τροχιακού $2p_y$ φαίνεται στο διπλανό σχήμα.



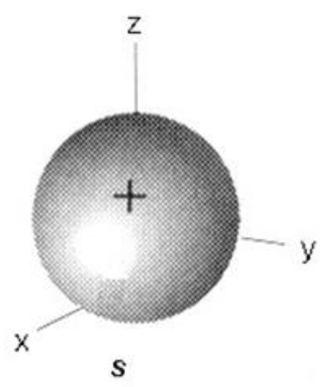
$3^{η}$ Στιβάδα (Μ) – *3s, 3 p και 3d*

- Όταν ο *n* = 3, ο δευτερεύοντας κβαντικός αριθμός μπορεί να πάρει τιμές 0, 1 και 2. Επομένως έχουμε τις παρακάτω περιπτώσεις συνδυασμών.
- **Περίπτωση $n = 3$, $l = 0$, $m_l = 0$**. Το ατομικό τροχιακό που προκύπτει ονομάζεται *3s* ατομικό τροχιακό.

- Η εξίσωση Schrödinger με τις πολικές συντεταγμένες για το τροχιακό *3s* παίρνει την ακόλουθη μορφή:

$$\Psi_{3s} = \frac{2}{81\sqrt{3}}\left(\frac{z}{\alpha_0}\right)^{3/2}(27-18\rho+2\rho^2)e^{-\rho/3}\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

- Δεν υπάρχει εξάρτηση της Ψ_{3s} από τις γωνίες θ και φ. Επομένως, η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο κάπου στο χώρο είναι η ίδια προς όλες τις κατευθύνσεις. Γι' αυτό το ηλεκτρονιακό νέφος του *2s* τροχιακού παριστάνεται με σφαίρα.



3^{η} Στιβάδα (M) – *3s, 3p και 3d*

❖ **Περιπτώσεις:**

✓ ***n* = 3, *l* = 1, *m*$_l$ = 0** → $3p_z$ ατομικό τροχιακό.

✓ ***n* = 3, *l* = 1, *m*$_l$ = 1** → $3p_x$ ατομικό τροχιακό.

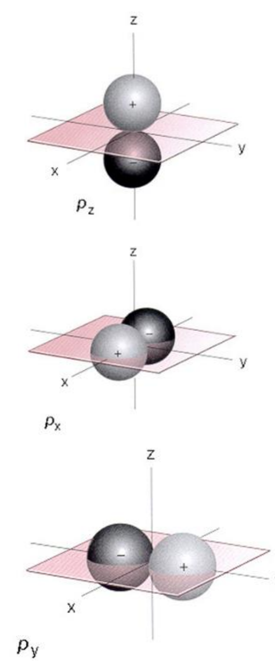
➢ ***n* = 3, *l* = 1, *m*$_l$ = -1** → $3p_y$ ατομικό τροχιακό.

➢ Οι εξισώσεις Schrödinger με τις πολικές συντεταγμένες για τα τροχιακά $3p_z$ $3p_x$ $3p_z$ παίρνουν τις ακόλουθες μορφές:

$$\psi_{3p_z} = \frac{4}{81\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{\alpha_0}\right)^{3/2} (6\rho - \rho^2)\, e^{-\rho/3}\, \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\ \text{συν}\,\theta$$

$$\psi_{3p_x} = \frac{4}{81\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{\alpha_0}\right)^{3/2} (6\rho - \rho^2)\, e^{-\rho/3}\, \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\ \text{συν}\,\varphi\cdot\text{ημ}\,\theta$$

$$\psi_{3p_y} = \frac{4}{81\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{\alpha_0}\right)^{3/2} (6\rho - \rho^2)\, e^{-\rho/3}\, \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\ \text{ημ}\,\theta\cdot\text{ημ}\,\theta$$



❖Υπάρχει εξάρτηση των Ψ_{3pz}, Ψ_{3px} και Ψ_{3py} από τις γωνίες φ και θ. Επομένως, οι πυκνότητες των ηλεκτρονιακών τους νεφών δεν είναι ανεξάρτητη της κατεύθυνσης. Οι απεικονίσεις των τροχιακών $3p_z$, $3p_x$και $3p_y$ είναι παρόμοιες με αυτών των 2p.

$3^{η}$ Στιβάδα (Μ) – *3s, 3p και 3d*

❖ **Περιπτώσεις:**

✓ ***n* = 3, *l* = 2, *m*$_l$ = 0** → $3d_{z^2}$ ατομικό τροχιακό.

✓ ***n* = 3, *l* = 2, *m*$_l$ = 1** → $3d_{xz}$ ατομικό τροχιακό.

✓ ***n* = 3, *l* = 2, *m*$_l$ = -1** → $3d_{yz}$ ατομικό τροχιακό.

✓ ***n* = 3, *l* = 2, *m*$_l$ = 2** → $3d_{x^2-y^2}$ ατομικό τροχιακό.

✓ ***n* = 3, *l* = 2, *m*$_l$ = -2** → $3d_{xy}$ ατομικό τροχιακό.

➢ Οι εξισώσεις Schrödinger με τις πολικές συντεταγμένες για τα *3d* ατομικά τροχιακά παίρνουν τις ακόλουθες μορφές:

$$\psi_{3d_{z^2}} = \frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\,(3\,\text{συν}^2\theta - 1)$$

$$\psi_{3d_{xz}} = \frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3}\, 2^{-3/2}\frac{1}{4}\sqrt{\frac{30}{\pi}}\,\text{ημ}\theta\cdot\text{συν}\theta\cdot\text{συν}\varphi$$

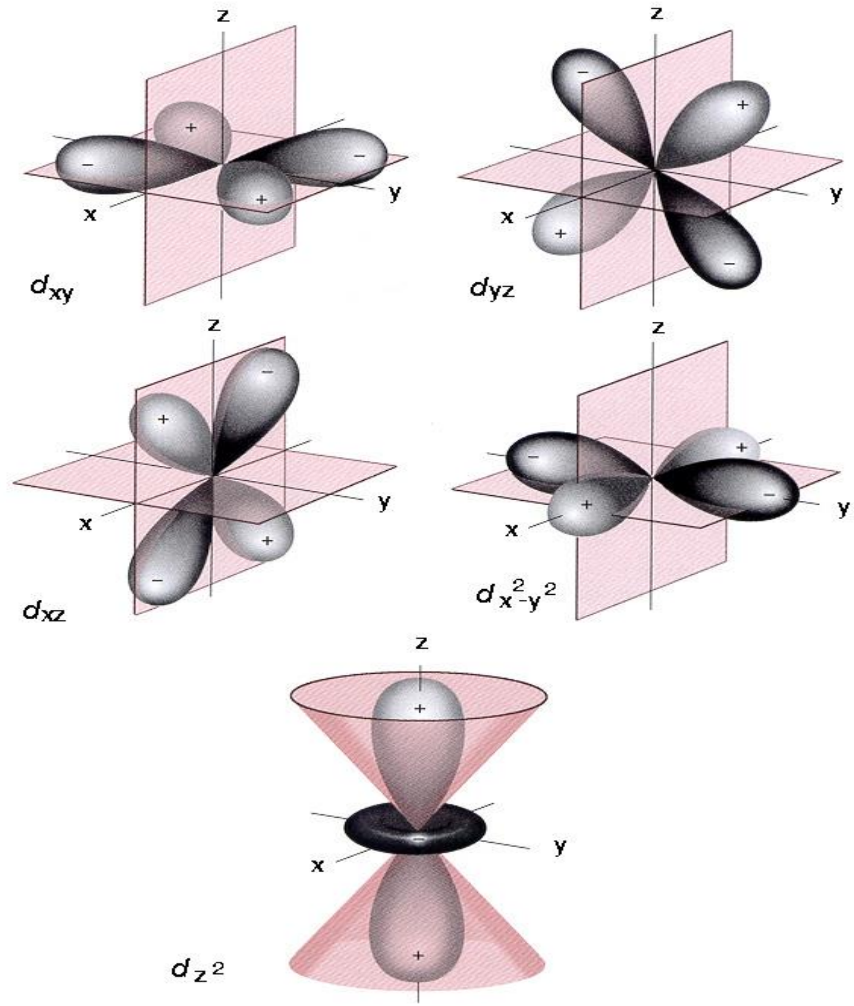
$$\psi_{3d_{yz}} = \frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3}\, 2^{-3/2}\frac{1}{4}\sqrt{\frac{30}{\pi}}\,\text{ημ}\theta\cdot\text{συν}\theta\cdot\text{ημ}\varphi$$

$$\psi_{3d_{x^2-y^2}} = \frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\,\text{ημ}^2\theta\cdot\text{συν}\,2\varphi$$

$$\psi_{3d_{xy}} = \frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\,\text{ημ}^2\theta\cdot\text{ημ}\,2\varphi$$

$3^η$ Στιβάδα (M) – *3s, 3p και 3d*

- Υπάρχει εξάρτηση όλων των $Ψ_{3d}$ από τις γωνίες φ και θ. Επομένως, οι πυκνότητες των ηλεκτρονιακών τους νεφών δεν είναι ανεξάρτητη της κατεύθυνσης. Οι απεικονίσεις των τροχιακών *3d* φαίνονται στο διπλανό σχήμα.



$4^η$ Στιβάδα (Ν) – *4s, 4 p, 4d και 4f*

❖ Όταν ο *n* = 4, οι παραδεκτές λύσεις της εξίσωσης Schrödinger είναι οι ακόλουθες:

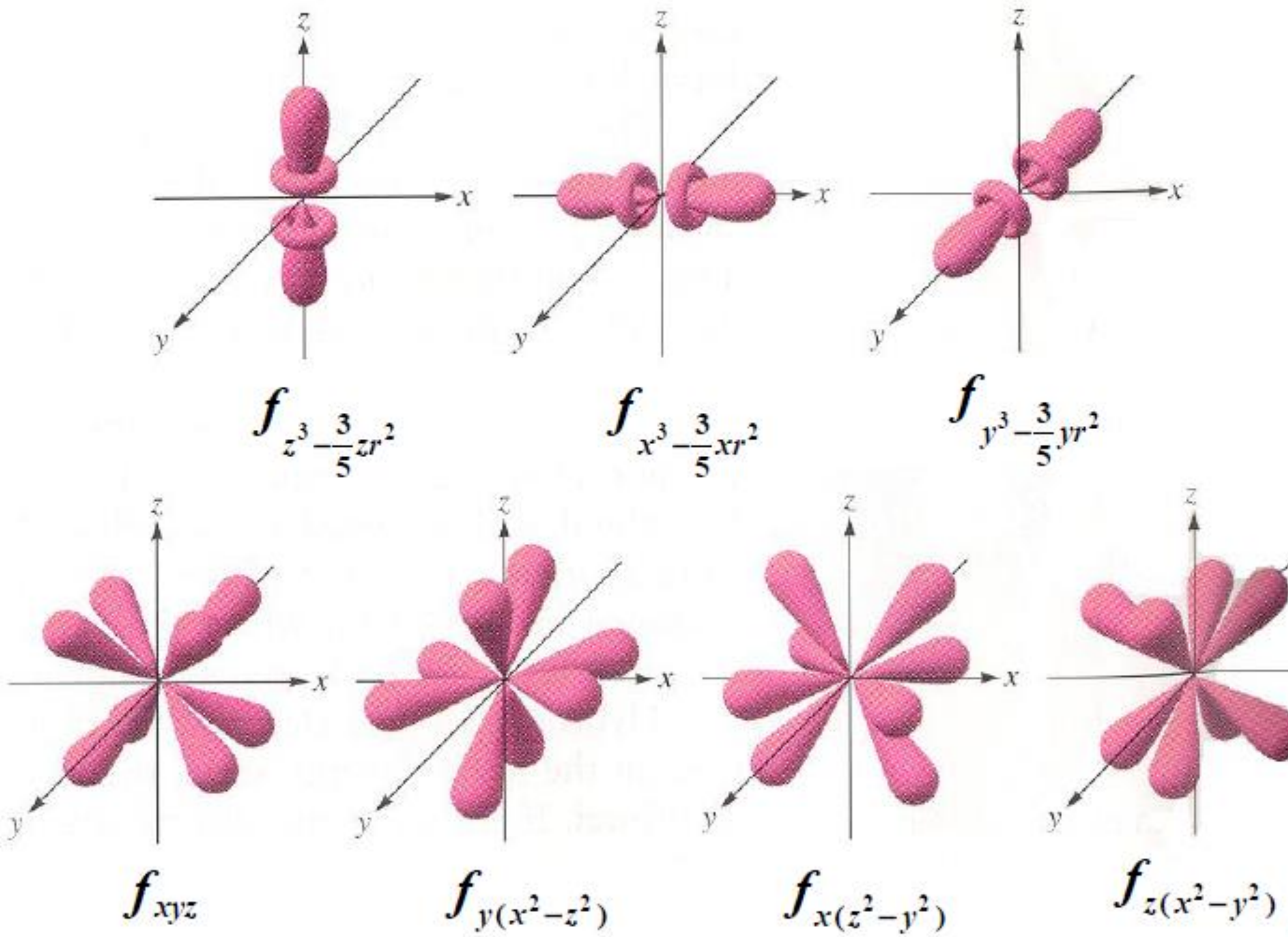
- ✓ $n = 4, l = 0, m_l = 0$ → 4s ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 1, m_l = 0$ → $4p_z$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 1, m_l = 1$ → $4p_x$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 1, m_l = -1$ → $4p_y$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 2, m_l = 0$ → $4d_{z^2}$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 2, m_l = 1$ → $4d_{xz}$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 2, m_l = -1$ → $4d_{yz}$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 2, m_l = 2$ → $4d_{x^2-y^2}$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 2, m_l = -2$ → $4d_{xy}$ ατομικό τροχιακό.

❖ Τα 4p και 4d τροχιακά παρουσιάζουν μεγάλες αναλογίες με το σχήμα των τροχιακών 2p, 3p και 3d.

$4^η$ Στιβάδα (N) – *4s, 4 p, 4d και 4f*

- ✓ ***n* = 4, *l* = 3, *m*$_l$ = 0** → $f_{z^3-3/5\,zr^2}$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ ***n* = 4, *l* = 3, *m*$_l$ = 1** → $f_{y^3-3/5\,yr^2}$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ ***n* = 4, *l* = 3, *m*$_l$ = -1** → $f_{x^3-3/5\,xr^2}$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ ***n* = 4, *l* = 3, *m*$_l$ = 2** → $f_{z(x^2-y^2)}$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ ***n* = 4, *l* = 3, *m*$_l$ = -2** → $f_{y(x^2-z^2)}$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ ***n* = 4, *l* = 3, *m*$_l$ = 3** → $f_{x(z^2-y^2)}$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ ***n* = 4, *l* = 3, *m*$_l$ = -3** → f_{xyz} ατομικό τροχιακό.

$4^{η}$ Στιβάδα (N) – *4f τροχιακά*



Ασκήσεις

4. Η επίλυση της εξίσωσης Schrödinger απαιτεί την εισαγωγή των κβαντικών αριθμών:

Α. n, l

Β. n, l και m_l

Γ. n, l, m_l και m_s

Δ. μόνο του αζιμουθιακού l.

5. Ποιο από τα παρακάτω σύνολα κβαντικών αριθμών δεν είναι επιτρεπτό;

Α. $n = 3$, $l = 2$, $m_l = -2$, $m_s = +½$

Β. $n = 4$, $l = 4$, $m_l = -4$, $m_s = +½$

Γ. $n = 5$, $l = 4$, $m_l = -3$, $m_s = -½$

Δ. $n = 3$, $l = 0$, $m_l = -1$, $m_s = +½$

6. Να αναγραφούν οι τιμές όλων των κβαντικών αριθμών για ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται σε τροχιακό 5g. Να εξηγήσετε γιατί δεν είναι δυνατόν να έχουμε 3f και 4g τροχιακά.

Ασκήσεις

7. Ποιος είναι ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων που μπορεί να τοποθετηθεί: α) στη στιβάδα με n = 4, β) στην υποστιβάδα p, γ) σε ένα άτομο όπου η μεγαλύτερη τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού είναι n = 4;

8. Ο συμβολισμός d_{z^2} αποκαλύπτει τις τιμές:

Α. του δευτερεύοντος κβαντικού αριθμού,

Β. του μαγνητικού κβαντικού αριθμού,

Γ. του κύριου και του δευτερεύοντος κβαντικού αριθμού,

Δ. του αζιμουθιακού και του μαγνητικού κβαντικού αριθμού.

9. α) Πώς συμβολίζεται ένα τροχιακό με τους κβαντικούς αριθμούς n=4, l=2 και m_l=1.

β) Ποιοι είναι οι 3 κβαντικοί αριθμοί που αντιστοιχούν σε ένα τροχιακό 5p.

γ) Πόσα τροχιακά έχουν τις τιμές n=5 και l=2

Ασκήσεις

10. Όταν ο κύριος κβαντικός αριθμός είναι 3, ποιες τιμές μπορούν να πάρουν κβαντικοί αριθμοί l και m_l;

11. Πόσα s, p, d τροχιακά διαθέτει ο φλοιός M ενός ατόμου.

12. Πόσα τροχιακά 2s, 2d, 3f, 4p και 5d μπορούν να υπάρχουν σε ένα άτομο; Να δικαιολογήσετε.

13. Πόσα ηλεκτρόνια στη θεμελιώδη κατάσταση του $_{36}Kr$ έχουν μαγνητικό κβαντικό αριθμό ml = +1; Πόσα ηλεκτρόνια έχουν l =+1;

Κομβικές επιφάνειες

- Από τα σχήματα των ατομικών τροχιακών αλλά και από τις μαθηματικές εκφράσεις είναι φανερό ότι υπάρχουν επιφάνειες όπου το Ψ^2 μηδενίζεται, πάνω στις οποίες δηλαδή είναι αδύνατο να βρεθεί το e-. Οι επιφάνειες αυτές ονομάζονται κομβικές επιφάνειες.

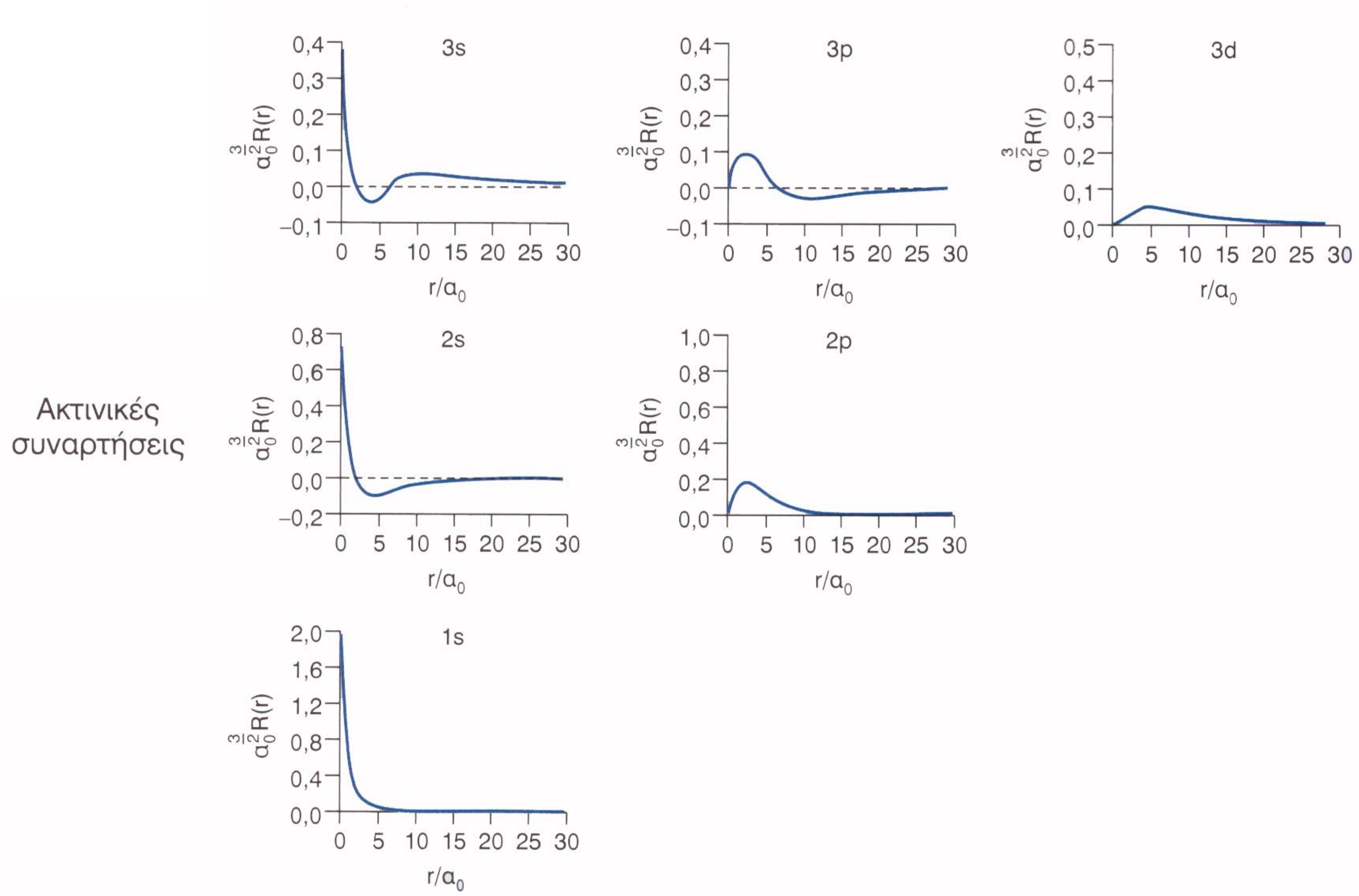
- Από τη γνωστή σχέση: $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r).\Theta(\theta).\Phi(\varphi)$

για $\Psi = 0$ θα πρέπει είτε $R(r) = 0$ ή $\Theta(\theta).\Phi(\varphi) = 0$

- ✓ Είναι δυνατόν να βρεθεί ο αριθμός και το είδος των κομβικών επιφανειών καθορίζοντας τις συνθήκες υπό τις οποίες $R(r) = 0$ ή $\Theta(\theta).\Phi(\varphi) = 0$

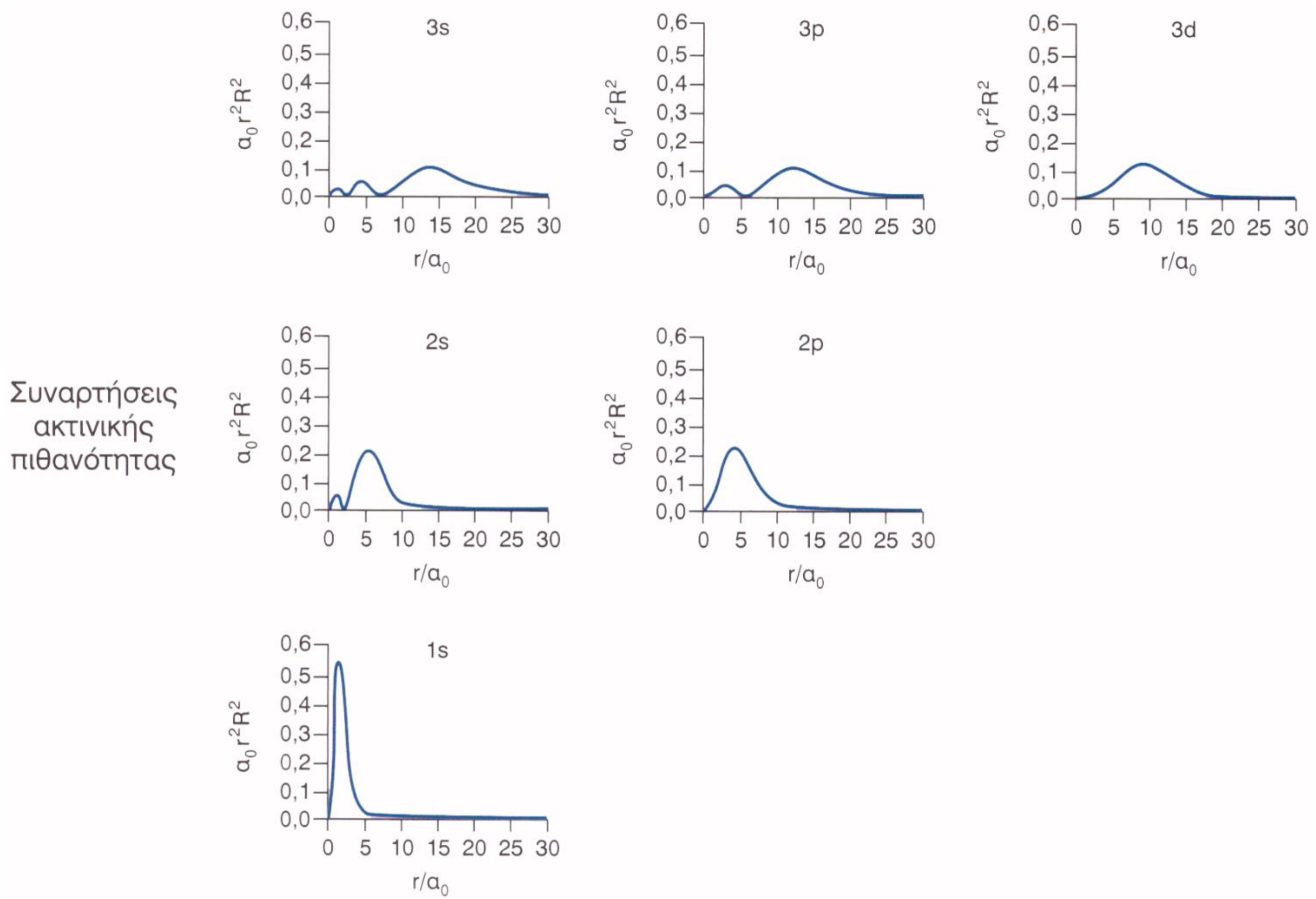
Ακτινικοί κόμβοι

- Προκύπτουν από το μηδενισμό της ακτινικής συνάρτησης.
- Εμφανίζονται όταν η ακτινική συνάρτηση αλλάζει πρόσημο



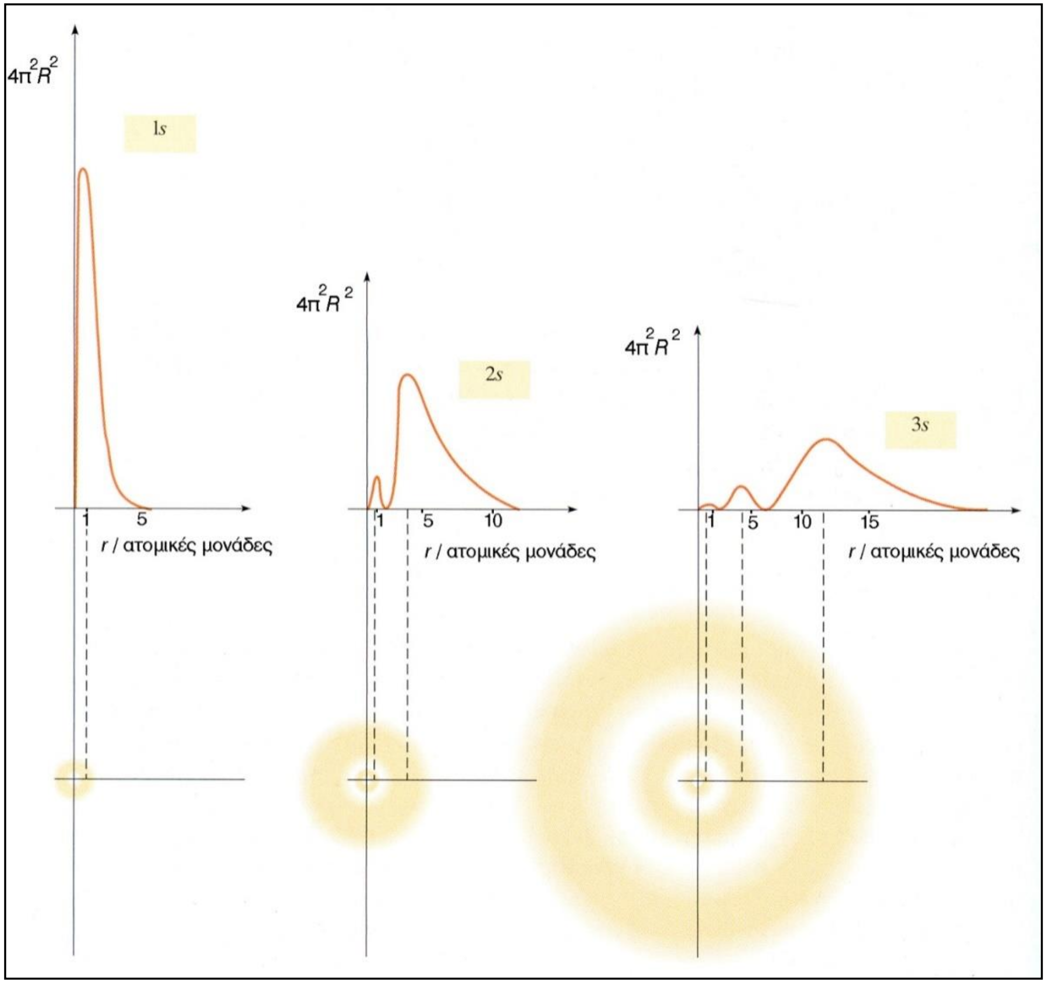
Ακτινικοί κόμβοι

- Διαγράμματα συναρτήσεων ακτινικής πιθανότητας, $R^2 = f(r)$, σε συνάρτηση με την ατομική ακτίνα μας δείχνουν σε ποια απόσταση από τον πυρήνα βρίσκονται οι σφαιρικές κομβικές επιφάνειες και τον αριθμό τους.



Ακτινικοί κόμβοι

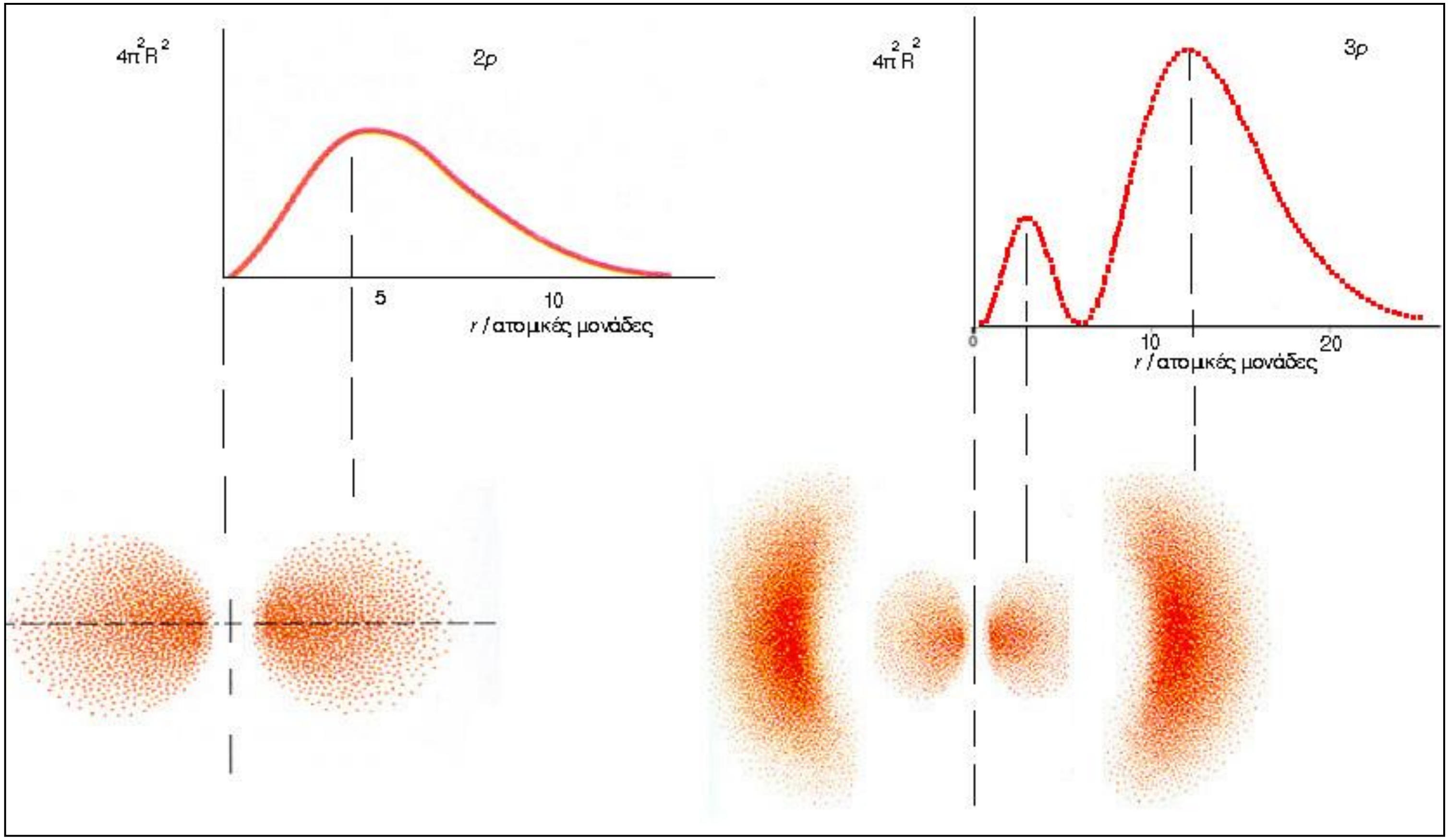
- Ο αριθμός σφαιρικών κομβικών επιφανειών ισούται με n -l -1



- Γραφική παράσταση της συνάρτησης ακτινικής πιθανότητας $4\pi r^2R^2$ για τα τροχιακά 1s, 2s και 3s και σχηματική παρουσίαση της αντίστοιχης κατανομής της ηλεκτρονιακής πυκνότητας (με τις λευκές περιοχές απεικονίζονται. οι κομβικές επιφάνειες).

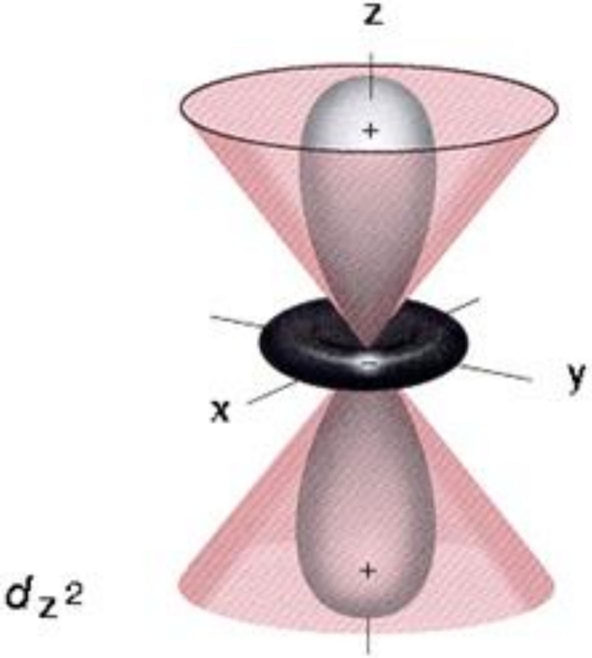
Ακτινικοί κόμβοι

- Γραφική παράσταση της συνάρτησης ακτινικής πιθανότητας $4\pi r^2 R^2$ για τα τροχιακά $2p$, $3p$ και σχηματική παρουσίαση της αντίστοιχης κατανομής της ηλεκτρονιακής πυκνότητας (με τις λευκές περιοχές απεικονίζονται οι σφαιρικές κομβικές επιφάνειες).



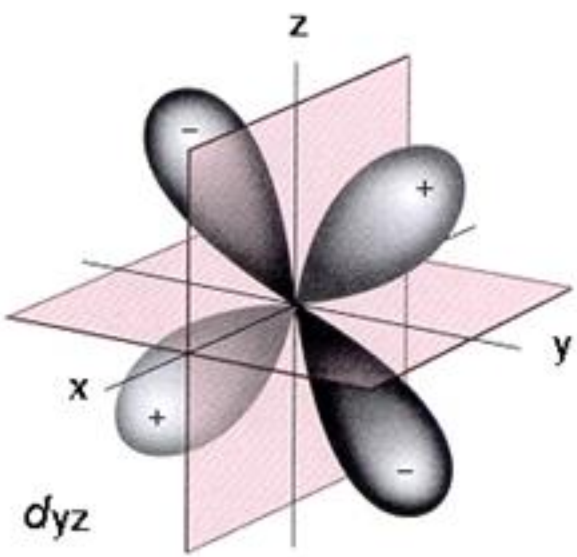
Γωνιακοί κόμβοι

- Προκύπτουν από τον μηδενισμό της γωνιακής συνάρτησης Θ(θ).Φ(φ).
- Από το μηδενισμό της ζενιθιακής συνιστώσας της γωνιακής κυματοσυνάρτησης, Θ(θ), προκύπτουν κομβικές επιφάνειες που είναι κωνικές.



Γωνιακοί κόμβοι

- Από το μηδενισμό της *αζιμουθιακής συνιστώσας της γωνιακής* συνάρτησης, Φ(φ), προκύπτουν κομβικές επιφάνειες που είναι κατακόρυφα επίπεδα.
- Ο αριθμός των γωνιακών κομβικών επιπέδων ισούται με l.
- Σε κάθε τροχιακό, ο συνολικός αριθμός των κομβικών επιφανειών (ακτινικοί και γωνιακοί) ισούται με n-1



Ατομικά Τροχιακά – Συνοπτικά

- Τα ατομικά τροχιακά είναι κυματοσυναρτήσεις των θέσεων του ηλεκτρονίου και υπάρχουν δυνητικά ακόμα και όταν δεν είναι κατειλημμένα με ηλεκτρόνια. Διακρίνονται σε s p, d, f, g, h, κ.λ.π..
- Μπορούν να περιγραφούν πλήρως από τους τρείς κβαντικούς αριθμούς n, l και m_l.
- Ατομικά τροχιακά που έχουν τον ίδιο κύριο κβαντικό αριθμό (n), αποτελούν στιβάδα.
- Ατομικά τροχιακά που έχουν τον ίδιο n και l αποτελούν υποστιβάδα.
- Υπάρχουν n τύποι τροχιακών για το n ενεργειακό επίπεδο.
- Ο αριθμός των ατομικών τροχιακών με ίδιο n ισούται με n^2.
- Υπάρχουν 2l + 1 τροχιακά από κάθε τύπο. Τόσες είναι και οι τιμές m_l για μια δεδομένη τιμή l.
- Ο μέγιστος αριθμός e που μπορεί να υπάρχει σε μία στιβάδα ισούται με $2n^2$.

Ατομικά Τροχιακά – Συνοπτικά

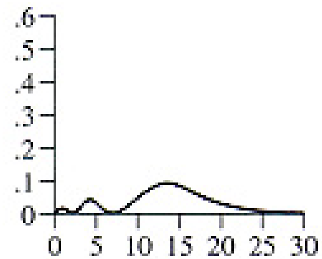
- Υπάρχουν n-l-1 σφαιρικές κομβικές επιφάνειες στην ακτινική συνάρτηση ενός τροχιακού

- Υπάρχουν l κομβικά επίπεδα στη γωνιακή συνάρτηση ενός τροχιακού

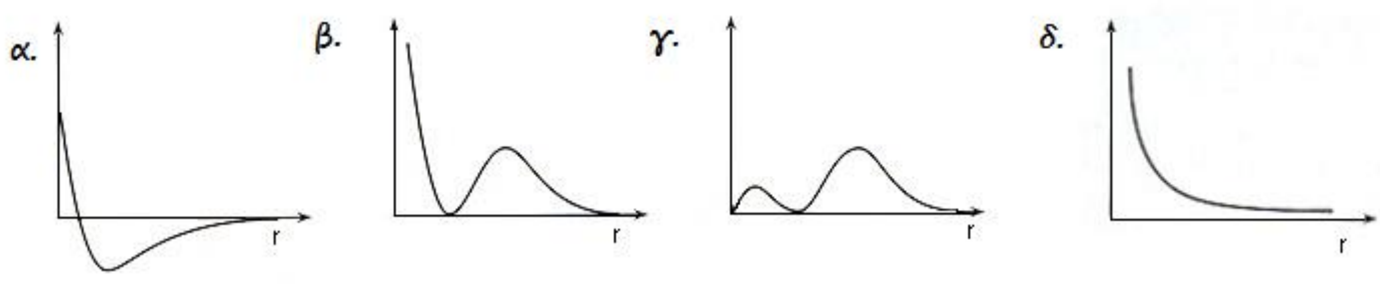
- Ο συνολικός αριθμός των σφαιρικών κομβικών επιφανειών και γωνιακών κομβικών επιπέδων για τη συνολική κυματική συνάρτηση ισούται με n -1

Άσκηση

1. Πόσοι κόμβοι υπάρχουν στην ακτινική και πόσοι στην γωνιακή συνάρτηση ενός 4p τροχιακού;
2. Η παρακάτω γραφική παράσταση της συνάρτησης ακτινικής πιθανότητας $4\pi r^2 R^2(r)$ αφορά το ατομικό τροχιακό (α) 2p, (β) 3p, (γ) 3s ή (δ) 3d;

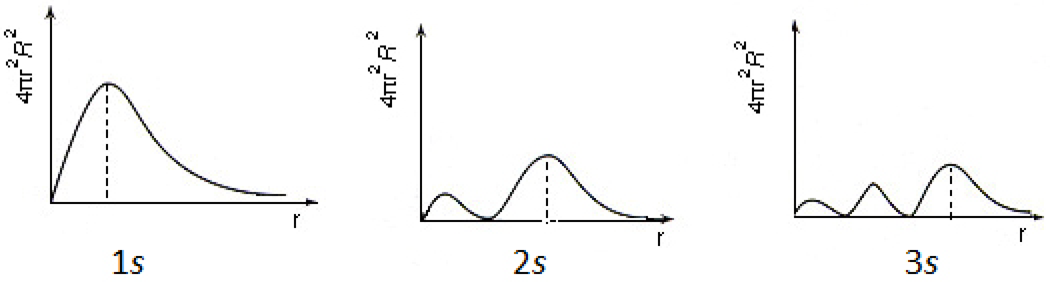


3. Ποιο από τα παρακάτω διαγράμματα αποτελεί γραφική παράσταση της συνάρτησης ακτινικής πιθανότητας $4\pi r^2 R^2(r)$ ενός 2s ηλεκτρονίου;



Άσκηση

4. Τι καθορίζει η θέση της μέγιστης κορυφής στα παρακάτω διαγράμματα $4\pi r^2 R^2(r)$;



Ενέργειες Ατομικών Τροχιακών για το Υδρογόνο

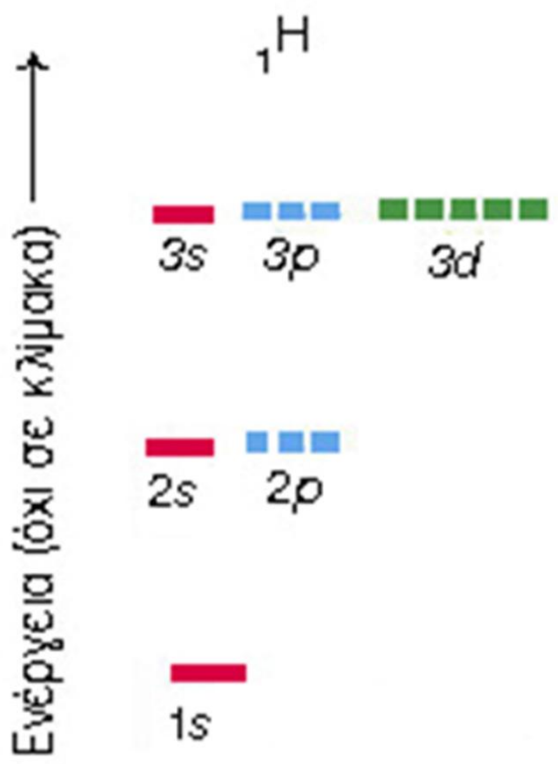
- Η ενέργεια του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου και τα υδρογονοειδή εξαρτάται μόνο από τον κύριο κβαντικό αριθμό.

$$E = \frac{-2{,}18\times 10^{-18} Z^2}{n^2}$$

✓ Έτσι

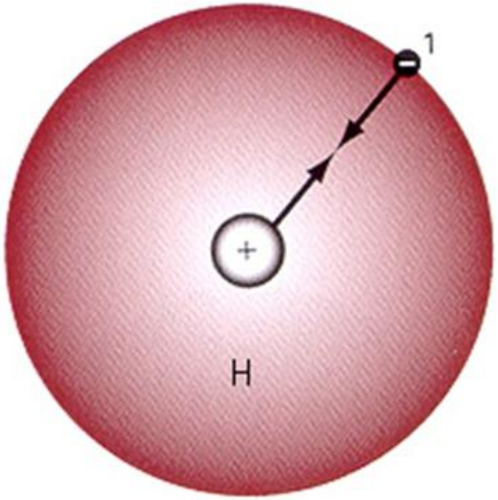
1s < 2s = 2p < 3s = 3p = 3d < 4s = 4p = 4d =4f <…

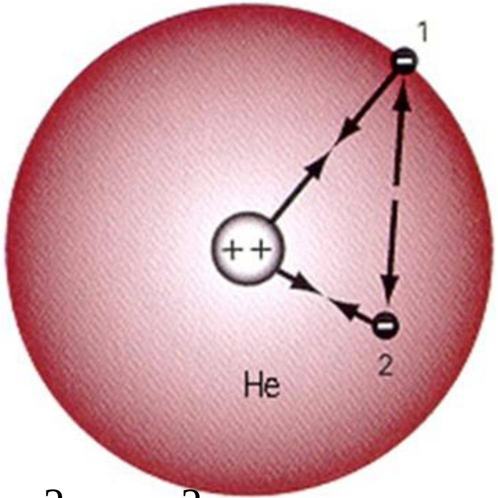
✓ Μόνο τα ατομικά τροχιακά του υδρογόνου και των υδρογονοειδών (He^+, Li^{2+}, Be^{3+}) έχουν αυτήν την ενεργειακή συμπεριφορά



Ενέργειες Ατομικών Τροχιακών για Πολυηλεκτρονιακά άτομα

- Η εξίσωση Schrödinger τροποποιείται για να συμπεριλάβει και τις απώσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων
- Ισχύουν τα τροχιακά που ορίσθηκαν για το υδρογόνο μέσω της εξίσωσης του Schrödinger και επομένως διατηρούνται τα s, p, d, f, g, h...τροχιακά
- Τα τροχιακά της ίδιας στιβάδας δεν είναι πλέον ισοδύναμα ενεργειακά (μη εκφυλισμένα)
- Οι ενέργειες των τροχιακών εξαρτώνται όχι μόνο από τον *n* αλλά και από τον *l*.



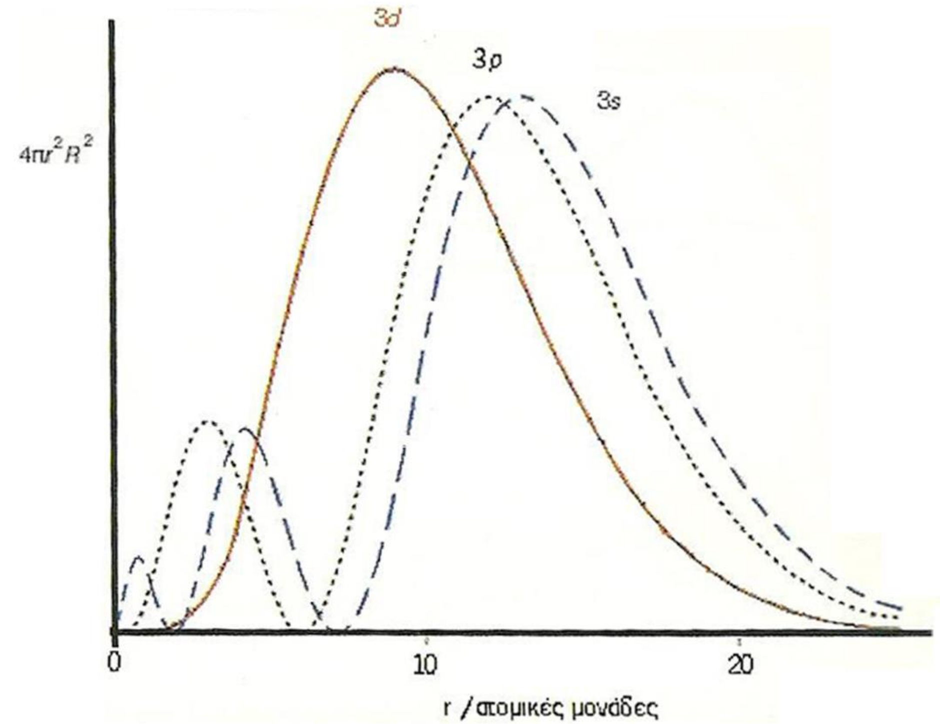


$$\nabla_1^2\Psi + \nabla_2^2\Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{1,2}}\right)\Psi = 0$$

Διείσδυση και θωράκιση ηλεκτρονίων

❖ Η άρση του εκφυλισμού των τροχιακών στο ενεργειακό διάγραμμα των πολυηλεκτρονιακών ατόμων μπορεί να ερμηνευτεί με βάση το φαινόμενο της διείσδυσης και θωράκισης (ή προάσπισης) των ηλεκτρονίων

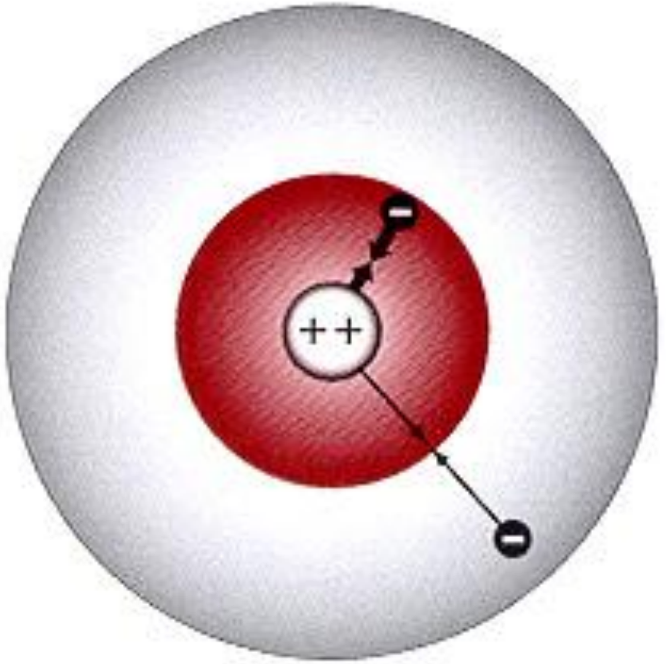
➢Η διείσδυση εκφράζει την ικανότητα που έχει το ηλεκτρόνιο να προσεγγίζει τον πυρήνα του ατόμου. Όσο μεγαλύτερη είναι η διεισδυτικότητα ενός ηλεκτρονίου, τόσο μικρότερη είναι η ενέργειά του.



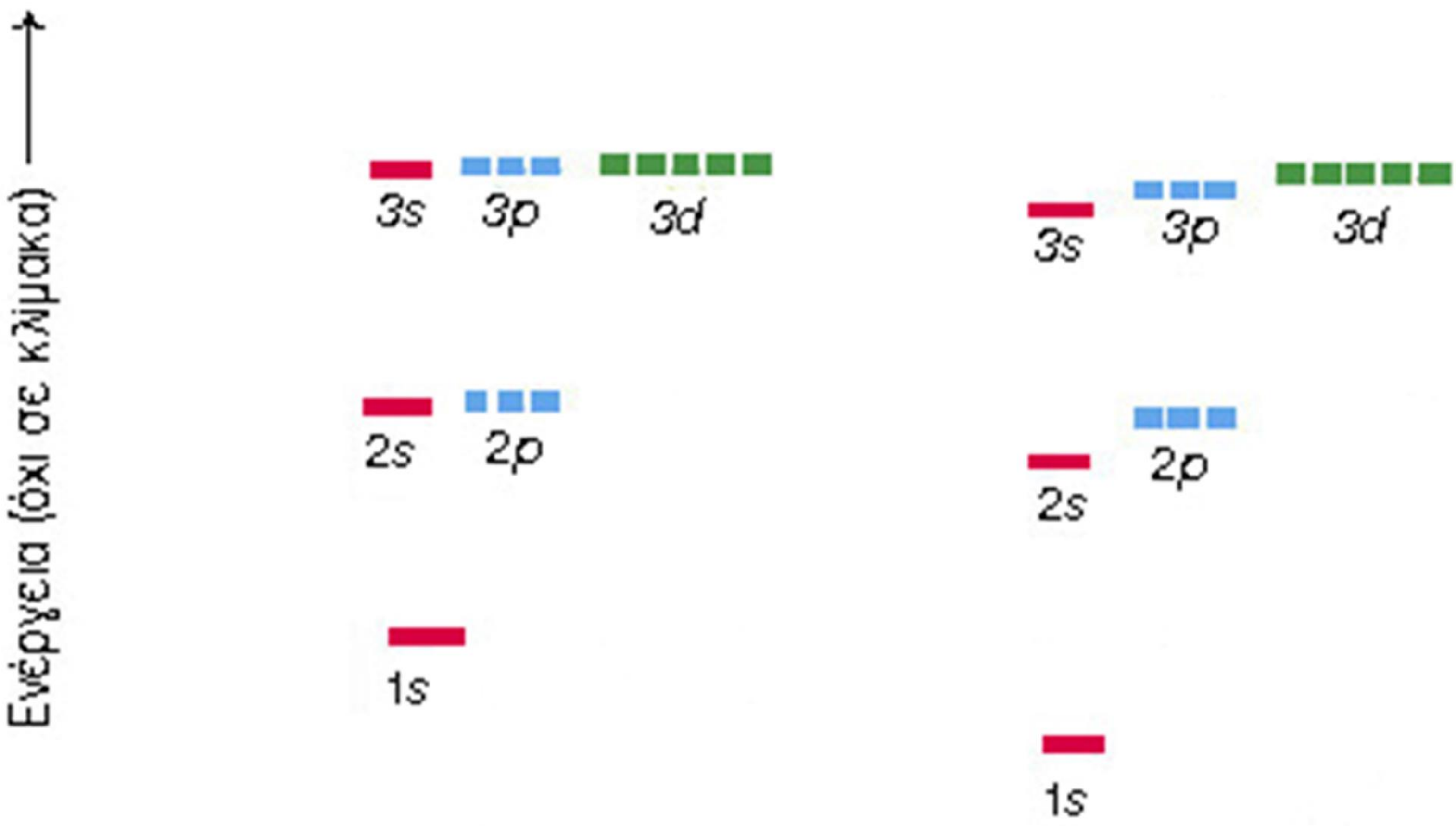
Διείσδυση και θωράκιση ηλεκτρονίων

❖Η θωράκιση ή προάσπιση ενός ηλεκτρονίου προκαλείται από τα «εσωτερικά» ηλεκτρόνια του ατόμου με αποτέλεσμα να επιφέρεται απομάκρυνση του εξωτερικού ηλεκτρονίου από τον πυρήνα, δηλαδή, αύξηση της ενέργειας του.

❖Το εσωτερικό ηλεκτρόνιο λόγω μεγάλης διεισδυτικότητας βρίσκεται κοντά στον πυρήνα. Το ηλεκτρόνιο αυτό προασπίζει (θωρακίζει) τον πυρήνα, απωθώντας το δεύτερο (εξωτερικό) ηλεκτρόνιο.



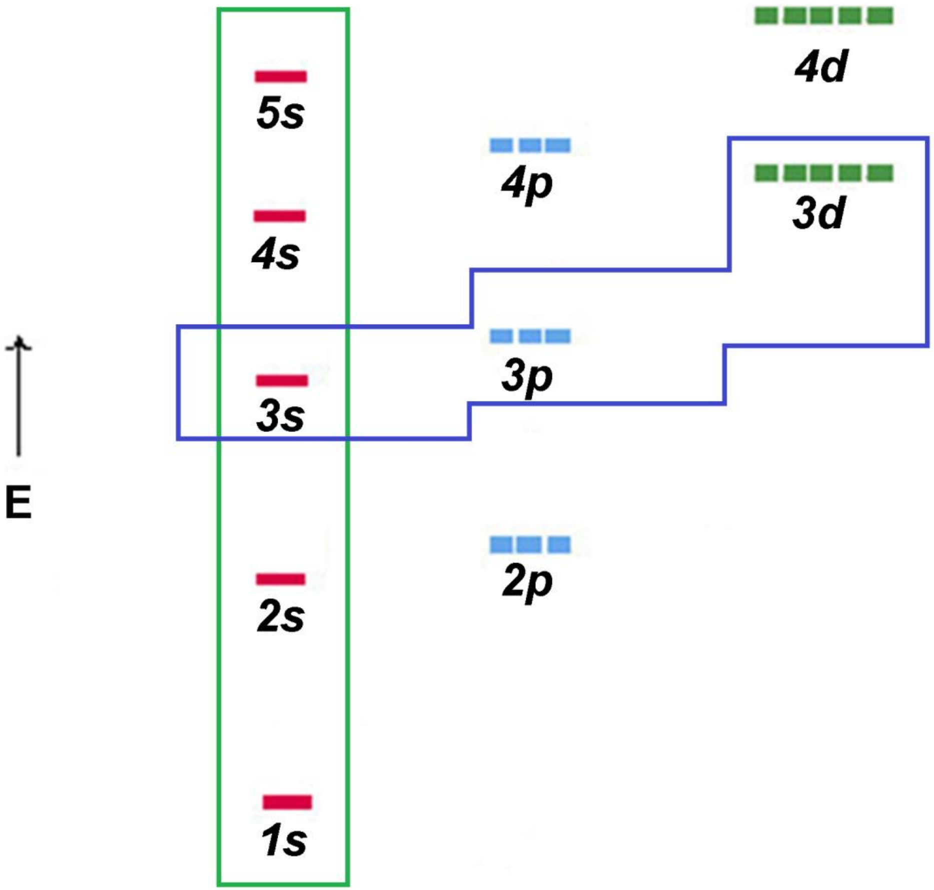
Ενέργειες Ατομικών Τροχιακών για Πολυηλεκτρονιακά άτομα



Υδρογονοειδές άτομο

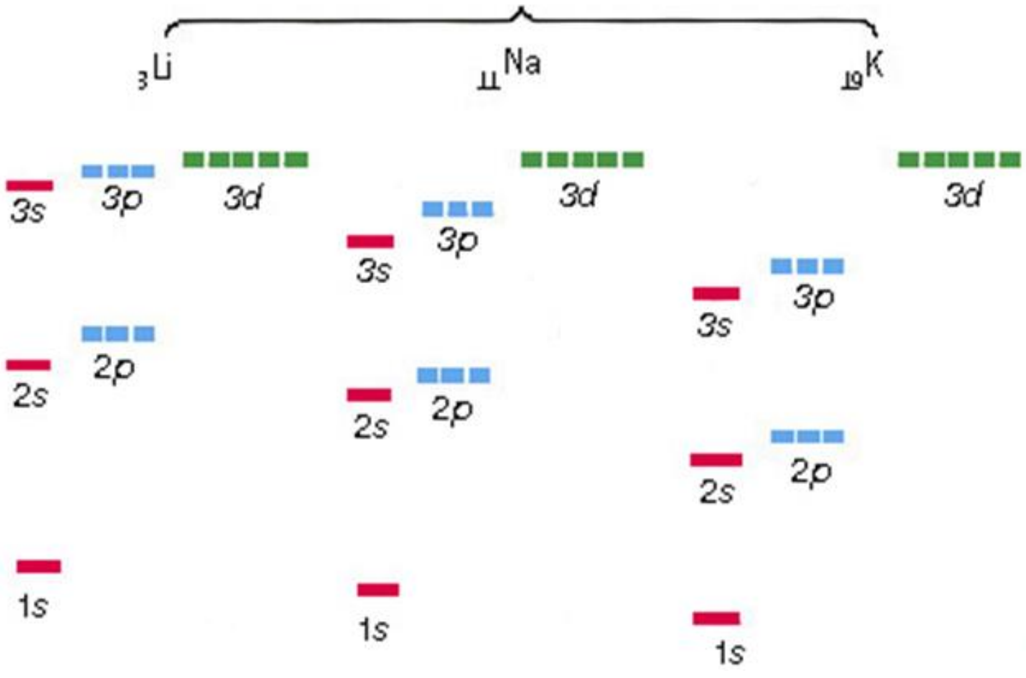
Πολυηλεκτρονιακό άτομο

Ενέργειες Ατομικών Τροχιακών για Πολυηλεκτρονιακά άτομα



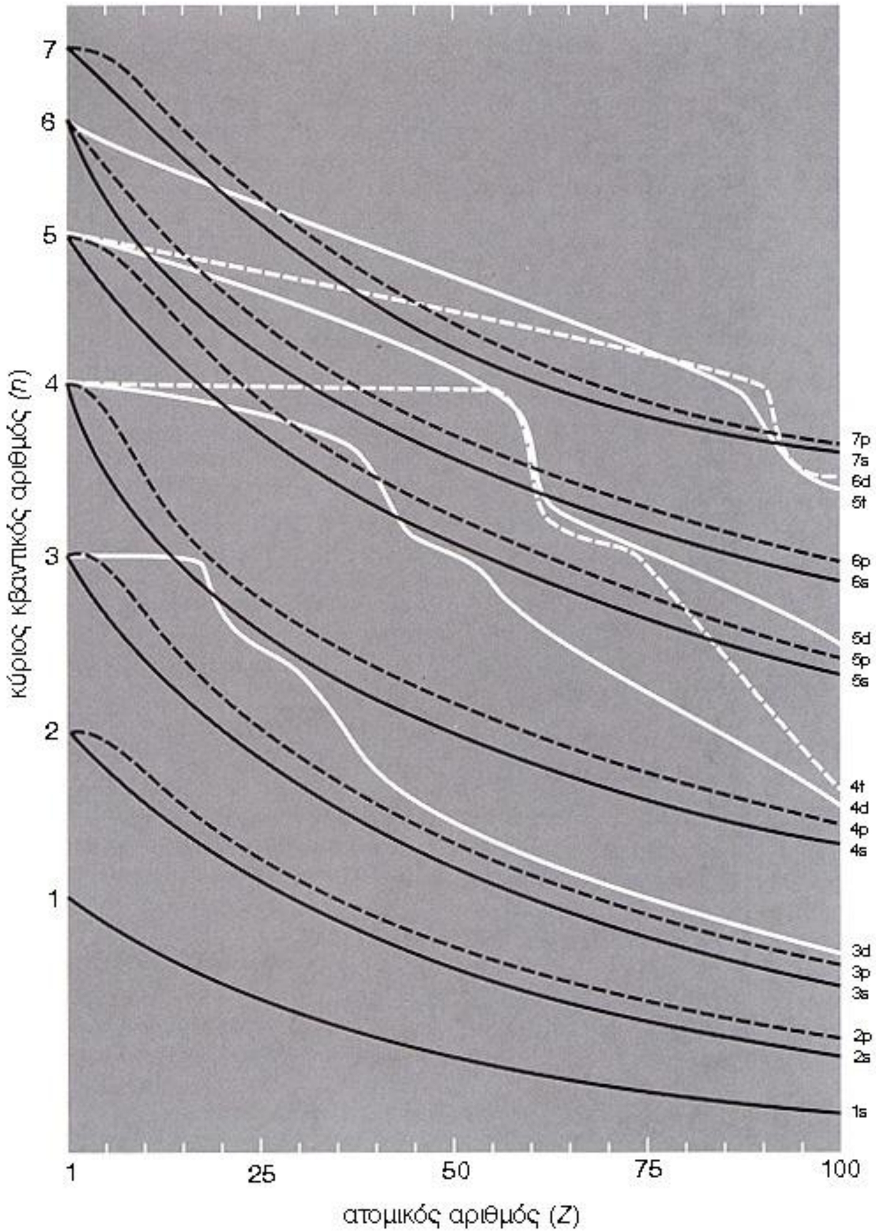
- Η ενέργεια των τροχιακών με τον ίδιο *l*, αυξάνεται με την αύξηση του *n*.
- Η ενέργεια των τροχιακών με τον ίδιο *n* αυξάνεται με την αύξηση του *l*.
- Όσο αυξάνει το μέγεθος του ατόμου (αύξηση *n*), τόσο ελαττώνεται η ενεργειακή απόσταση ανάμεσα στα τροχιακά (πυκνές ενεργειακές στάθμες) και η εξάρτηση της ενέργειας των τροχιακών από τον ℓ γίνεται σημαντικότερη ώστε το 4s να βρίσκεται χαμηλότερα από το 3d ($E_{5s} < E_{4d}$, $E_{6s} < E_{4f}$).

Ενέργειες Ατομικών Τροχιακών για Πολυηλεκτρονιακά άτομα



- Η ενέργεια των τροχιακών καθορίζεται από το άθροισμα $n+l$. Όσο μεγαλύτερο είναι το άθροισμα τόσο μεγαλύτερη και *η* ενέργεια του τροχιακού. Μεταξύ δύο τροχιακών με το ίδιο άθροισμα ($n+l$), χαμηλότερη ενέργεια έχει εκείνο με το μικρότερο n.

Ενέργειες Ατομικών Τροχιακών για Πολυηλεκτρονιακά άτομα



- Οι ενέργειες των τροχιακών τείνουν να ελαττωθούν με την αύξηση του ατομικού αριθμού.