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

Εκ: 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.

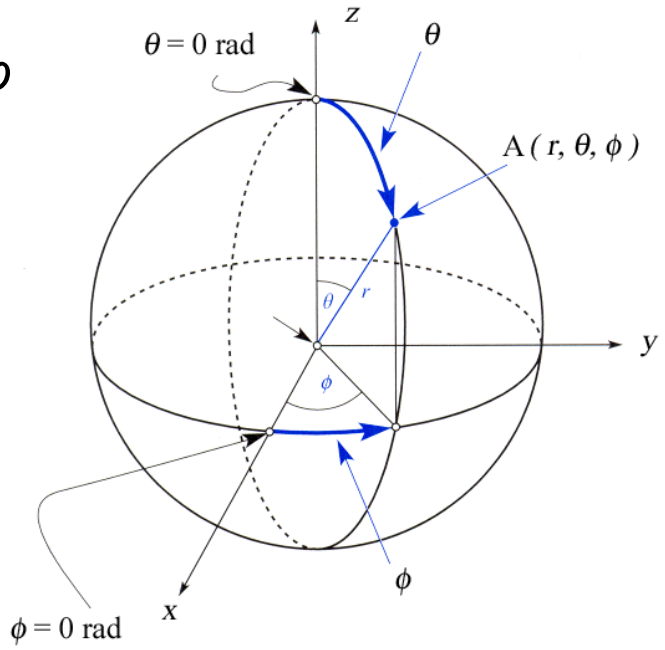
Γ. Το σημείο Β βρίσκεται πιο μακριά από τον πυρήνα του ατόμου.

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 A: 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:

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

$$\Downarrow$$

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

Εξίσωση Schrödinger με πολικές συντεταγμένες

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

R(r): η ακτινική 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)

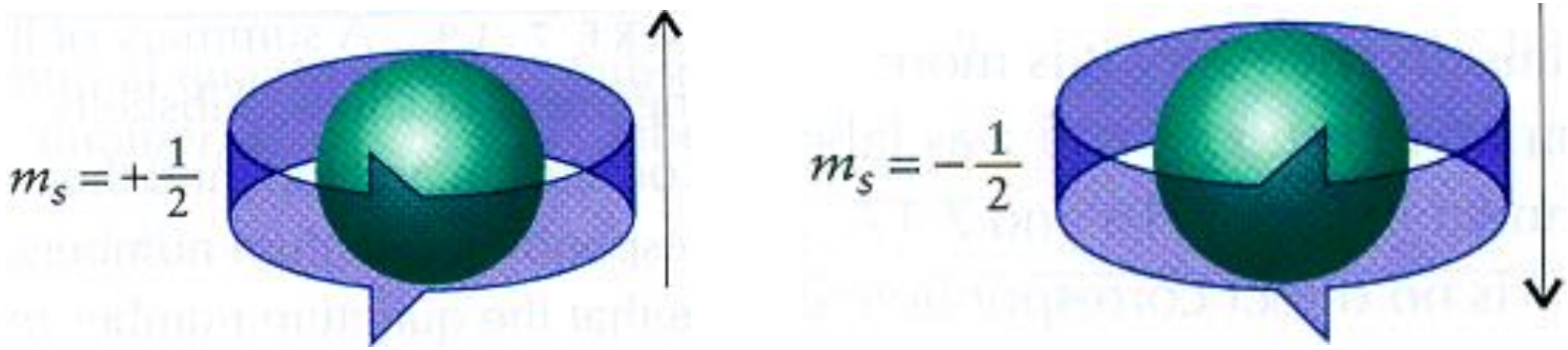
❖ *Η ονομασία «μαγνητικός» οφείλεται στη δημιουργία μαγνητικού πεδίου λόγω της κίνησης του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα του ατόμου.*

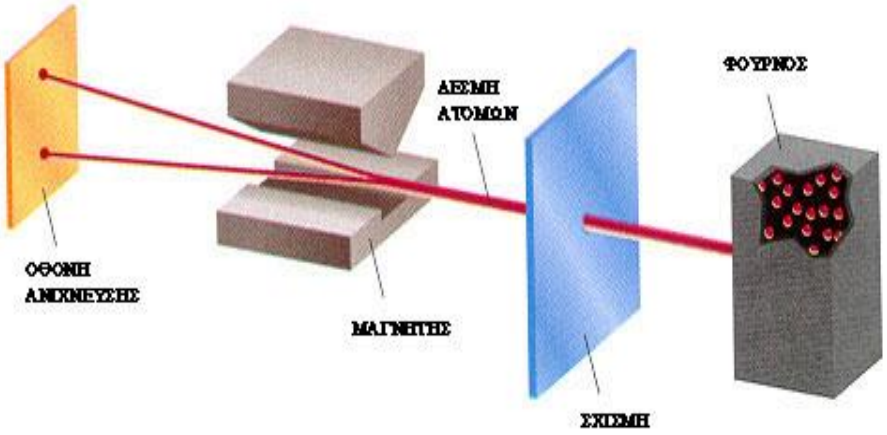
Μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_l	**+1**	**0**	**-1**
τροχιακά p	p_x	p_z	p_y

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.

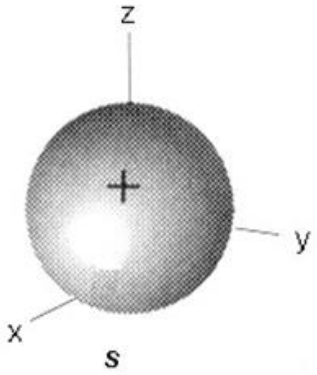
1η Στιβάδα (K) – *1s*

❖ 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 $$\alpha_o = \frac{h^2}{4\pi^2 me^2}$$ 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.



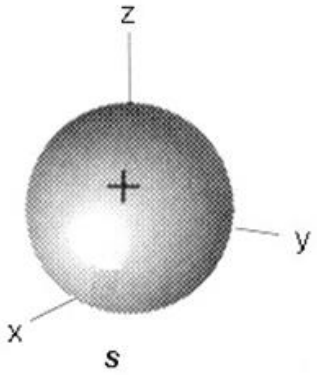
2η Στιβάδα (L) – *2s και 2p*

- 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.



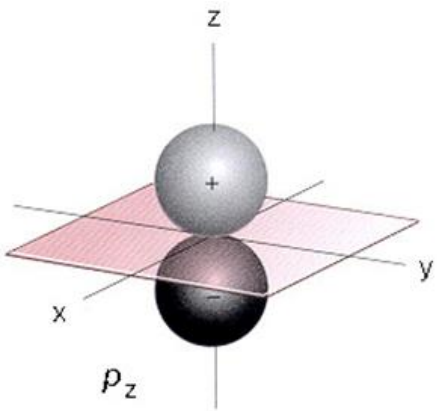
2η Στιβάδα (L) – *2s και 2p*

❖ **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:

$$\psi_{2p_z} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho\, e^{-\rho/2} \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\, \sigma\upsilon\nu\, \theta$$

❖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.



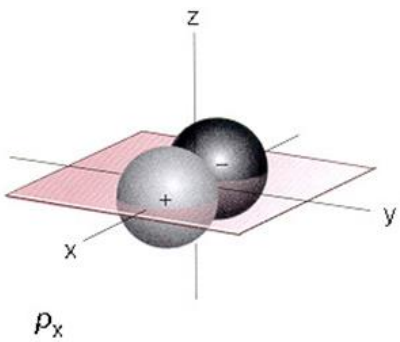
2η Στιβάδα (L) – *2s και 2p*

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

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

$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho\, e^{-\rho/2} \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\ \text{συν}\,\varphi \cdot \text{ημ}\,\theta$$

❖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 $2p_x$ φαίνεται στο διπλανό σχήμα.



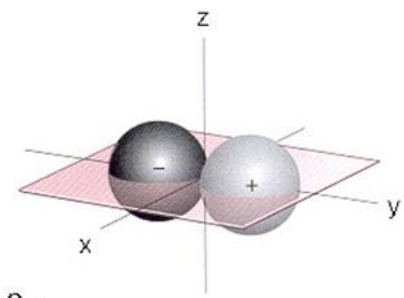
2η Στιβάδα (L) – *2s2p*

❖ **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:

$$\psi_{2p_y} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho\, e^{-\rho/2} \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\, \eta\mu\,\theta \cdot \eta\mu\,\varphi$$

❖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.



p_y

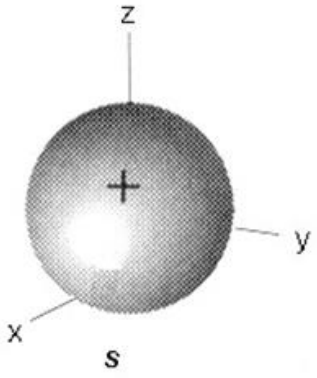
3η Στιβάδα (M) – *3s, 3 p και 3d*

- 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:

$$\psi_{3s} = \frac{2}{81\sqrt{3}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} (27 - 18\rho + 2\rho^2) e^{-\rho/3} \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

- 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.



3η 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.

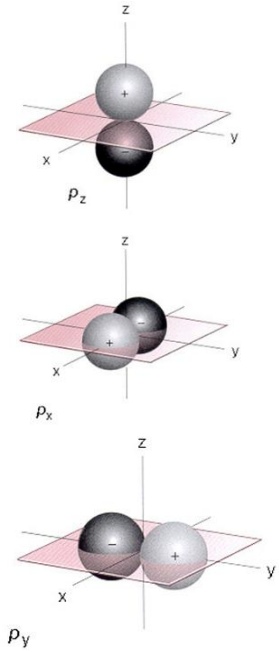
➢ ***n* = 3, *l* = 1, m_l = -1** → 3p_y ατομικό τροχιακό.

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

$$\psi_{3p_z} = \frac{4}{81\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2}(6\rho - \rho^2)\, e^{-\rho/3}\,\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\ \text{συν}\,\theta$$

$$\psi_{3p_x} = \frac{4}{81\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2}(6\rho - \rho^2)\, e^{-\rho/3}\,\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\ \text{συν}\,\varphi\cdot\text{ημ}\,\theta$$

$$\psi_{3p_y} = \frac{4}{81\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2}(6\rho - \rho^2)\, e^{-\rho/3}\,\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\ \text{ημ}\,\theta\cdot\text{ημ}\,\theta$$



❖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_xκαι 3p_y είναι παρόμοιες με αυτών των 2p.

3η Στιβάδα (M) – *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:

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

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

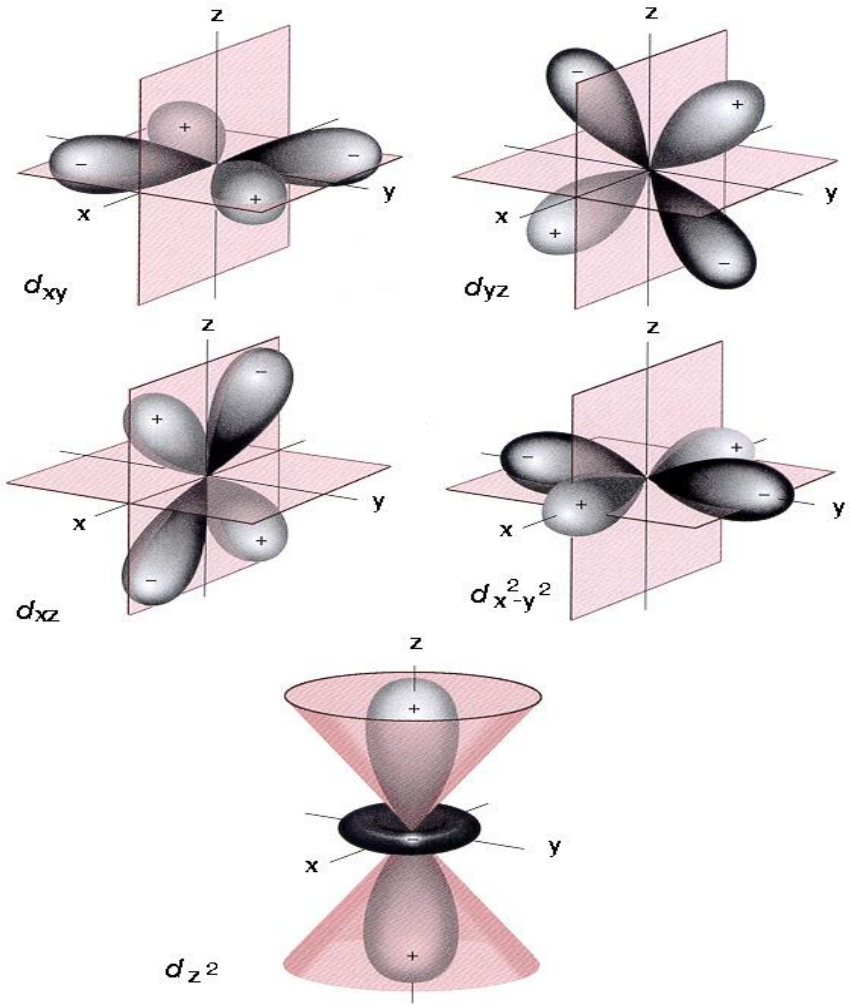
$$\Psi_{3d_{yz}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} 2^{-3/2} \frac{1}{4}\sqrt{\frac{30}{\pi}}\, \text{ημ}\theta \cdot \text{συν}\theta \cdot \text{ημ}\varphi$$

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

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

3η 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.



4η Στιβάδα (N) – *4s, 4 p, 4d και 4f*

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

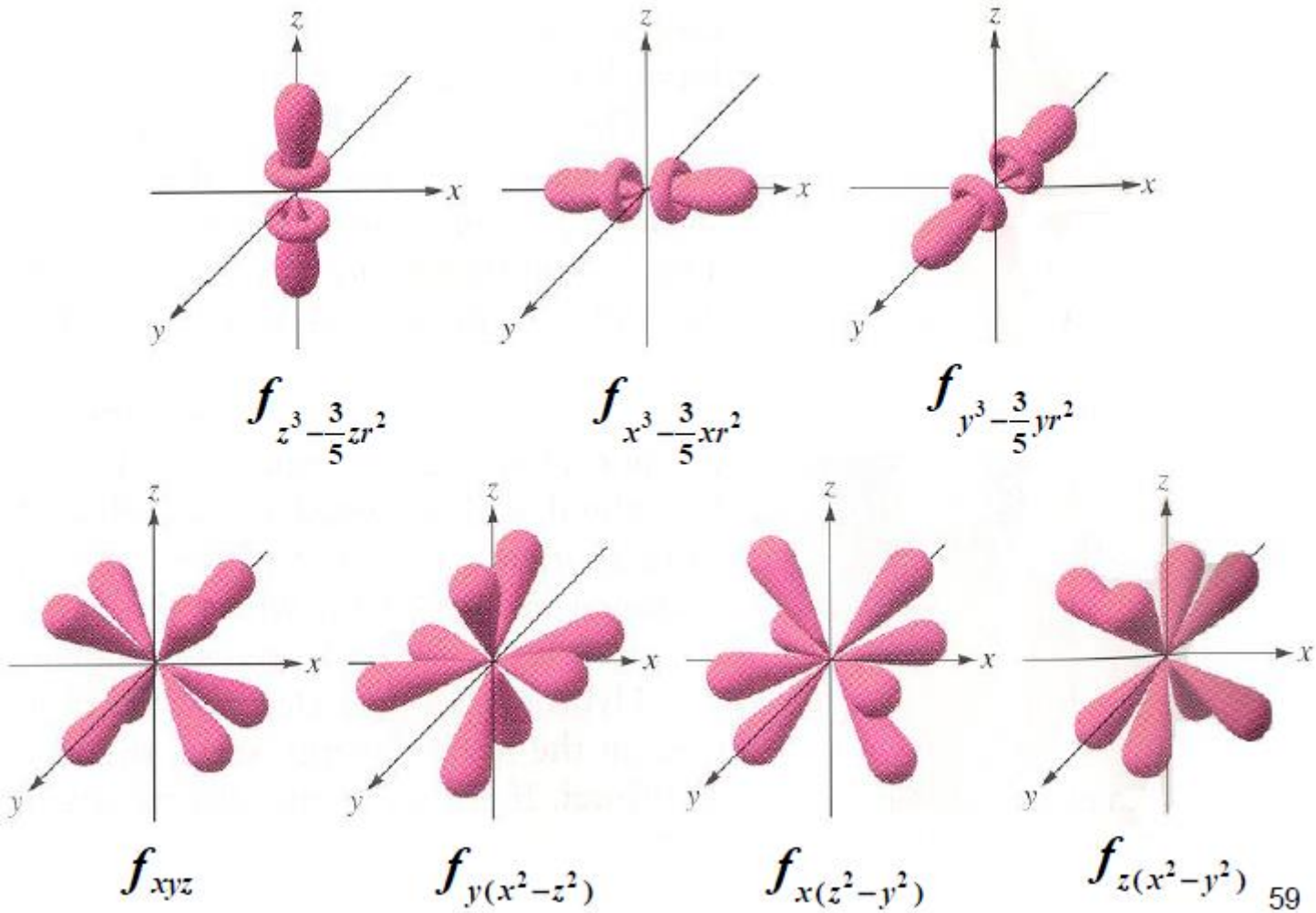
- ✓ $n = 4, l = 0, m_l = 0$ → 4s ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 1, m_l = 0$ → $4p_z$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 1, m_l = 1$ → $4p_x$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 1, m_l = -1$ → $4p_y$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 2, m_l = 0$ → $4d_{z^2}$ ατομικό τροχιακό.
- ✓ $n = 4, l = 2, m_l =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

4η 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.

4η 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;