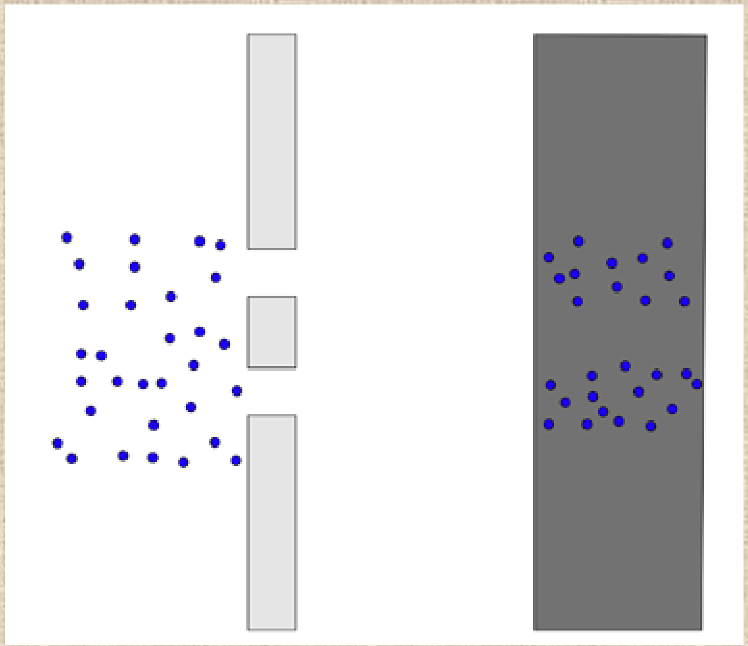
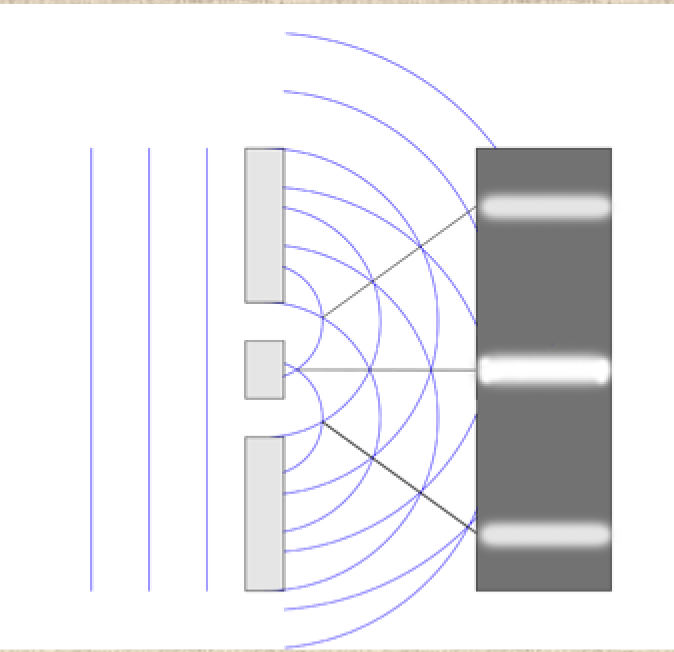
Πείραμα των 2 σχισμών

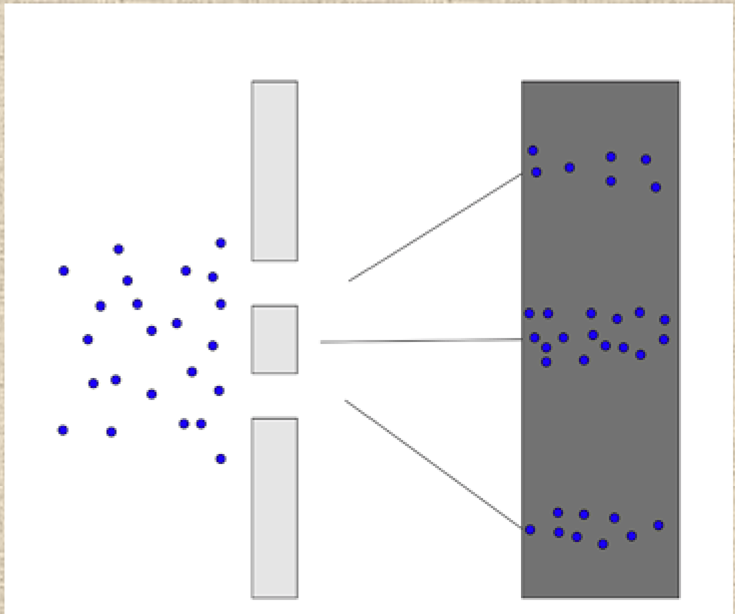
σωματίδια

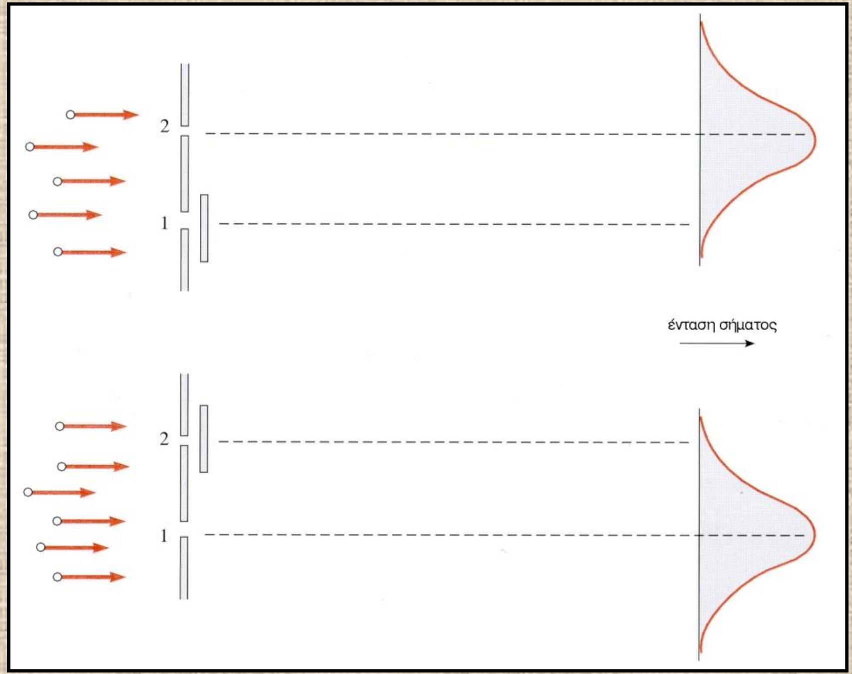


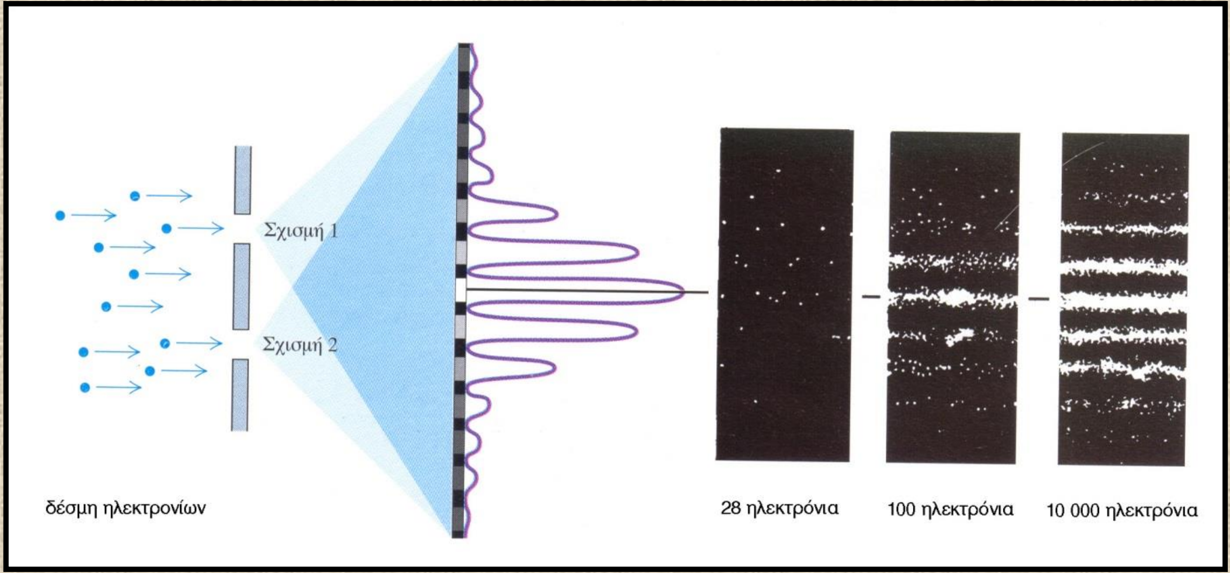
κύματα

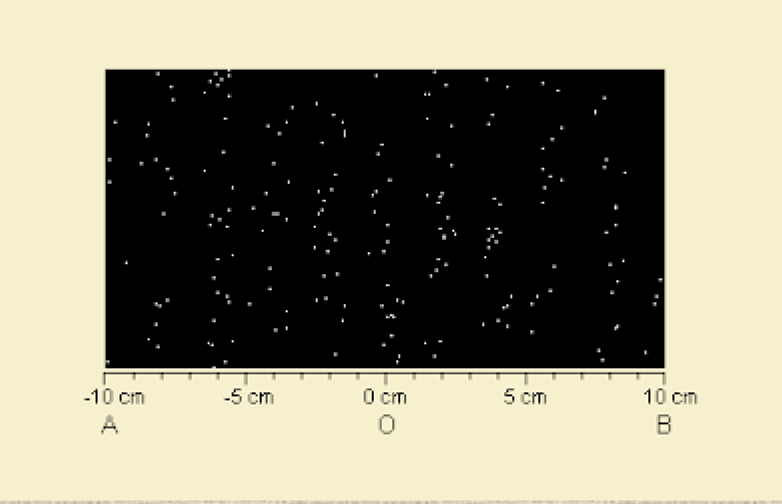


ηλεκτρόνια

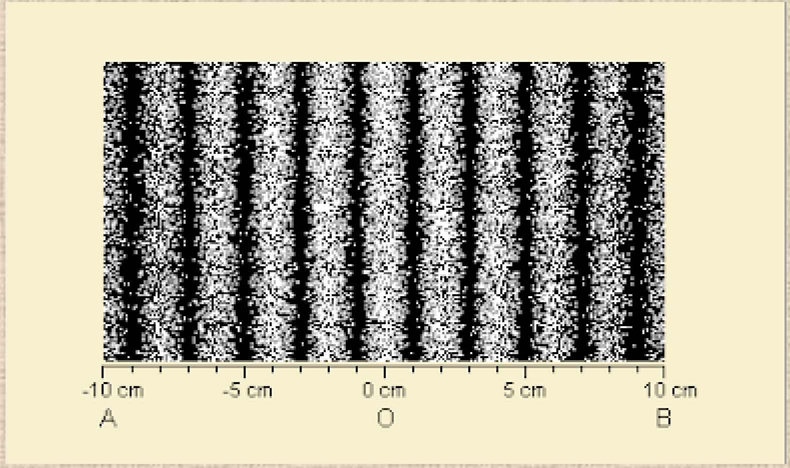



2
1
ένταση σήματος
2
1


Σχισμή 1
Σχισμή 2
δέσμη ηλεκτρονίων
28 ηλεκτρόνια
100 ηλεκτρόνια
10 000 ηλεκτρόνια

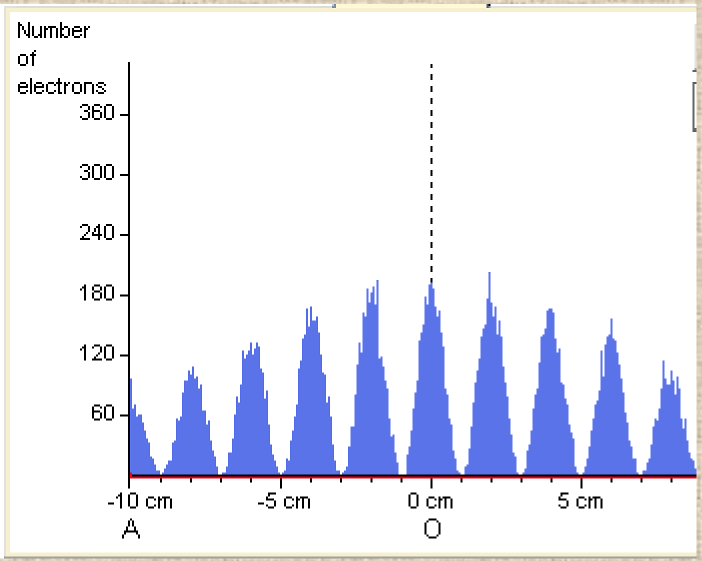


Δεν μπορούμε να προβλέψουμε με βεβαιότητα που θα πάει ένα μεμονωμένο ηλεκτρόνιο

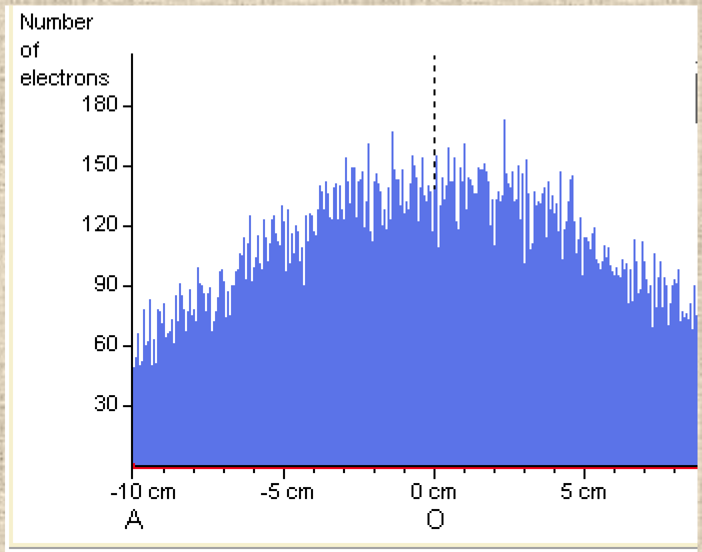


Μπορούμε να προβλέψουμε με απόλυτη ακρίβεια που θα πάει ένας μεγάλος αριθμός ηλεκτρονίων

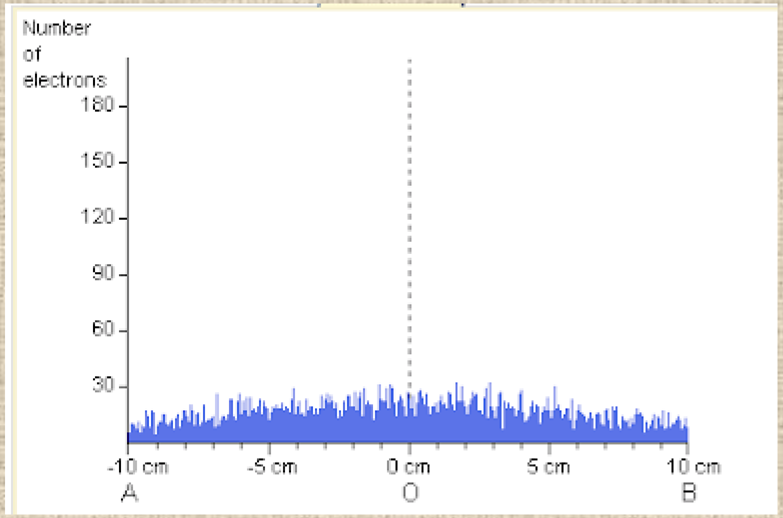
Με 2 σχισμές ανοιχτές

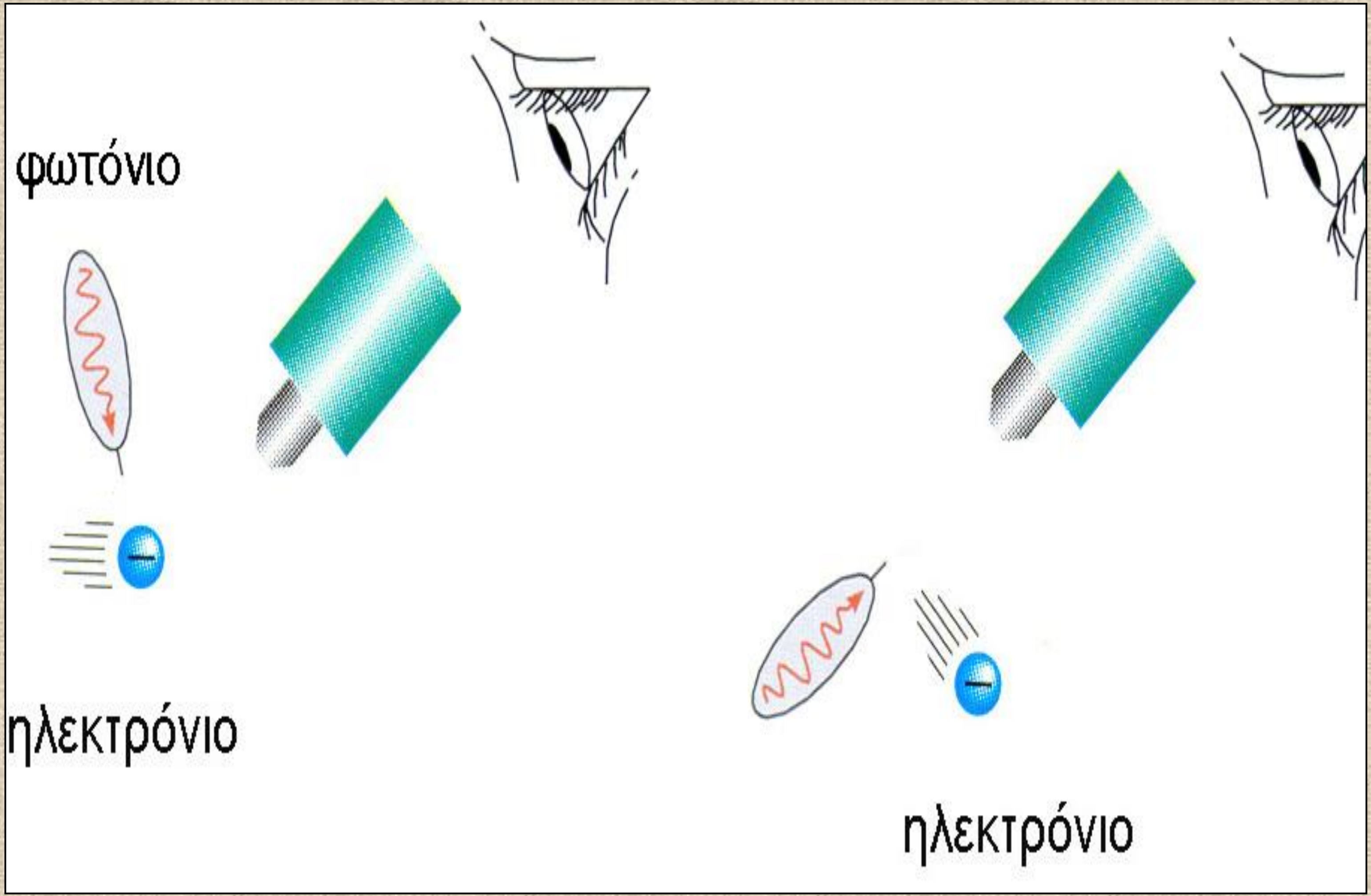


Με 1 σχισμή ανοιχτή



Με σύστημα παρατήρησης ηλεκτρονίων




φωτόνιο
ηλεκτρόνιο
ηλεκτρόνιο

Αρχή της αβεβαιότητας (απροσδιοριστίας) Heisenberg - 1927

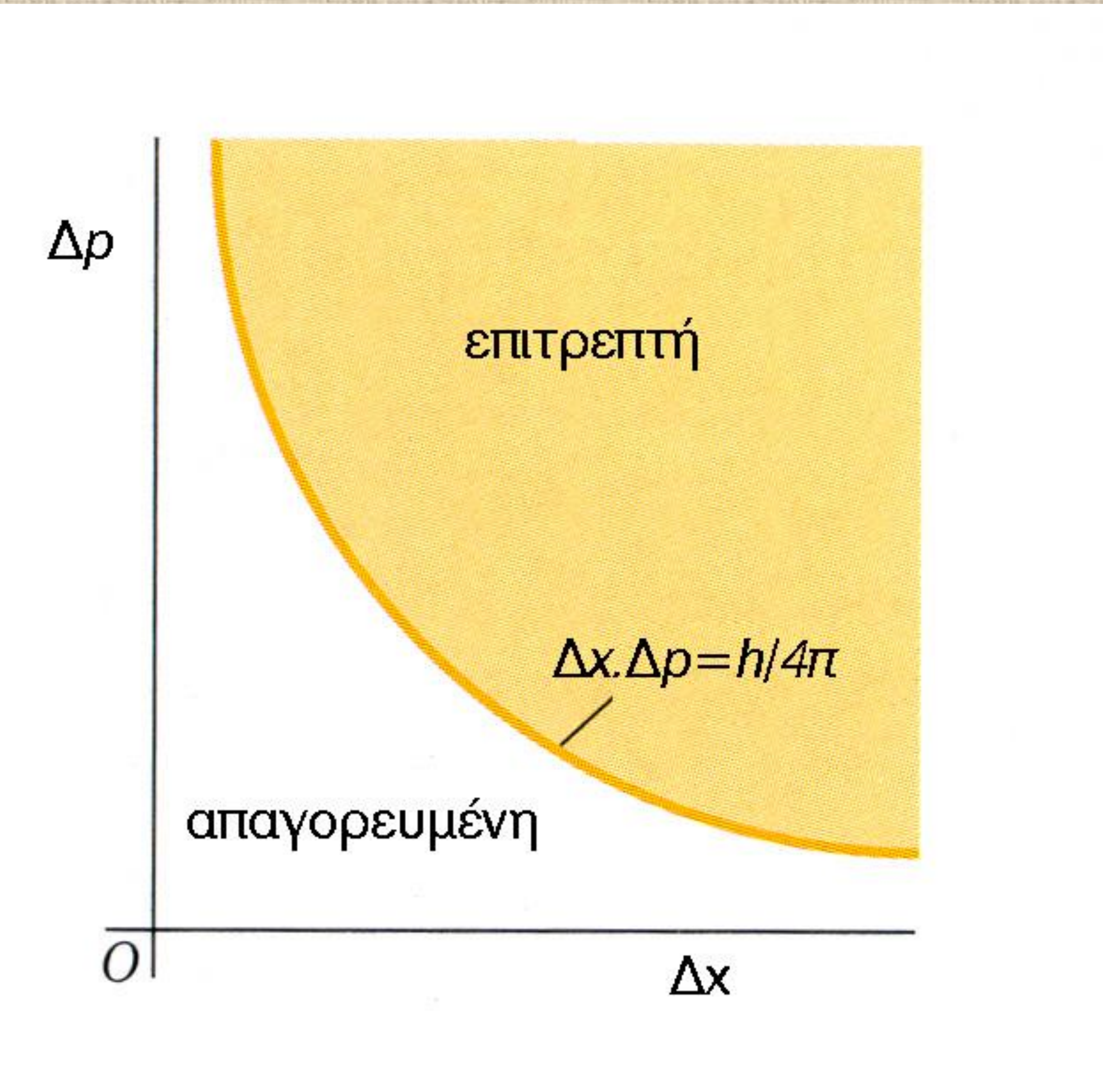
Είναι αδύνατο να προσδιορισθεί με ακρίβεια συγχρόνως η θέση και η ορμή ενός μικρού σωματιδίου, π.χ. ηλεκτρονίου.

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

Αν γνωρίζουμε με απόλυτη ακρίβεια τη θέση ενός μικρού σωματιδίου, δηλαδή Δx=0, τότε έχουμε απόλυτη άγνοια για την ορμή αυτού, δηλαδή Δp=∞.

Αν γνωρίζουμε με απόλυτη ακρίβεια την ορμή ενός μικρού σωματιδίου, δηλαδή Δp=0, τότε έχουμε απόλυτη άγνοια για τη θέση που βρίσκεται το σωματίδιο, δηλαδή Δx=∞.

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



Τελικά "παίζει ζάρια ο καλός Θεός;"

➔**4.6** Ποια από τα παρακάτω σημεία της θεωρίας του Bohr έρχονται σε αντίθεση προς την Αρχή της Αβεβαιότητας του Heisenberg και γιατί;

(**a**) καθορισμένες στάθμες ενέργειας

(**b**) απλές κυκλικές τροχιές

(**c**) κβαντικοί αριθμοί

(**d**) τροχιακά ηλεκτρονίων

(**e**) εκπομπή και απορρόφηση φωτονίων.

Να υπολογισθεί η αβεβαιότητα στον προσδιορισμό της ταχύτητας ενός σώματος μάζας 1g και ενός ηλεκτρονίου, όταν η αβεβαιότητα της θέσης είναι 10^{-8}cm
Τι συμπέρασμα εξάγεται από τα αποτελέσματα
(Δίδονται $h=6{,}63.10^{-34}$ J.s, $m_e = 9{,}11.10^{-31}$kg)

Να υπολογισθεί η αβεβαιότητα της θέσης του ηλεκτρονίου του υδρογόνου στη θεμελιώδη κατάσταση αν η ταχύτητα του ηλεκτρονίου υπολογίζεται με ακρίβεια περίπου 1%

Μηχανική συνθήκη Bohr

$$m \cdot u \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$

Ενέργεια e στην n στιβάδα

$$E_n = \frac{-\,2{,}18 \cdot 10^{-18}}{n^2}\ \mathrm{J}$$

Ενέργεια που εκπέμπεται ή απορροφάται κατά την μετακίνηση ηλεκτρονίου από την n_i στην n_f τροχιά (άτομο Η)

$$\Delta E = \left| \ 2{,}18 \quad 10^{18} \left(\frac{1}{n_f^{\,2}} \quad \frac{1}{n_i^{\,2}}\right) \right|$$

Ακτίνα τροχιάς e στην στιβάδα n

$$r = a_o \cdot n^2$$

$$\alpha_o = 0.0529\ \text{nm}$$

Να προσδιοριστεί το σφάλμα προσδιορισμού της θέσης ενός ηλεκτρονίου Δ*x*, αν η αβεβαιότητα προσδιορισμού της ταχύτητας Δ*u* είναι $2x10^4$ m s^{-1}. Δίνονται: σταθερά Plank h=$6.63x10^{-34}$ j.s, Μάζα ηλεκτρονίου m=$9.11x10^{-28}$ g

Κυματική εξίσωση του Schrödinger (1926)

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

H: τελεστής Hamilton (Hamiltonian operator)

εκτέλεση μαθηματικών πράξεων επί της κυματοσυνάρτησης *Ψ.*

E: ολική ενέργεια των ηλεκτρονίων

δυναμική ενέργεια + κινητική ενέργεια ηλεκτρονίου (μετρήσιμη ιδιότητα του συστήματος)

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

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

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

κινητική ενέργεια e

δυναμική ενέργεια e

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

x, y, z: καρτεσιανές συντεταγμένες

h: σταθερά του Planck.

m: μάζα του ηλεκτρονίου

e: το φορτίο του ηλεκτρονίου.

E: ολική ενέργεια του ηλεκτρονίου.

r: η απόσταση ηλεκτρονίου-πυρήνα.

Z: το φορτίο του πυρήνα (στο άτομο του υδρογόνου Z=1).

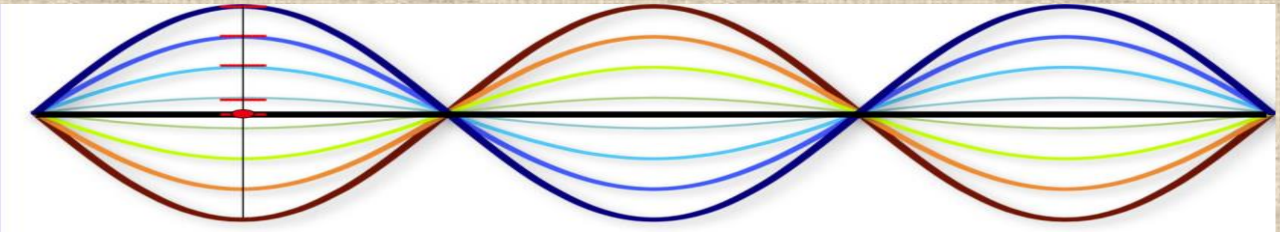
ε_0: διηλεκτρική σταθερά του κενού.

Η κυματική εξίσωση του Schrödinger:

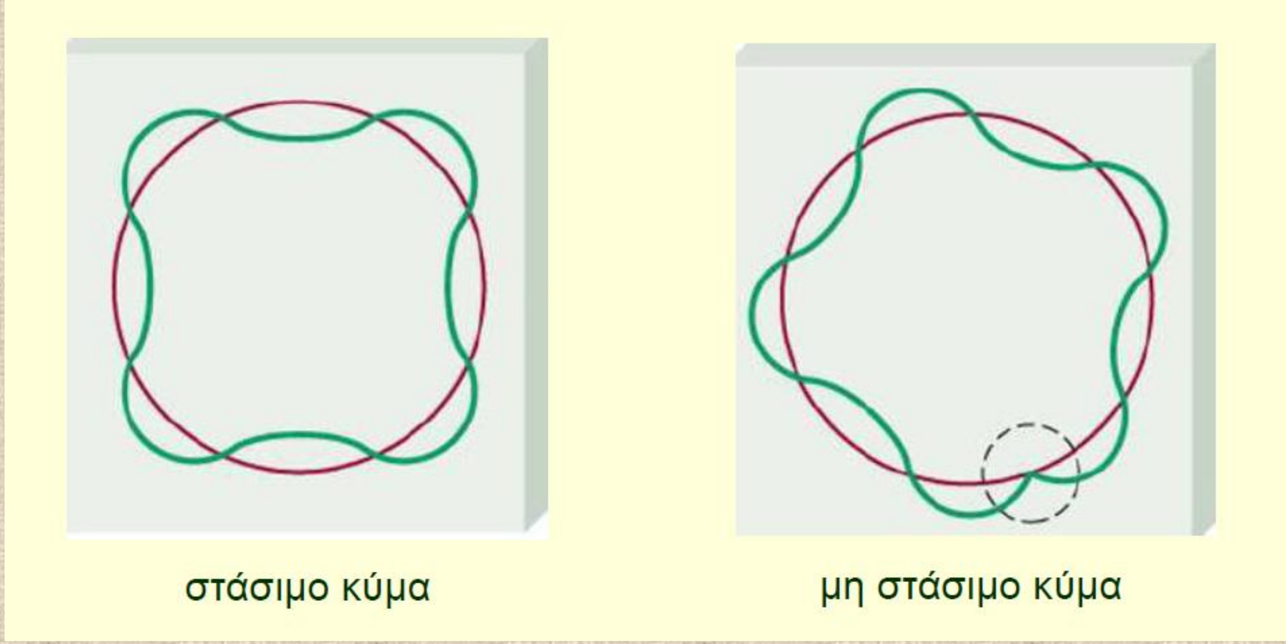
- προκύπτει από την εμπειρική επιλογή της εξίσωσης του στάσιμου κύματος για την περιγραφή της κίνησης του ηλεκτρονίου
- η ισχύς της εξίσωσης επαληθεύεται από πειραματικά δεδομένα
- είναι μια εξίσωση κύματος στην οποία περιλαμβάνεται η μάζα
- είναι ανεξάρτητη του χρόνου. Τα δέσμια ηλεκτρόνια βρίσκονται σε στάσιμη κατάσταση ανεξάρτητη του χρόνου.
- στην εξίσωση γνωστά μεγέθη είναι η μάζα m και η δυναμική ενέργεια V, ενώ τα άγνωστα είναι η κυματική συνάρτηση Ψ και η ολική ενέργεια E.
- η δυναμική ενέργεια V είναι συνάρτηση της θέσης, επομένως η εξίσωση πρέπει να επιλυθεί ξεχωριστά σε διάφορες περιοχές του χώρου.

Στάσιμα κύματα

ευθύγραμμη τροχιά



κυκλική τροχιά



Η περιφέρεια της τροχιάς του ηλεκτρονίου πρέπει να είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματος του ηλεκτρονίου

$$2\pi r = n\lambda$$

Οι αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης ονομάζονται *<u>κυματικές συναρτήσεις</u>* ή *<u>ατομικά τροχιακά.</u>*

Η συνάρτηση Ψ μπορεί να λάβει θετικές, αρνητικές, μηδέν, φανταστικές ή μιγαδικές τιμές.

ποια η φυσική σημασία της Ψ ;

Ψ = 0 ⟶ απουσία e

Ψ ≠ 0 ⟶ πιθανή παρουσία e

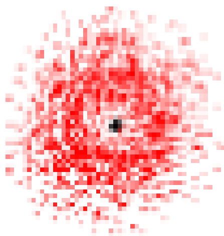
$|\psi|^2 = \psi \cdot \psi^*$:

- **σχετίζεται με την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε κάποιο σημείο του χώρου γύρω από τον πυρήνα (με συντεταγμένες *x*, *y*, *z*), σε δεδομένη χρονική στιγμή.**
- **εκφράζει την πιθανότητα ανά μονάδα όγκου και έχει μονάδες vol^{-1}.**

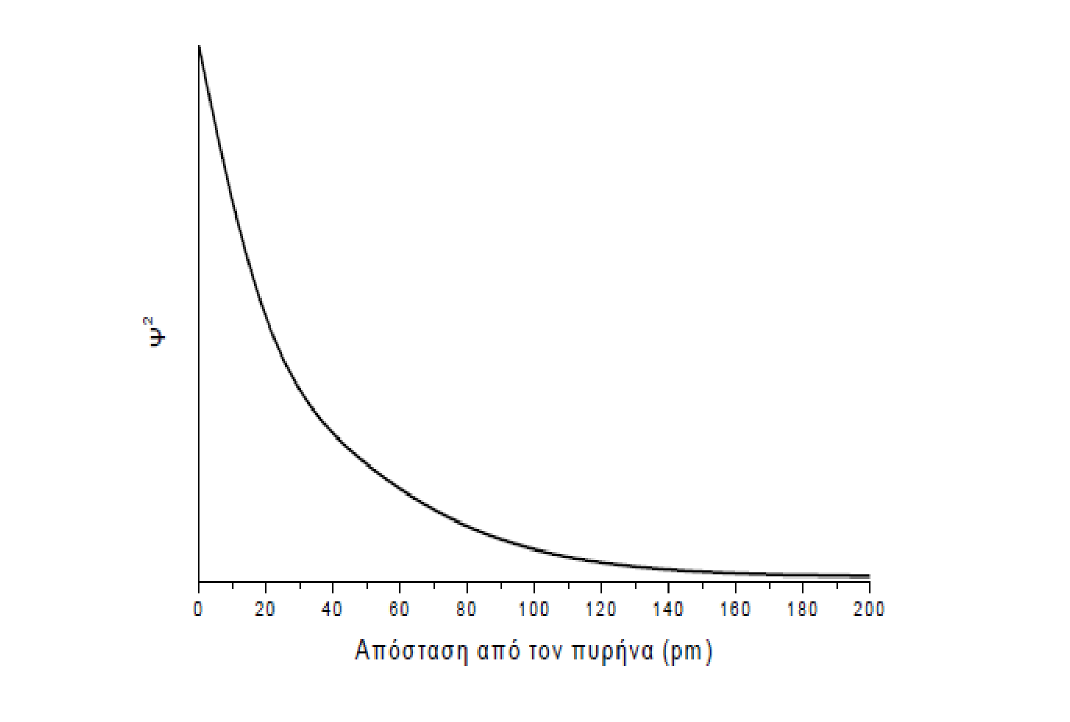
$|\psi|^2 \cdot dV$:

- **καθορίζει τον *αριθμό κατοχής* (*occupation number*), του ηλεκτρονίου στο στοιχειώδη όγκο d*V* γύρω από τον πυρήνα.**
- **ανάλογο με την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σ' ένα στοιχειώδη χώρο d*V*.**

ηλεκτρονιακό νέφος: μια τρισδιάστατη "κηλίδα ηλεκτρονίων"

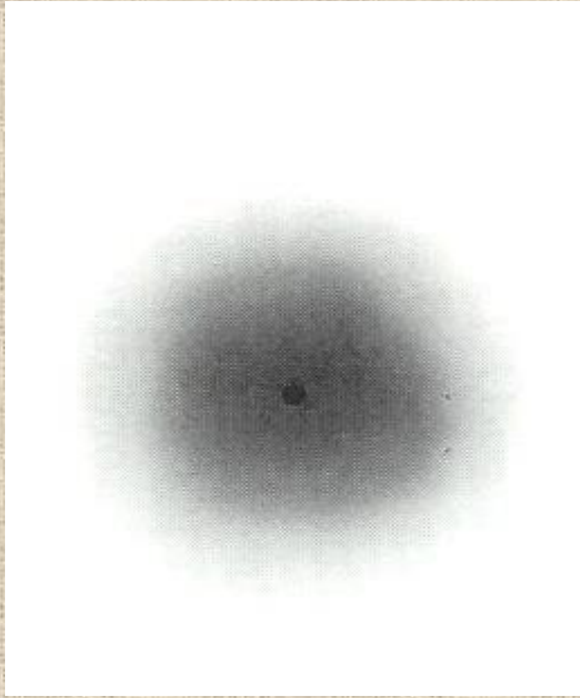


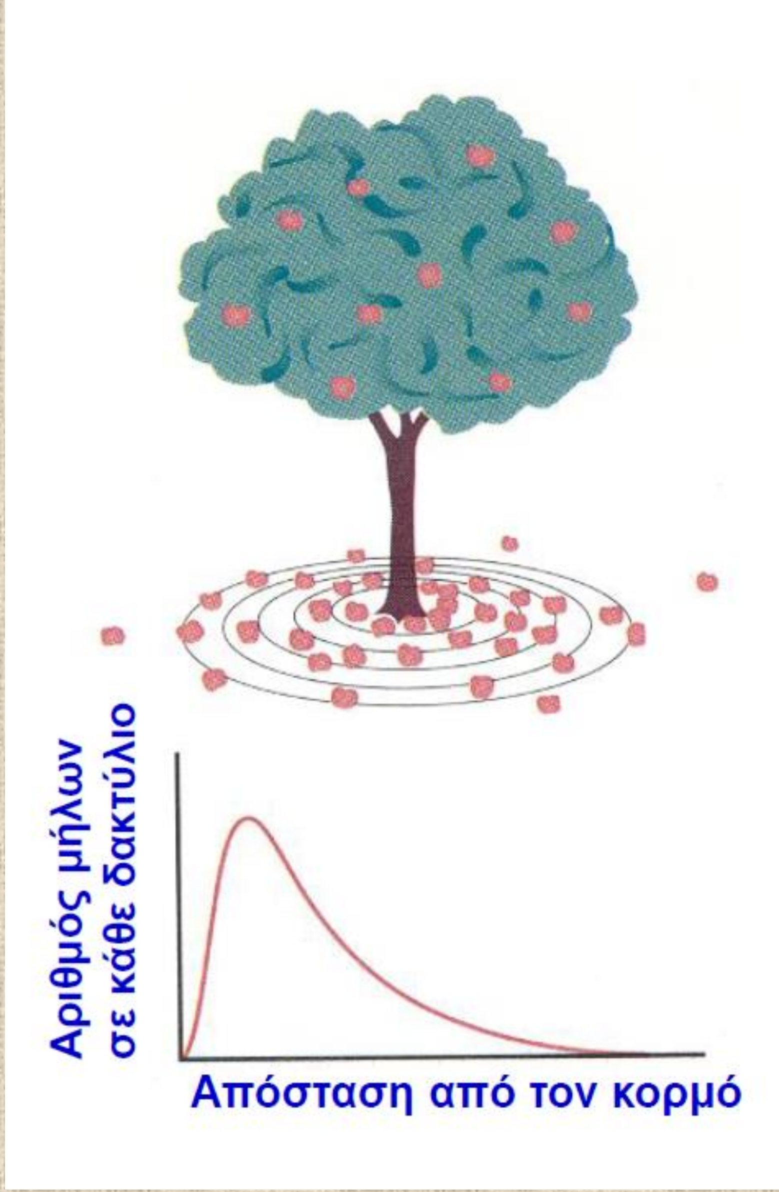
$-e|\psi|^2$: ***πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους***



Η ηλεκτρονική πυκνότητα είναι μέγιστη στον πυρήνα

Το ηλεκτρονικό νέφος είναι πυκνότερο κοντά στον πυρήνα





το ηλεκτρονικό νέφος μπορεί να είναι πυκνότερο στον πυρήνα, όμως το μεγαλύτερο μέρος του νέφους βρίσκεται σε κάποια απόσταση από αυτόν.

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

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;

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;

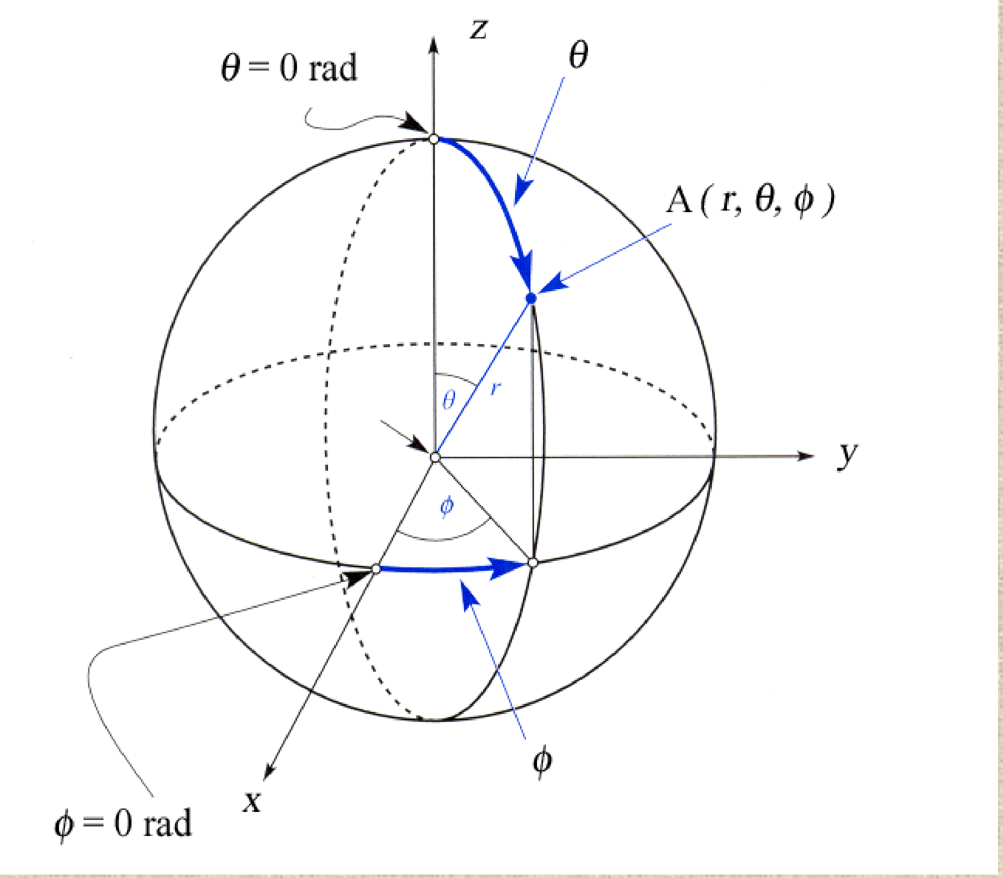
Α. Στην περιοχή Β κινούνται λιγότερα ηλεκτρόνια από ότι στην περιοχή Α.

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 Α.

Εξίσωση Schrödinger σε πολικές συντεταγμένες



A: πολικό σημείο

r: η απόσταση του από την αρχή των αξόνων

r: πολική ακτίνα

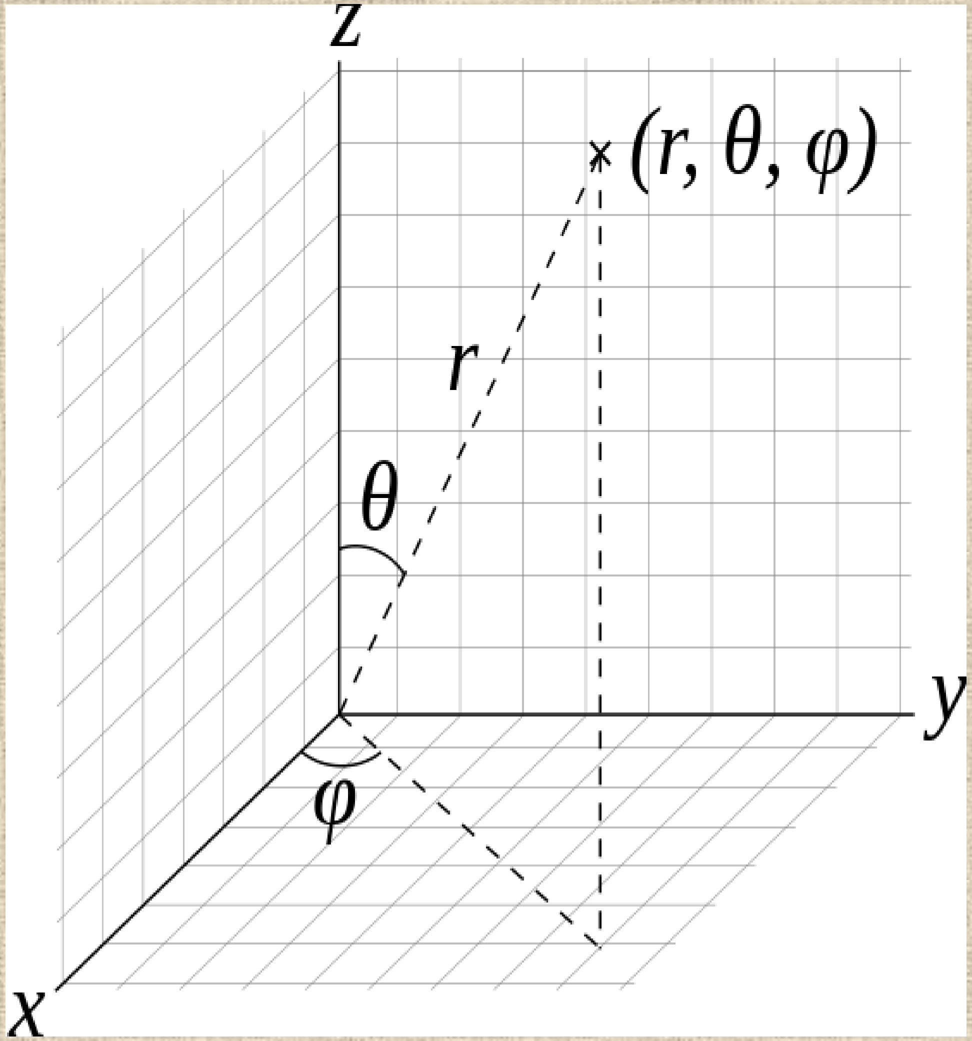
θ: ζενιθιακή γωνία

φ: αζιμουθιακή γωνία

$x = r \cdot \eta\mu\theta \cdot \sigma\upsilon\nu\varphi$

$y = r \cdot \eta\mu\theta \cdot \eta\mu\varphi$

$z = r \cdot \sigma\upsilon\nu\theta$



$x = r \cdot ημθ \cdot συνφ$

$y = r \cdot ημθ \cdot ημφ$

$z = r \cdot συνθ$

Σφαιρικές συντεταγμένες (*r*, *θ*, *φ*): ακτινική απόσταση *r*, πολική γωνία *θ* και αζιμούθιο *φ*.

Στο πολικό σύστημα συντεταγμένων η εξίσωση Schrödinger παίρνει την μορφή:

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

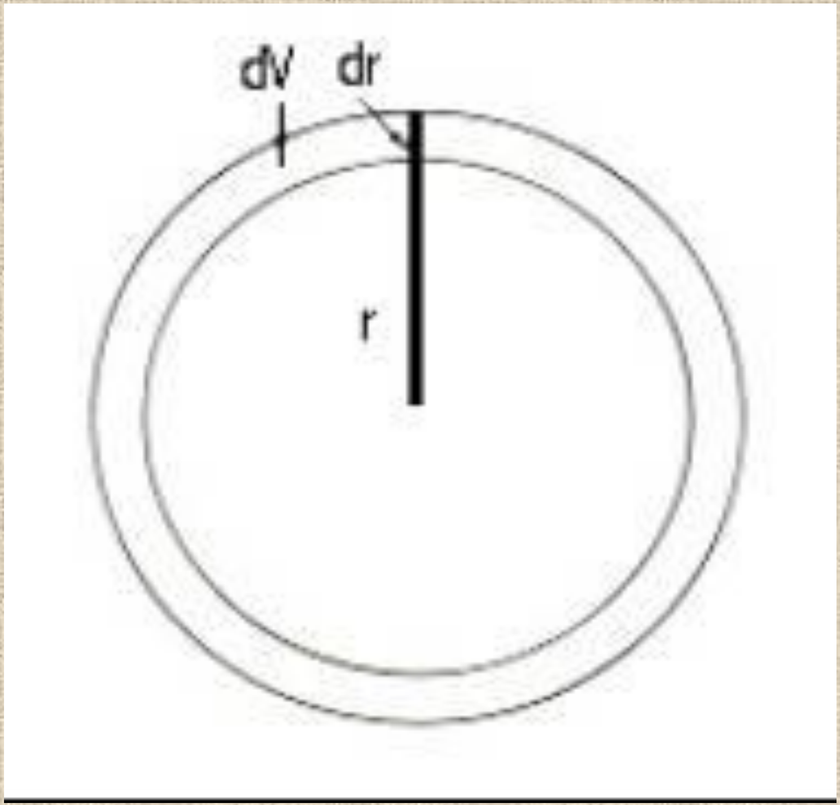
$$\underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r}\right)}_{R(r)} + \underbrace{\frac{1}{r^2 \eta\mu\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\eta\mu\theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}\right)}_{\Theta(\theta)} + \underbrace{\frac{1}{r^2 \eta\mu^2\theta}\frac{\partial^2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

Η γραφική παράσταση Ψ(r,θ, φ) προϋποθέτει τετραδιάστατο γράφημα. Για να παρακάμψουμε το πρόβλημα μπορούμε να δώσουμε δύο γραφικές παραστάσεις:

- **τη γραφική παράσταση της ακτινικής συνάρτησης $R($r) σε σχέση με την απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα. Το διάγραμμα αυτό συσχετίζεται με το μέγεθος του τροχιακού.**
- **τη γραφική παράσταση της γωνιακής συνάρτησης A(θ,φ) σε σχέση με τις σφαιρικές γωνιακές συντεταγμένες θ, φ. Το διάγραμμα αυτό συσχετίζεται με το σχήμα του τροχιακού.**

Η γραφική παράσταση των ηλεκτρονιακών νεφών (συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας) $|\Psi|^2$ περιλαμβάνει:

- **τη γραφική παράσταση του R^2(r) προς r**
- **τη γραφική παράσταση της συνάρτησης A^2(θ, φ) προς θ-φ**



Ένας πιο συνηθισμένος τρόπος εξέτασης της κατανομής του ηλεκτρονιακού νέφους είναι να θεωρήσουμε ότι το άτομο συγκροτείται από «φλοιούς», όπως είναι το κρεμμύδι.

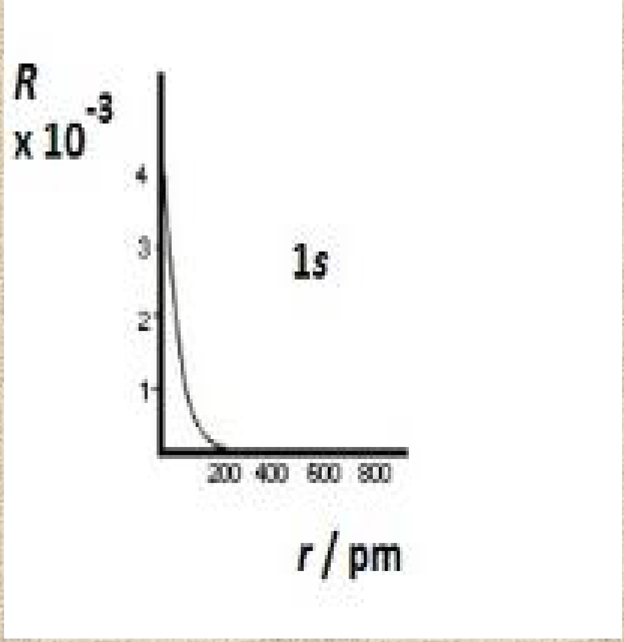
Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στο φλοιό όγκου d*V* εσωτερικής ακτίνας *r* και εξωτερικής ακτίνας *r*+d*r* είναι:

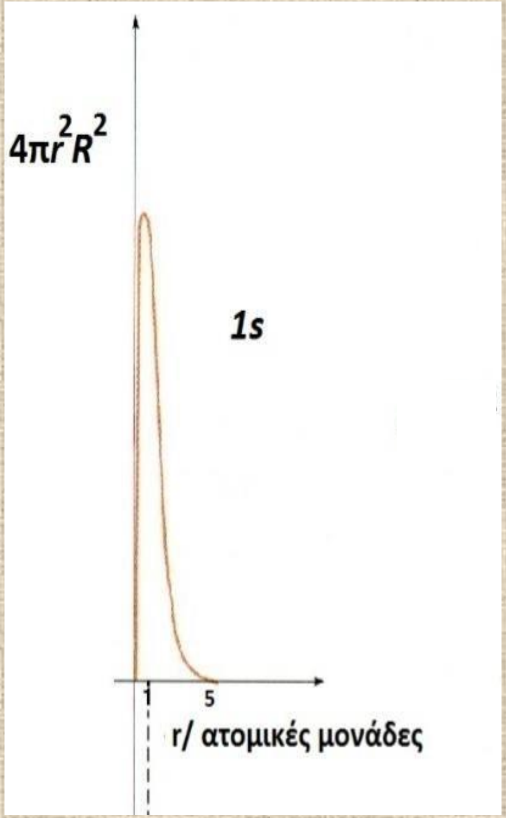
$$R^2 dV = R^2 d(4\pi r^3/3) = R^2 4\pi r^2 dr$$

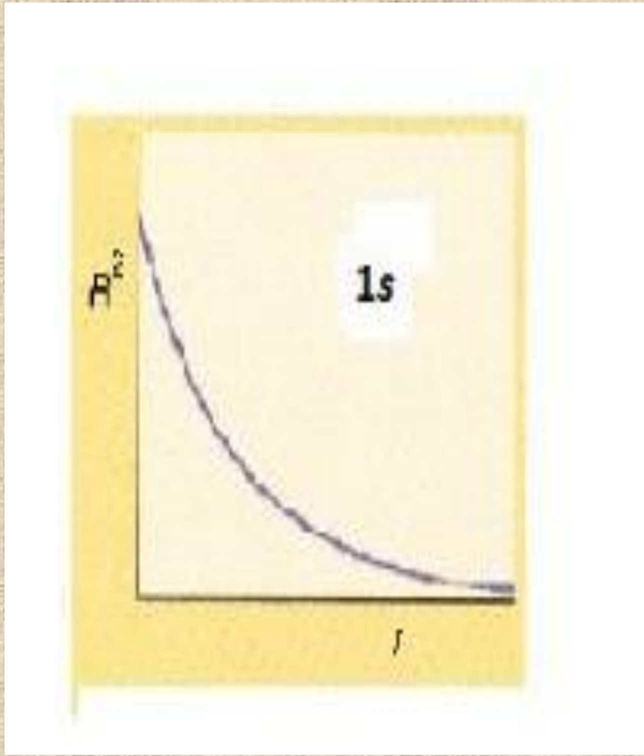
Ο όγκος φλοιού πάχους dr είναι:

$$dV = d(4\pi r^3/3) = 4\pi r^2 dr$$

Γραφική παράσταση των ακτινικών συναρτήσεων R(r), R^2(r) και της συνάρτησης ακτινικής πιθανότητας $4\pi r^2R^2$ για τροχιακό 1s







Κβαντικοί Αριθμοί

Για να προκύψει ηλεκτρονικό νέφος με παραδεκτό μέγεθος, σχήμα και προσανατολισμό θα πρέπει να δοθούν σωστές τιμές ενέργειας στην εξίσωση Schrödinger.

Οι αποδεκτές τιμές ενέργειας των ηλεκτρονίων δίνονται από τους συνδυασμούς των τριών *κβαντικών αριθμών, n, l και ml.*

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 αποδεκτές.

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

Κύριος κβαντικός αριθμός (*n*)

Επιτρεπτές τιμές: n = 1, 2, 3, … ∞

Καθορίζει:

- ✓ **το μέγεθος του ηλεκτρονιακού νέφους**
- ✓ **κατά μεγάλο μέρος, την ενέργεια του τροχιακού**
- ✓ **τη στιβάδα στην οποία κινείται το ηλεκτρόνιο**

Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή του *n* τόσο πιο απομακρυσμένο από τον πυρήνα είναι, κατά μέσο όρο, το ηλεκτρονιακό νέφος.

στιβάδα: τροχιακά με ίδιο n

τροχιακά στιβάδας n : n^2

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

Δευτερεύων ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός (*l*)

Επιτρεπτές τιμές: l = 0, 1, 2, 3, …(n-1)

Καθορίζει:

- ✓ **το σχήμα του ηλεκτρονιακού νέφους**
- ✓ **την ενέργεια του τροχιακού στα πολυηλεκτρονικά άτομα**
- ✓ **τη υποστιβάδα στην οποία κινείται το ηλεκτρόνιο**

l	0	1	2	3
τροχιακό	*s*	*p*	*d*	*f*

υποστιβάδα: τροχιακά με ίδιο l

τροχιακά υποστιβάδας l : 2l+1

s: sharp
p: principal
d: diffuse
f: fundamental

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

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l)

Επιτρεπτές τιμές: m_l = -l, (-l+1), …, 0, …, (l-1), +l

Καθορίζει:

✓ **τον προσανατολισμό του ηλεκτρονικού νέφους**

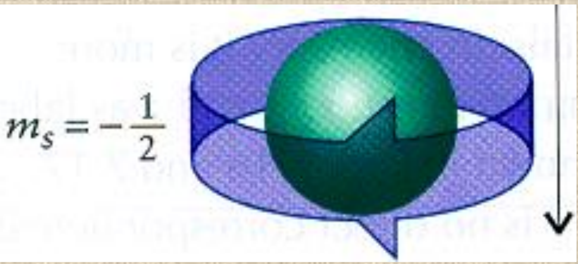
μαγνητικός κβαντικός αριθμός, m_l	+1	0	-1
τροχιακά *p*	p_x	p_z	p_y

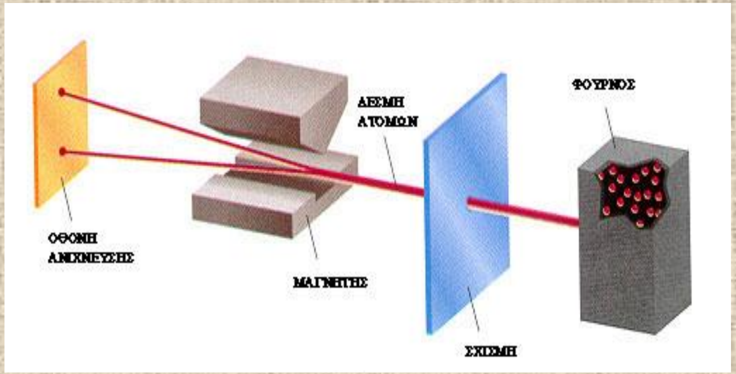
μαγνητικός κβαντικός αριθμός, m_l	+2	+1	0	-1	-2
τροχιακά *d*	$d_{x^2-y^2}$	d_{xz}	d_{z^2}	d_{yz}	d_{xy}

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός του spin (m_s)

Επιτρεπτές τιμές: m_s = -1/2, +1/2

ανεξάρτητος από τις τιμές των άλλων κβαντικών αριθμών.





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.

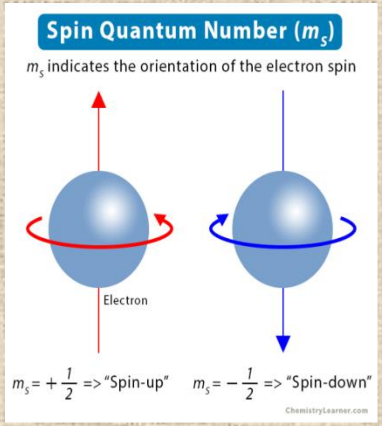
Κβαντικός αριθμός spin (s)

spin: εγγενής στροφορμή ενός θεμελιώδους σωματιδίου

θεμελιώδη σωματίδια → **φερμιόνια** → **ημιακέραιο spin**

θεμελιώδη σωματίδια → **μποζόνια** → **ακέραιο spin**

spin e^- = 1/2



Φερμιόνια: matter - Fermi–Dirac statistics – αρχή Pauli *(ηλεκτρόνια)*

Μποζόνια: force carrier - Bose–Einstein statistics *(φωτόνια)*

⇓

Η ύλη αποτελείται από φερμιόνια που αλληλοεπιδρούν με δυνάμεις που μεταφέρονται από μποζόνια

m_s για το ηλεκτρόνιο:

-1/2, +1/2

n	l $n-1$	Τροχιακό	m_l $(-l)$-$(+l)$	Αριθμός τροχιακών σε κάθε υπο-στιβάδα	Συνολικός αριθμός τροχιακών σε μία στιβάδα n^2	
1	0	1*s*	0	1	1	K
2	0	2*s*	0	1		L
2	1	2*p*	-1, 0, +1	3	4	
3	0	3*s*	0	1		M
3	1	3*p*	-1, 0, +1	3		
3	2	3*d*	-2, -1, 0, +1, +2	5	9	
4	0	4*s*	0	1		N
4	1	4*p*	-1, 0, +1	3		
4	2	4*d*	-2, -1, 0, +1, +2	5		
4	3	4*f*	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7	16	

Στιβάδα

Υποστιβάδα

$2l+1$

n^2

ΑΤΟΜΙΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

Τα ατομικά τροχιακά είναι συναρτήσεις των θέσεων του ηλεκτρονίου και όταν δεν υπάρχει ηλεκτρόνιο, αυτά υπάρχουν δυνητικά.

Περιγράφονται πλήρως από τους 3 κβαντικούς αριθμούς, n, l, m_l, και ανάλογα με τις τιμές αυτών ταξινομούνται ως εξής:

- ατομικά τροχιακά που έχουν τον ίδιο κβαντικό αριθμό n αποτελούν στιβάδα,
- ατομικά τροχιακά που έχουν τον ίδιο n και τον ίδιο l αποτελούν υποστιβάδα.

Ο αριθμός των ατομικών τροχιακών που έχουν τον ίδιο κύριο κβαντικό αριθμό n ισούται με n^2.

Ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων που μπορεί να υπάρχει σε κάθε στιβάδα ισούται με $2n^2$.

αριθμός που δηλώνει την ενεργειακή στάθμη

κύριος κβαντικός αριθμός n

$4p^5$

γράμμα που δηλώνει τον τύπο του τροχιακού (l)

l=0 $\longrightarrow$ **s** **l=1** $\longrightarrow$ **p**

l=2 $\longrightarrow$ **d** **l=3** $\longrightarrow$ **f**

$4p^5$

Αριθμός (δείκτης) που δηλώνει το πλήθος των

e στα συγκεκριμένα τροχιακά

$4p^5$

Περιγράψετε συνοπτικά τις βασικές διαφορές μεταξύ του ατομικού πρότυπου Bohr και του υλοκυματικού προτύπου του Schrödinger.

2. 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.

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

4. 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.

5. 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;

6. 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.

7. Πώς συμβολίζεται ένα τροχιακό με τους κβαντικούς αριθμούς n=4, l=2 και m_l=0.

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

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

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

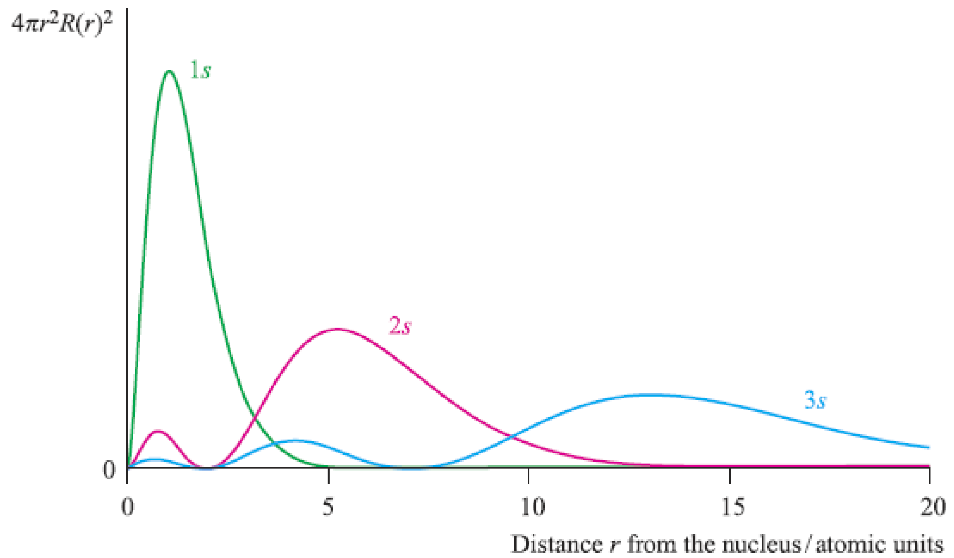
9. Πόσα s, p, d τροχιακά διαθέτει ο φλοιός Μ ενός ατόμου.

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

Να δικαιολογήσετε.

Συνάρτηση ακτινικής πιθανότητας $4\pi r^2R(r)^2$

η πιθανότητα να βρεθεί το e σε απόσταση r από τον πρήνα



Radial distribution functions, $4\pi r^2R(r)^2$, for the 1s, 2s and 3s atomic orbitals of the hydrogen atom.

- **Η πιθανότητα εύρεσης e στον πυρήνα είναι 0**
- **Κάθε συνάρτηση έχει τουλάχιστον ένα μέγιστο**
- **Το μέγιστο αντιστοιχεί στην απόσταση από τον πυρήνα όπου είναι πιθανότερο να βρεθεί το e**
- **Στα σημεία όπου μηδενίζεται η συνάρτηση ($r\neq0$) δεν υπάρχει πιθανότητα να βρεθεί το e**

Κομβικές επιφάνειες

- **κομβικά σημεία (nodes): σημεία μηδενικής πιθανότητας εύρεσης ηλεκτρονίου**
- **κόμβος ή κομβική επιφάνεια: περιοχή μηδενικής πιθανότητας εύρεσης ηλεκτρονίου**

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi)$$

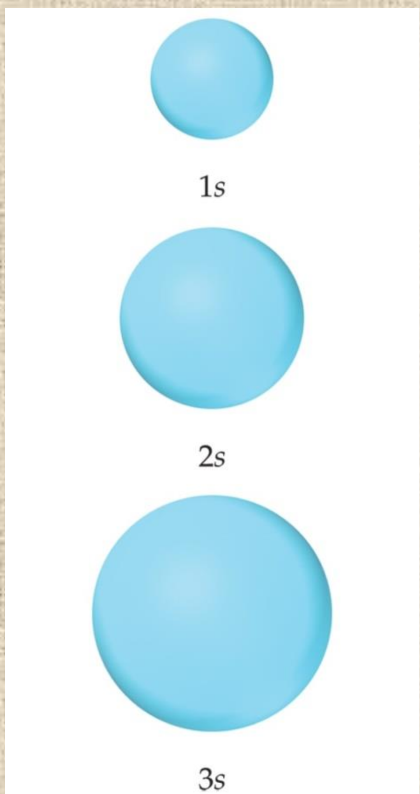
$$\Psi = 0 \Longrightarrow R(r) = 0 \text{ είτε } \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi) = 0$$

ο αριθμός και το είδος των κομβικών επιφανειών προκύπτει

από τις συνθήκες για τις οποίες

$R(r) = 0$ ή $\Theta(\theta).\Phi(\phi) = 0$

s τροχιακά



n = 1, 2, ..

l = 0

m_l = 0

σχήμα: σφαιρικό

ακτίνα σφαίρας: ανάλογη του n

Εξίσωση Schrödinger

$$\psi_{1s} = 2\left(\frac{z}{\alpha_0}\right)^{3/2} e^{-\rho}\,\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$\alpha_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2}$$

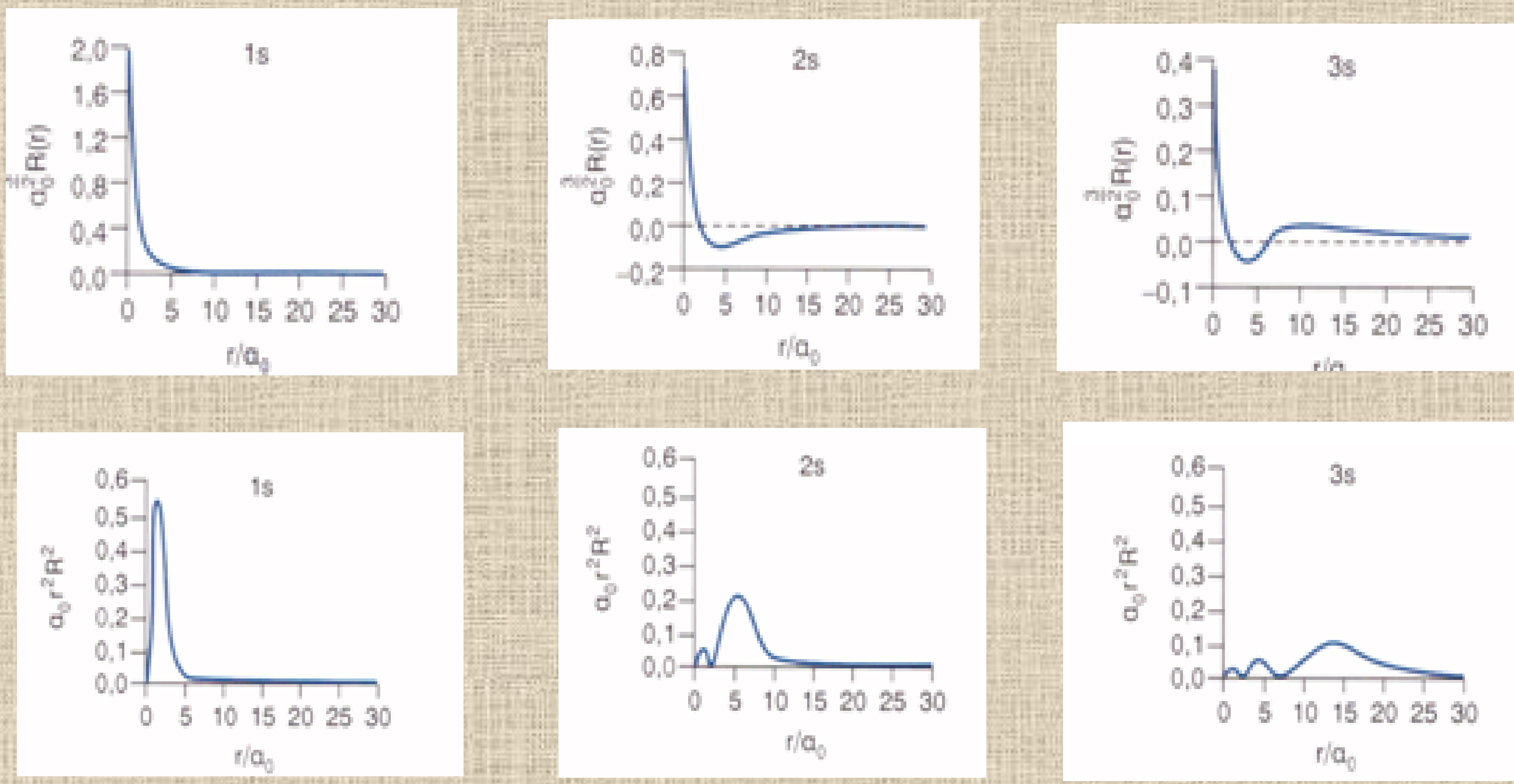
$$\rho = \frac{zr}{\alpha_0}$$

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.

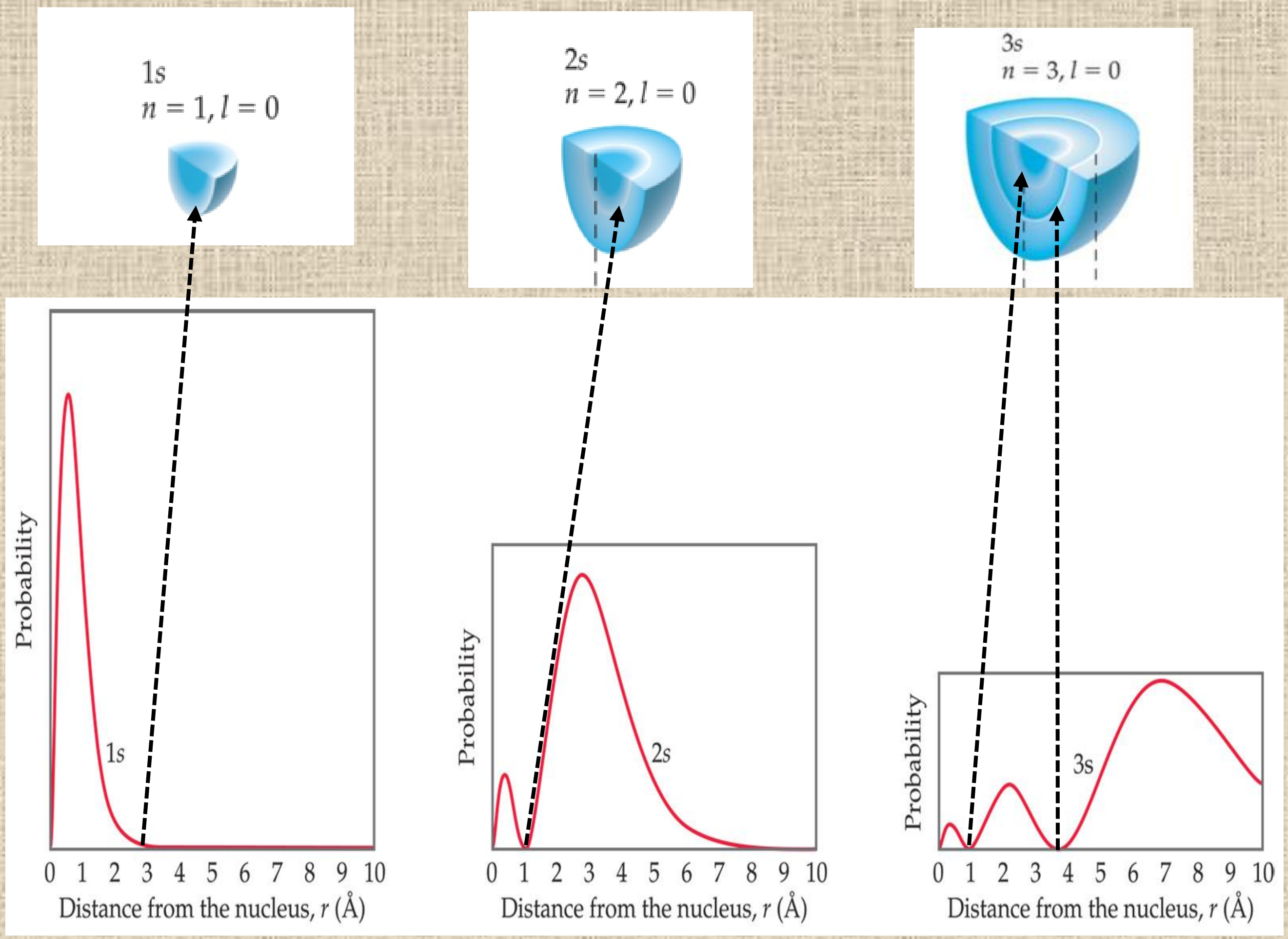
Ακτινικοί κόμβοι - *τροχιακά s*

$R\,(r_i) = 0$ ⟶ ακτινικός κόμβος

$R^2\,(r_i) = 0$ ⟹ μηδενική πιθανότητα εύρεσης e



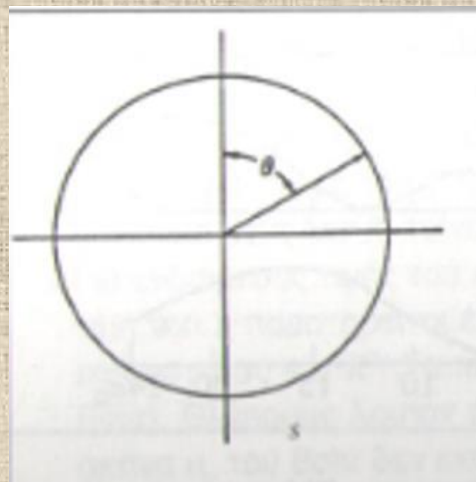
s τροχιακά

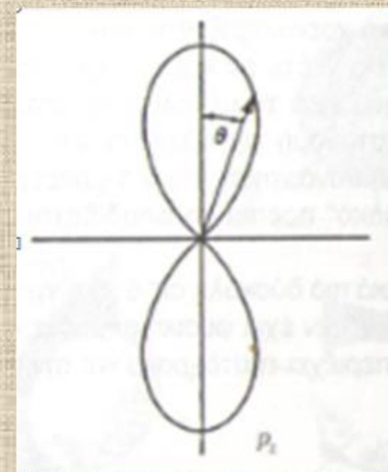


Τα τροχιακά με κύριο κβαντικό αριθμό n παρουσιάζουν n-l-1 κόμβους (nodes).

Συνάρτηση γωνιακής πιθανότητας A (θ,φ)^2

η πιθανότητα να βρεθεί το e σε χώρο που καθορίζεται από τις γωνίες ϑ και φ





A (θ,φ) ανεξάρτητη των θ και φ

A(θ,φ) = f (θ,φ)

p τροχιακά

n = 2, ..

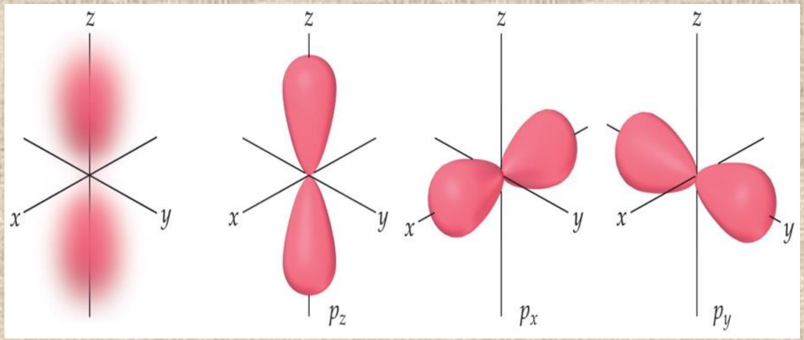
l = 1

$$m_l \begin{cases} -1 \longrightarrow p_y \\ 0 \longrightarrow p_z \\ 1 \longrightarrow p_x \end{cases}$$

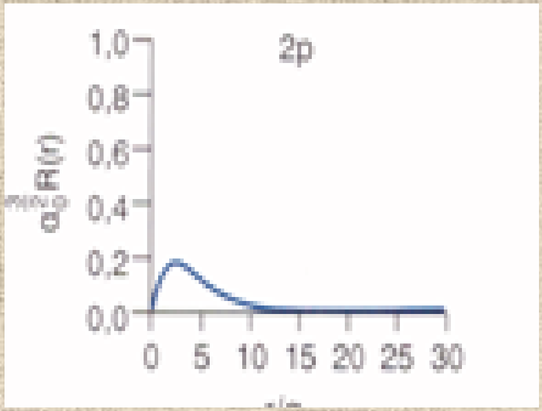
$$\psi_{2p_z} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho\, e^{-\rho/2}\, \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\ \sigma\upsilon\nu\,\theta$$

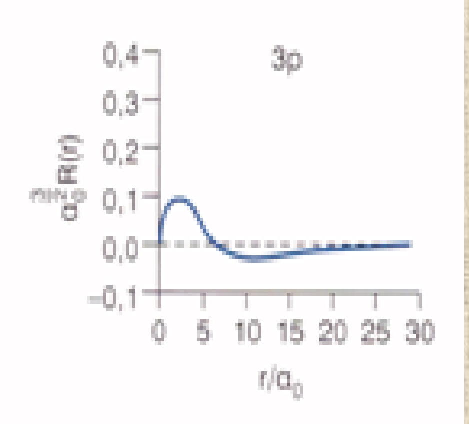
$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho\, e^{-\rho/2}\, \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\ \sigma\upsilon\nu\,\varphi\cdot\eta\mu\,\theta$$

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

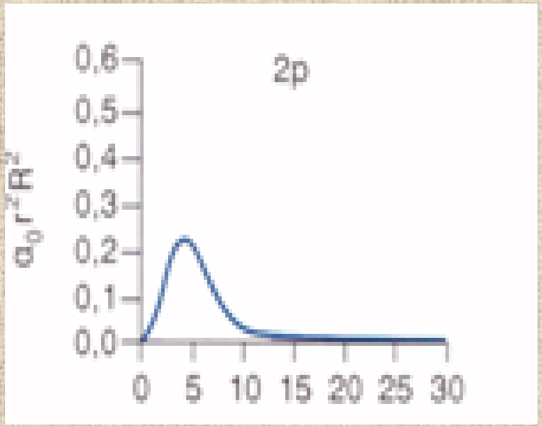


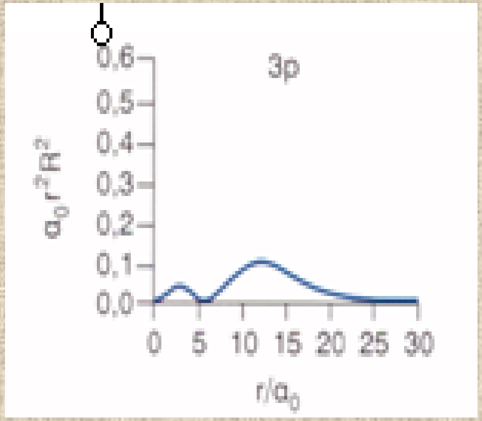
Ακτινικοί κόμβοι - *τροχιακά p*



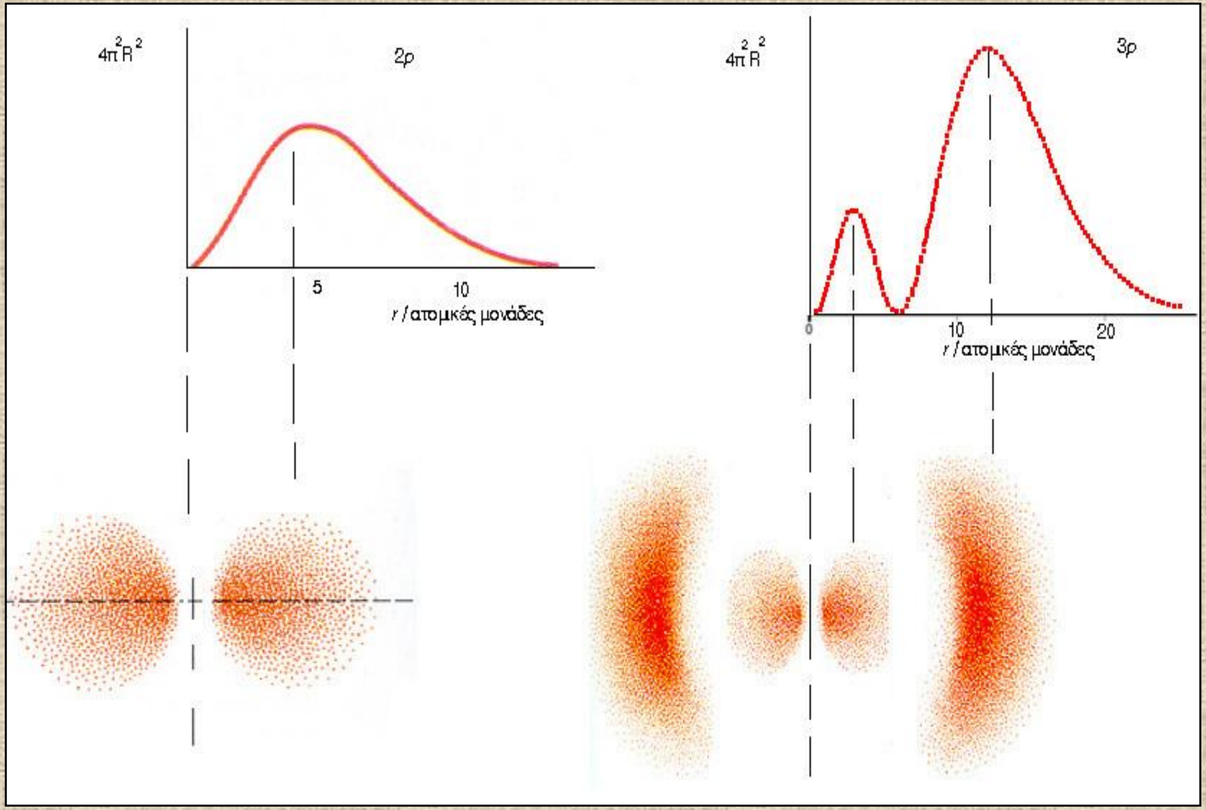


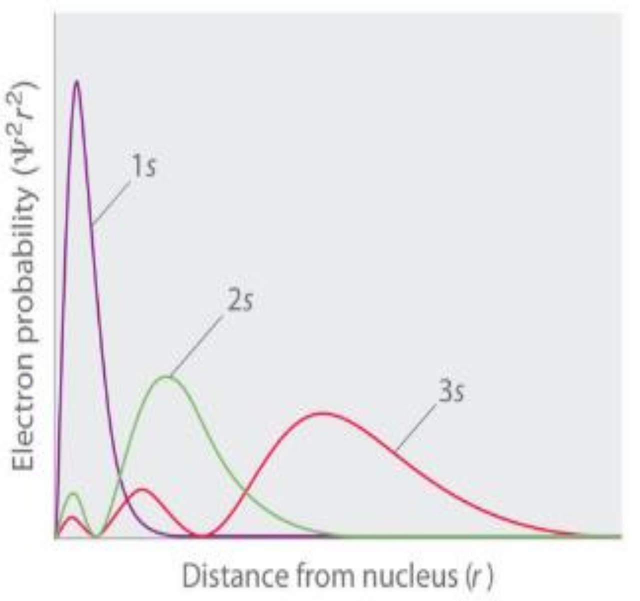
Κόμβοι = n-l-1



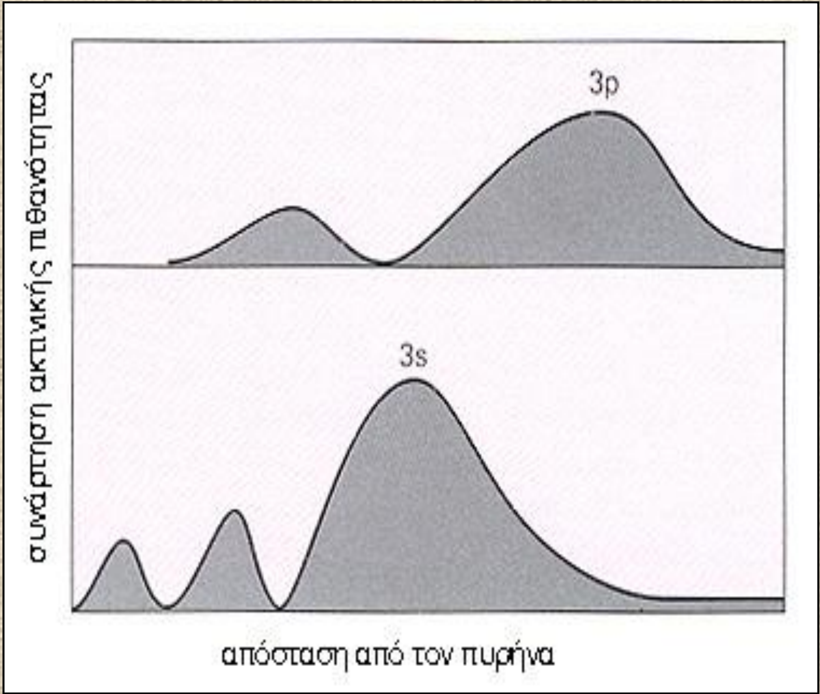


Ακτινικοί κόμβοι - *τροχιακά p*





(c) Radial probability



σύνολο κόμβων = n-l-1