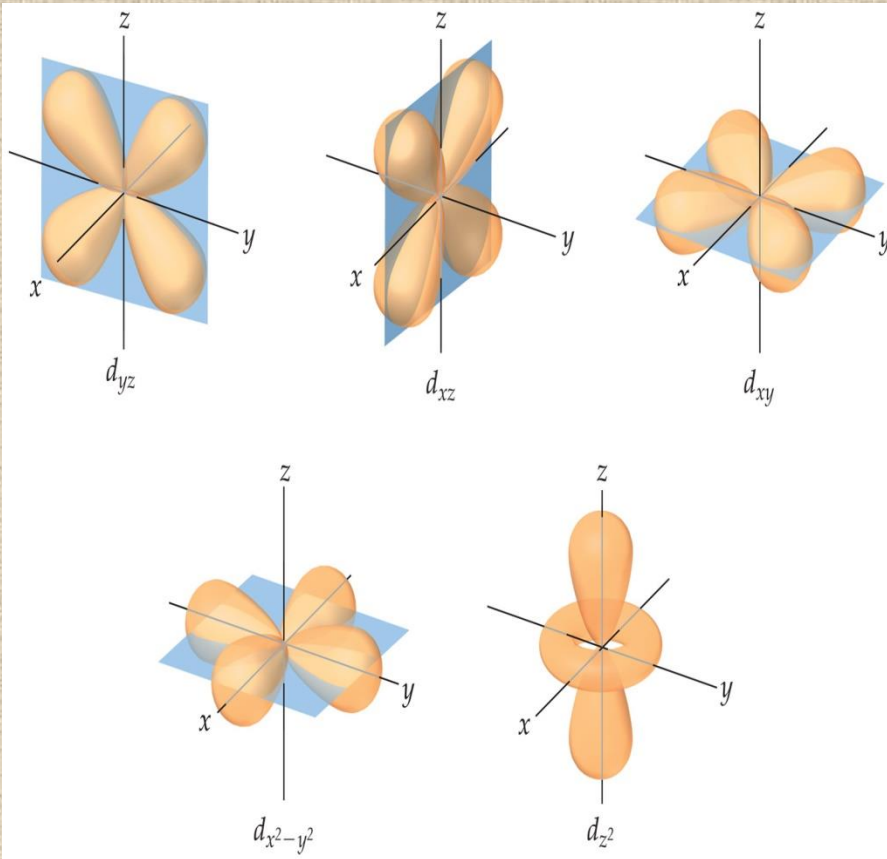
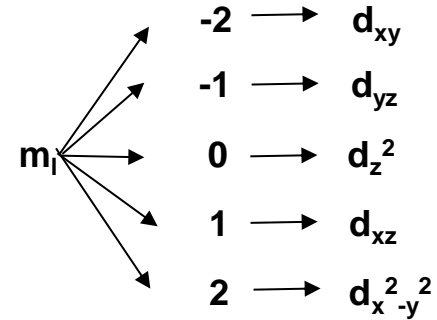


d τροχιακά



$n = 3, ..$

$l = 2$



$$\psi_{3d_{z^2}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

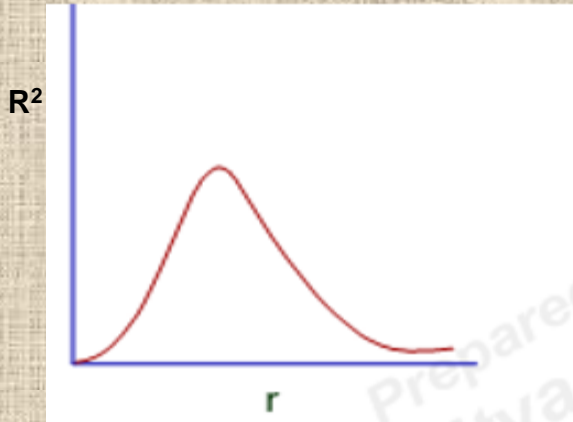
$$\psi_{3d_{xz}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} z^{3/2} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{30}{\pi}} \eta \mu \theta \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi$$

$$\psi_{3d_{yz}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} z^{3/2} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{30}{\pi}} \eta \mu \theta \cdot \sin \theta \cdot \eta \mu \varphi$$

$$\psi_{3d_{x^2-y^2}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \eta \mu^2 \theta \cdot \sin 2\varphi$$

$$\psi_{3d_{xy}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \eta \mu^2 \theta \cdot \eta \mu 2\varphi$$

Κόμβοι - τροχιακά 3d



δεν υπάρχουν
ακτινικοί κόμβοι

Γωνιακός κόμβος

μηδενισμός της γωνιακής συνάρτησης $\Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$

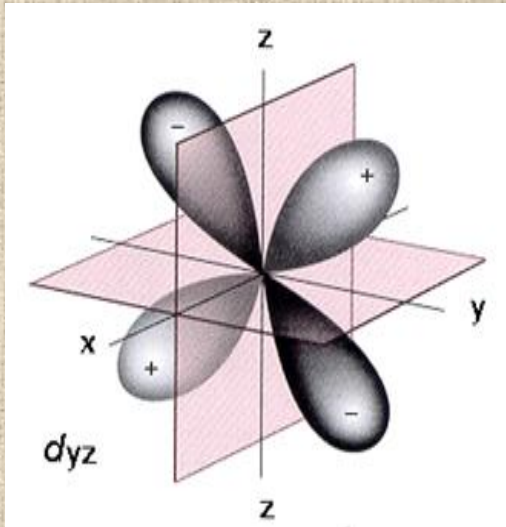
μηδενισμός $\Theta(\theta)$

κωνικές κομβικές
επιφάνειες

μηδενισμός $\Phi(\varphi)$

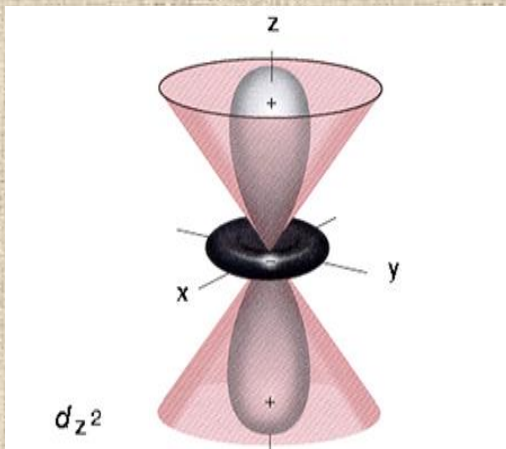
επίπεδες κομβικές
επιφάνειες

Κόμβοι - τροχιακά d

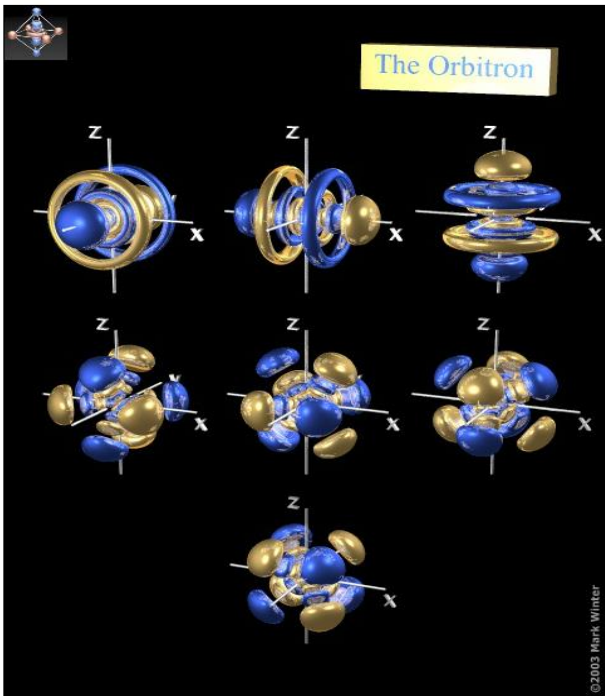


2 επίπεδοι κόμβοι

σύνολο επίπεδων κόμβων = 1

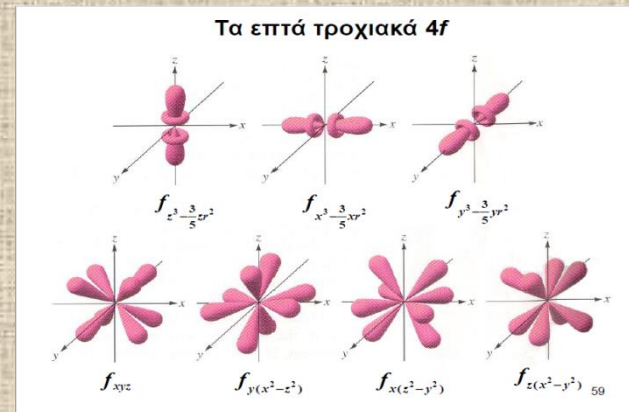


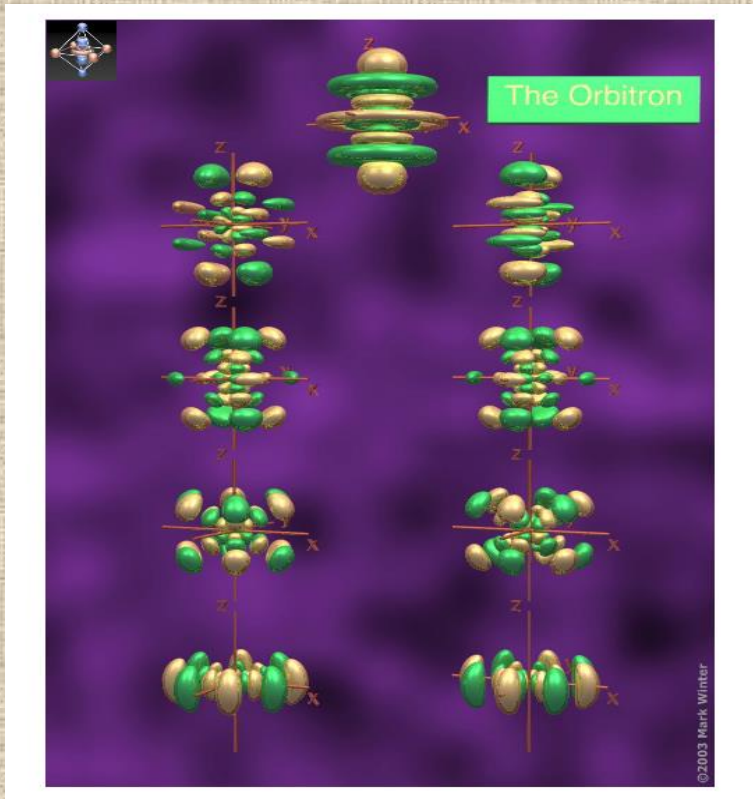
1 κωνικός κόμβος



The shape of the seven *f* orbitals (cubic set). From left to right: (top row) $7f_y^3$, $7f_x^3$, $7f_z^3$, (middle row) $7f_x(z^2-y^2)$, $7f_y(z^2-x^2)$, $7f_z(x^2-y^2)$ and (bottom row) $7f_{xyz}$. For each, the blue zones are where the wave functions have negative values and the gold zones denote positive values.

f atomic orbitals





g atomic orbitals

[http://www.orbitals.com/orb/orbtable.
htm](http://www.orbitals.com/orb/orbtable.htm)

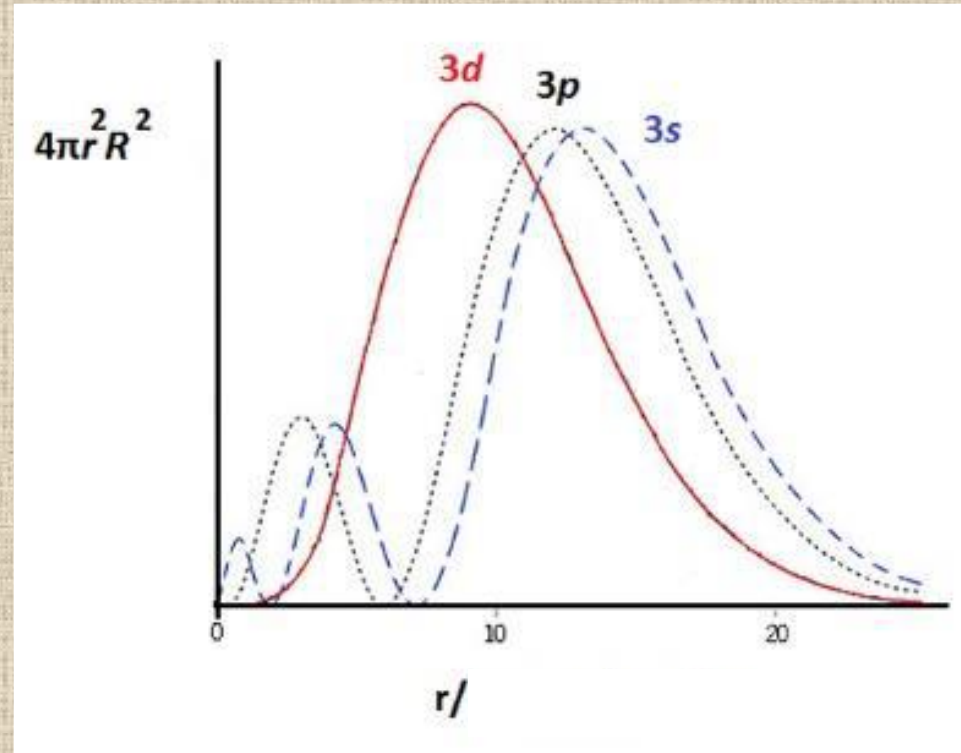
Η παρουσία μεγάλου αριθμού κόμβων αυξάνει την ηλεκτρονιακή πυκνότητα κοντά στον πυρήνα με αποτέλεσμα να αυξάνεται η διεισδυτικότητα του τροχιακού.



Όσο περισσότερες είναι οι κομβικές επιφάνειες τόσο χαμηλότερη είναι η ενέργεια του αντίστοιχου τροχιακού



$$E(3s) < E(3p) < E(3d)$$



$$\text{σύνολο κόμβων} = n - l - 1$$

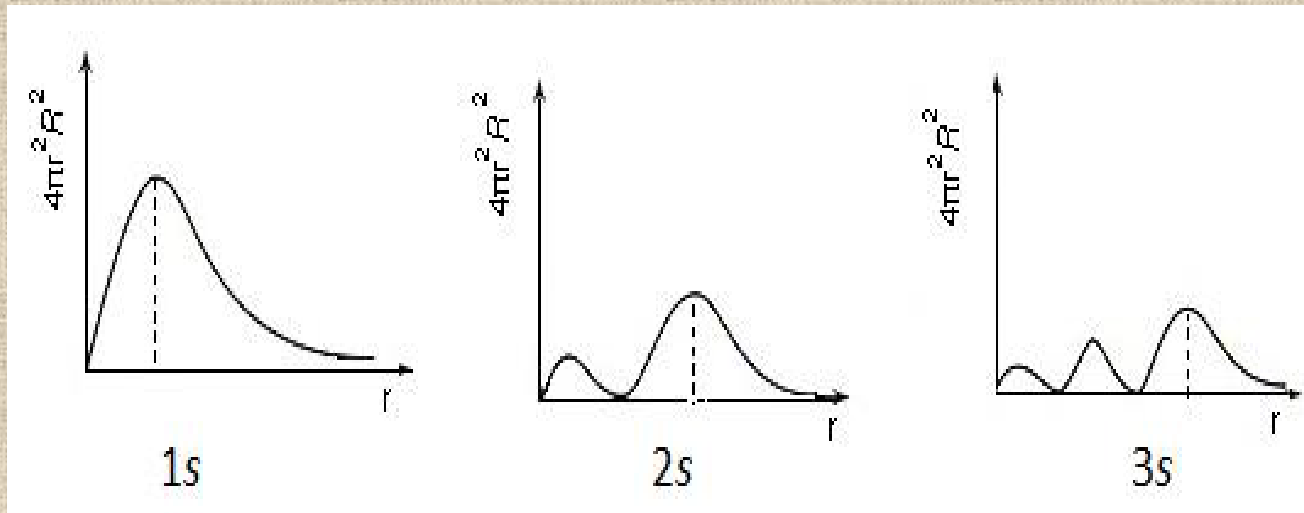
11. Γιατί για τον καθορισμό ενός s τροχιακού απαιτούνται δύο κβαντικοί αριθμοί, ενώ για τον καθορισμό κάθε άλλου είδους τροχιακού απαιτούνται τρεις;

12. Η οριακή επιφάνεια που καλύπτει το 99% του ηλεκτρονιακού νέφους για το $2s$ τροχιακό είναι μια σφαίρα με ακτίνα 500 pm. Η οριακή επιφάνεια που καλύπτει το 99% του ηλεκτρονιακού νέφους για το $1s$ τροχιακό είναι μια σφαίρα με ακτίνα:

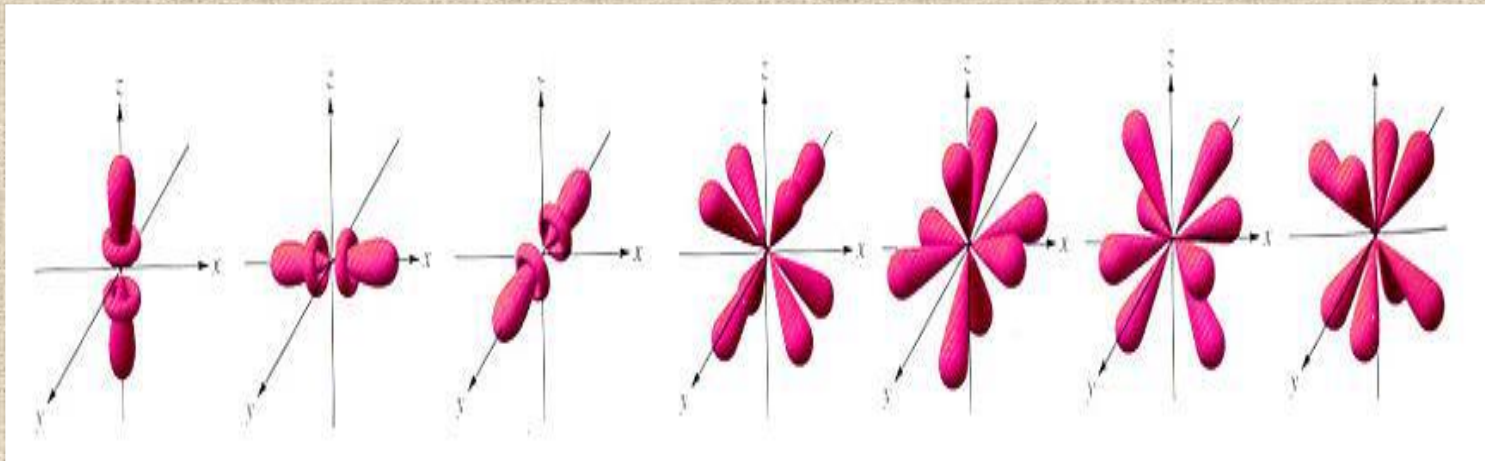
- A. 200 pm,
- B. 500 pm,
- Γ. 600 pm,
- Δ. 800 pm.

13. Πώς τα ηλεκτρόνια διασχίζουν τις κομβικές επιφάνειες; Για παράδειγμα πως ένα p ηλεκτρόνιο περνά από τον ένα λοβό στον άλλο;

14. Με τι σχετίζεται η θέση της μέγιστης κορυφής στα παρακάτω διαγράμματα $4\pi r^2 R^2 - r$;

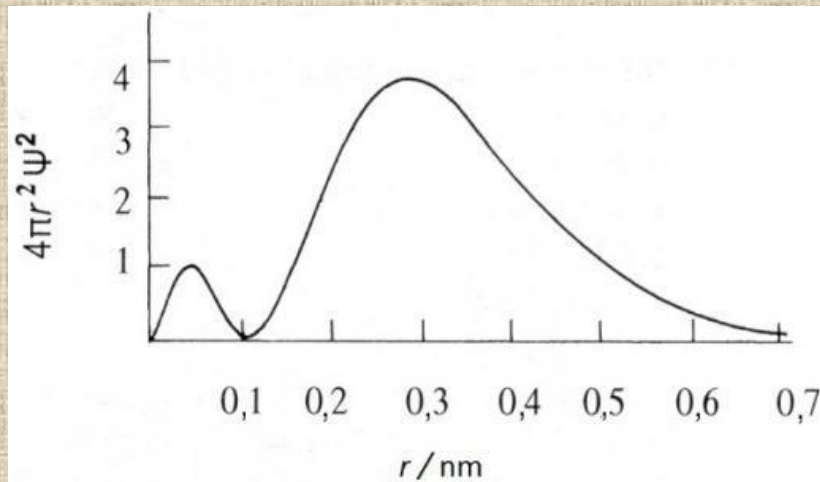


15. Παρακάτω δίνονται σχηματικά, με περιγράμματα (οριακές καμπύλες) ηλεκτρονιακής πυκνότητας, τα τροχιακά $4f$. Να εξηγήσετε τι εκφράζουν οι παραστάσεις αυτές και πως προκύπτουν; Γιατί υπάρχουν επτά διαφορετικά f τροχιακά;



16. Δίνεται η παρακάτω γραφική παράσταση της συνάρτησης ακτινικής πιθανότητας για το άτομο του υδρογόνου. Με βάση το διάγραμμα αυτό να απαντήσετε στα εξής:

- α. Πόσους κόμβους έχει η συνάρτηση αυτή;
- β. Ποιος τύπος τροχιακού εμπλέκεται στην περίπτωση αυτή;
- γ. Τι είδος τροχιακό θα είχαμε αν υπήρχε ένας ακόμα κόμβος;



5.4. Δίνεται η γραφική παράσταση της $R(r)$ για το 1s τροχιακό του H.

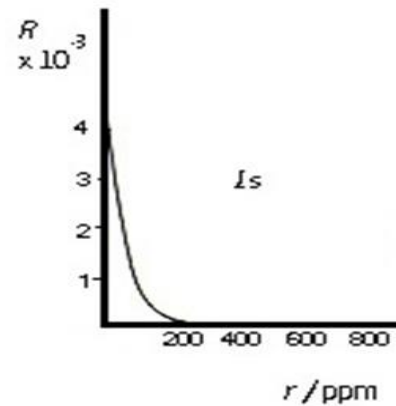
Τι διαφορά θα έχει η αντίστοιχη συνάρτηση για το He^+ ?

Να σχεδιάσετε συγκριτικά την γραφική παράσταση των

$4\pi r^2 R(r)^2$ για τα 2 είδη

Ακτινική συνάρτηση για 1s:

$$2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\rho} \quad \rho = \frac{Zr}{a_0}$$

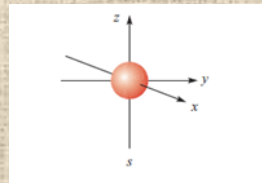


Hydrogenic Orbitals

Hydrogenic atoms are atoms that only have one electron orbiting around the nucleus, even though the nucleus may have more than one proton and one or more neutrons. In this case, the electron has the same orbitals as the hydrogen atom, except that they are scaled by a factor of $1/Z$. Z is the atomic number of the atom, the number of protons in the nucleus. The increased number of positively charged protons shrinks the size of the orbitals.

Thus, the same graphs for hydrogen above apply to hydrogenic atoms, except that instead of expressing the radius in units of a_0 , the radius is expressed in units of a_0/Z . Correspondingly, the values have to be renormalized by a factor of $(Z/a_0)^{3/2}$. So a He^+ atom has orbitals that are the same shape but half the size of the corresponding hydrogen orbitals and a Li^{2+} atom has orbitals that are the same shape but one third the size of the corresponding hydrogen orbitals.

Στο σχήμα φαίνεται η γραφική παράσταση της συνάρτησης γωνιακής πιθανότητας $A(\theta, \phi)^2$ για τα τροχιακά 1s και 2p. Πώς περιμένετε να είναι το σχήμα για τα τροχιακά 2s και 3p



$A(\theta, \phi)$

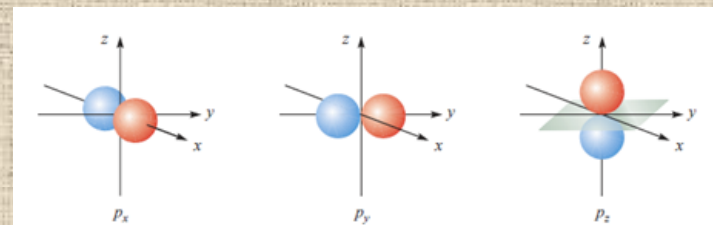
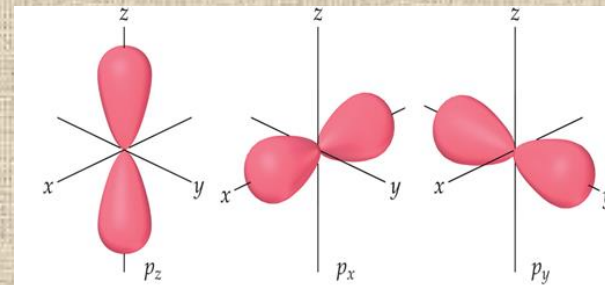


Table 2.3 Angular wave-functions of hydrogenic atom

l	$Y(\theta, \phi)$
0	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
1	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta$
1	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sin\theta\cos\phi$
1	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sin\theta\sin\phi$
2	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$
2	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\phi$
2	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\phi$
2	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin^2\theta\cos 2\phi$
2	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin^2\theta\sin 2\phi$

$A(\theta, \phi)^2$



5.6. Το e του H (στη θεμελιώδη κατάσταση) είναι πιθανότερο να βρίσκεται σε απόσταση 52.9 pm από τον πυρήνα. Αυτό είναι συμβατό με την μέγιστη τιμή της $R(r)$ στο σημείο $r=0$?

Οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger για το άτομο του H

Atomic orbital	n	l	m_l	Radial part of the wavefunction, $R(r)^\dagger$	Angular part of wavefunction, $A(\theta, \phi)$
1s	1	0	0	$2e^{-r}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$

Ατομικά Τροχιακά – Συνοπτικά

- ❖ Τα ατομικά τροχιακά είναι κυματοσυναρτήσεις των θέσεων του ηλεκτρονίου και υπάρχουν δυνητικά ακόμα και όταν δεν είναι κατειλημμένα με ηλεκτρόνια.
- ❖ Κάθε κυματοσυνάρτηση περιλαμβάνει την ακτινική (R) και την γωνιακή (A) συνάρτηση
- ❖ Η ακτινική συνάρτηση σχετίζεται με το μέγεθος του τροχιακού ενώ η ακτινική με τον προσανατολισμό του.
- ❖ Το μέγιστο του τετραγώνου της ακτινικής συνάρτησης αντιστοιχεί στην απόσταση από τον πυρήνα όπου είναι πιθανότερο να βρεθεί το e
- ❖ Κομβικά σημεία (nodes): σημεία μηδενικής πιθανότητας εύρεσης ηλεκτρονίου
- ❖ Κόμβος ή κομβική επιφάνεια: περιοχή μηδενικής πιθανότητας εύρεσης ηλεκτρονίου
- ❖ Υπάρχουν $n-1$ κόμβοι στην ακτινική συνάρτηση ενός τροχιακού
- ❖ Υπάρχουν l κομβικά επίπεδα στη γωνιακή συνάρτηση ενός τροχιακού