

Normality ή Κανονικότητα (N)

Normality (N) είναι τα γραμμοϊσοδύναμα της διαλυμένης ουσίας σε ένα λίτρο διαλύματος.

$$\text{Normality (N)} = \frac{\text{γραμμοϊσοδύναμα διαλυμένης ουσίας}}{\text{λίτρα διαλύματος}}$$

Στην πράξη χρησιμοποιούμε και τα χιλιοστο-γραμμοϊσοδύναμα (meq) ανά χιλιοστόλιτρο (mL).

Ορισμός γραμμοϊσοδυναμίου:

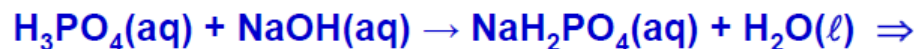
$$\text{g-eq} = \text{mole διαλυμένης ουσίας} \times n \quad n = \text{καθαρός αριθμός}$$

Η τιμή του n εξαρτάται από τον τύπο της αντίδρασης!!!

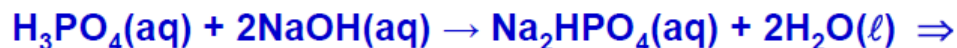
⇒ δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε τη normality, αν δεν γνωρίζουμε σε ποια αντίδραση θα χρησιμοποιηθεί το διάλυμα.

Το γραμμοϊσοδύναμο σε μεταθετικές αντιδράσεις

Οξύ: n = αριθμός των H^+ που παρέχονται κατά την αντίδραση



$$1 \text{ eq } H_3PO_4 = \frac{1 \text{ mol } H_3PO_4}{1} = \frac{98,00 \text{ g}}{1} = 98,00 \text{ g } H_3PO_4$$



$$1 \text{ eq } H_3PO_4 = \frac{1 \text{ mol } H_3PO_4}{2} = \frac{98,00 \text{ g}}{2} = 49,00 \text{ g } H_3PO_4$$



$$1 \text{ eq } H_3PO_4 = \frac{1 \text{ mol } H_3PO_4}{3} = \frac{98,00 \text{ g}}{3} = 32,67 \text{ g } H_3PO_4$$

Το γραμμοϊσοδύναμο σε οξειδοαναγωγικές αντιδράσεις

Οξειδωτική ουσία: n = αριθμός των προσλαμβανομένων ηλεκτρονίων κατά την αντίδραση

$$1 \text{ eq KMnO}_4 = \frac{1 \text{ mol KMnO}_4}{5} = 31,61 \text{ g} \quad \text{για } \text{MnO}_4^- \rightarrow \text{Mn}^{2+}$$

$$1 \text{ eq KMnO}_4 = \frac{1 \text{ mol KMnO}_4}{3} = 52,68 \text{ g} \quad \text{για } \text{MnO}_4^- \rightarrow \text{MnO}_2$$

Αναγωγική ουσία: n = αριθμός των αποβαλομένων ηλεκτρονίων κατά την αντίδραση

$$1 \text{ eq H}_2\text{S} = \frac{\text{H}_2\text{S}}{2} = 17,04 \text{ g} \quad \text{για } \text{S}^{2-} \rightarrow \text{S}$$

Molality ή Γραμμομοριακή κατά βάρος συγκέντρωση (m)

Molality (m) είναι τα moles της διαλυμένης ουσίας ανά χιλιόγραμμα διαλύτη.

$$\text{Molality } (m) = \frac{\text{moles διαλυμένης ουσίας}}{\text{χιλιόγραμμα διαλύτη}}$$

Π.χ. ένα διάλυμα που προκύπτει με διάλυση 0,30 mol αιθυλενογλυκόλης σε 2,0 kg νερού έχει molality $0,30 \text{ mol} / 2,0 \text{ kg} = 0,15 \text{ m}$ αιθυλενογλυκόλη

! molality: ανεξάρτητη από τη θερμοκρασία.

Υπολογισμός της Molality από μάζα ουσίας και μάζα διαλύτη

Παράδειγμα

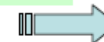
Πόση είναι η molality ενός διαλύματος που παρασκευάστηκε με διάλυση 225 mg γλυκόζης ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$) σε 5,00 mL αιθυλικής αλκοόλης ($d = 0,789 \text{ g/mL}$);

Η molality αναφέρεται σε moles διαλυμένης ουσίας ανά kg διαλύτη.

Θα πρέπει λοιπόν να μετατρέψουμε τα 225 mg γλυκόζης σε moles γλυκόζης και τα mL της αλκοόλης σε kg αλκοόλης.

1 mol $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ ζυγίζει 180,2 g $\Rightarrow$ τα 225 mg = 0,225 g είναι

$$\text{moles } \text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 = \frac{0,225 \text{ g}}{180,2 \text{ g / mol}} = 1,25 \times 10^{-3} \text{ mol}$$



Υπολογισμός της Molality από μάζα ουσίας και μάζα διαλύτη

Η μάζα του διαλύτη βρίσκεται, αν πολλαπλασιάσουμε τον όγκο επί την πυκνότητα:

$$\text{μάζα διαλύτη} = (5,00 \text{ mL})(0,789 \text{ g/mL}) = 3,95 \text{ g} = 0,00395 \text{ kg} \Rightarrow$$

$$\text{Molality} = \frac{1,25 \times 10^{-3} \text{ mol C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}{0,00395 \text{ kg διαλύτη}} = 0,316 \text{ m C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$$

Γραμμομοριακό κλάσμα

Γραμμομοριακό κλάσμα (X) ενός συστατικού A του διαλύματος είναι τα moles του συστατικού A διαιρεμένα δια του συνολικού αριθμού των moles του διαλύματος (δηλαδή, moles υπολοίπων συστατικών και διαλύτη).

$$X_A = \frac{\text{moles συστατικού } A}{\text{συνολικός αριθμός moles διαλύματος}}$$

Π.χ., σε ένα διάλυμα που παρασκευάστηκε από 1 mol αιθυλενογλυκόλης και 9 mol νερού, το γραμμομοριακό κλάσμα της αιθυλενογλυκόλης είναι $1/10 = 0,1$ και το γραμμομοριακό κλάσμα του νερού είναι $9/10 = 0,9$.

Υπολογισμός γραμμομοριακών κλασμάτων των συστατικών διαλύματος

Παράδειγμα

Υπολογίστε τα γραμμομοριακά κλάσματα της γλυκόζης ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$) και του νερού σε ένα διάλυμα που περιέχει 6,32 g γλυκόζης διαλυμένα σε 27,3 g νερού.

Επειδή τα γραμμομοριακά κλάσματα αναφέρονται σε moles, θα μετατρέψουμε τις δεδομένες μάζες σε moles.

1 mol $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ ζυγίζει 180,2 g $\Rightarrow$ τα 6,32 g είναι

$$\text{moles } \text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 = \frac{6,32 \text{ g}}{180,2 \text{ g / mol}} = 0,0351 \text{ mol}$$



Υπολογισμός γραμμομοριακών κλασμάτων των συστατικών διαλύματος

Τα moles του νερού στο διάλυμα είναι

$$\text{moles H}_2\text{O} = \frac{27,3 \text{ g}}{18,0 \text{ g / mol}} = 1,52 \text{ mol}$$

Συνεπώς, το σύνολο των moles του διαλύματος είναι
 $0,0351 \text{ mol} + 1,52 \text{ mol} = 1,555 \text{ mol} \Rightarrow$

$$\text{Γραμμομοριακό κλάσμα γλυκόζης} = \frac{0,0351 \text{ mol}}{1,555 \text{ mol}} = 0,0226$$

$$\text{Γραμμομοριακό κλάσμα νερού} = \frac{1,52 \text{ mol}}{1,555 \text{ mol}} = 0,977$$

Το άθροισμα των γραμμομοριακών κλασμάτων είναι 1,00

Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατά μάζα (%w/w)

Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατά μάζα (% m/m) είναι ο λόγος της μάζας της διαλυμένης ουσίας (σε g) προς τη μάζα του διαλύματος (σε g), πολλαπλασιασμένος επί 100%.

$$\begin{array}{l} \text{Συγκέντρωση} \\ \text{επί τοις εκατό} \\ \text{κατά μάζα} \end{array} = \frac{\text{μάζα διαλυμένης ουσίας}}{\text{μάζα διαλύματος}} \times 100\%$$

Π.χ., ένα υδατικό διάλυμα χλωριδίου του νατρίου, NaCl, 4,2% κατά μάζα περιέχει 4,2 g NaCl σε 100 g διαλύματος.

Συγκέντρωση επί τοις εκατό μάζα κατά όγκο (%w/v)

Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατά μάζα προς όγκο (% *m/V*) είναι ο λόγος της μάζας της διαλυμένης ουσίας (σε g) προς τον όγκο του διαλύματος (σε mL), πολλαπλασιασμένος επί 100%.

$$\text{Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατ' όγκο} = \frac{\text{μάζα διαλυμένης ουσίας}}{\text{όγκος διαλύματος}} \times 100\%$$

Π.χ., ένα υδατικό διάλυμα χλωριδίου του νατρίου, NaCl, 3,6 % κατ' όγκο περιέχει 3,6 g NaCl σε 100 mL διαλύματος.

Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατά όγκο (%v/v)

Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατ' όγκο (% V/V) είναι ο λόγος του όγκου της διαλυμένης ουσίας (σε mL) προς τον όγκο του διαλύματος (σε mL), πολλαπλασιασμένος επί 100%.

$$\text{Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατ' όγκο} = \frac{\text{όγκος διαλυμένης ουσίας}}{\text{όγκος διαλύματος}} \times 100\%$$

Π.χ., ένα υδατικό διάλυμα μεθανόλης 8,5% κατ' όγκο περιέχει 8,5 mL μεθανόλης στα 100 mL διαλύματος.

Το διάλυμα αυτό παρασκευάζεται με εισαγωγή 8,5 mL μεθανόλης σε ογκομετρική φιάλη των 100 mL και συμπλήρωση με νερό μέχρι τη χαραγή της φιάλης.

Τι σημαίνει συγκέντρωση υδροχλωρικού οξέος 37%?

!!! Όταν η συγκέντρωση εκφράζεται επί τοις εκατό, πρέπει να καθορίζεται αν αυτή είναι επί τοις εκατό κατά μάζα, κατ' όγκο ή κατά μάζα προς όγκο.

Εφόσον αυτό δεν αναφέρεται, θεωρούμε ότι πρόκειται για:

* Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατά μάζα προς όγκο (m/V), αν η διαλυμένη ουσία είναι στερεή.

* Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατ' όγκο (V/V), αν η διαλυμένη ουσία είναι υγρή.

* Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατά μάζα (m/m), για διαλυμένα στο νερό αέρια, όπως NH_3 και HCl .

$\Rightarrow \text{HCl(aq)} 37\%$ σημαίνει κατά μάζα

Μέρη ανά εκατομμύριο

Η συγκέντρωση σε μέρη ανά εκατομμύριο (c_{ppm}) ορίζεται από τη σχέση

$$c_{\text{ppm}} = \frac{\text{μάζα διαλυμένης ουσίας}}{\text{μάζα διαλύματος}} \times 10^6 \text{ ppm}$$

Π.χ., ένα υδατικό διάλυμα με συγκέντρωση ιόντων χλωριδίου (Cl^-) 7 ppm, περιέχει:

7 g ιόντων Cl^- σε 10^6 g διαλύματος ή

7 mg ιόντων Cl^- σε 1000 g διαλύματος.

Επειδή η πυκνότητα ενός τέτοιου αραιού διαλύματος είναι πρακτικά η πυκνότητα του καθαρού νερού ($d = 1,00 \text{ g/mL}$ ή 1000 g/L), μπορούμε να πούμε ότι η συγκέντρωση των 7 ppm αντιστοιχεί σε 7 mg ιόντων Cl^- ανά λίτρο διαλύματος.

Ανάλογα ορίζεται η συγκέντρωση σε μέρη ανά δισεκατομμύριο (ppb).

Ασκήσεις

1. Πως μπορούμε να μετατρέψουμε την %w/w σε % w/v περιεκτικότητα;
2. Ποιά είναι η μοριακότητα (M) διαλύματος HCl εμπορίου 37% w/w και πυκνότητας $\rho=1.19 \text{ g/cm}^3$
3. Ποιά είναι η μοριακότητα (M) διαλύματος NH_3 εμπορίου 25% w/w και πυκνότητας $\rho=0.91 \text{ g/cm}^3$
4. Σε τι μονάδες αντιστοιχεί το ppm;
5. Σε τι μονάδες αντιστοιχεί το ppb;
6. Ποια είναι η μοριακότητα ενός διαλύματος HCOOH 0,5N;
7. Υπολογίστε την κανονικότητα 49 g H_2SO_4 σε υδατικό διάλυμα όγκου 450 mL. Δίνεται το $M_r = 98 \text{ g/mole}$.

Η ΔΟΜΗ ΤΟΥ ΑΤΟΜΟΥ

Ατομικός αριθμός (Z)

αριθμός πρωτονίων του πυρήνα

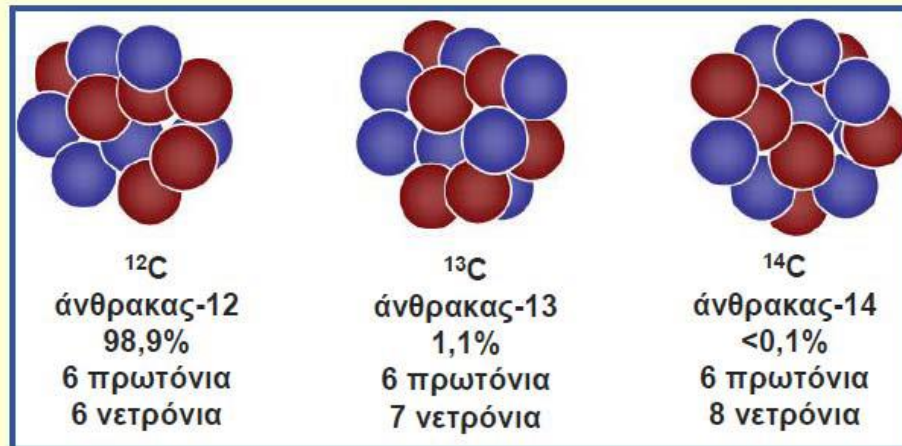
Μαζικός αριθμός (A)

αριθμός πρωτονίων και νετρονίων του πυρήνα



Ισότοπα

Άτομα των οποίων οι πυρήνες έχουν τον ίδιο ατομικό, αλλά διαφορετικό μαζικό αριθμό



Ασκήσεις

1) Ποιο είναι το νουκλιδικό σύμβολο για τον πυρήνα που περιέχει 34 πρωτόνια και 45 νετρόνια;

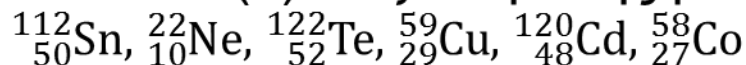
Στοιχείο	p	n
A	18	19
B	16	19
Γ	18	18
Δ	17	20

2) Έχετε τα δεδομένα του διπλανού πίνακα.

i) Ποιο άτομο είναι ισότοπο του A;

ii) Ποιο άτομο έχει τον ίδιο μαζικό αριθμό με το A;

3) Να κατατάξετε τα παρακάτω ισότοπα κατά σειρά (i) αυξανόμενου αριθμού ηλεκτρονίων, (b) αυξανόμενου αριθμού νετρονίων και (c) αυξανόμενης μάζας.



4) Δίνονται τα νουκλίδια:



Ποια από αυτά είναι ισότοπα; Ποια ισοβαρή; Από ποια στοιχειώδη σωματίδια αποτελείται το νουκλίδιο $^{136}_{56}\text{Ba}^{2+}$;

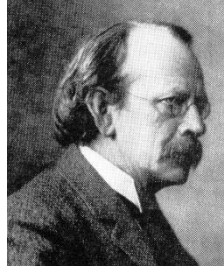
Ασκήσεις

5) Ένα μονοατομικό ιόν έχει φορτίο $+3$. Το αντίστοιχο άτομο έχει μαζικό αριθμό 45. Ο αριθμός νετρονίων του πυρήνα είναι 1,142 φορές μεγαλύτερος από τον αριθμό των πρωτονίων. Πόσα ηλεκτρόνια έχει το ιόν; Για ποιο στοιχείο πρόκειται;

Θεωρίες περί ατομικών προτύπων

- Από την στιγμή που ταυτοποιήθηκε η ύπαρξη υποατομικών σωματιδίων άρχισαν να διατυπώνονται διάφορες θεωρίες σχετικά με το πως αυτά τα σωματίδια συμμετέχουν στη δημιουργία του ατόμου.
- Thomson (1898)
- Rutherford (1911)

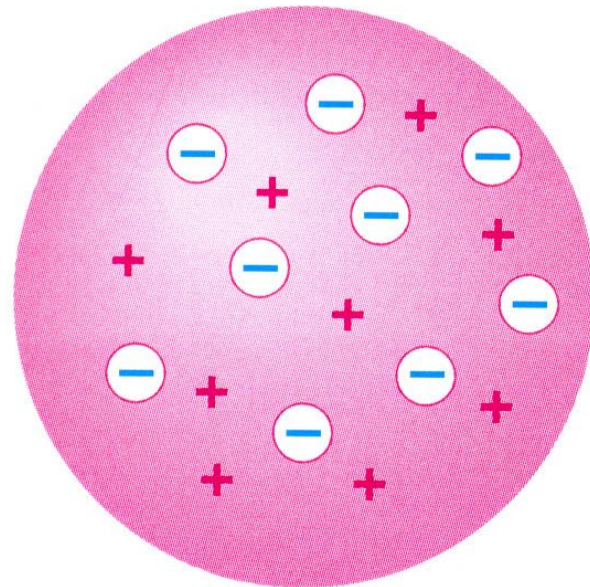
Ατομικό μοντέλο του Thomson (1898)



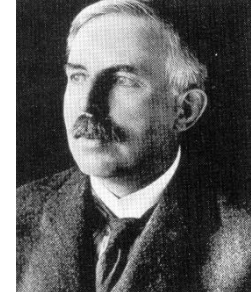
ο Άγγλος φυσικός **Thomson**

- Το **άτομο** αποτελείται από **θετικά** και **αρνητικά** σωματίδια.
- Το **θετικό** φορτίο είναι ομοιόμορφα συγκεντρωμένο πάνω στην **επιφάνεια** μίας σφαίρας, **μέσα** στην οποία **κινούνται** τα **ηλεκτρόνια**

ατομικό μοντέλο σταφιδόψωμου

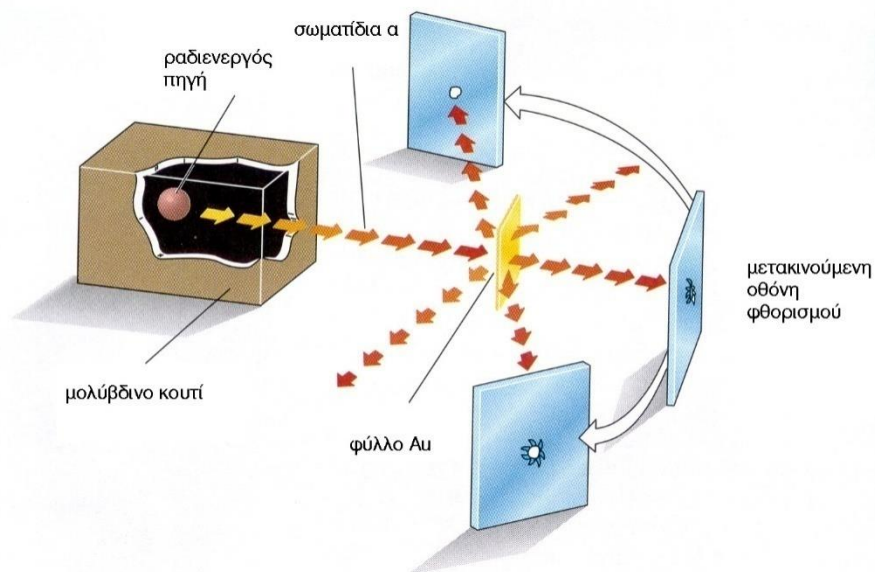


Ατομική Θεωρία του Rutherford (1911)



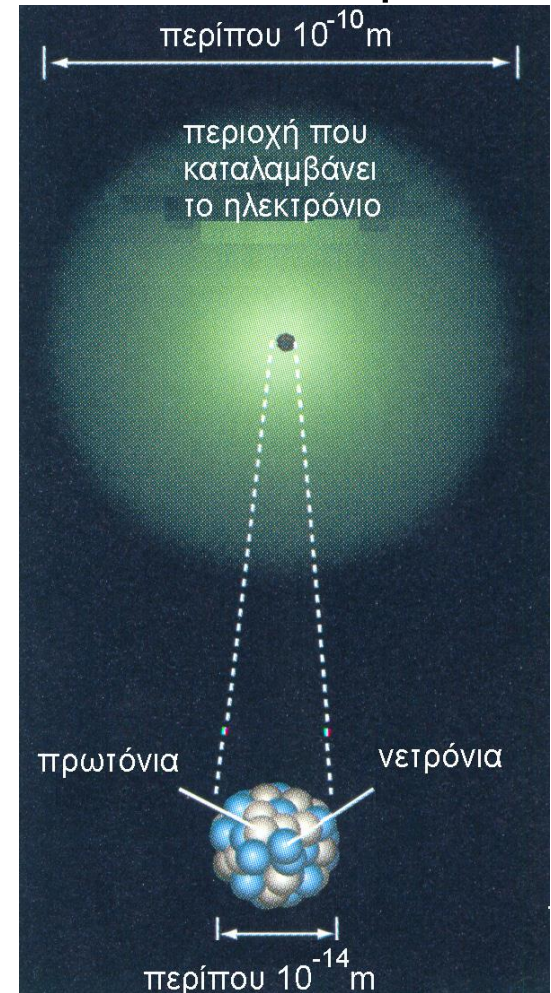
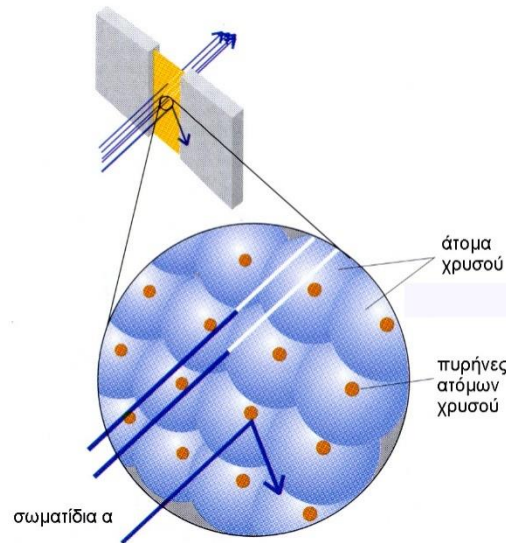
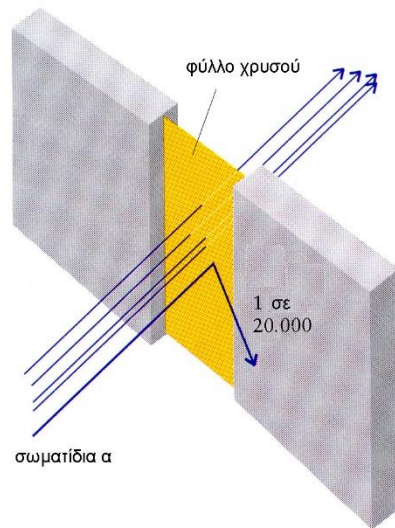
- Ο Νέοζηλανδός φυσικός **Rutherford** διεξήγαγε πειράματα βομβαρδισμού χρυσού με ακτίνες α και παρατήρησε την σκέδαση των σωματίων α πάνω σε μία φθορίζουσα οθόνη.
- Τα πιο πολλά από τα σωματρία α περνούσαν μέσα από το φύλλο του χρυσού ανεπηρέαστα (περίπου 99.9%)
 - 1 στα 1000 απέκλινε σημαντικά της ευθύγραμμης πορείας.
 - Ένας πολύ μικρότερος αριθμός εκτρεπόταν σχεδόν προς τα πίσω.

Πείραμα των Geiger-Marsden



Ατομική Θεωρία του Rutherford (1911)

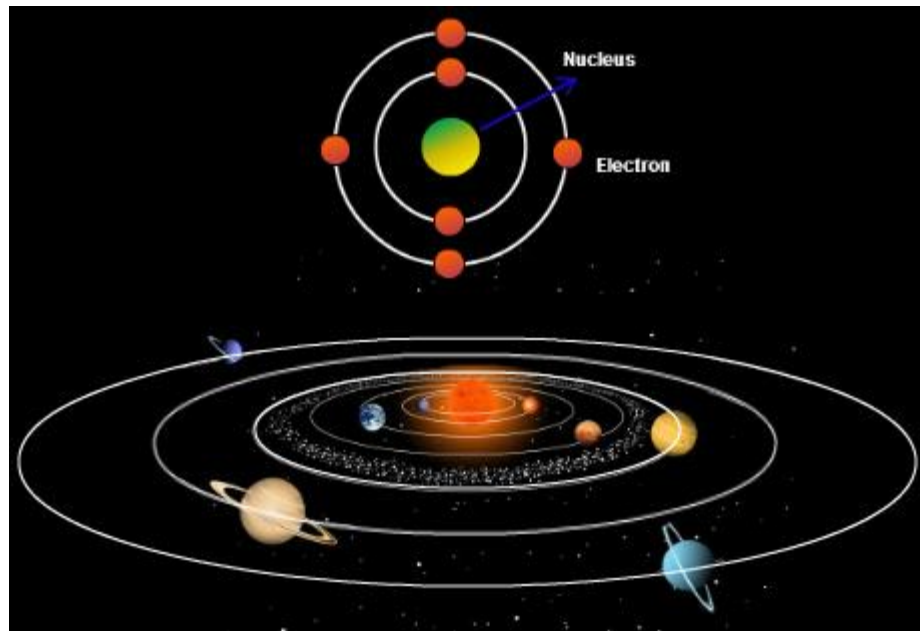
- Η σκέδαση των σωματίων α οφείλεται στον θετικά φορτισμένο πυρήνα του ατόμου του χρυσού, που είναι στο κέντρο του ατόμου



Ατομικό πρότυπο Rutherford – Πλανητικό Σύστημα

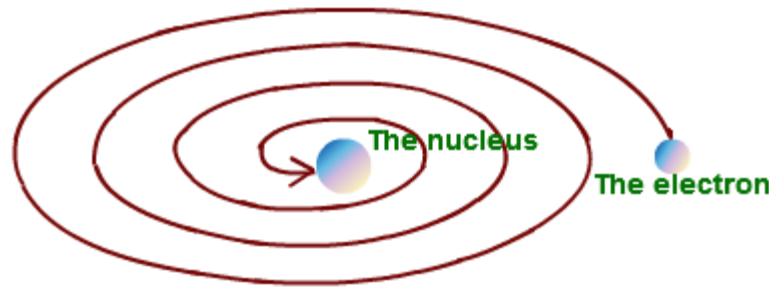
Ο **πυρήνας**, στον οποίο είναι συγκεντρωμένη όλη σχεδόν η μάζα και το θετικό φορτίο του ατόμου, καταλαμβάνει τη θέση του **ήλιου**

Τα **ηλεκτρόνια** κατέχουν τη θέση των **πλανητών** και κινούνται σε τυχαίες κυκλικές τροχιές.



Ατομικό πρότυπο Rutherford – Πλανητικό Σύστημα

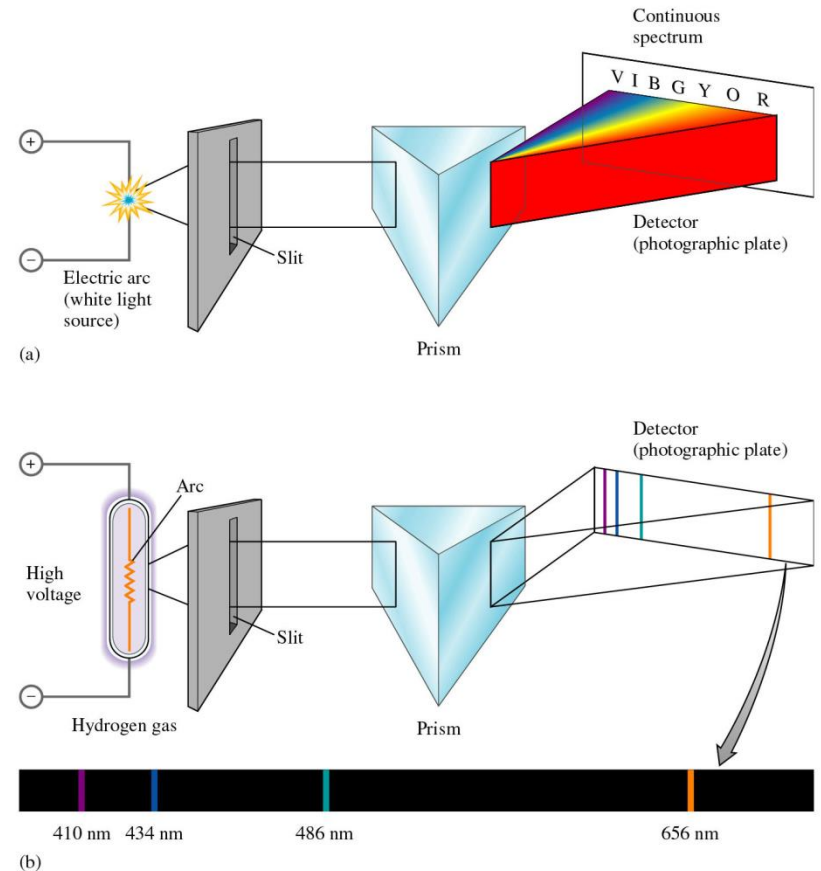
- Μειονεκτήματα
- Τα ηλεκτρόνια κινούμενα με επιταχυνόμενη κίνηση θα έπρεπε (Maxwell) να εκπέμπουν συνέχεια ενέργεια με μορφή ακτινοβολίας και έτσι διαγράφοντας ελικοειδή τροχιά τελικά να προσπίπτουν στον πυρήνα.



Ατομικό πρότυπο Rutherford – Πλανητικό Σύστημα

Μειονεκτήματα

- Η συνεχόμενη μείωση της ενέργειας των ηλεκτρονίων θα είχε ως συνέπεια τη συνεχή μείωση της συχνότητας της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας με συνέπεια τα φάσματα εκπομπής των ατόμων να είναι συνεχή κάτι το οποίο δεν παρατηρείται. Τα φάσματα εκπομπής των ατόμων είναι γραμμικά.





Ατομικό πρότυπο του Bohr (1913)

πρώτη συνθήκη του Bohr (μηχανική συνθήκη)

- τα ηλεκτρόνια κινούνται σε ορισμένες μόνο κυκλικές τροχιές, οι οποίες έχουν καθορισμένες ενέργειες δηλαδή είναι κβαντισμένες ενεργειακά. Η στροφορμή των ηλεκτρονίων είναι ακέραια πολλαπλάσια του $h/2\pi$ σύμφωνα με τη συνθήκη:

$$m u r = n h/2\pi$$

- Η ολική ενέργεια του ηλεκτρονίου (άθροισμα κινητικής και δυναμικής ενέργειας) στο άτομο του υδρογόνου δίνεται από τη σχέση:

$$E_n = (- 2,18 \cdot 10^{-18}/n^2) \text{ J}$$

Ατομικό πρότυπο του Bohr (1913)

Δεύτερη συνθήκη του Bohr (οπτική συνθήκη)

- τα ηλεκτρόνια (σε κάθε καθορισμένη τροχιά) έχουν καθορισμένη ενέργεια και κατά τη κίνησή τους δεν εκπέμπουν ακτινοβολία. Ακτινοβολία εκπέμπεται από το άτομο μόνο όταν ένα ηλεκτρόνιο του μεταπηδήσει από μία τροχιά ορισμένης ενέργειας ($E_{\alpha\rho\chi}$) σε μία άλλη τροχιά μικρότερης ενέργειας ($E_{\tau\epsilon\lambda}$).
- Η συχνότητα της ακτινοβολίας που εκπέμπεται κατά την διάρκεια αυτής της μεταπήδησης του ηλεκτρονίου δίνεται από τη ακόλουθη σχέση:

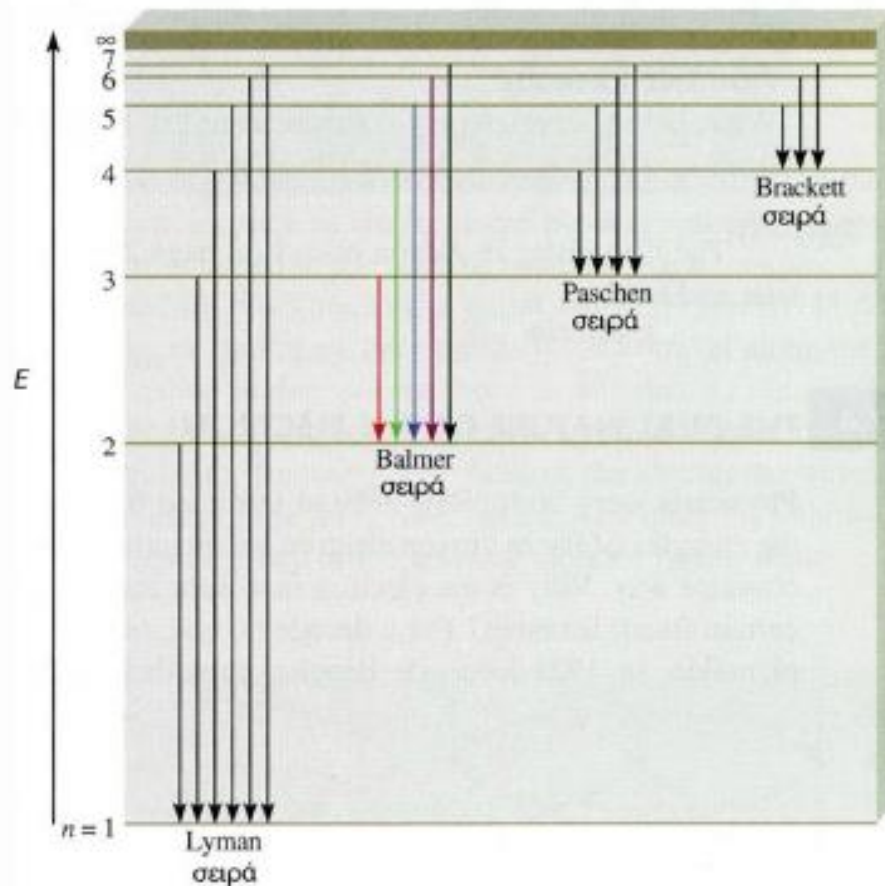
$$\Delta E = |E_f - E_i| = h \nu \quad \Delta E = |2,18 \cdot 10^{-18} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)| \quad \nu = \left| \frac{-2,18 \cdot 10^{-18}}{h} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \right|$$

Ατομικό πρότυπο του Bohr (1913)

Μειονεκτήματα

- Μπορεί να εξήγησε πλήρως το φάσμα του μονοηλεκτρονιακού ατόμου H και των υδρογονοειδών ιόντων (He^+ και Li^{2+}), **παραταύτα δεν** μπόρεσε να **εφαρμοστεί** με επιτυχία σε πολυηλεκτρονικά άτομα.

Ατομικό πρότυπο του Bohr (1913)



Τύπος Balmer

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Σταθερά Rydberg

$$R_H = 1.09678 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

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 $n = 2$.

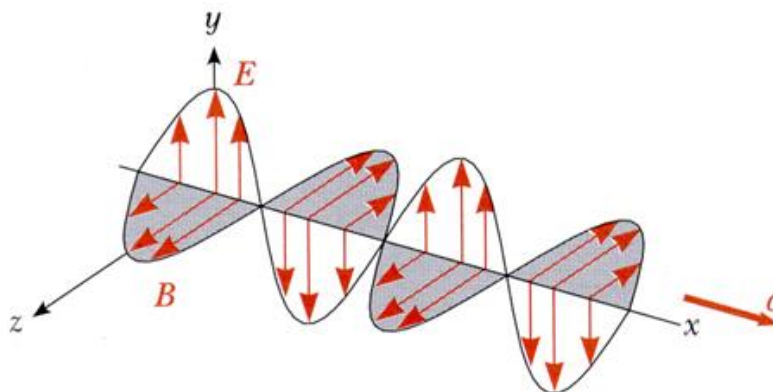
Ασκήσεις

- 2) Το άτομο του υδρογόνου βρίσκεται στη θεμελιώδη κατάσταση. Πόση ενέργεια πρέπει να απορροφήσει ώστε να μεταβεί στην τροχιά που αντιστοιχεί σε κβαντικό αριθμό $n = 3$;
- 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: $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$, $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$.
- 4) Πόση είναι η ελάχιστη ενέργεια που απαιτείται για τον ιοντισμό:
α) του ατόμου του υδρογόνου, β) 1 mol ατόμων υδρογόνου.
- 5) Ποια ηλεκτρονιακή μετάπτωση στο άτομο H, που καταλήγει στην τροχιά $n=5$, θα δώσει φωτόνια μήκους κύματος 3740nm ;
- 6) Για το ηλεκτρόνιο 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;



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.

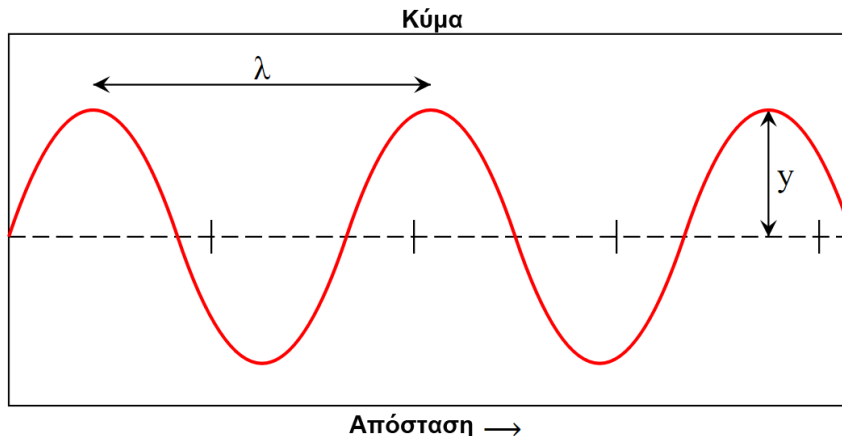


Φως

- ✓ 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)

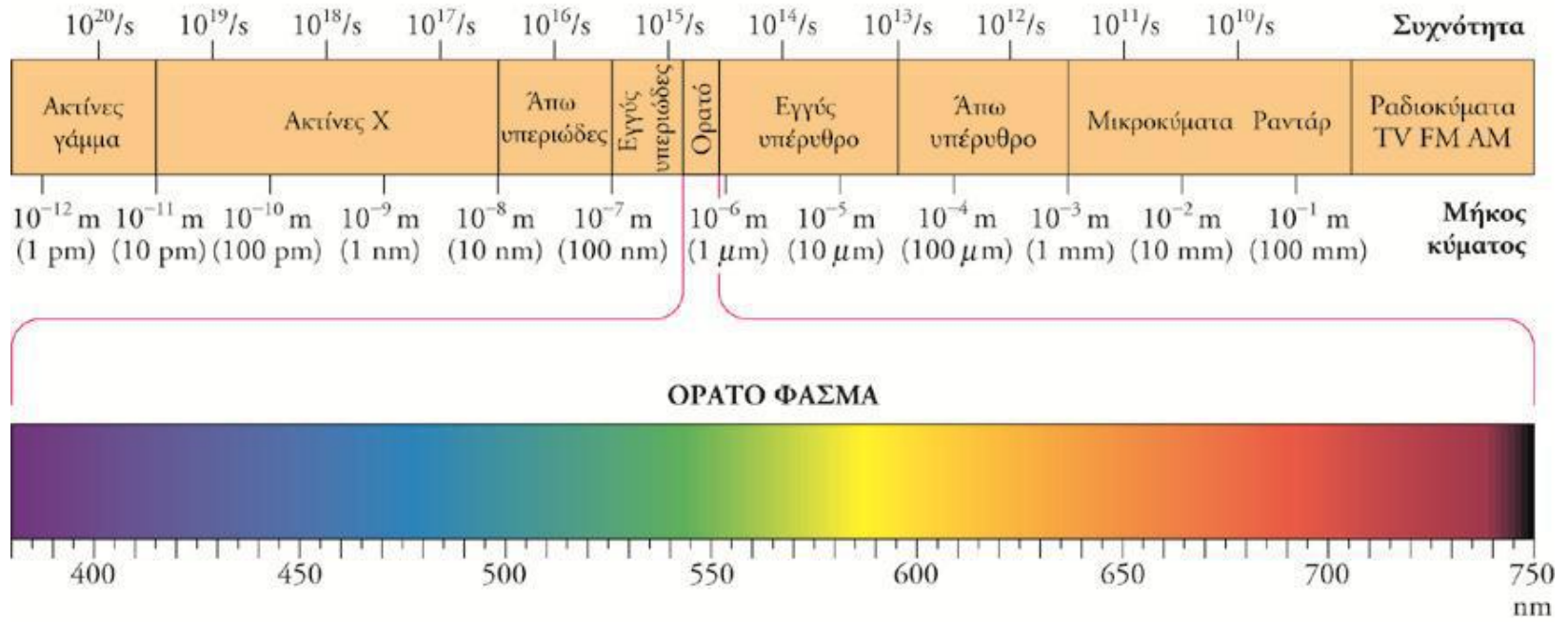
- Κύμα ονομάζεται κάθε μηχανισμός διάδοσης μιας διαταραχής που μεταφέρει ενέργεια και ορμή με ορισμένη ταχύτητα
- Το **μήκος κύματος** (λ) είναι: η απόσταση που διανύει το κύμα για χρόνο ίσο με την περίοδο



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

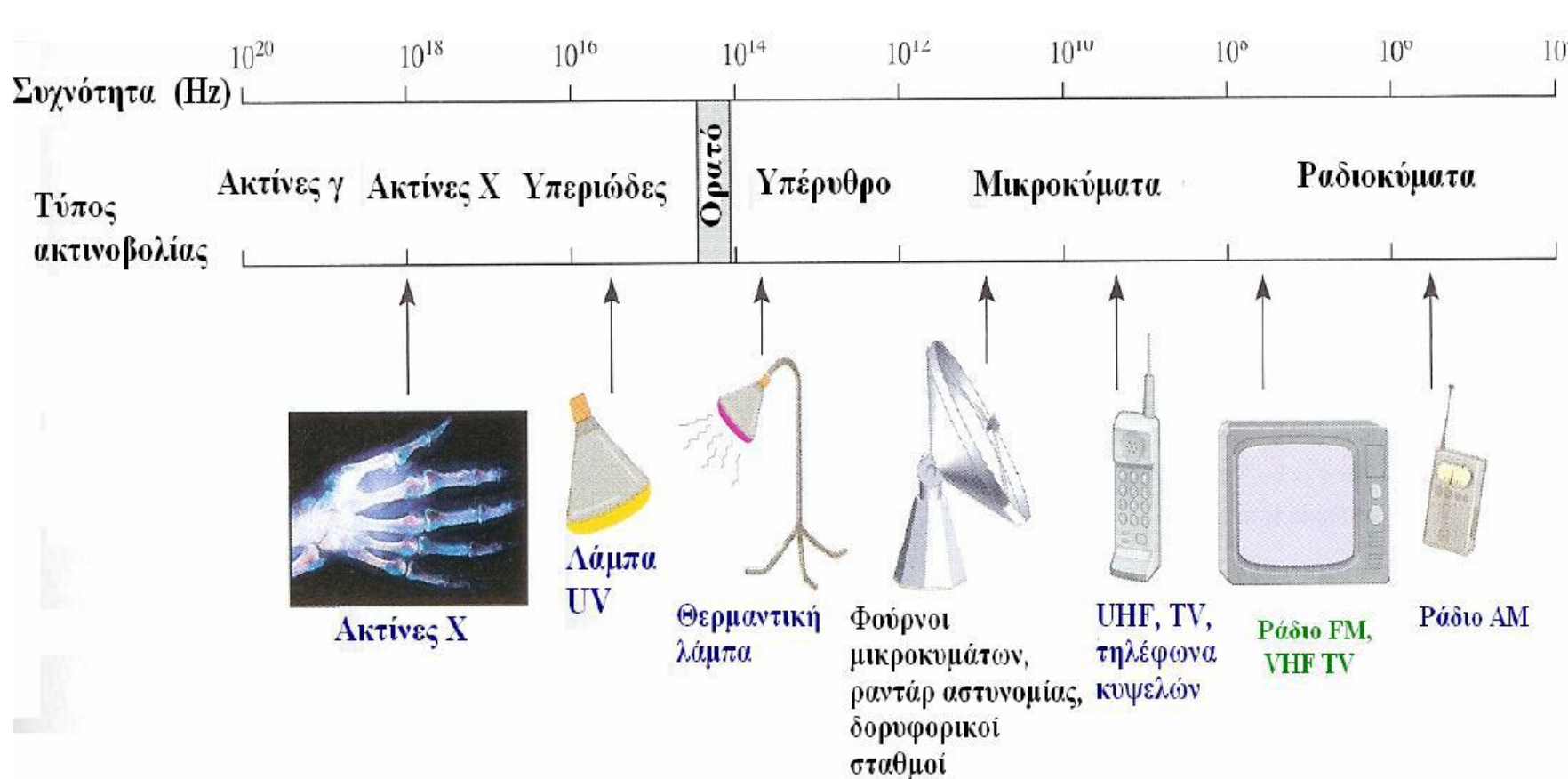
- Συνδέεται με τη συχνότητα (ν) μέσω της ταχύτητας του φωτός
$$\nu = c/\lambda$$
- **Συχνότητα** (ν) είναι ο αριθμός των εναλλαγών της ταλάντωσης ανά s, μονάδες: s^{-1} ή Hz
- **Περίοδος** (T), το χρονικό διάστημα στο οποίο η κυματική εικόνα επαναλαμβάνεται, $T = 1/\nu$

Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία

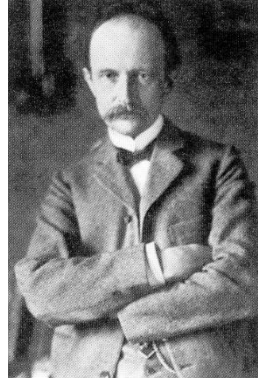


- ✓ Το **ορατό φάσμα (Vis)** αποτελεί ένα ελάχιστο τμήμα του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος.
- ✓ Ηλεκτρομαγνητικά κύματα υψηλών συχνοτήτων (μεγάλες ενέργειες) έχουν μικρά μήκη κύματος και αντίστροφα
- ✓ Τα όρια των διαφόρων περιοχών δεν καθορίζονται επακριβώς

Εφαρμογές



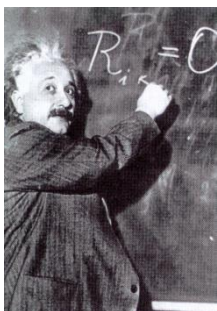
Η κβάντωση της ενέργειας του Planck (1900)



- 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:

$$E = nh\nu, n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

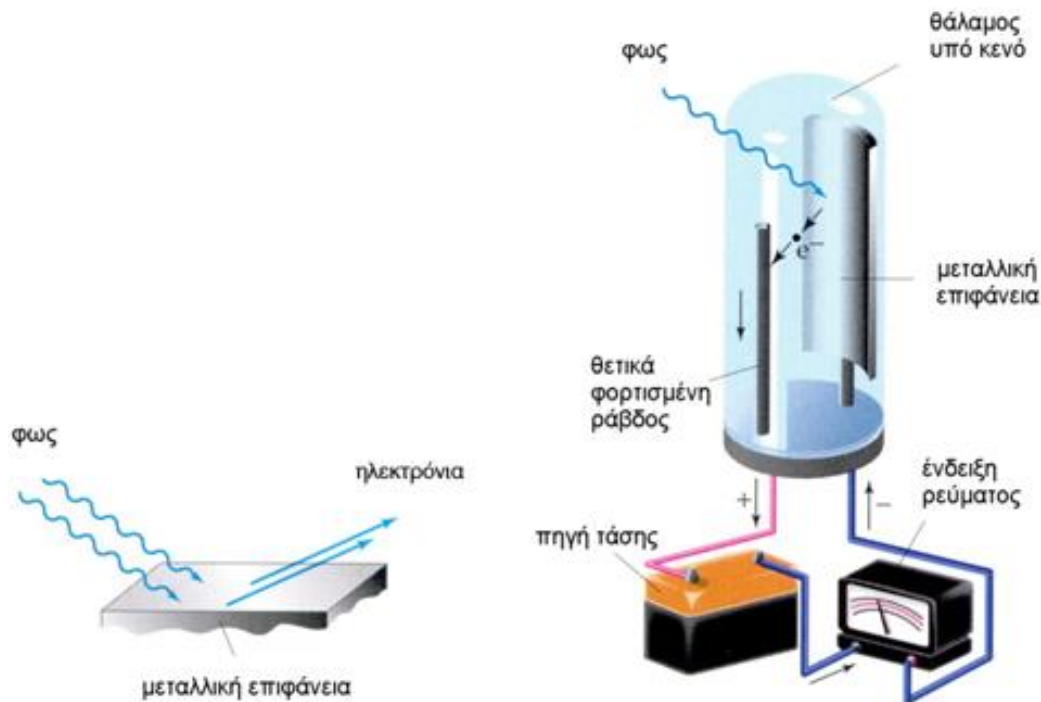
- Όπου $h = 6,63 \times 10^{-34}$ J s και ν η συχνότητα της ακτινοβολίας.
- Η **ακτινοβολία** από ένα υλικό **εκπέμπεται** όχι με συνεχή τρόπο, αλλά **σε «πακέτα» ενέργειας** $h\nu$ (κβάντα), η τιμή των οποίων **εξαρτάται** από την ν της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας.



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

$$E = h \nu \quad \text{ή} \quad E = h c / \lambda \quad (1)$$

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

Από τις σχέσεις (1) ^ (2) προκύπτει:

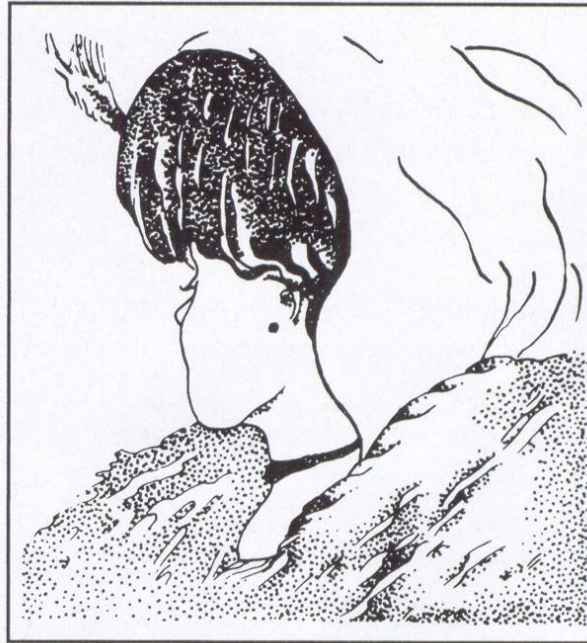
$$h c / \lambda = m c^2$$

$$\text{οπότε, } \lambda = h / (m c)$$

$$\text{ή } \lambda = h / (m u) = h / p, \text{ για το ηλεκτρόνιο}$$

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.

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h / 4\pi$$

- *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, 5×10^6 m/s, με μία αβεβαιότητα 1% και η μάζα του ηλεκτρονίου $9,11 \times 10^{-31}$ Kg. Σταθερά Planck, $6,63 \times 10^{-34}$ 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 $9,11 \times 10^{-31}$ Kg. Σταθερά Planck, $6,63 \times 10^{-34}$ 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)



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

- Η πιο πάνω εξίσωση προκύπτει από την

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

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



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

$$H = \underbrace{\frac{-\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{\text{κινητική ενέργεια } e} - \underbrace{\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}}_{\text{δυναμική ενέργεια } e}$$

όπου m : μάζα του ηλεκτρονίου

E : συνολική ενέργεια του ηλεκτρονίου

V : η δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου

E_k : η κινητική ενέργεια του ηλεκτρονίου

h : η σταθερά του Planck

r : απόσταση e πυρήνα

ϵ_0 : 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; ${}_1\text{H}^+$, ${}_2\text{He}^-$, ${}_2\text{He}^+$, ${}_3\text{Li}^+$, ${}_3\text{Li}^{2+}$
2. Η κυματοσυνάρτηση Ψ για το άτομο του υδρογόνου έχει τις τιμές $\Psi=0.1$ στο σημείο A και $\Psi=-0.3$ στο B. Που υπάρχει μεγαλύτερη πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο;
3. Σε μια περιοχή γύρω από ένα σημείο A η πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους είναι μεγαλύτερη από αυτή που είναι γύρω από ένα σημείο B. Τι σημαίνει αυτό;
 - A. Στην περιοχή B κινούνται λιγότερα ηλεκτρόνια από ότι στην περιοχή A.
 - B. Τα ηλεκτρόνια ξοδεύουν λιγότερο χρόνο στην περιοχή B.
 - Γ. Το σημείο B βρίσκεται πιο μακριά από τον πυρήνα του ατόμου.
 - Δ. Η τιμή της κυματοσυνάρτησης Ψ στο σημείο A είναι μεγαλύτερη από ότι η αντίστοιχη τιμή στο σημείο B.

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:

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

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

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

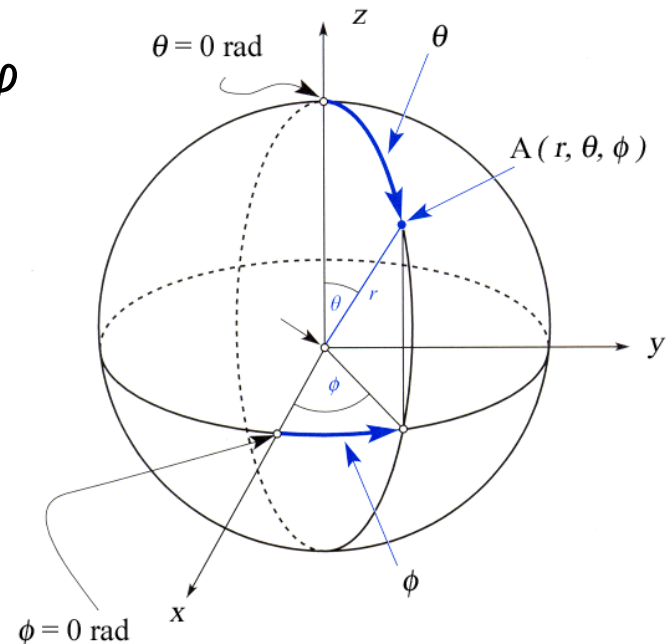
όπου

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:

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



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

Εξίσωση Schrödinger με πολικές συντεταγμένες

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

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

$\Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$: η **γωνιακή κυματοσυνάρτηση** η οποία δίνει την **εξάρτηση της Ψ** από τις **γωνίες θ και φ** .

$\Theta(\theta)$: η **γωνιακή ζενιθιακή συνιστώσα**.

$\Phi(\varphi)$: η **αξιμουθιακή 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 $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$.
- 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	

Δευτερέων ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός (l)

- Ο δευτερέων κβαντικός αριθμός l , παίρνει τιμές ανάλογα με την τιμή που έχει ο n , δηλαδή, $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$.
- 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 ($2l + 1$)	1	3	5	7	9	11	

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l)

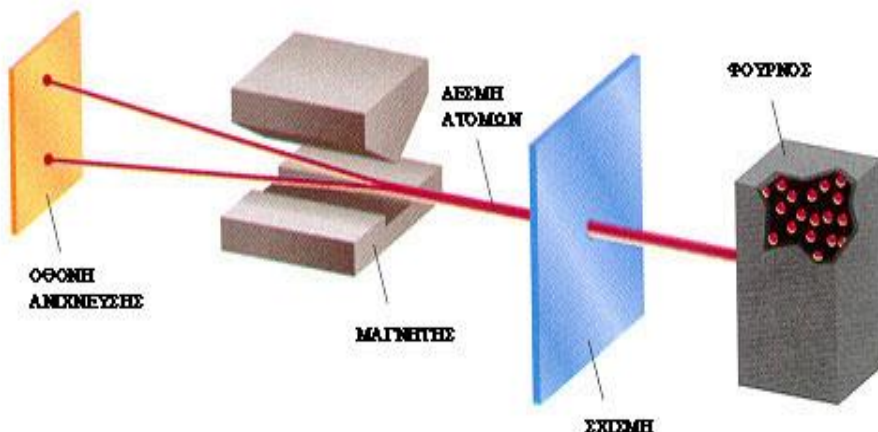
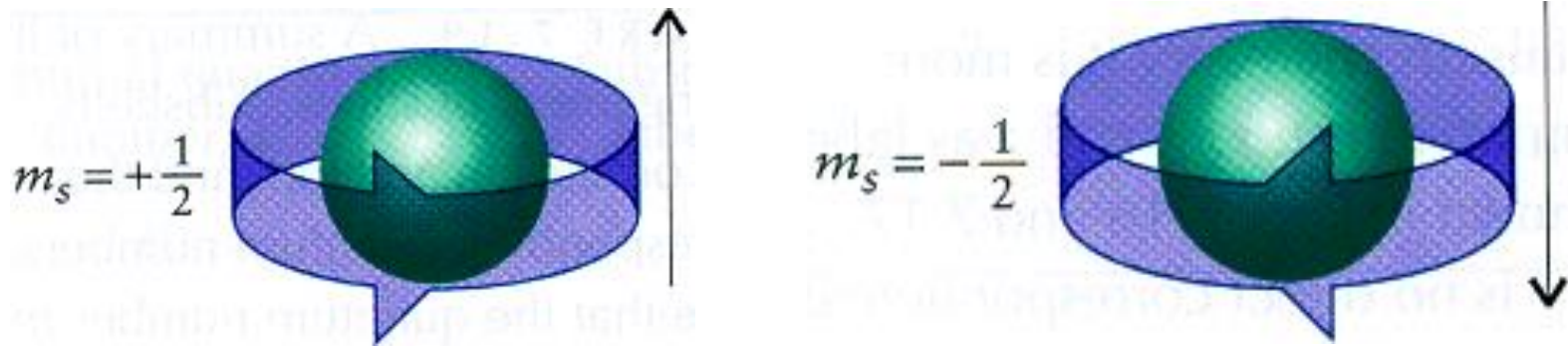
- Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_l , παίρνει τιμές ανάλογα με την τιμή που έχει ο l , δηλαδή, $-l, (-l+1), \dots, 0, \dots, (l-1), +l$.
- Καθορίζει:
 - ✓ τον προσανατολισμό του ηλεκτρονιακού νέφους (τροχιακού)
 - ❖ Η ονομασία «μαγνητικός» οφείλεται στη δημιουργία μαγνητικού πεδίου λόγω της κίνησης 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	$d_{x^2-y^2}$	d_{xz}	d_{z^2}	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.

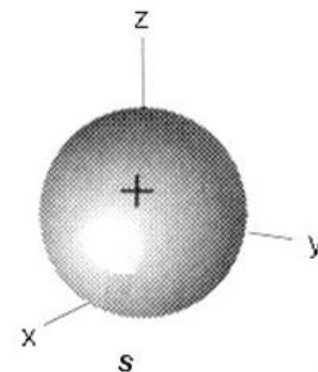
Η μια αντιστοιχεί σε άτομα με αριστερόστροφο spin ηλεκτρονίων και η άλλη σε δεξιόστροφο.

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**:

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

❖ **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**.

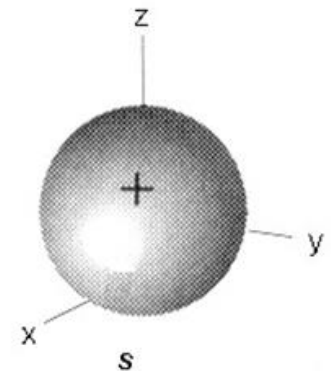


2^η Στιβάδα (L) – 2s και 2p

- ❖ 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**.



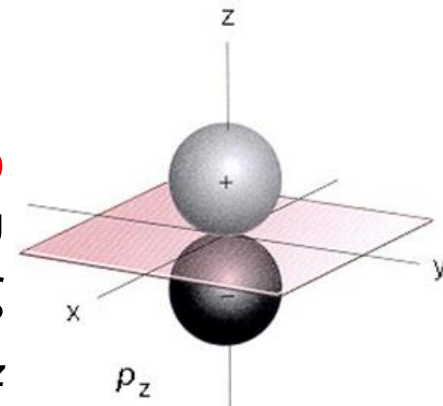
2^η Στιβάδα (L) – 2s και 2p

❖ 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:

$$\Psi_{2p_z} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$$

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

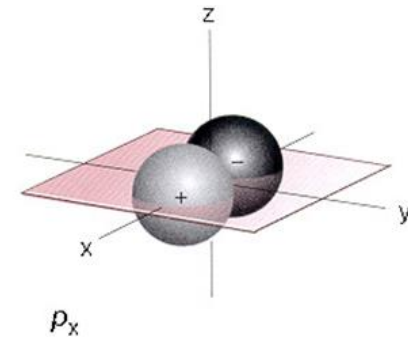


2^η Στιβάδα (L) – 2s και 2p

- ❖ Περίπτωση $n = 2, l = 1, m_l = 1$. Το ατομικό τροχιακό που προκύπτει ονομάζεται **2p_x** ατομικό τροχιακό.
- Η εξίσωση Schrödinger με τις πολικές συντεταγμένες για το τροχιακό 2p_x παίρνει την ακόλουθη μορφή:

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

❖ Υπάρχει εξάρτηση της Ψ_{2p_x} 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.



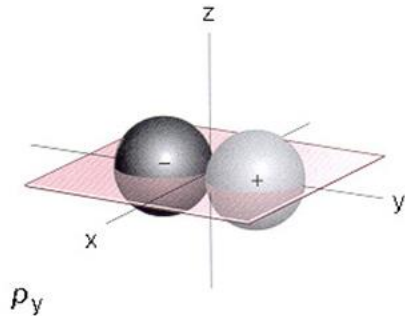
2^η Στιβάδα (L) – 2s2p

❖ 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:

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

❖ Υπάρχει εξάρτηση της Ψ_{2p_y} 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.

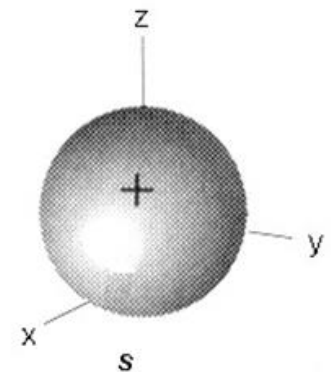


3^η Στιβάδα (M) – 3s, 3 p και 3d

- ❖ 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**.



3^η Στιβάδα (M) – 3s, 3p και 3d

❖ Περίπτώσεις:

- ✓ $n = 3, l = 1, m_l = 0$ → 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.

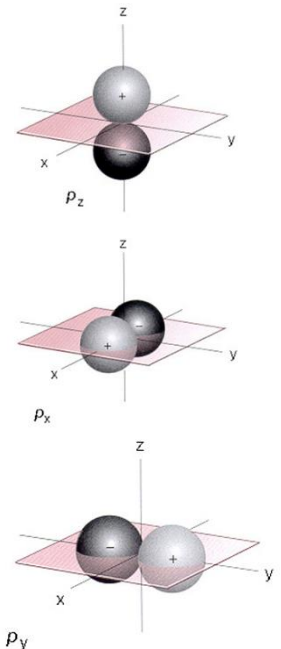
- Οι εξισώσεις Schrödinger με τις πολικές συντεταγμένες για τα τροχιακά 3p_z 3p_x 3p_y παίρνουν τις ακόλουθες μορφές:

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

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

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

❖ Υπάρχει εξάρτηση των Ψ_{3p_z} , Ψ_{3p_x} και Ψ_{3p_y} 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 (M) – 3s, 3p και 3d

❖ Περίπτώσεις:

- ✓ $n = 3, l = 2, m_l = 0$ → $3d_{z^2}$ 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:

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

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

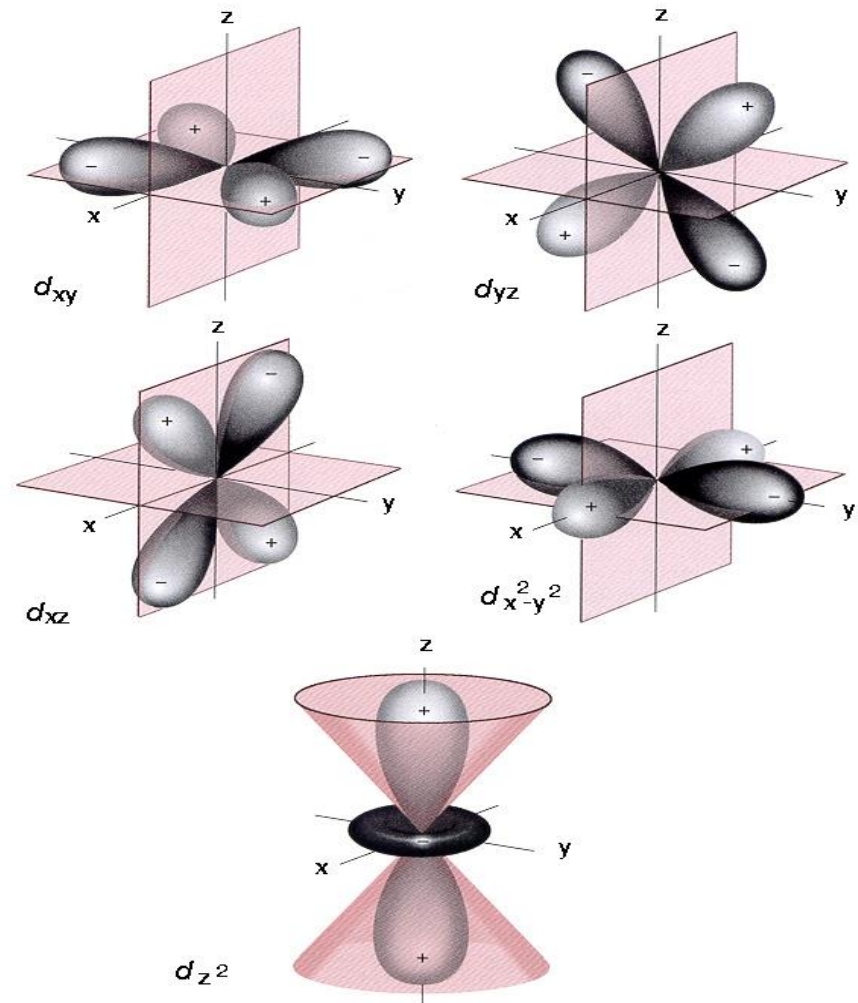
$$\psi_{3d_{yz}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} 2^{-3/2} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{30}{\pi}} \eta \mu \theta \cdot \sin \theta \cdot \eta \mu \varphi$$

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

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

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 (N) – 4s, 4p, 4d και 4f

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

✓ <u>$n = 4, l = 0, m_l = 0$</u>	→	4s	ατομικό τροχιακό.
✓ <u>$n = 4, l = 1, m_l = 0$</u>	→	4p _z	ατομικό τροχιακό.
✓ <u>$n = 4, l = 1, m_l = 1$</u>	→	4p _x	ατομικό τροχιακό.
✓ <u>$n = 4, l = 1, m_l = -1$</u>	→	4p _y	ατομικό τροχιακό.
✓ <u>$n = 4, l = 2, m_l = 0$</u>	→	4d _z ²	ατομικό τροχιακό.
✓ <u>$n = 4, l = 2, m_l = 1$</u>	→	4d _{xz}	ατομικό τροχιακό.
✓ <u>$n = 4, l = 2, m_l = -1$</u>	→	4d _{yz}	ατομικό τροχιακό.
✓ <u>$n = 4, l = 2, m_l = 2$</u>	→	4d _x ² -y ²	ατομικό τροχιακό.
✓ <u>$n = 4, l = 2, m_l = -2$</u>	→	4d _{xy}	ατομικό τροχιακό.

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

4^η ΣΤΙΒΑΔΑ (N) – 4s, 4p, 4d και 4f

✓ $n = 4, l = 3, m_l = 0$

→ $f_z^3 r^{-3/5} z r^2$

ατομικό τροχιακό.

✓ $n = 4, l = 3, m_l = 1$

→ $f_y^3 r^{-3/5} y r^2$

ατομικό τροχιακό.

✓ $n = 4, l = 3, m_l = -1$

→ $f_x^3 r^{-3/5} x r^2$

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.

✓ $n = 4, l = 3, m_l = 3$

→ $f_{x(z^2 - y^2)}$

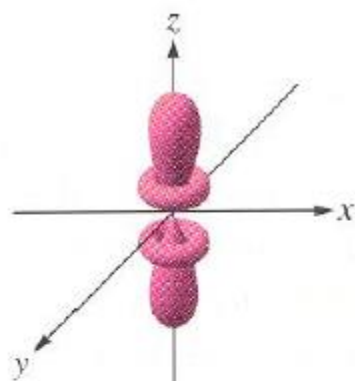
ατομικό τροχιακό.

✓ $n = 4, l = 3, m_l = -3$

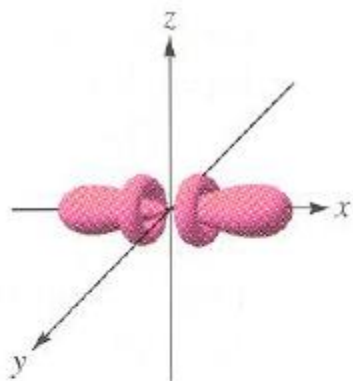
→ f_{xyz}

ατομικό τροχιακό.

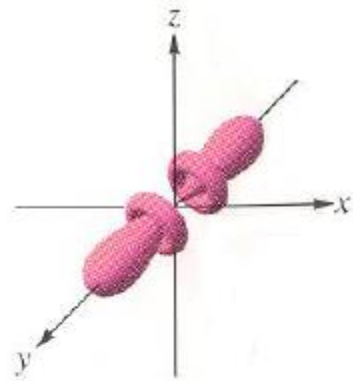
4^η Στιβάδα (N) – 4f τροχιακά



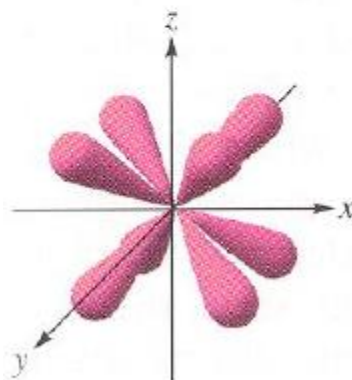
$$f_{z^3 - \frac{3}{5}zr^2}$$



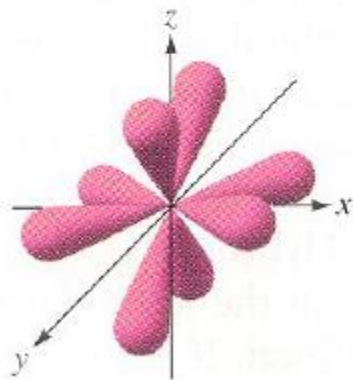
$$f_{x^3 - \frac{3}{5}xr^2}$$



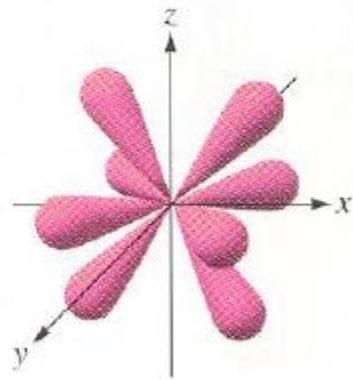
$$f_{y^3 - \frac{3}{5}yr^2}$$



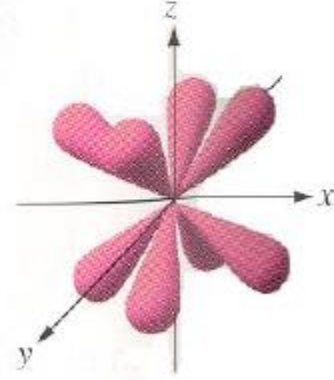
$$f_{xyz}$$



$$f_{y(x^2 - z^2)}$$



$$f_{x(z^2 - y^2)}$$



$$f_{z(x^2 - y^2)}$$

Ασκήσεις

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

A. n, l

B. 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;

A. $n = 3, l = 2, m_l = -2, m_s = +\frac{1}{2}$

B. $n = 4, l = 4, m_l = -4, m_s = +\frac{1}{2}$

Γ. $n = 5, l = 4, m_l = -3, m_s = -\frac{1}{2}$

Δ. $n = 3, l = 0, m_l = -1, m_s = +\frac{1}{2}$

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:

A. του δευτερεύοντος κβαντικού αριθμού,

B. 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 ${}_{36}\text{Kr}$ έχουν μαγνητικό κβαντικό αριθμό $m_l = +1$; Πόσα ηλεκτρόνια έχουν $l = +1$;