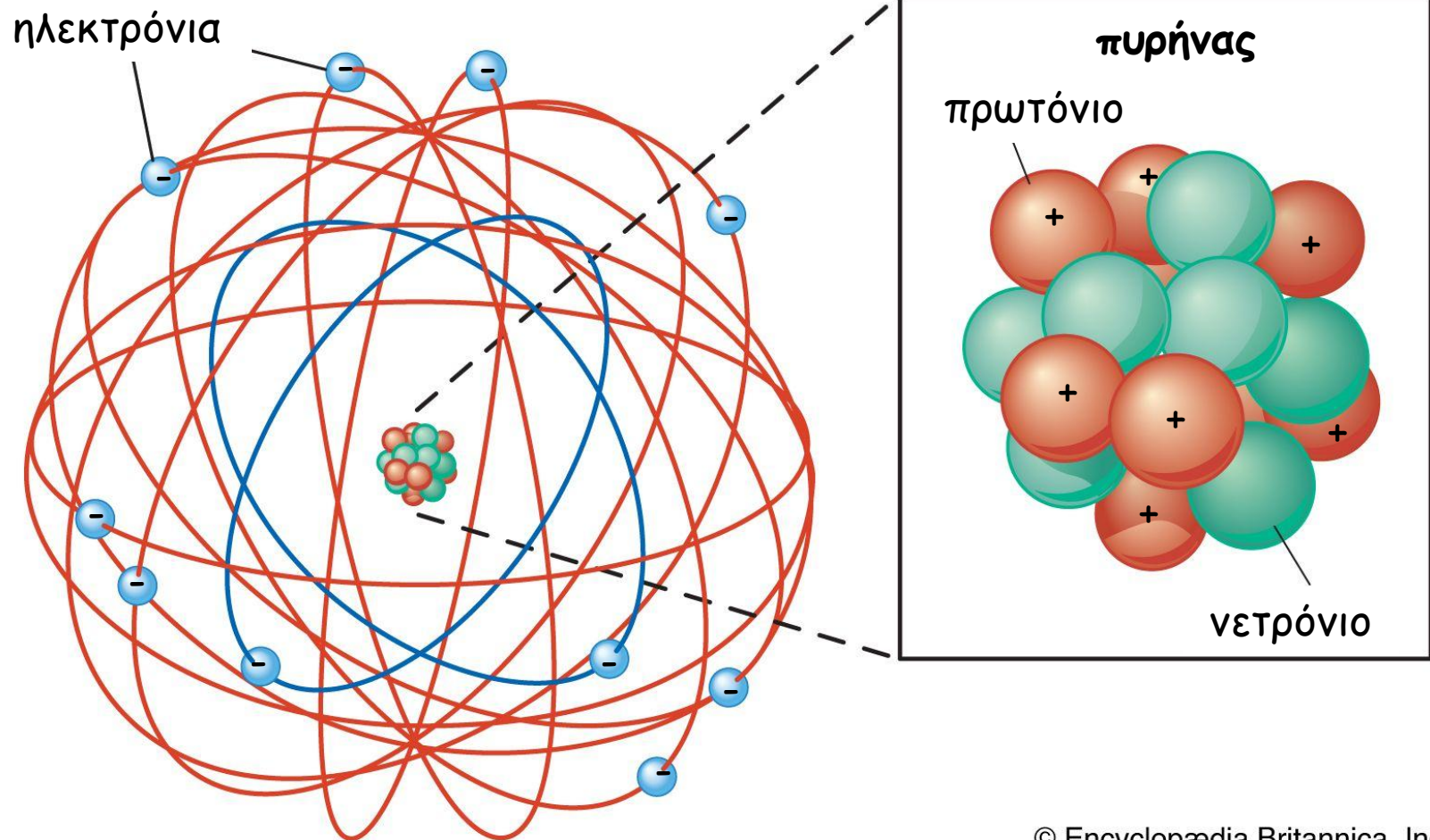


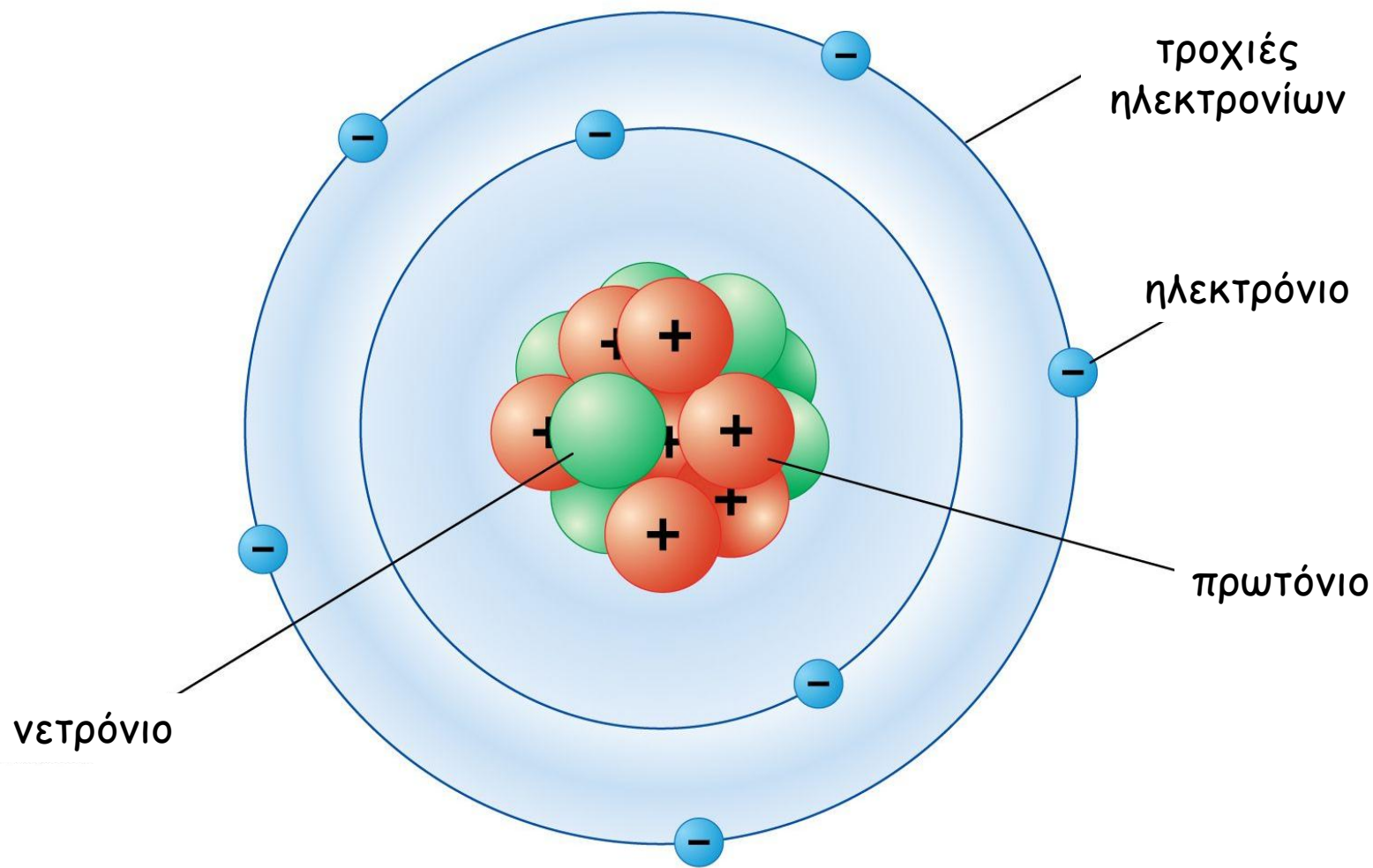
Μάθημα 6.1

Τροχιακό - κβαντικοί αριθμοί

Ατομικό μοντέλο Rutherford



Ατομικό μοντέλο Bohr



Ατομικό μοντέλο Bohr

1^η συνθήκη (μηχανική)

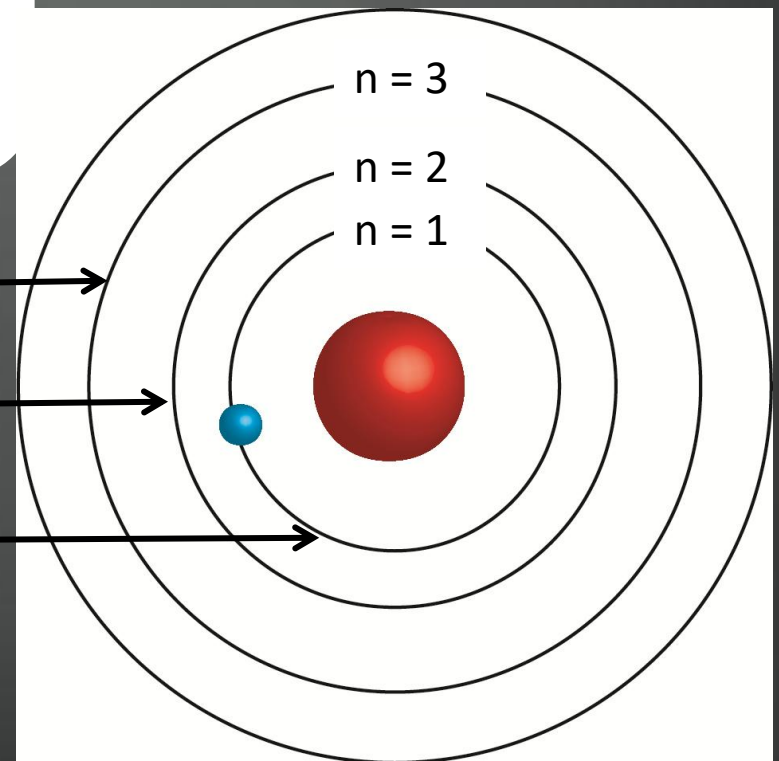
Τα ηλεκτρόνια περιστρέφονται γύρω από τον πυρήνα σε ορισμένες κυκλικές τροχιές. Κάθε επιτρεπόμενη τροχιά έχει καθορισμένη ενέργεια, είναι δηλαδή κβαντισμένη.

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

$$E_3 = \frac{-2,18 \cdot 10^{-18}}{3^2} \text{ J} = -0,24 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_2 = \frac{-2,18 \cdot 10^{-18}}{2^2} \text{ J} = -0,55 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_1 = \frac{-2,18 \cdot 10^{-18}}{1^2} \text{ J} = -2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$



Ατομικό μοντέλο Bohr

1^η συνθήκη (μηχανική)

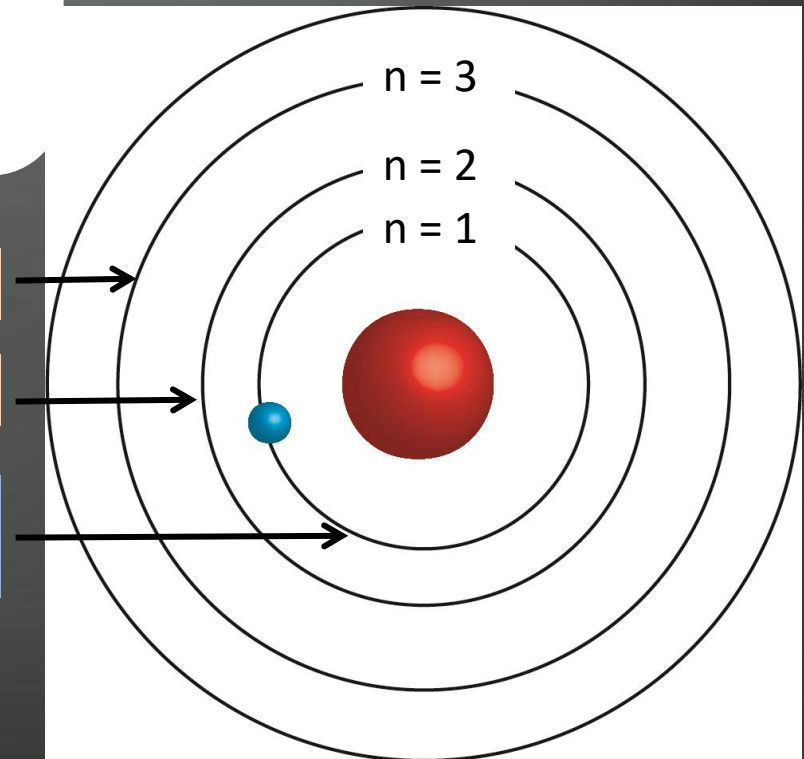
Τα ηλεκτρόνια περιστρέφονται γύρω από τον πυρήνα σε ορισμένες κυκλικές τροχιές. Κάθε επιτρεπόμενη τροχιά έχει καθορισμένη ενέργεια, είναι δηλαδή κβαντισμένη.

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

Διηγερμένη κατάσταση

Διηγερμένη κατάσταση

Θεμελιώδης κατάσταση
(όσο πιο κοντά στον πυρήνα).



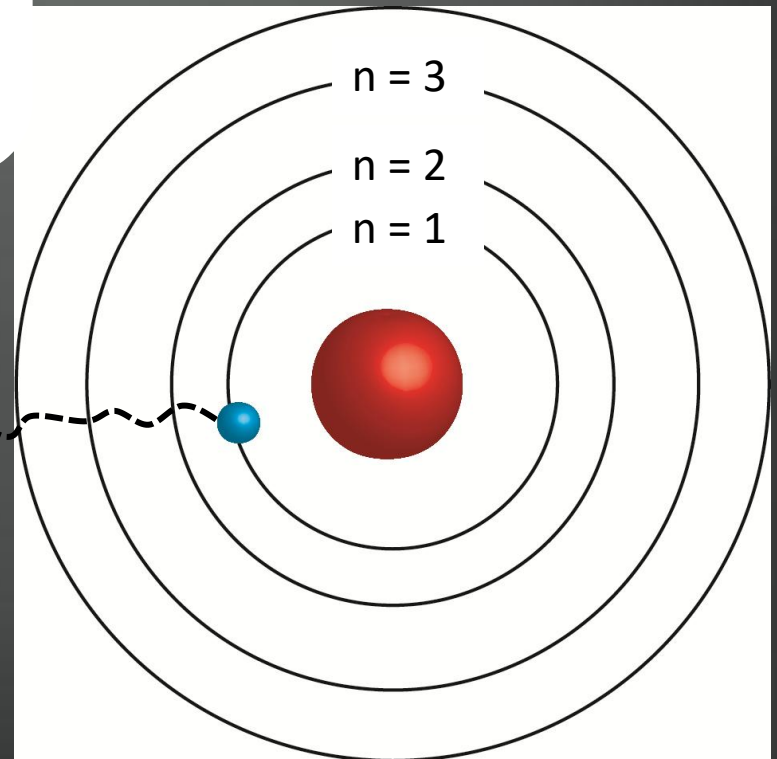
Ατομικό μοντέλο Bohr

1^η συνθήκη (μηχανική)

Τα ηλεκτρόνια περιστρέφονται γύρω από τον πυρήνα σε ορισμένες κυκλικές τροχιές. Κάθε επιτρεπόμενη τροχιά έχει καθορισμένη ενέργεια, είναι δηλαδή κβαντισμένη.

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

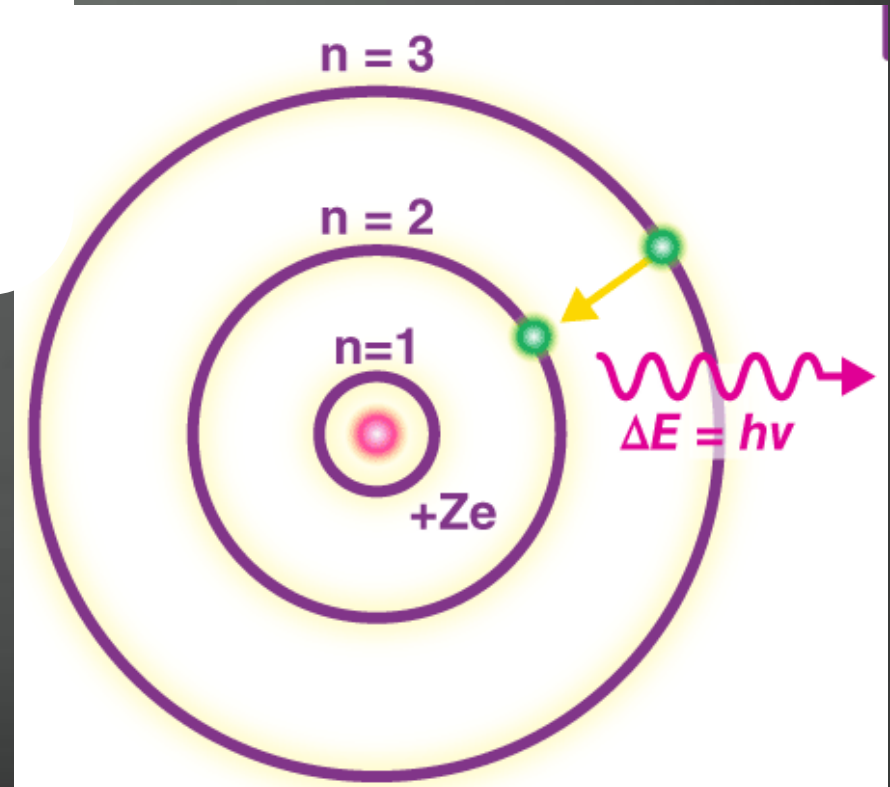
Όσο το ηλεκτρόνιο απομακρύνεται από τον πυρήνα, η ενέργεια του αυξάνεται. Όταν απομακρυνθεί αρκετά, η ενέργεια θα πάρει τη μέγιστη τιμή ($E = 0$) Αυτό λέγεται ιοντισμός.



Ατομικό μοντέλο Bohr

2η συνθήκη (οπτική)

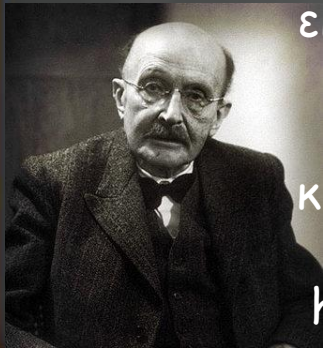
Το ηλεκτρόνιο εκπέμπει ενέργεια υπό μορφή ακτινοβολίας μόνο όταν μεταπηδά από μια τροχιά σε μια άλλη, όταν δηλαδή αλλάζει ενεργειακή στάθμη.



Κβαντική Θεωρία Plank

Η ακτινοβολία εκπέμπεται όχι με συνεχή τρόπο αλλά σε μικρά πακέτα (κβάντα). Τα κβάντα φωτός ή της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας γενικότερα ονομάζονται φωτόνια.

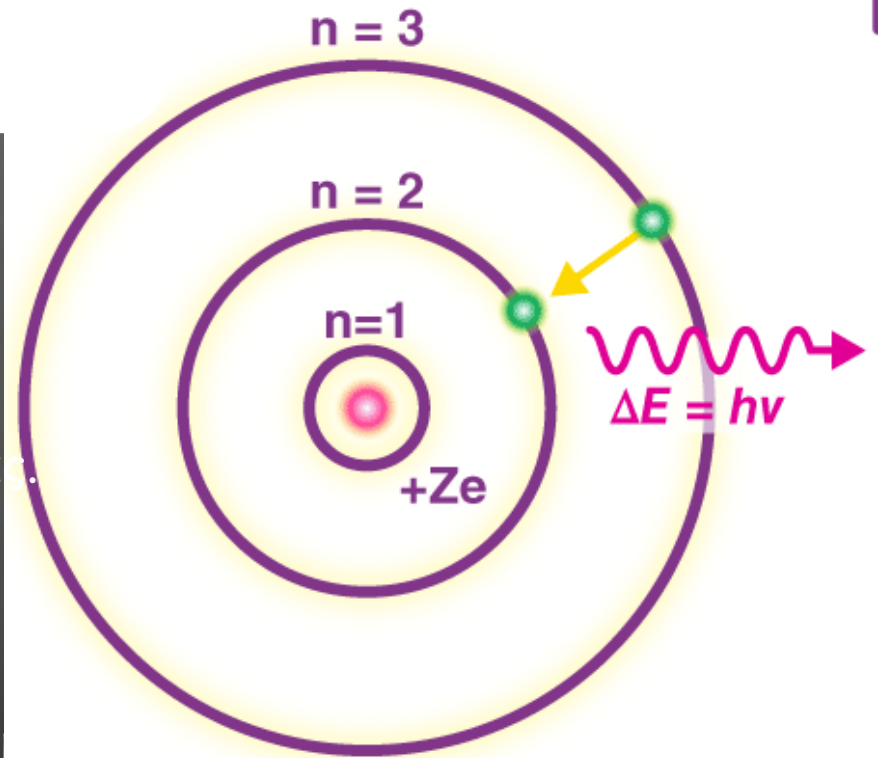
Κάθε κβάντο μεταφέρει ενέργεια ανάλογη προς τη συχνότητα της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας:

$$E = h \cdot \nu$$


και σύμφωνα με τον Bohr:

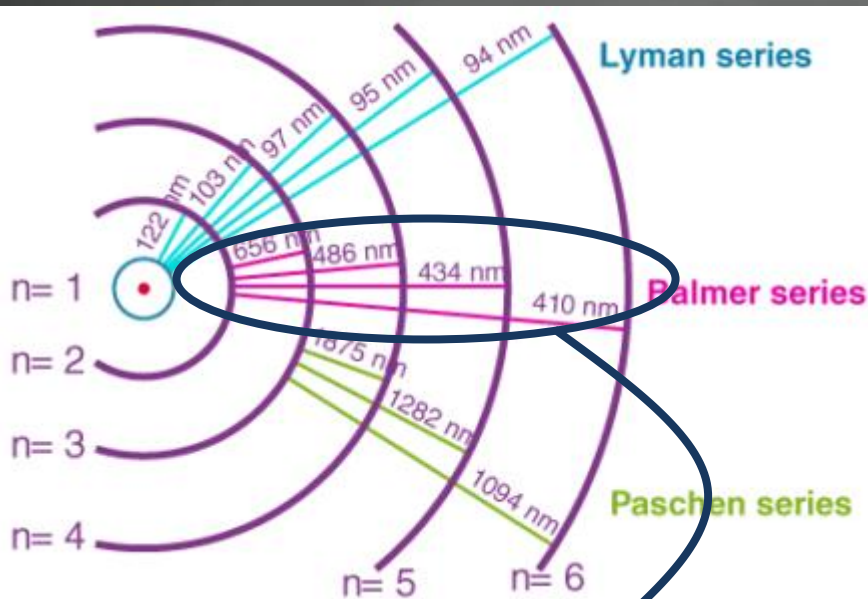
$$\Delta E = |E_f - E_i| = h \cdot \nu$$

$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ (στ. Planck)

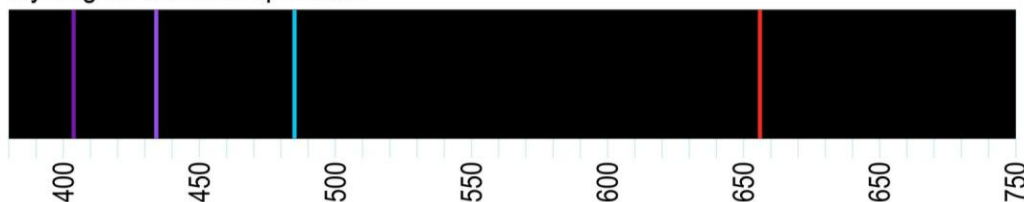


Φάσμα εκπομπής ατόμου Η

Η θεωρία του Bohr κατάφερε να ερμηνεύσει το φάσμα εκπομπής του ατόμου του υδρογόνου. Όχι όμως και αυτά των πολυπλοκότερων ατόμων.



Hydrogen Emission spectrum

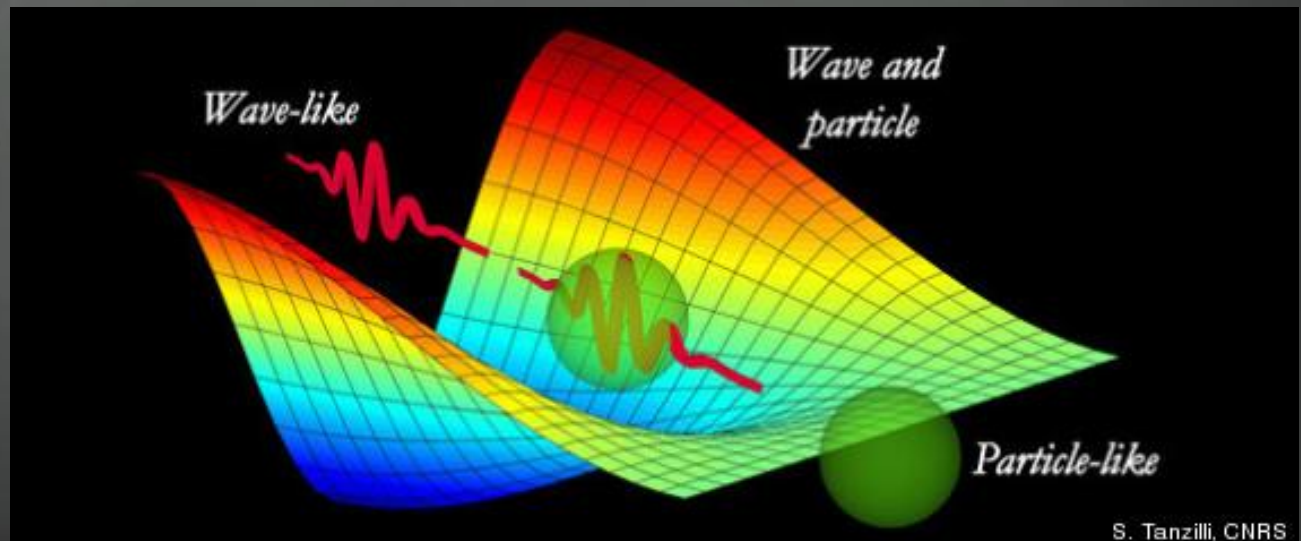


Κυματική Θεωρία της ύλης De Broglie

Το φως, του οποίου το κβάντο ονομάζεται φωτόνιο, όπως και κάθε κινούμενο μικρό σωματίδιο π.χ. ηλεκτρόνιο, παρουσιάζει διττή φύση, σωματιδίου (κβάντα) και κύματος (ηλεκτρομαγνητικό κύμα)

Το μήκος κύματος, λ , ενός σωματιδίου μάζας, m , και ταχύτητας, u , δίνεται από τη σχέση:

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot u}$$

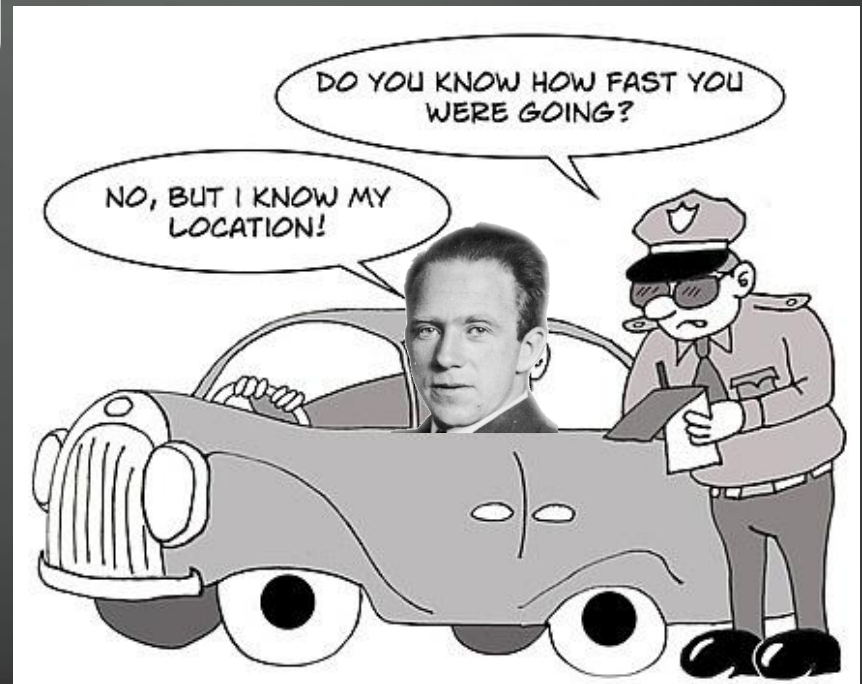


Αρχή της απροσδιοριστίας Heisenberg

Είναι αδύνατο να προσδιορίσουμε με ακρίβεια συγχρόνως τη θέση και την ορμή ($p = m \cdot u$) ενός μικρού σωματιδίου π.χ. ηλεκτρονίου.



$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$



Κυματική εξίσωση Schrödinger

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r) + V(r) \Psi(r) = E \Psi(r)$$

Δε μιλάμε για τη θέση ενός ηλεκτρονίου, αλλά για την **πιθανότητα** να βρίσκεται σε μια ορισμένη θέση ένα ηλεκτρόνιο.
Υπολογίζεται η ενέργεια E_n του ηλεκτρονίου.



Κυματική εξίσωση Schrödinger

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r) + V(r)\Psi(r) = E\Psi(r)$$

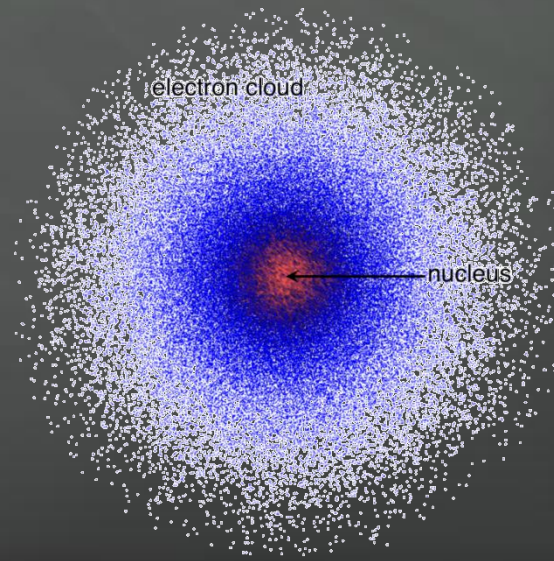
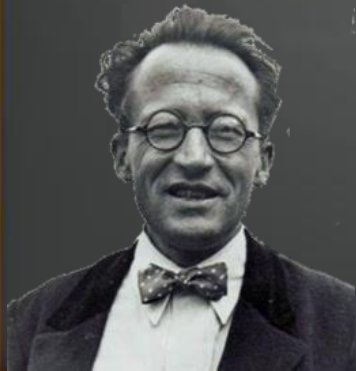
Οι λύσεις είναι κυματοσυναρτήσεις ψ , οι οποίες περιγράφουν την κατάσταση του ηλεκτρονίου με ορισμένη ενέργεια (E_n) και ονομάζονται **ατομικά τροχιακά**. Είναι συναρτήσεις θέσης του ηλεκτρονίου στο άτομο π.χ. της μορφής $\psi(x, y, z)$.



Κυματική εξίσωση Schrödinger

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r) + V(r)\Psi(r) = E\Psi(r)$$

Το ψ^2 (ή ακριβέστερα το $-e\psi^2$, όπου $-e$ το φορτίο του ηλεκτρονίου) εκφράζει την κατανομή ή την **πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους** στο χώρο γύρω από τον πυρήνα.



Κβαντικοί αριθμοί

Προκύπτουν από την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου και είναι:

- ο κύριος κβαντικός αριθμός (n),
- ο δευτερεύων κβαντικός αριθμός ή αζιμουθιακός (ℓ)
- ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_ℓ).

Κάθε δυνατή τριάδα κβαντικών αριθμών (n, ℓ, m_ℓ) οδηγεί σε μια λύση της εξίσωσης Schrödinger, καθορίζοντας ένα συγκεκριμένο τροχιακό του ατόμου.

Ο τέταρτος κβαντικός αριθμός, ο κβαντικός αριθμός του spin (m_s), δε συμμετέχει στη διαμόρφωση της τιμής της ενέργειας του ηλεκτρονίου και κατά συνέπεια στο καθορισμό του ατομικού τροχιακού.

Κύριος κβαντικός αριθμός (n)

Με βάση το πρότυπο του Bohr, καθορίζει την τροχιά που κινείται το ηλεκτρόνιο.

Με βάση την κβαντομηχανική, καθορίζει το μέγεθος του ηλεκτρονιακού νέφους (ή τροχιακού).

Τροχιακά με τον ίδιο κύριο κβαντικό αριθμό (n) συγκροτούν τη στιβάδα ή φλοιό.

κύριος κβαντικός αριθμός (n)	1	2	3	4	
στιβάδα ή φλοιός	K	L	M	N	

Δευτερεύων κβαντικός αριθμός ή αζιμουθιακός (ℓ)

Παίρνει τιμές ανάλογα με την τιμή που έχει ο n , δηλαδή,
 $0, 1, 2, \dots, (n-1)$.

Καθορίζει το σχήμα του ηλεκτρονικού νέφους
(τροχιακού).

Ατομικά τροχιακά που έχουν το ίδιο n και ℓ αποτελούν
υποστιβάδα ή υποφλοιό.

Αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός, ℓ	0	1	2	3	
υποστιβάδα	s	p	d	f	

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_ℓ)

Παίρνει τιμές ανάλογα με την τιμή του ℓ : $-\ell, (-\ell + 1), \dots, 0, \dots, 1, (\ell - 1), +\ell$

Καθορίζει τον προσανατολισμό του ηλεκτρονικού νέφους σε σχέση με τους άξονες x, y, z .

Σε κάθε τιμή του μαγνητικού κβαντικού αριθμού αντιστοιχεί και ένα τροχιακό.

Σε κάθε υποστιβάδα με τιμή δευτερεύοντος κβαντικού αριθμού αντιστοιχούν **$(2\ell + 1)$ τροχιακά**. Δηλαδή,

με $\ell = 0$ (υποστιβάδα s), έχουμε $(2 \cdot 0 + 1) = 1$ τροχιακό s

όταν $\ell = 1$ (υποστιβάδα p), έχουμε $(2 \cdot 1 + 1) = 3$ τροχιακά p

Για το τροχιακό p χρησιμοποιούνται τα παρακάτω σύμβολα:

μαγνητικός κβαντικός αριθμός, m_ℓ	+1	0	-1
ατομικό τροχιακό	p_x	p_z	p_y

Κβαντικός αριθμός του spin (m_s)

Παίρνει τιμές $+1/2$ ή $-1/2$, είναι δηλαδή ανεξάρτητος από τις τιμές των άλλων κβαντικών αριθμών.

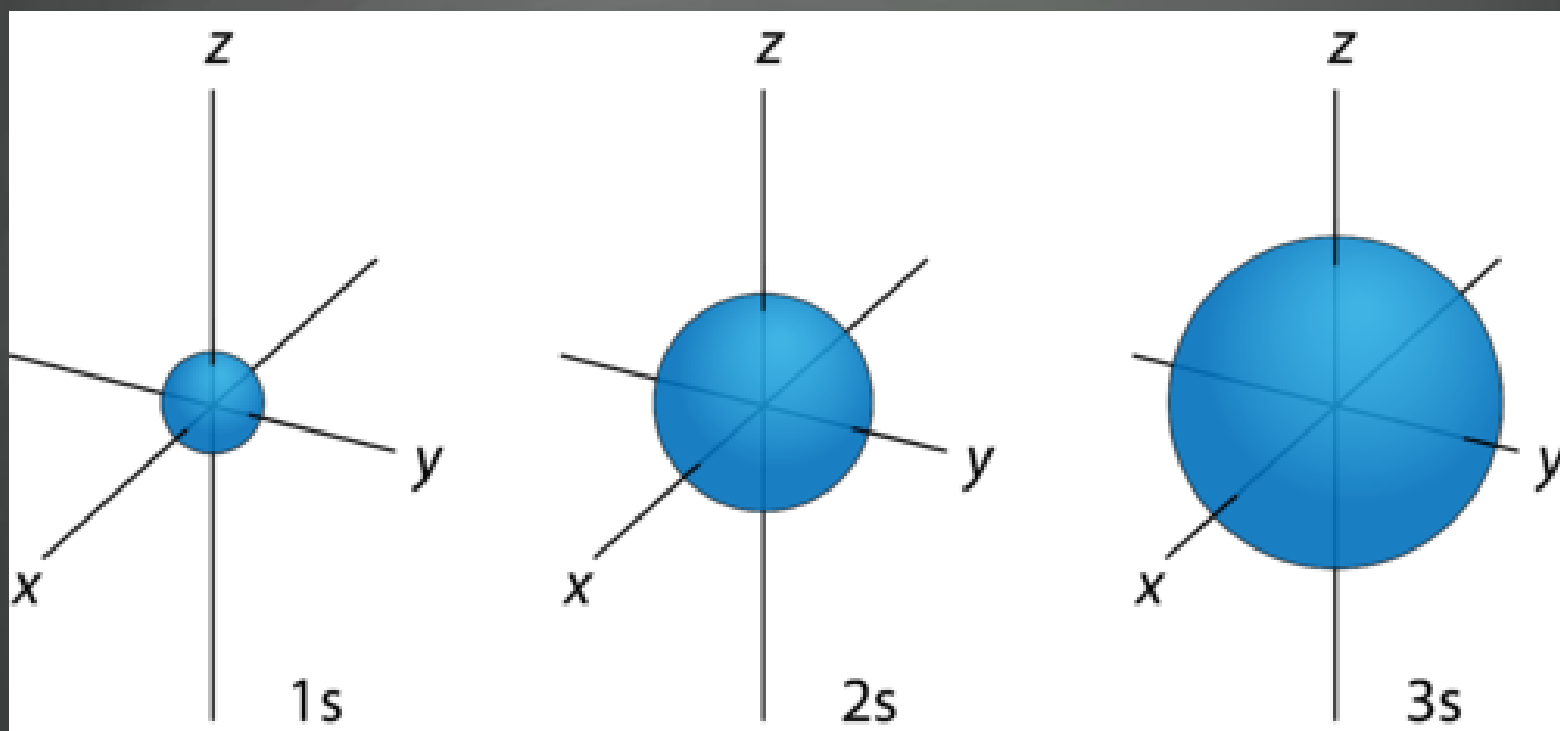
Καθορίζει την ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου (spin).

Για τιμή $m_s = +1/2$ έχουμε παράλληλο spin ή spin προς τα πάνω ($\uparrow$), ενώ για τιμή $m_s = -1/2$ έχουμε αντιπαράλληλο spin ή spin προς τα κάτω ($\downarrow$).

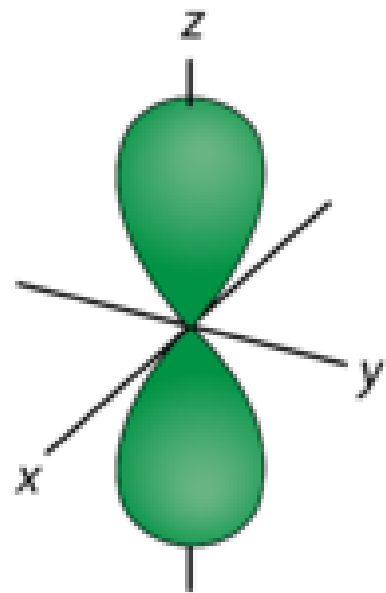
Σε κάθε τροχιακό δε μπορούμε να έχουμε περισσότερα από δύο ηλεκτρόνια. Μάλιστα έχουν αντίθετη ιδιοπεριστροφή (spin).

Δεν συμμετέχει στη διαμόρφωση της τιμής της ενέργειας του ηλεκτρονίου, ούτε στον καθορισμό του τροχιακού.

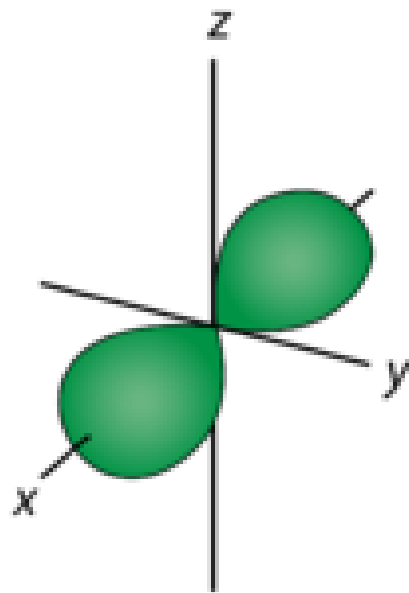
Γραφική απεικόνιση s τροχιακών



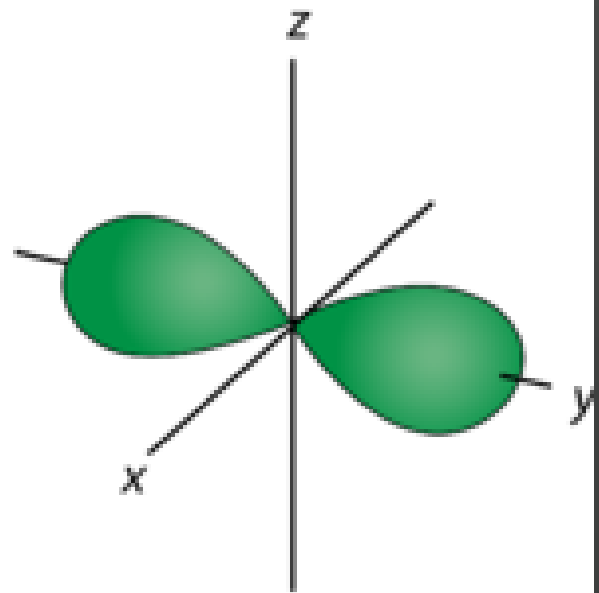
Γραφική απεικόνιση p τροχιακών



p_z

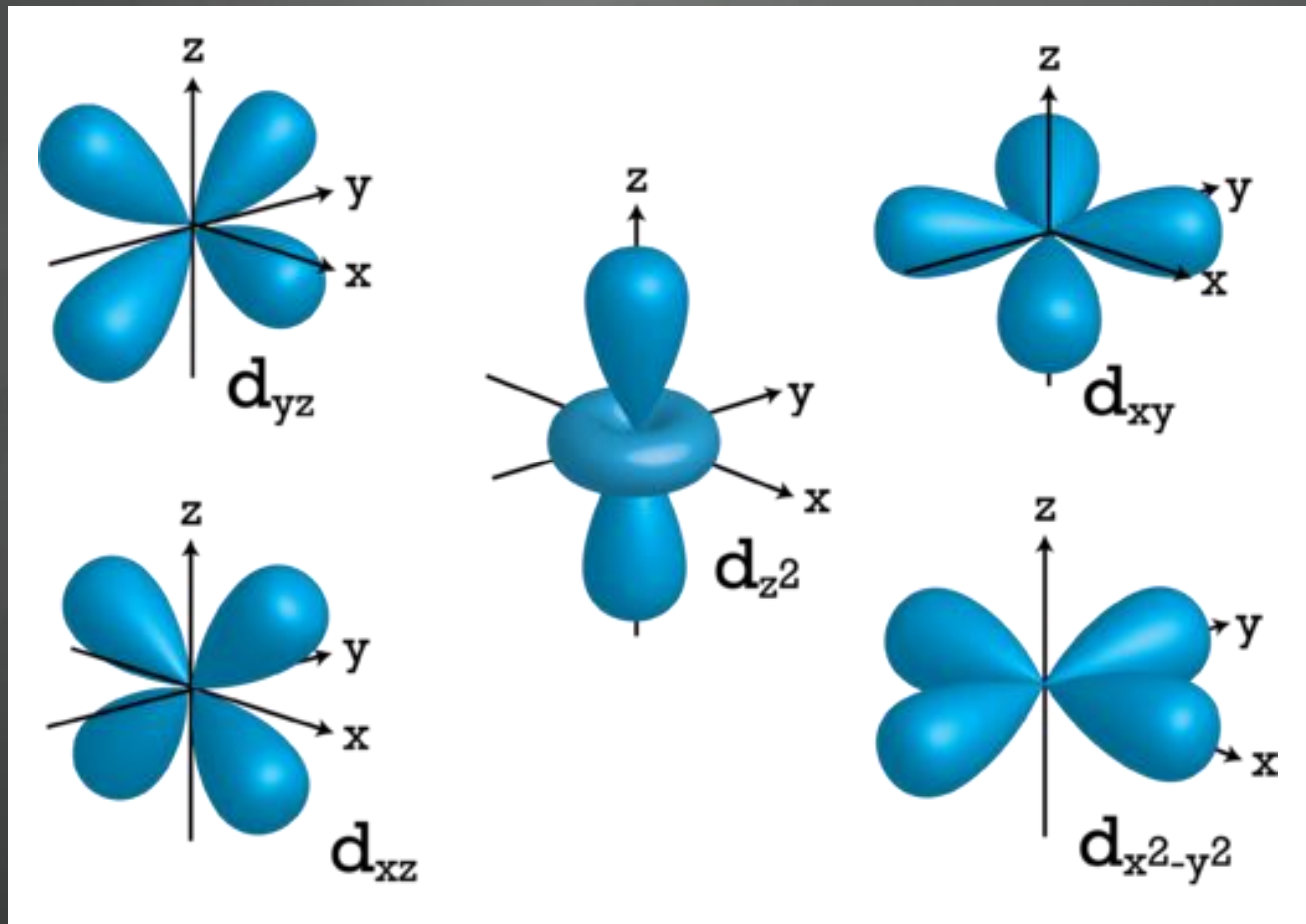


p_x



p_y

Γραφική απεικόνιση d τροχιακών



Γραφική απεικόνιση f τροχιακών

