Άσκηση 7.3

Τα ακόλουθα μήκη κύματος είναι αντιπροσωπευτικά για τις περιοχές υπερύθρου, υπεριώδους και ακτίνων-Χ του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος, αντίστοιχα:

$$1{,}0 \times 10^{-6}\ \text{m}, \quad 1{,}0 \times 10^{-8}\ \text{m} \quad \text{και} \quad 1{,}0 \times 10^{-10}\ \text{m}.$$

(α) Πόση είναι η ενέργεια ενός φωτονίου καθεμιάς ακτινοβολίας;

(β) Ποια ακτινοβολία έχει το μεγαλύτερο ποσόν ενέργειας ανά φωτόνιο;

(γ) Ποια το λιγότερο;

ΛΥΣΗ

(α) Πρώτα υπολογίζονται οι συχνότητες από $c = \nu\lambda$ και μετά οι ενέργειες από $E = h\nu$:

$$\nu_{\upsilon\pi\varepsilon\rho\acute{\upsilon}\theta\rho o\upsilon} = \frac{c}{\lambda} = \frac{3{,}00 \times 10^{8}\ \text{m/s}}{1{,}0 \times 10^{-6}\ \text{m}} = 3{,}\underline{00} \times 10^{14}\ /\text{s}$$

$$E_{\upsilon\pi\varepsilon\rho\acute{\upsilon}\theta\rho o\upsilon} = h\nu = 6{,}63 \times 10^{-34}\ \text{J s} \times 3{,}\underline{00} \times 10^{14}\ /\text{s} = 1{,}\underline{9}89 \times 10^{-19}\ \text{J} = 2{,}0 \times 10^{-19}\ \text{J}$$

$$\nu_{\upsilon\pi\varepsilon\rho\iota\acute{\omega}\delta o\upsilon\varsigma} = \frac{c}{\lambda} = \frac{3{,}00 \times 10^{8}\ \text{m/s}}{1{,}0 \times 10^{-8}\ \text{m}} = 3{,}\underline{0}0 \times 10^{16}\ /\text{s}$$

$$E_{\upsilon\pi\varepsilon\rho\iota\acute{\omega}\delta o\upsilon\varsigma} = h\nu = 6{,}63 \times 10^{-34}\ \text{J s} \times 3{,}\underline{0}0 \times 10^{16}\ /\text{s} = 1{,}\underline{9}89 \times 10^{-17}\ \text{J} = 2{,}0 \times 10^{-17}\ \text{J}$$

$$\nu_{\alpha\kappa\tau\acute{\iota}\nu\omega\nu\text{-}X} = \frac{c}{\lambda} = \frac{3{,}00 \times 10^{8}\ \text{m/s}}{1{,}0 \times 10^{-10}\ \text{m}} = 3{,}\underline{0}0 \times 10^{18}\ /\text{s}$$

$$E_{\alpha\kappa\tau\acute{\iota}\nu\omega\nu\text{-}X} = h\nu = 6{,}63 \times 10^{-34}\ \text{J s} \times 3{,}\underline{0}0 \times 10^{18}\ /\text{s} = 1{,}\underline{9}89 \times 10^{-15}\ \text{J} = 2{,}0 \times 10^{-15}\ \text{J}$$

Οπότε:

(β) Τα φωτόνια των ακτίνων-Χ έχουν το μεγαλύτερο ποσό ενέργειας (μικρότερο μήκος κύματος).

(γ) Τα φωτόνια της υπέρυθρης ακτινοβολίας έχουν το μικρότερο ποσό ενέργειας

Άσκηση 7.2α

Για να αποσπασθεί ένα ηλεκτρόνιο από μια γυαλιστερή επιφάνεια ψευδαργύρου, θα πρέπει το προσπίπτον φωτόνιο να έχει ελάχιστη ενέργεια $E_{min} = 6{,}94 \times 10^{-19}$ J (*έργο εξαγωγής*).

(α) Μπορεί ένα φωτόνιο με μήκος κύματος 210 nm να προκαλέσει απόσπαση ηλεκτρονίου από ψευδάργυρο;

(β) Εάν ναι, πόση είναι η μέγιστη ενέργεια του αποσπώμενου ηλεκτρονίου;

ΛΥΣΗ

(α) Πρώτα υπολογίζεται η συχνότητα από $c = \nu\lambda$ και μετά η ενέργεια του φωτονίου από $E = h\nu$:

$$\nu_{φωτονίου} = \frac{c}{\lambda} = \frac{3{,}00 \times 10^{8}\ \text{m/s}}{210 \times 10^{-9}\ \text{m}} = 1{,}4\underline{2}8 \times 10^{15}\ /\text{s}$$

$$E_{φωτονίου} = h\nu = 6{,}63 \times 10^{-34}\ \text{J s} \times 1{,}4\underline{2}8 \times 10^{15}\ /\text{s} = 9{,}4\underline{7}1 \times 10^{-19}\ \text{J} = 9{,}47 \times 10^{-19}\ \text{J}$$

Το φωτόνιο με μήκος κύματος 210 nm μπορεί να προκαλέσει *απόσπαση e*, επειδή η ενέργειά του είναι μεγαλύτερη από το *έργο εξαγωγής*

(β) Η μέγιστη ενέργεια του αποσπώμενου ηλεκτρονίου είναι

$$E_{φωτονίου} - E_{min} = 2{,}53 \times 10^{-19}\ \text{J}$$

Άσκηση 7.3α

Στο <u>ορατό</u> φάσμα του ατόμου Η :

1) **Πόσο είναι το μήκος κύματος της πρώτης <u>οριακής</u> γραμμής;**
2) **Πόσο είναι το μήκος κύματος της δεύτερης <u>οριακής</u> γραμμής;**

<u>ΛΥΣΗ</u> **Η Εξίσωση Balmer είναι:** $\frac{1}{\lambda} = 1,097\times10^{7}\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right)\mathrm{m}^{-1}$, ***n*** **= ακέραιος > 2**

Οι γραμμές στο ορατό φάσμα του Η είναι τέσσερις για *n* = 3, 4, 5, 6,

(1)

Για την πρώτη οριακή γραμμή *n* = 3 $\Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 1,097\times10^{7}\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right)\mathrm{m}^{-1} = 1,097\times10^{7}\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{3^2}\right)\mathrm{m}^{-1}$

$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 0,15236\times10^{7}\,\mathrm{m}^{-1} \Rightarrow \lambda = 6,563\times10^{-7}\,\mathrm{m} = 656,3\ \mathrm{nm}$$

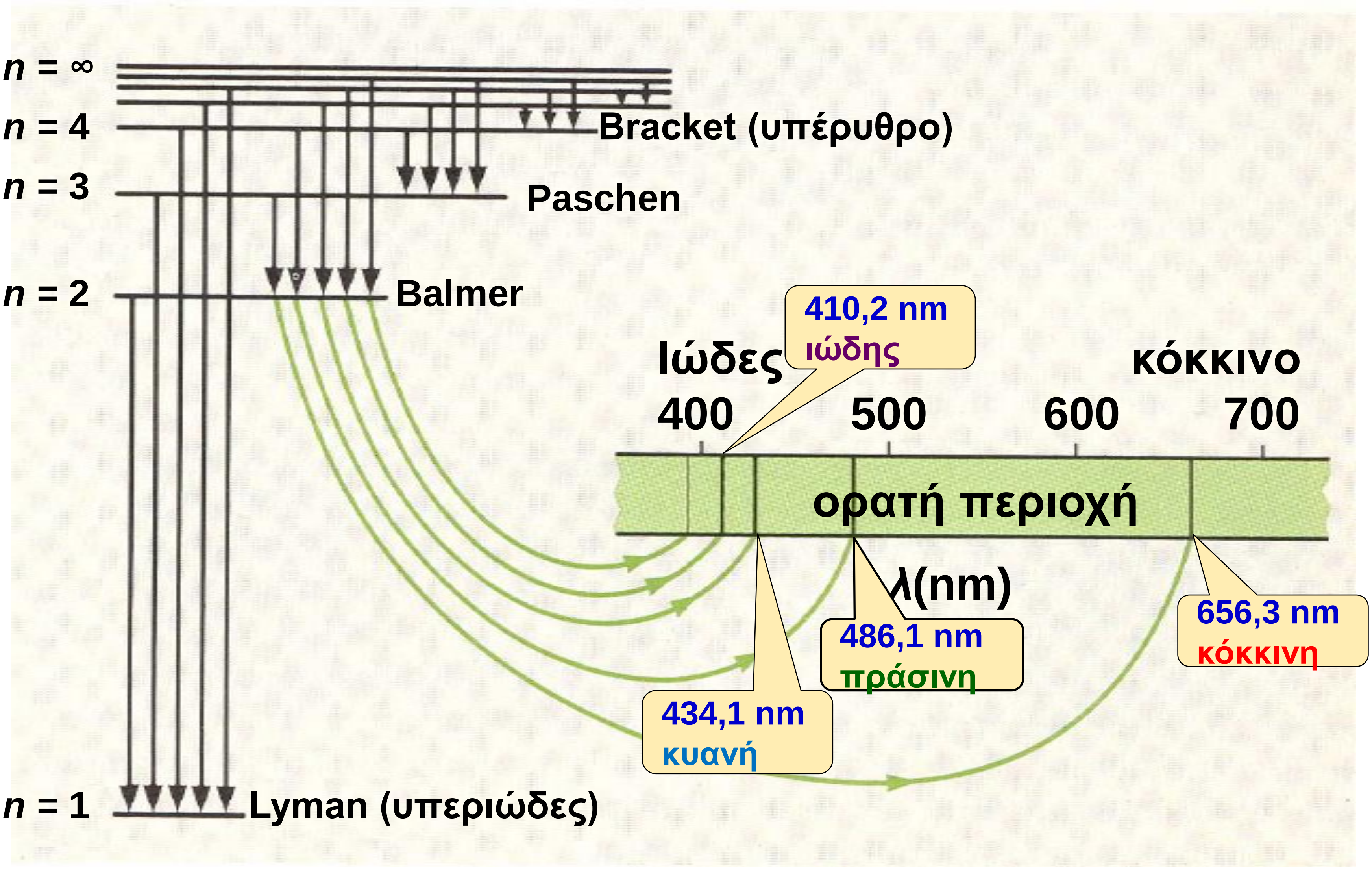
(2)

Για τη δεύτερη οριακή γραμμή *n* = 6 $\Rightarrow$

$$\frac{1}{\lambda} = 1,097\times10^{7}\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{6^2}\right)\mathrm{m}^{-1} \Rightarrow$$

$$\frac{1}{\lambda} = 2,43\underline{7}78\times10^{6}\ \mathrm{m}^{-1} \Rightarrow \lambda = 4,10\underline{2}1\times10^{-7}\,\mathrm{m} = 410,2\,\mathrm{nm}$$

Ερμηνεία του φάσματος του ατόμου H



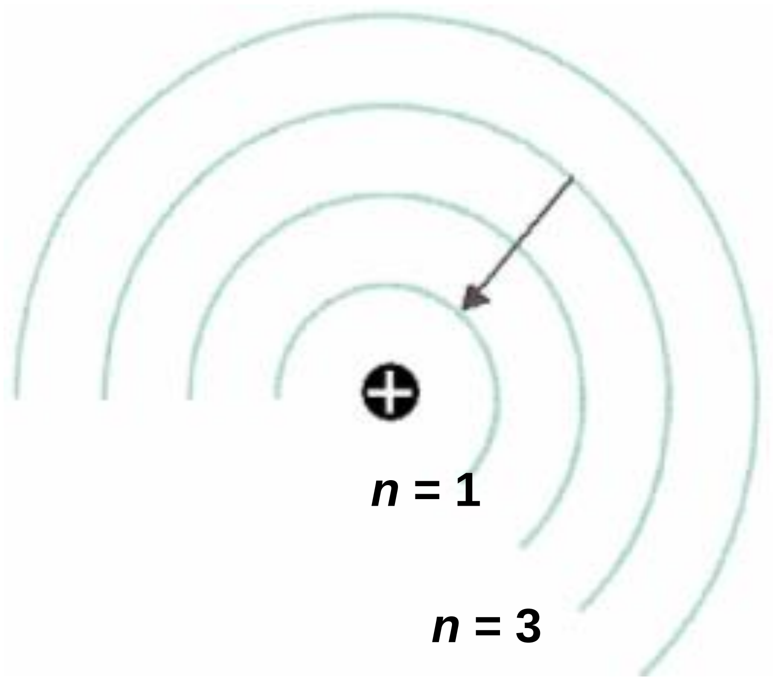
Για $n = \infty \Rightarrow$ πλήρης απομάκρυνση του e (ιοντισμός)

Άσκηση 7.4

Υπολογίστε το μήκος κύματος του φωτός που εκπέμπεται από το υδρογονοάτομο, όταν το ηλεκτρόνιο μεταπίπτει από το επίπεδο ενέργειας *n* = 3 στο επίπεδο *n* = 1.

(ή σε ποια περιοχή του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος ανήκει το φως αυτό;)

[ή ποιο είναι το χρώμα αυτού του φωτός; (αν βρίσκεται στην ορατή περιοχή του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος)]



Άσκηση 7.4

Από τη συνθήκη 2 του Bohr $\Rightarrow$ $$h\nu = E_i - E_f = \left(-\frac{R_{\mathrm{H}}}{n_i^2}\right) - \left(-\frac{R_{\mathrm{H}}}{n_f^2}\right) = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Εδώ $n_f = 1$ και $n_i = 3$ $\Rightarrow$ $$h\nu = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{1^2}\right) - \left(\frac{1}{3^2}\right) = R_{\mathrm{H}}\left(1 - \frac{1}{9}\right) = \frac{8R_{\mathrm{H}}}{9}$$

Οπότε η συχνότητα της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας είναι:

$$\nu = \frac{8R_{\mathrm{H}}}{9h} = \frac{8}{9} \times \frac{2{,}179 \times 10^{-18}\,\mathrm{J}}{6{,}63 \times 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}} = 2{,}9\underline{2}1 \times 10^{15}\,/\,\mathrm{s} = 2{,}92 \times 10^{15}\,/\,\mathrm{s}$$

Και επειδή $\lambda = c/\nu$ $\Rightarrow$ $$\lambda = \frac{3{,}00 \times 10^{8}\,\mathrm{m/s}}{2{,}92 \times 10^{15}\,/\,\mathrm{s}} = 1{,}0\underline{2}7 \times 10^{-7}\,\mathrm{m} \quad (103\ \mathrm{nm})$$

☆ Το φως αυτό ανήκει στην εγγύς υπεριώδη περιοχή του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος.

1. Ποια είναι η μεγαλύτερη συχνότητα που μπορεί να έχει γραμμή της σειράς Balmer;

2. Σε ποια περιοχή του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος εμφανίζεται αυτή;

ΛΥΣΗ (1)

$$\frac{1}{\lambda}=1,097\times10^{7}\left(\frac{1}{2^{2}}-\frac{1}{\infty^{2}}\right)\mathrm{m}^{-1}\xrightarrow{\nu=\frac{c}{\lambda}}\nu=\mathrm{c}\ \left[1,097\times10^{7}\left(\frac{1}{2^{2}}-\frac{1}{\infty^{2}}\right)\mathrm{m}^{-1}\right]=$$

$$=2,998\times10^{8}\ \mathrm{m\ s}^{-1}(2,74\ \underline{2}5\times10^{6}\ \mathrm{m}^{-1})\Rightarrow\nu=8,22\underline{2}1\times10^{14}\ \mathrm{s}^{-1}$$

$$\lambda=\frac{c}{\nu}=\frac{2,998\times10^{8}\ \mathrm{m\ s}^{-1}}{8,222\times10^{14}}\Rightarrow\lambda=3,646\times10^{-7}\ \mathrm{m}\ \text{ή}\ 364,6\ \mathrm{nm}$$

ΑΠΑΝΤΗΣΗ (2)

Η γραμμή αυτή εμφανίζεται στην εγγύς υπεριώδη περιοχή (UV) του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος

Κβαντομηχανική ή κυματομηχανική

Ποια ήταν τα αναπάντητα ερωτήματα της θεωρίας του Bohr;

1. Φάσματα πολυηλεκτρονικών ατόμων
2. Κυκλικές τροχιές
3. Γιατί η ενέργεια του e είναι κβαντισμένη;

<u>Κβαντομηχανική ή κυματομηχανική</u>: ο κλάδος της Φυσικής που περιγράφει μαθηματικά τις κυματικές ιδιότητες των στοιχειωδών σωματιδίων.

Η κβαντομηχανική, ένα από τα σημαντικότερα επιτεύγματα του 20ου αιώνα, στηρίχθηκε κυρίως στις ιδέες των:

- **De Broglie (Εξίσωση του de Broglie)**
- **Heisenberg (Αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg) και**
- **Schrödinger (Κυματική εξίσωση του Schrödinger)**

Κβαντομηχανική: Εξίσωση του de Broglie
(Δυϊσμός κύματος-σωματιδίου)

Einstein: $E_{φωτονίου} = h\nu$, άρα και $ορμή_{φωτονίου} = mc$

$m_{ηρεμίας\ φωτονίου} = 0$, αλλά λόγω κίνησης του φωτονίου:

$$E_{φωτονίου} = m_{σχετικιστική\ φωτονίου}\,c^2 = h\nu \Rightarrow \lambda = \frac{h}{m_{σχ.\ φωτ.}\,c}$$

Louis de Broglie
(1892-1987)
Γάλλος Φυσικός
N.P. 1929

Louis de Broglie (1923):

Αν τα κύματα του φωτός μπορούν να συμπεριφέρονται ως υλικά σωματίδια, μήπως και υλικά σωματίδια, (όπως τα e), μπορούν να συμπεριφέρονται ως κύματα υπό κατάλληλες συνθήκες;

Εξίσωση του de Broglie για το υλικό κύμα:

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{m\upsilon}}$$

Όπου:

h = η σταθερά του Planck,

m και υ = η μάζα και η ταχύτητα του σωματιδίου αντίστοιχα

Άσκηση 7.6

Εφαρμογή της εξίσωσης του de Broglie

Υπολογίστε το μήκος κύματος (σε πικόμετρα) που σχετίζεται με ηλεκτρόνιο κινούμενο με ταχύτητα $2{,}19 \times 10^{6}$ m/s.

ΛΥΣΗ

Χρησιμοποιούμε την εξίσωση του de Broglie ($\lambda = h/mu$), όπου m η μάζα του ηλεκτρονίου ($9{,}11 \times 10^{-31}$ kg) και h η σταθερά του Planck ($h = 6{,}63 \times 10^{-34}$ J s $= 6{,}63 \times 10^{-34}$ kg m^2 s^{-1}):

$$\lambda = \frac{h}{m\upsilon} = \frac{6{,}63 \times 10^{-34}\,\mathrm{kg} \cdot \mathrm{m}^2/\mathrm{s}}{9{,}11 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg} \times 2{,}19 \times 10^{6}\,\mathrm{m/s}}$$

$$= 3{,}323 \times 10^{-10}\,\mathrm{m} \quad (332\ \mathrm{pm})$$

!!! Συγκρίνετε:

Για ένα μπαλάκι του μπέιζμπολ ($m = 0{,}145$ kg, $\upsilon = 27$ m/s) $\Rightarrow$

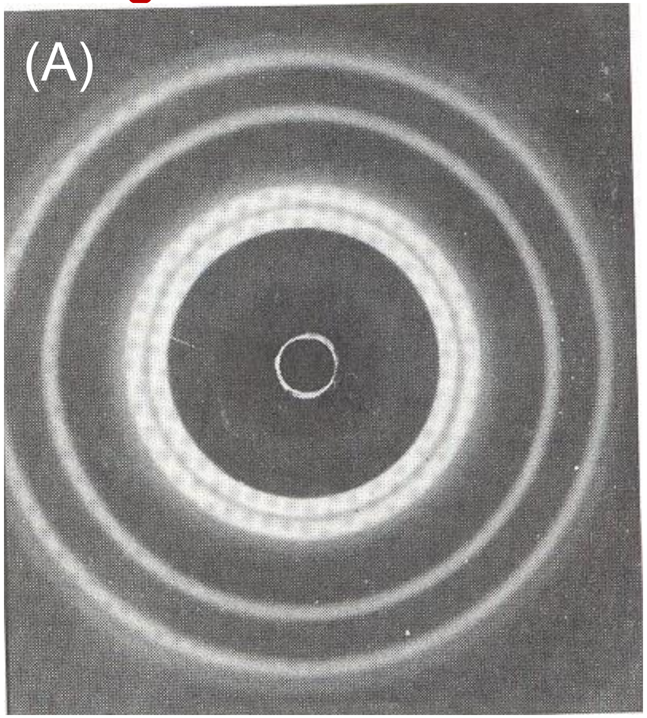
$$\lambda = 10^{-34}\ \mathrm{m}$$

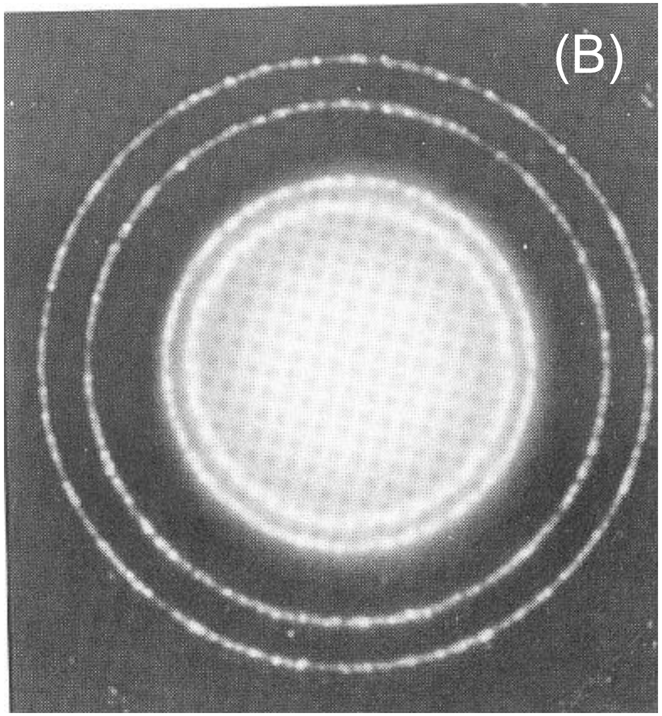
Πώς αποδεικνύεται ότι το ηλεκτρόνιο έχει κυματικές ιδιότητες;

Περίθλαση: **φαινόμενο διάχυσης των κυμάτων προς όλες τις κατευθύνσεις όταν αυτά συναντούν εμπόδιο ή οπή διαστάσεων παραπλήσιων του λ**

Πείραμα Davisson-Germer και περίθλαση e σε κρυστάλλους, (1927)

Κατευθύνοντας μια δέσμη ηλεκτρονίων (που είναι σωματίδια) προς ένα κρύσταλλο νικελίου παρατήρησαν στην οθόνη ένα σύνολο ομοκεντρικών δακτυλίων, όμοιο με αυτό που έδιναν οι ακτίνες Χ, οι οποίες είναι κύματα. Αυτοί θα αναμένονταν από ηλεκτρόνια με λ που δίνεται από την εξίσωση de Broglie





(A) Περίγραμμα περίθλασης ακτίνων Χ σε φύλλο Al

(B) Περίγραμμα περίθλασης ηλεκτρονίων σε φύλλο Al

G. P. Thomson
Nobel P. 1937

<u>Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο</u>: Μια καταπληκτική εφαρμογή της κυματικής φύσης του ηλεκτρονίου

E. Ruska (1933), Νόμπελ Φυσικής 1986

Η «δέσμη» του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου αποτελείται από υψηλής ταχύτητας ηλεκτρόνια και οι «φακοί» του είναι ηλεκτρομαγνητικά πεδία για εστίαση της δέσμης.
Μεγεθύνσεις > 200.000, Ανάλυση 0,5 nm

Απεικόνιση με ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης

Κεφάλι εξωγήινου τέρατος; Όχι. Είναι το κεφάλι μιας σφήκας με όλες εκείνες τις λεπτομέρειες που μόνο το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σήραγγας μπορεί να μας δώσει. (Για δημιουργία αντίθεσης, έχει προστεθεί χρώμα.)

Κβαντομηχανική: Η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg

Πώς μπορεί να είναι ορισμένη η «θέση» ενός κύματος; Μπορούμε να καθορίσουμε την ακριβή θέση ενός κύματος, αφού ένα κύμα απλώνεται στο χώρο;

Werner Heisenberg
(1901-1976)
Γερμανός Φυσικός
N.P. Φυσικής 1932

Τι λέει η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg (1927):

Είναι αδύνατο να γνωρίζουμε ταυτόχρονα και με ακρίβεια τη θέση *x* και την ορμή *p* (= *mυ*) ενός τόσο μικρού σωματιδίου, όπως είναι το ηλεκτρόνιο.

Πώς διατυπώνεται η αρχή της αβεβαιότητας μαθηματικά;

$$(\Delta x)(m\Delta \upsilon) \geq \frac{h}{4\pi}$$

Δ*x*, Δ*υ* = αβεβαιότητες ως προς τη θέση και την ταχύτητα, αντίστοιχα

Άσκηση 7.4α

Εφαρμογή της αρχής της αβεβαιότητας

Ένα ηλεκτρόνιο κινούμενο στην περιοχή κάποιου ατομικού πυρήνα έχει ταχύτητα $6 \times 10^6 \pm 1\%$ m/s.
Πόση είναι η αβεβαιότητα ως προς τη θέση του;

$\Delta \upsilon = (6 \times 10^6 \text{ m/s})(0{,}01) = 6 \times 10^4 \text{ m/s}$

$$(\Delta x) \geq \frac{h}{4\pi m \Delta \upsilon} \geq \frac{6{,}526 \times 10^{-34} \text{kg m}^2/\text{s}}{(4 \times 3{,}14)(9{,}11 \times 10^{-31} \text{kg})(6 \times 10^4 \text{m/s})} \geq 1 \times 10^{-9} \text{m}$$

Δx ηλεκτρονίου ~ 10 φορές μεγαλύτερη (!!!) από τη διάμετρο του ατόμου (10^{-10} m) $\Rightarrow$ πώς μπορούμε να γνωρίζουμε πού ακριβώς βρίσκεται το e;

Συγκρίνετε: Το Δx μπάλας του μπέιζ μπολ (m = 0,146 kg) που κινείται με ταχύτητα 44,7 ± 1,00% m/s είναι $8{,}08 \times 10^{-31}$ m $\Rightarrow$
Δx μηδαμινό (!!!): Ισχύει για όλα τα αντικείμενα του μακρόκοσμου

Κβαντομηχανική: Η εξίσωση του Schrödinger

Πληροφορίες για το ηλεκτρόνιο (σωματίδιο σε δεδομένο ενεργειακό επίπεδο) περιέχονται στην κυματική συνάρτηση *ψ* που λαμβάνεται με επίλυση της εξίσωσης του Schrödinger. Το ψ^2 δίνει την πιθανότητα εύρεσης του e σε περιοχή χώρου.

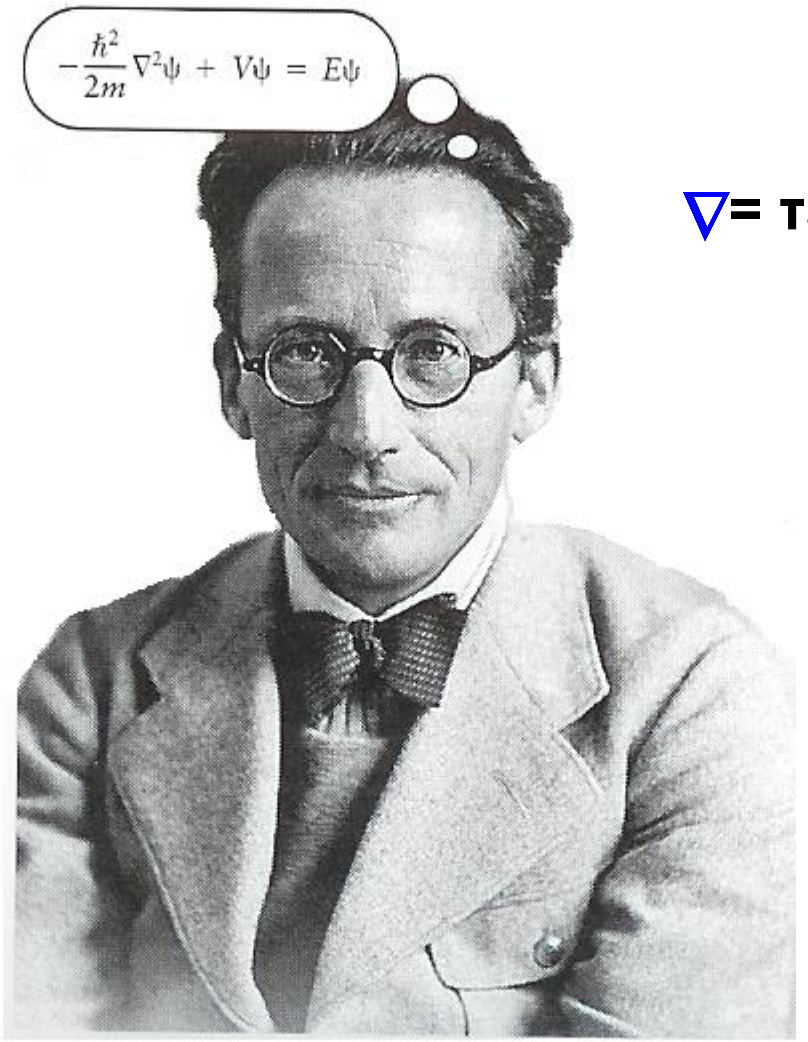
☞ **Η εξίσωση του Schrödinger είναι, μια πολύπλοκη διαφορική εξίσωση, η οποία εμπεριέχει τη μάζα *m* του ηλεκτρονίου (σωματιδιακός χαρακτήρας) και μια κυματική συνάρτηση *ψ* (κυματικός χαρακτήρας). Δηλαδή, μια εξίσωση που ενσωματώνει το σωματιδιακό και τον κυματικό χαρακτήρα του ηλεκτρονίου.**

☞ **Το ηλεκτρόνιο ως κύμα δεν διαδίδεται στο χώρο (όπως π.χ. ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα) αλλά πρέπει να είναι χρονικά αμετάβλητο.**
Ένα τέτοιο κύμα δεν προχωράει, γι' αυτό χαρακτηρίζεται ως στάσιμο, δηλαδή περιορισμένο στο άτομο.

O Schrödinger και η εξίσωσή του

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi$$

∇= τελεστής Laplace= $\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$



Erwin Schrödinger (1887-1961)
Αυστριακός, Ν.Ρ. 1933 στη Φυσική

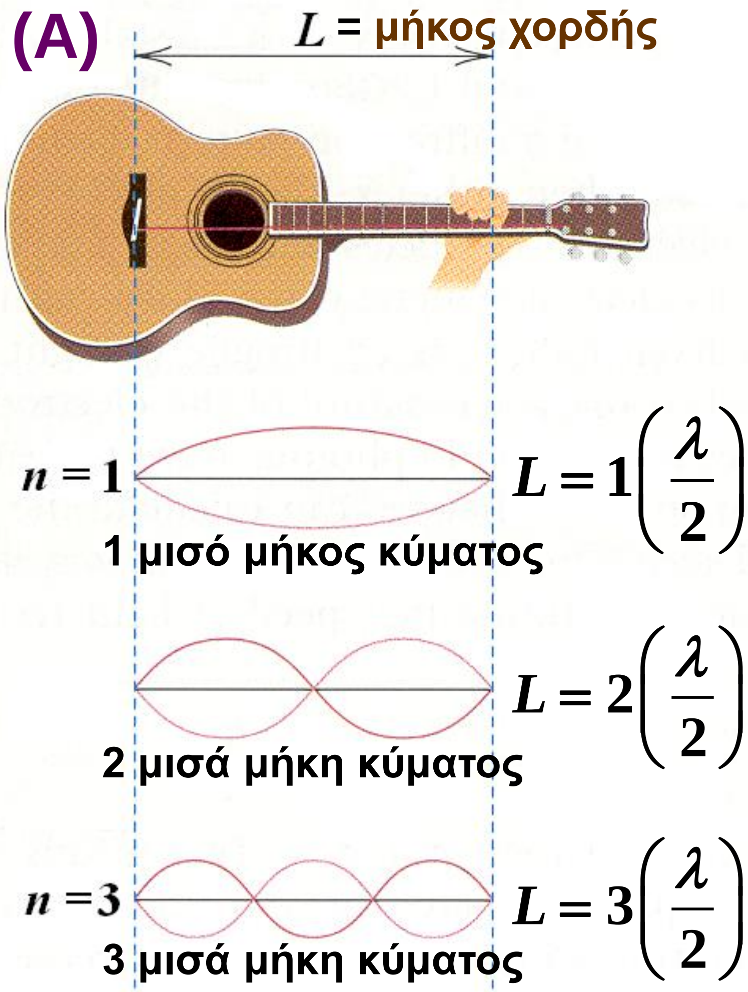
Γνωστά μεγέθη: *m* και *V* (μάζα και δυναμική ενέργεια e)

Άγνωστα που μπορούν να προσδιορισθούν:
***Ψ* και *E* (ολική ενέργεια e)**

Από τις άπειρες λύσεις *Ψ*, μόνο μερικές έχουν φυσική σημασία και θεωρούνται παραδεκτές $\Rightarrow$ ορισμένες οι τιμές της *E*.

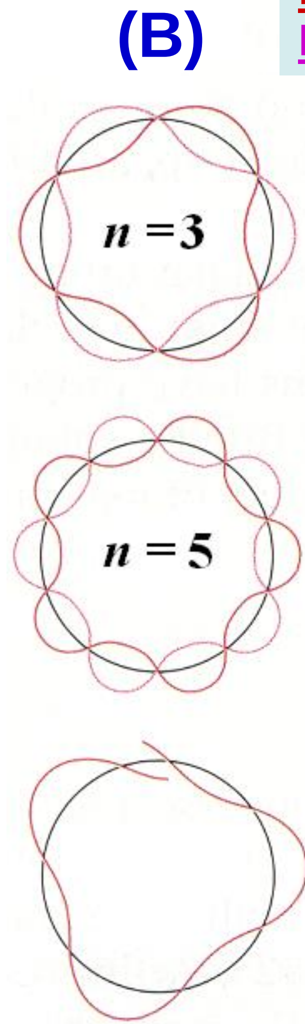
Ακριβείς λύσεις μόνο για το H και τα υδρογονοειδή άτομα !!!

Στάσιμα κύματα



Οι <u>πιθανές δονήσεις</u> χαρακτηρίζονται από το n και μια δόνηση έχει n -1 κόμβους, ενώ $\lambda_{δόνησης}$= $2L/n$ ή $L=n(\lambda/2)$

$$L = n\left(\frac{\lambda}{2}\right)$$



Απαγορευμένο επειδή $n=3{,}5$ *(όχι ακέραιος)*

<u>Κόμβος:</u> σημείο *πλάτους κύματος* = 0
<u>Κορυφή:</u> >> μέγιστου *πλάτους* >>

<u>Στάσιμο κύμα</u>: όταν οι κορυφές και οι κόμβοι δεν αλλάζουν θέση

(A) <u>Στάσιμα κύματα που δημιουργεί η χορδή μιας κιθάρας</u> (Το 'κβάντο' στη δόνηση της χορδής της κιθάρας, είναι το $\lambda/2$ ⇒ επιτρεπτές δονήσεις (στάσιμα κύματα) μόνο όταν το L είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του $\lambda/2$).

(B) <u>Το ηλεκτρόνιο ως στάσιμο κύμα</u> (Για ένα ηλεκτρόνιο ⇒ στάσιμα κύματα σχηματίζονται μόνο όταν η περιφέρεια της τροχιάς: $2\pi r = n\lambda$)

Κυματικές συναρτήσεις

- <u>Κιθάρα</u> (παλλόμενη χορδή): οι επιτρεπτές μορφές των στάσιμων κυμάτων (μιας διάστασης) περιγράφονται από τη μαθηματική εξίσωση $L = n(\lambda/2)$.

- <u>Άτομο Η</u> (ηλεκτρόνιο): οι επιτρεπτές μορφές των στάσιμων ηλεκτρονικών κυμάτων (τριών διαστάσεων) περιγράφονται από την εξίσωση του Schrödinger.

- Πώς ονομάζονται οι αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger;

- Κυματικές συναρτήσεις Ψ ή ατομικά τροχιακά.

- Ποια σημασία έχει η κυματική συνάρτηση Ψ ;

- Η κυματική συνάρτηση Ψ δεν έχει <u>καμία φυσική σημασία</u>!

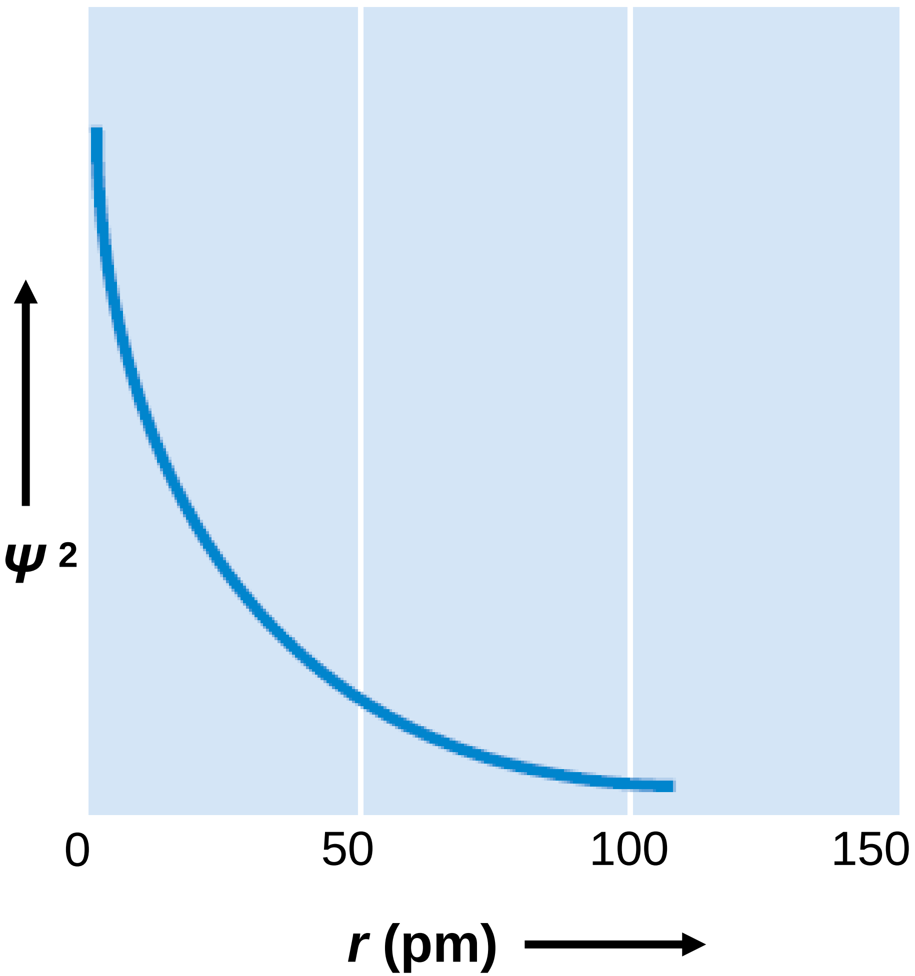
Το τετράγωνο της κυματικής συνάρτησης, ψ^2

- **Κυματική θεωρία: Η ένταση του φωτός είναι ανάλογη προς το τετράγωνο του πλάτους του κύματος (ψ^2).**
  Ποια φυσική σημασία αποκτά έτσι το ψ^2 για το ηλεκτρόνιο;

- **(α) Θεωρώντας το e ως κύμα: το ψ^2 δίνει την ηλεκτρονική πυκνότητα στα διάφορα σημεία γύρω από τον πυρήνα του ατόμου.**

- **(β) Θεωρώντας το e ως σωματίδιο: το ψ^2 ~ της πιθανότητας εύρεσης του e σε κάποιο συγκεκριμένο σημείο του ατόμου.**

Ένα άτομο δεν έχει καθορισμένα όρια !

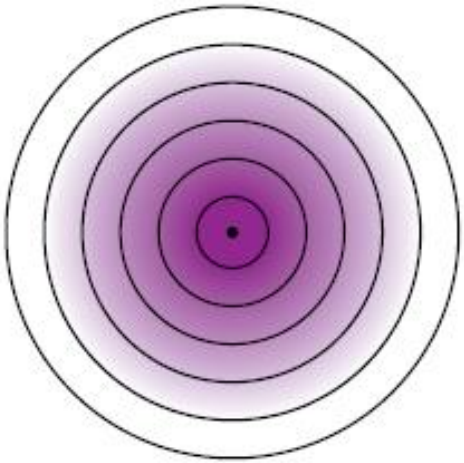


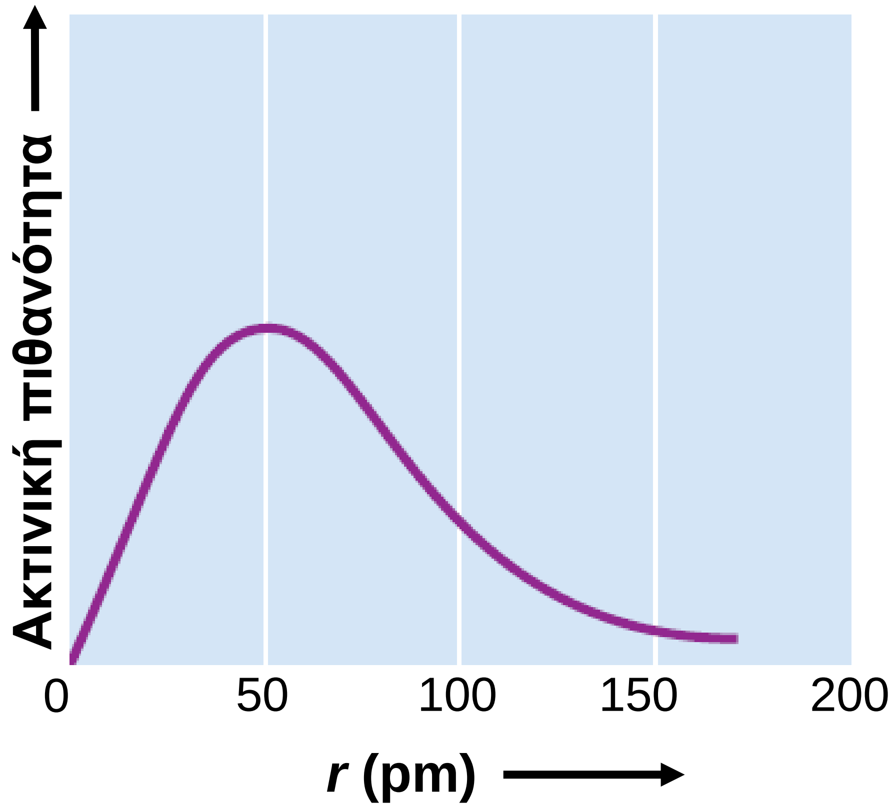
Γραφική παράσταση του ψ^2 για το χαμηλότερο ενεργειακό επίπεδο του ατόμου H

Η τιμή του ψ^2 ελαττώνεται γρήγορα καθώς η απόσταση r από τον πυρήνα μεγαλώνει, όμως το ψ^2 δεν γίνεται ποτέ μηδέν, παρόλο που η πιθανότητα γίνεται εξαιρετικά μικρή σε μεγάλες αποστάσεις από τον πυρήνα.

Αυτό σημαίνει ότι ένα άτομο δεν έχει καθορισμένα όρια, αντίθετα με το ατομικό μοντέλο του Bohr.

Πιθανότητα εύρεσης ενός ηλεκτρονίου σε σφαιρικό φλοιό γύρω από τον πυρήνα

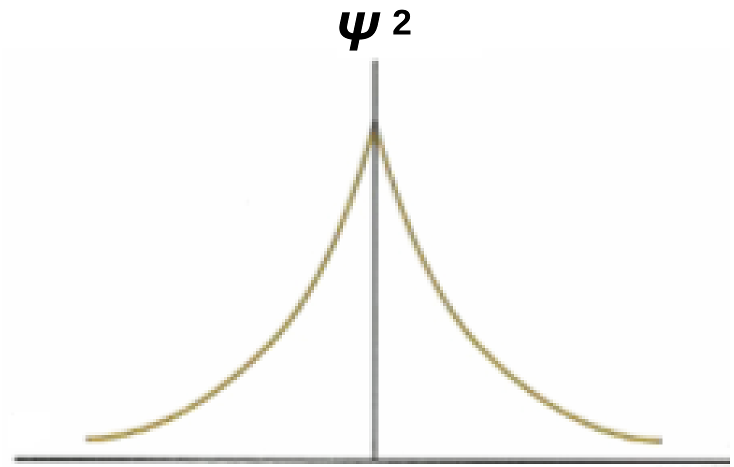


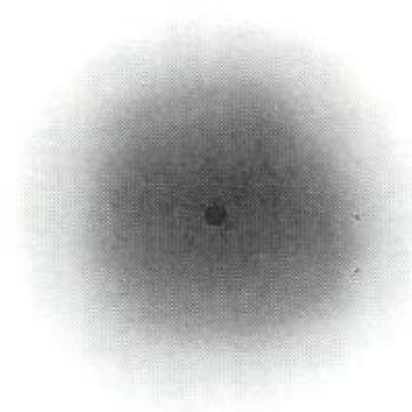


Η περιοχή γύρω από τον πυρήνα χωρισμένη σε φλοιούς (πυκνότητα πιθανότητας για ηλεκτρόνιο σε άτομο Η).

- **Η <u>γραφική παράσταση</u> δείχνει την πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου μέσα σε φλοιούς που απέχουν διάφορες αποστάσεις από τον πυρήνα (ακτινική πιθανότητα).**
- **Η <u>καμπύλη</u> παρουσιάζει ένα μέγιστο, το οποίο σημαίνει ότι η ακτινική πιθανότητα είναι μέγιστη για μια δεδομένη απόσταση από τον πυρήνα (η απόσταση αυτή συμπίπτει με την <u>ακτίνα του Bohr</u>)**

Τρεις τρόποι παρουσίασης του ψ^2 για το απλούστερο τροχιακό 1*s*



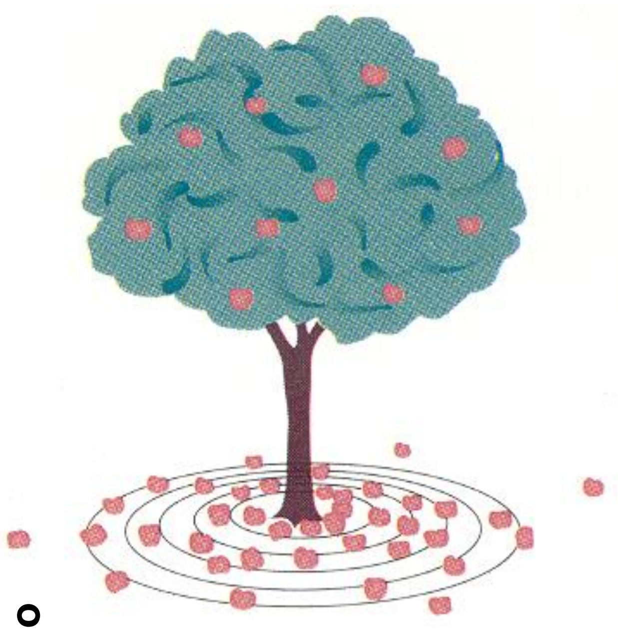


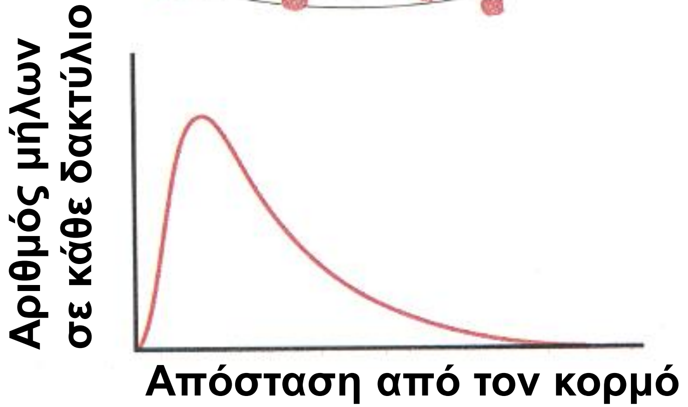
Η ηλεκτρονική πυκνότητα είναι μέγιστη σε σημεία πλησίον του πυρήνα

Το ηλεκτρονικό νέφος είναι πολύ πυκνό κοντά στον πυρήνα και αραιό μακριά από αυτόν.

Στο χώρο που περικλείεται από μια ***οριακή επιφάνεια*** η πιθανότητα εύρεσης του e είναι περίπου 90%. (Για το τροχιακό *1s* η οριακή επιφάνεια είναι σφαιρική)

Η ηλεκτρονική πυκνότητα για το 1s τροχιακό είναι μέγιστη στον πυρήνα.





…. Αυτό σημαίνει ότι πιθανόν το ηλεκτρόνιο βρίσκεται πάνω στον ίδιο τον πυρήνα;

Η πυκνότητα των μήλων είναι μεν μέγιστη στον πρώτο δακτύλιο, όμως το εμβαδόν του δεύτερου δακτυλίου είναι μεγαλύτερο και έτσι αυτός περιέχει συνολικά περισσότερα μήλα.

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

Άσκηση 7.50

(α) Υπολογίστε το μήκος κύματος (σε πικόμετρα) ενός πρωτονίου που κινείται με ταχύτητα 6,21 km s^{-1}

(β) Ποια θα ήταν η περιοχή του φάσματος για ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία αυτού του μήκους κύματος;

Κβαντικοί αριθμοί

<u>**Κβαντικοί αριθμοί (Κ.Α.):**</u> **τέσσερις διαφορετικοί αριθμοί οι οποίοι, σύμφωνα με την Κβαντομηχανική, απαιτούνται για την περιγραφή κάθε e σε ένα άτομο.**

Οι τρεις από αυτούς (οι n, ℓ και m_ℓ) προκύπτουν από τη μαθηματική επίλυση της εξίσωσης του Schrödinger.
(άμεση συνέπεια απαιτήσεων που ικανοποιούν κάθε παραδεκτή λύση της εξίσωσης για Η)

☞ <u>**Πώς χαρακτηρίζονται οι Κ.Α.;**</u>

➊ Κύριος κβαντικός αριθμός (n)

➋ Δευτερεύων (ή αζιμουθιακός) κβαντικός αριθμός (ℓ)

➌ Μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_ℓ)

➍ Κβαντικός αριθμός του spin (m_s)

Ποια είναι η σημασία των Κ.Α.

➊ **Κύριος κβαντικός αριθμός (*n*)**

- Επιτρεπτές τιμές: 1, 2, 3,… – ∞
- Καθορίζει την ενέργεια του e και το μέγεθος του τροχιακού.
- *Φλοιός* ή *στιβάδα*: τροχιακά με τον ίδιο *n*.

➋ **Δευτερεύων (ή αζιμουθιακός) κβαντικός αριθμός (ℓ)**

- Επιτρεπτές τιμές: 0, 1, 2,… – (*n* – 1)
- Καθορίζει το σχήμα του τροχιακού.
- (*Υποφλοιός* ή *υποστιβάδα*): τροχιακά με τον ίδιο ℓ.
- Χαρακτηρισμός υποφλοιών:

τιμή του ℓ :	0, 1, 2, 3, 4, 5, …
χαρακτηρισμός υποφλοιού :	*s*, *p*, *d*, *f*, *g*, *h*, …

➌ **Μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_ℓ)**

- Επιτρεπτές τιμές: από –ℓ έως +ℓ
- Καθορίζει τον προσανατολισμό του τροχιακού στο χώρο.

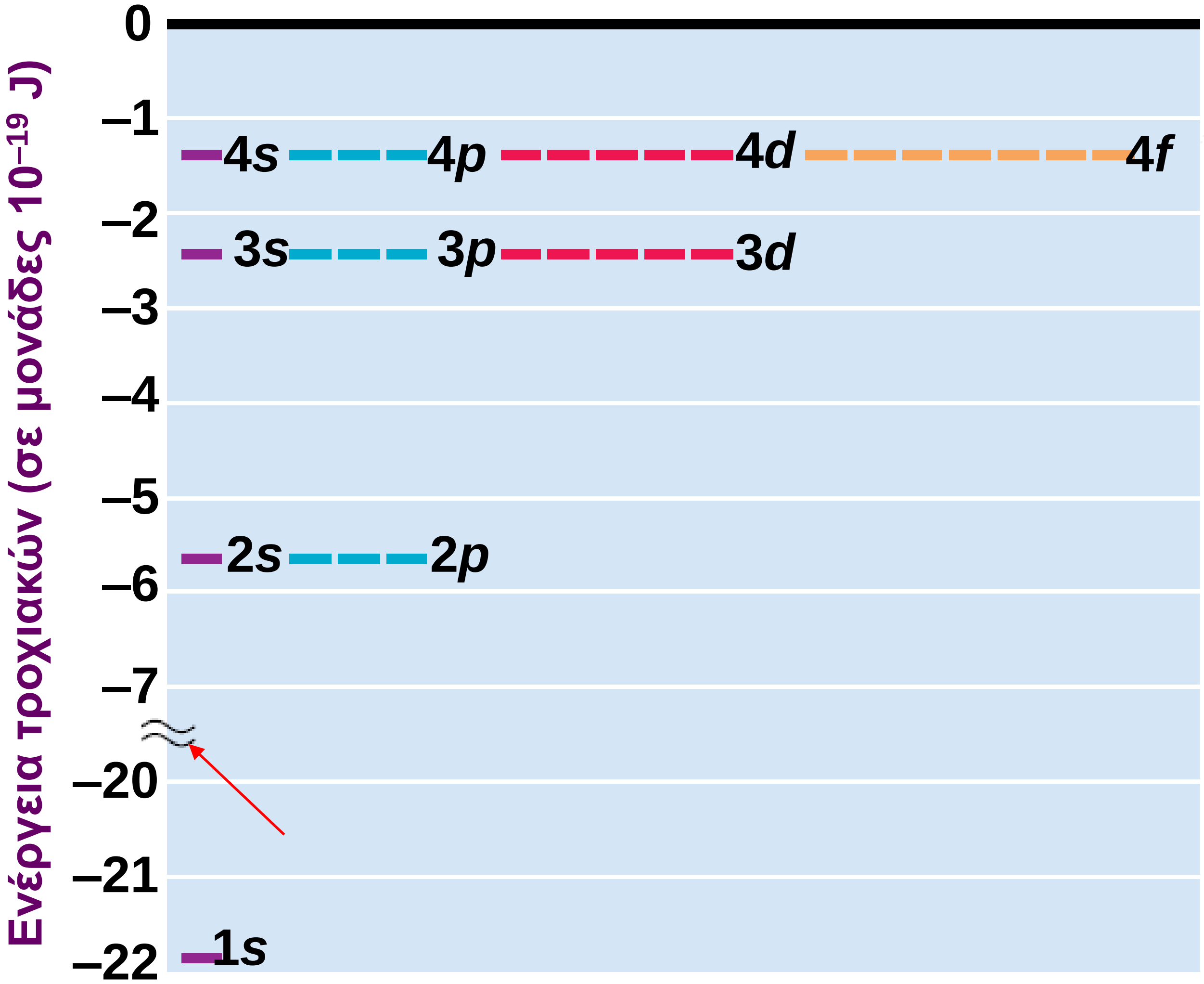
➍ **Κβαντικός αριθμός του spin (m_s)**

- Δίνει τους δύο δυνατούς προσανατολισμούς του άξονα αυτοστροφής (spin) ενός ηλεκτρονίου.
- Επιτρεπτές τιμές: +1/2 και –1/2

Επιτρεπτές τιμές κβαντικών αριθμών και ατομικά τροχιακά

n	*ℓ*	Υποφλοιός	m_ℓ	Αριθμός τροχιακών σε έναν υποφλοιό	Συνολικός αριθμός τροχιακών σε έναν φλοιό
1	0	1*s*	0	1	1
2	0	2*s*	0	1	
2	1	2*p*	-1, 0, +1	3	4
3	0	3*s*	0	1	
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	
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

Ενέργειες τροχιακών για το άτομο του υδρογόνου



Οι μικρές γραμμές για κάθε υποφλοιό παριστάνουν τα διαφορετικά τροχιακά του συγκεκριμένου υποφλοιού. Παρατηρούμε ότι όλα τα τροχιακά με τον ίδιο κύριο κβαντικό αριθμό *n* έχουν την ίδια ενέργεια στο Η (*εκφυλισμένα τροχιακά*).

Το ίδιο ισχύει και για άτομα με περισσότερα ηλεκτρόνια;

Άσκηση 7.115

Ο όρος *εκφυλισμός* σημαίνει τον *αριθμό* των διαφόρων *κβαντικών καταστάσεων* ενός ατόμου ή μορίου που έχουν την *ίδια ενέργεια*. Για παράδειγμα, ο *εκφυλισμός* του επιπέδου $n = 2$ του υδρογονατόμου είναι 4 (μία κβαντική κατάσταση 2*s* και τρεις διαφορετικές καταστάσεις 2*p*).

Ποιος είναι ο *εκφυλισμός* του επιπέδου $n = 5$ στο άτομο του H;

Άσκηση 7.5α

Σχέση μεταξύ των τιμών των κβαντικών αριθμών

Εξακριβώστε ποιες από τις παρακάτω τριάδες κβαντικών αριθμών θα ήταν επιτρεπτές και ποιες όχι για ένα ηλεκτρόνιο ατόμου.

(α) $n = 0$, $\ell = 0$, $m_\ell = 0$ **(β)** $n = 1$, $\ell = 1$, $m_\ell = 0$

(γ) $n = 1$, $\ell = 0$, $m_\ell = 0$ **(δ)** $n = 2$, $\ell = 1$, $m_\ell = -1$

Άσκηση 7.7

Εφαρμογή των κανόνων για τους κβαντικούς αριθμούς

Εξηγήστε γιατί καθεμιά από τις παρακάτω τετράδες κβαντικών αριθμών δεν είναι επιτρεπτή για ένα τροχιακό.

(α) $n = 0, \quad \ell = 1, \quad m_\ell = 0, \quad m_s = +1/2$

(β) $n = 2, \quad \ell = 3, \quad m_\ell = 0, \quad m_s = -1/2$

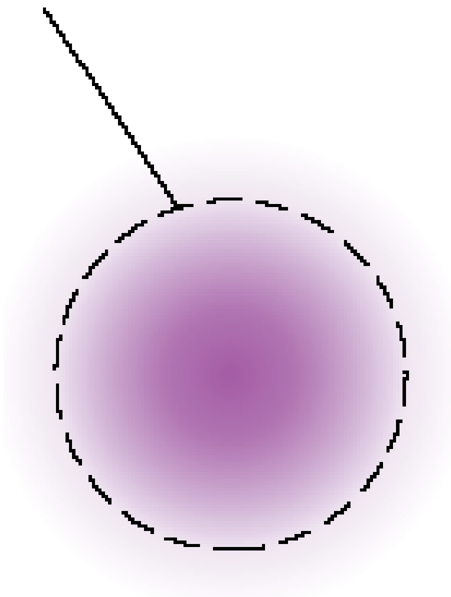
(γ) $n = 3, \quad \ell = 2, \quad m_\ell = +3, \quad m_s = +1/2$

(δ) $n = 3, \quad \ell = 2, \quad m_\ell = +2, \quad m_s = 0$

Τα σχήματα των ατομικών τροχιακών

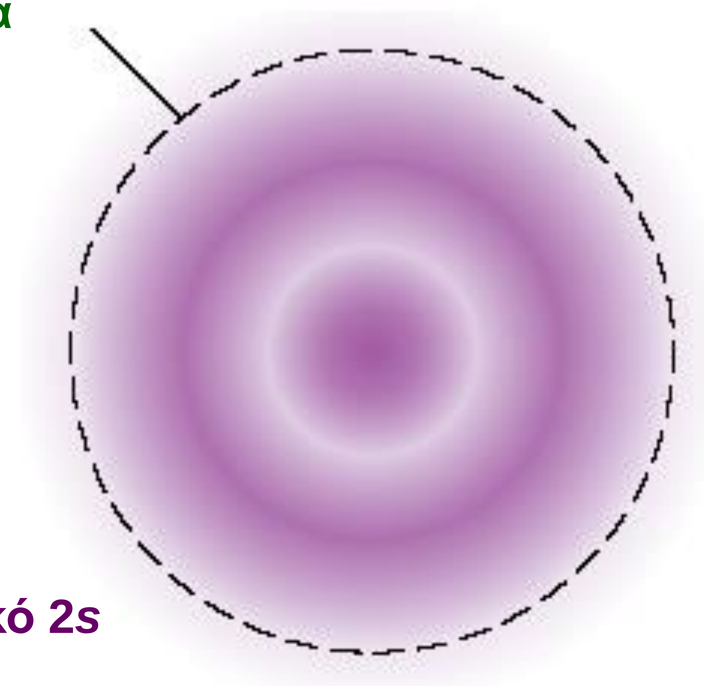
Διατομές της κατανομής ηλεκτρονικής πιθανότητας για *s* τροχιακά

Περίγραμμα 99%



Τροχιακό 1*s*

Περίγραμμα 99%

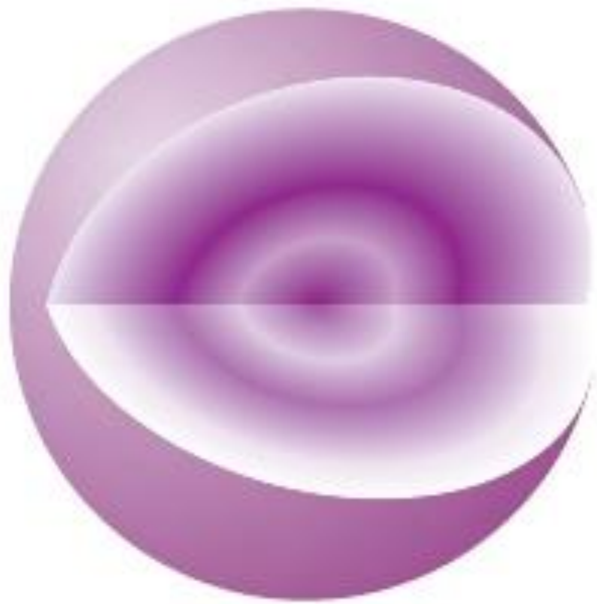


Τροχιακό 2*s*

Σε ένα τροχιακό 1*s* η κατανομή ηλεκτρονικής πιθανότητα είναι μέγιστη κοντά στον πυρήνα. Σε ένα τροχιακό 2*s*, η εν λόγω κατανομή είναι μέγιστη σε έναν σφαιρικό φλοιό γύρω από τον πυρήνα. Επιπλέον, στο 2*s* υπάρχει και περιοχή μηδενικής πιθανότητας (λευκός κύκλος). Παρατηρούμε το σχετικό "μέγεθος" των τροχιακών, το οποίο οριοθετείται από τα περιγράμματα 99%.

Διαγράμματα αποκοπής που δείχνουν το σφαιρικό σχήμα των τροχιακών *s*

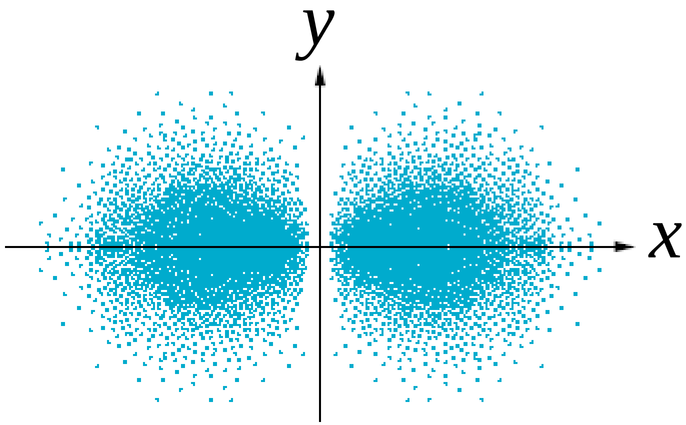
τροχιακό 1*s*



τροχιακό 2*s*

Τόσο από τη μία όσο και από την άλλη σφαίρα, οι οποίες παριστάνουν τα τροχιακά 1*s* και 2*s*, έχει αποκοπεί ένα τμήμα για να αποκαλυφθεί η ηλεκτρονική κατανομή του καθενός τροχιακού στο χώρο.

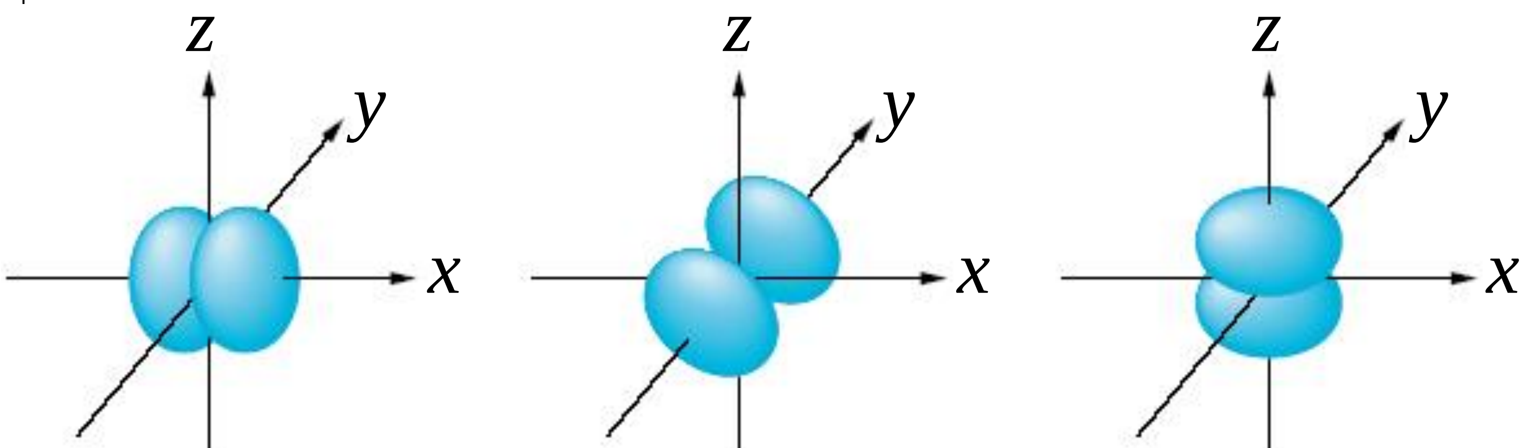
Τα τροχιακά 2p



$2p_x$

(*A*) Ηλεκτρονική κατανομή στο τροχιακό 2p_x

Η κατανομή αυτή αποτελείται από δύο λοβούς προσανατολισμένους κατά μήκος του άξονα *x*.

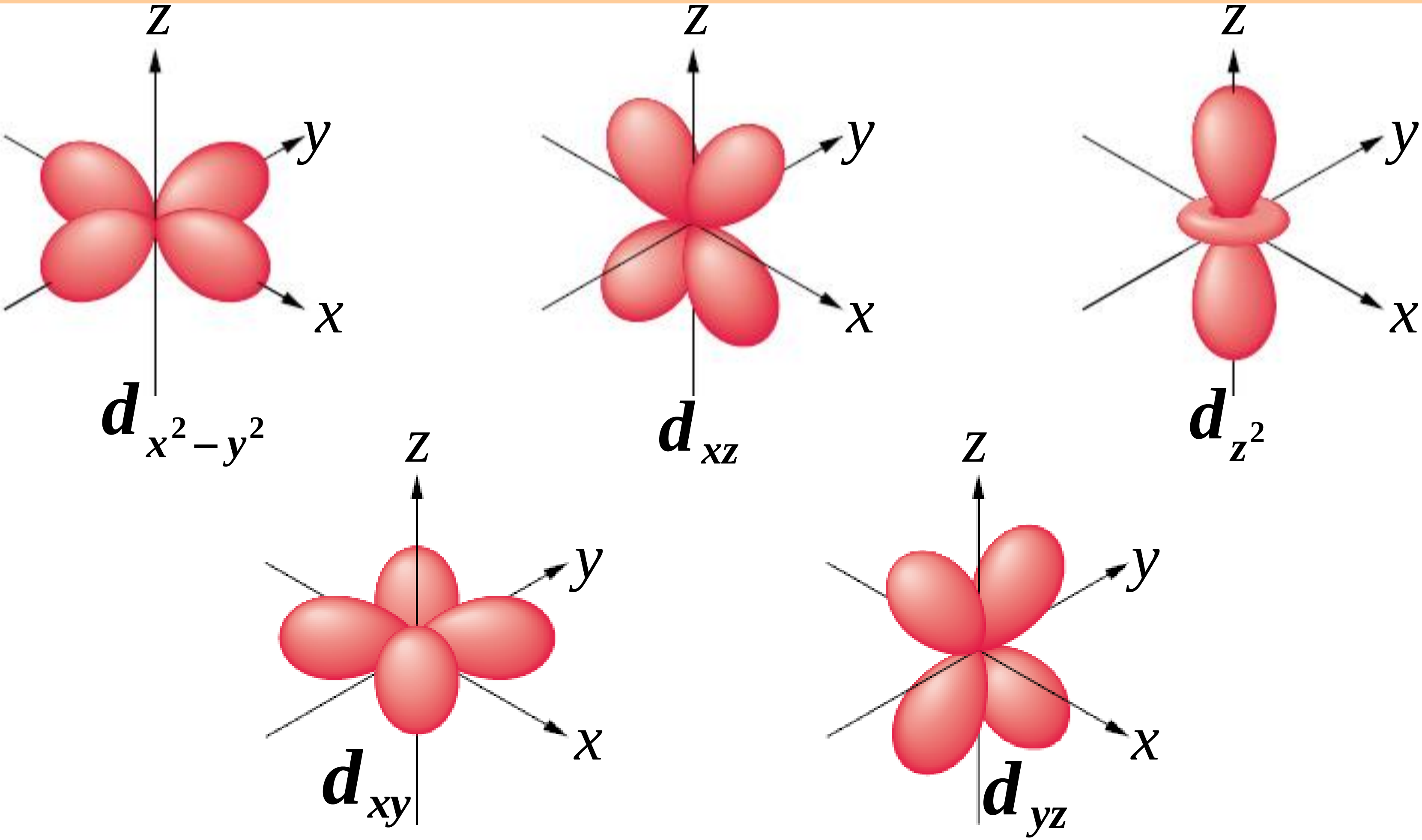


$2p_x$ $2p_y$ $2p_z$

(*B*) Προσανατολισμοί των τριών τροχιακών 2p

Τα σχήματα δίνουν τη γενική εικόνα και τον προσανατολισμό των τροχιακών, όχι όμως τη λεπτομερή ηλεκτρονική κατανομή που δίνει το (*A*).

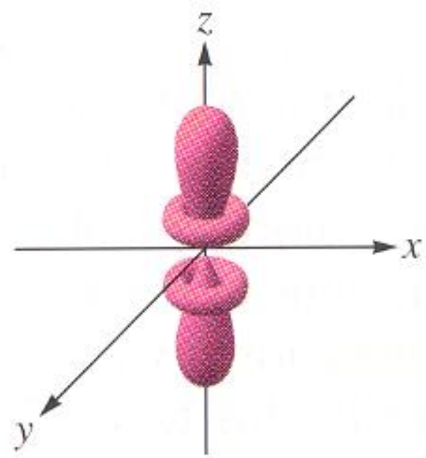
Τα πέντε τροχιακά 3*d*



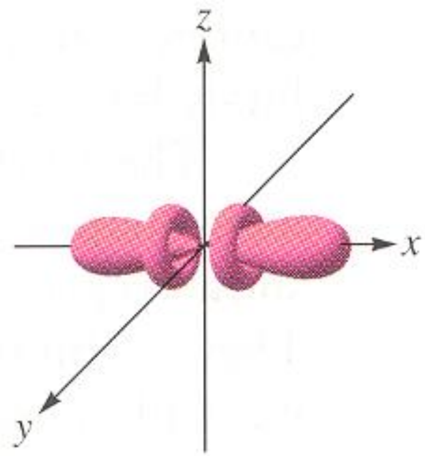
Οι χαρακτηρισμοί *xy*, *xz*, *yz* … των *d* τροχιακών σχετίζονται με τις τιμές του κβαντικού αριθμού m_ℓ . Το τροχιακό d_{z^2} , παρόλο που δείχνει διαφορετικό, είναι ισοδύναμο με τα υπόλοιπα *d* τροχιακά.

Τα τροχιακά 4*d*, 5*d*, … έχουν παρόμοια σχήματα.

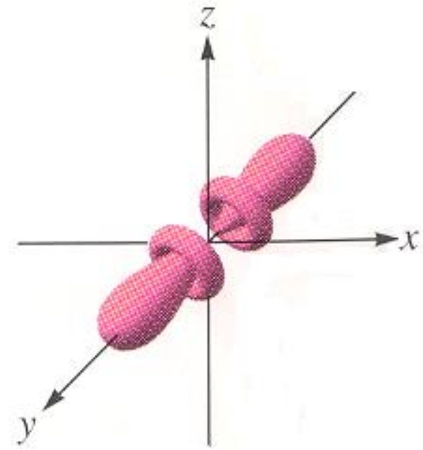
Τα επτά τροχιακά 4*f*



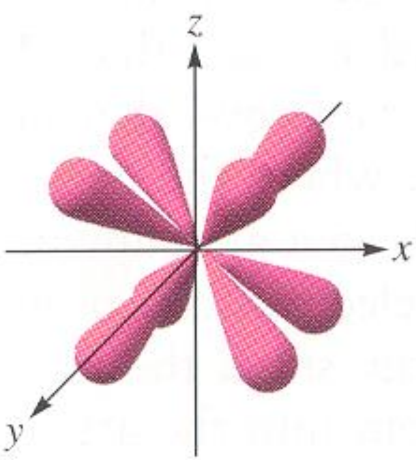
$f_{z^3-\frac{3}{5}zr^2}$



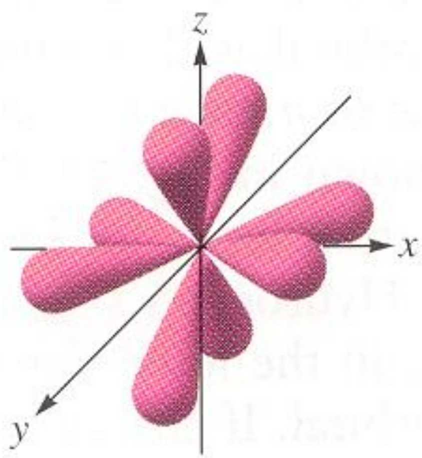
$f_{x^3-\frac{3}{5}xr^2}$



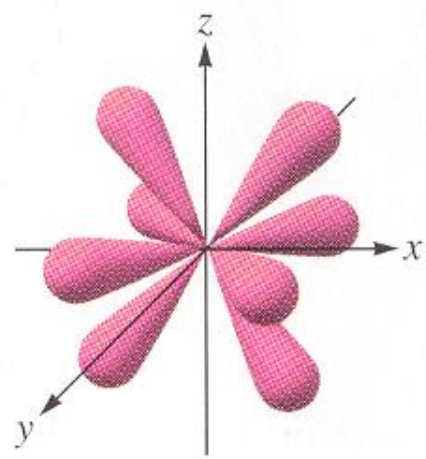
$f_{y^3-\frac{3}{5}yr^2}$



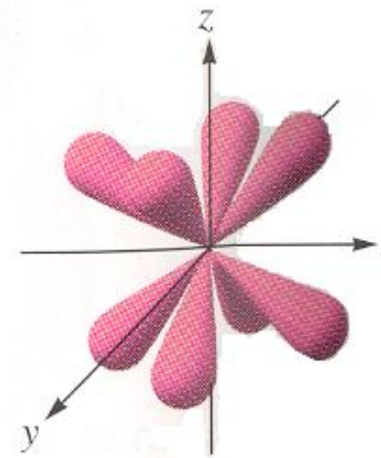
f_{xyz}



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



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



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

Άσκηση 7.5α

Συσχέτιση χαρακτηρισμού τροχιακών με κβαντικούς αριθμούς

(α) Πώς χαρακτηρίζεται το τροχιακό με τους κβαντικούς αριθμούς n = 4, ℓ = 2 και m_ℓ = 0;

(β) Ποιοι είναι οι τρεις κβαντικοί αριθμοί που αντιστοιχούν στο τροχιακό 5*p*;

(γ) Πόσα τροχιακά έχουν τις τιμές n = 5 και ℓ = 2;