Κβαντομηχανική εικόνα του ατομικού μοντέλου

1. Ερώτηση: Τι είναι η κβαντομηχανική;

Η *κβαντομηχανική*, είναι η σύγχρονη αντίληψη μιας νέας μηχανικής που μπορεί να εφαρμοστεί **στο μικρόκοσμο του ατόμου**. Σήμερα το ατομικό μοντέλο βασίζεται στην κβαντομηχανική αυτή θεωρία, βασικές αρχές της οποίας είναι οι:

1. Η ***κυματική θεωρία της ύλης του De Broglie.***

2. *Η αρχή της αβεβαιότητας (απροσδιοριστίας) του Heisenberg*.

3. Η κυματική εξίσωση του Schrödinger.

2. Ερώτηση: Ποια είναι κυματική θεωρία της ύλης του De Broglie;

Διατύπωση:

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

Επισημάνσεις:

1. **Για να εκδηλωθεί ο κυματικός χαρακτήρας ενός σωματιδίου** θα **πρέπει** αυτό να έχει **μικρή μάζα** και **μεγάλη ταχύτητα**.

Παραδείγματα:

- Η μπάλα του τένις, κινούμενη με ταχύτητα 65 $km \cdot h^{-1}$ αντιστοιχεί σε υλικό μήκους κύματος $\lambda < 10^{-33}$ m, το οποίο υπολείπεται κατά πολύ ακόμη και της διαμέτρου των ατομικών πυρήνων (($\lambda \approx 10^{-10}$ m).
- Αντίθετα, η πολύ μικρή μάζα και η σχετικά μεγάλη ταχύτητα των ηλεκτρονίων μας επιτρέπουν να ανιχνεύσουμε την κυματική φύση της κίνησης τους.

2. Η φύση του φωτός και του ηλεκτρονίου **είναι μία**, δηλαδή, δεν αλλάζει συνεχώς, απλώς: **άλλοτε εκδηλώνεται ο σωματιδιακός και άλλοτε ο κυματικός χαρακτήρας του, ανάλογα με τις πειραματικές συνθήκες που εφαρμόζουμε**.

Παράδειγμα: η σωματιδιακή φύση των ηλεκτρονίων εκδηλώνεται με την περίθλαση των ηλεκτρονίων σε κρυσταλλικό πλέγμα, η οποία βρίσκει εφαρμογή στη λειτουργία των **ηλεκτρονικών μικροσκοπίων.**

3. Ερώτηση: Τι γνωρίζετε για την αρχή της αβεβαιότητας (απροσδιοριστίας) του Heisenberg (1927);

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

Παρατηρήσεις!!

1. Η ερμηνεία αυτής της αρχής είναι πως **όσο μεγαλύτερη είναι η ακρίβεια για τον προσδιορισμό της θέσης του σωματιδίου (π.χ. ηλεκτρονίου), τόσο μεγαλύτερο είναι το σφάλμα,** δηλαδή, τόσο μεγαλύτερη αβεβαιότητα υπάρχει κατά τον προσδιορισμό της ορμής του, και αντιστρόφως.

2. Στην περίπτωση μεγάλων σωμάτων, π.χ. κινούμενη μπάλα ποδοσφαίρου, τα σφάλματα **αυτά είναι αμελητέα**. Έτσι, μπορεί να προσδιοριστεί με ακρίβεια ταυτόχρονα η θέση και η ταχύτητα της μπάλας, οποιαδήποτε χρονική στιγμή.

Στην περίπτωση, όμως, υποατομικών σωματιδίων π.χ. ηλεκτρονίων τα σφάλματα αυτά δεν μπορούν να θεωρηθούν αμελητέα και κατά συνέπεια υπάρχει πάντοτε κάποια αβεβαιότητα, είτε ως προς τη θέση, είτε ως προς την ορμή τους.

3. Η αποδοχή της αρχής της αβεβαιότητας οδηγεί αυτομάτως στην κατάρριψη όλων των πλανητικών προτύπων, συμπεριλαμβανομένου και του ατομικού πρότυπου Bohr. Η παραδοχή της κίνησης του ηλεκτρονίου σε καθορισμένη κυκλική τροχιά προϋποθέτει, με βάση τους νόμους της κυκλικής κίνησης, επακριβή γνώση της θέσης και της ταχύτητας.

4. Ερώτηση: Τι είναι η κυματική εξίσωση του Schrödinger;

Ο Schrödinger έδωσε την περίφημη ***κυματική εξίσωση,*** η οποία μαθηματικά **συσχετίζει τη σωματιδιακή και κυματική συμπεριφορά του ηλεκτρονίου και περιγράφει με επιτυχία την κίνηση των μικρών σωματιδίων.**

5. Ερώτηση: Τι γνωρίζετε για τα ατομικά τροχιακά;

- Η επίλυση της εξίσωσης Schrödinger οδηγεί στις ***κυματοσυναρτήσεις ψ,*** οι οποίες **περιγράφουν την κατάσταση του ηλεκτρονίου με ορισμένη ενέργεια (E_n)** και ονομάζονται ***ατομικά τροχιακά.***
- Αποτελούν **συναρτήσεις θέσης του** ηλεκτρονίου στο άτομο π.χ. είναι της μορφής $\psi(x, y, z)$, όπου x, y, z είναι οι συντεταγμένες που καθορίζουν τη θέση του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα.
- Η ονομασία «ατομικό τροχιακό» δόθηκε για να τιμηθεί η προσφορά του Bohr.

6. Ερώτηση: Ποια ποσότητα του ατομικού προτύπου του Bohr υπολογίζεται με την εξίσωση Schrödinger;

Με βάση την εξίσωση Schrödinger **υπολογίζεται η ενέργεια, E_n,** του ηλεκτρονίου, η οποία **βρίσκεται σε πλήρη ταύτιση με αυτή που προσδιόρισε ο Bohr** (κβάντωση ενέργειας) και είχε εισαχθεί αυθαίρετα.

7. Ερώτηση Ποια είναι η φυσική σημασία της κυματοσυνάρτησης ψ;

Το ψ αυτό καθεαυτό δεν έχει φυσική σημασία, αλλά αποτελεί μια ένδειξη της παρουσίας, ή μη, του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα (ψ =0 υποδηλώνει την απουσία και $\psi \neq 0$ την παρουσία του ηλεκτρονίου).

8. Ερώτηση: Τι εκφράζει το τετράγωνο ψ^2 της κυματοσυνάρτησης ψ;

Το **ψ^2 έχει σημαντική φυσική σημασία:**

Το ψ^2 εκφράζει την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε ένα ορισμένο σημείο του χώρου γύρω από τον πυρήνα.

Για παράδειγμα:

Στη θέση Α: ψ = 0,1 ή ψ^2 = 0,01

Στη θέση Β: ψ = -0,3 ή ψ^2 = 0,09

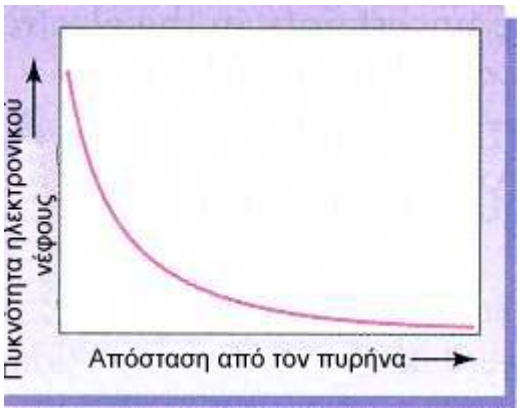
Δηλαδή, η πιθανότητα να βρίσκεται το ηλεκτρόνιο στη θέση Β είναι εννιά φορές μεγαλύτερη από όσο στη θέση Α.

- **Ισοδύναμα** μπορούμε να ορίσουμε για το ψ^2:

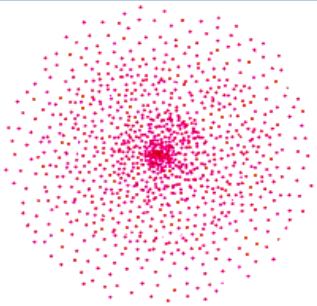
Το ψ^2 (ή ακριβέστερα το $-e\psi^2$, όπου –e το φορτίο του ηλεκτρονίου) εκφράζει την κατανομή ή την πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους στο χώρο γύρω από τον πυρήνα.

9. Ερώτηση: Να σχεδιάσετε με όλους τους δυνατούς τρόπους τη γραφική παράσταση της πυκνότητας του ηλεκτρονιακού νέφους σε συνάρτηση με την απόσταση από τον πυρήνα στη θεμελιώδη κατάσταση σε τρεις διαστάσεις.

1ος τρόπος:

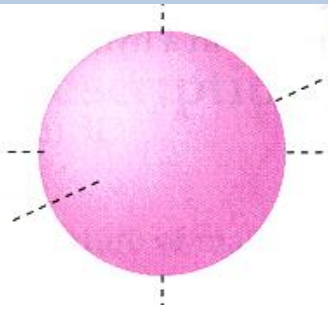


2ος τρόπος: με «στιγμές»



3ος τρόπος: με πυκνότητα χρώματος

4ος τρόπος: με «οριακές» καμπύλες



Οι οριακές καμπύλες περιλαμβάνουν το 90%-99% της μέγιστης πυκνότητας του ηλεκτρονικού νέφους.

10. Ερώτηση: Είναι σωστή η έκφραση πως οι παραπάνω γραφικές παραστάσεις συμβολίζουν τα ατομικά τροχιακά;

Απάντηση: **Όχι.**

- Οι παραπάνω γραφικές παραστάσεις απεικονίζουν την πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους (ψ^2) και όχι το τροχιακό (ψ), όπως πολλές φορές αναφέρεται (χάριν απλούστευσης).
- **Τα ατομικά τροχιακά προκύπτουν από την επίλυση των εξισώσεων** Schrödinger και είναι οι **κυματοσυναρτήσεις ψ.**
- Οι **οριακές καμπύλες** περιλαμβάνουν το **90%-99%** της μέγιστης πυκνότητας του ηλεκτρονικού νέφους.

11. Ερώτηση: Η εξίσωση Schrödinger ισχύει για τα ηλεκτρόνια όλων των ατόμων;

Απάντηση: **Όχι.**

- Η εξίσωση Schrödinger ισχύει για τη συμπεριφορά του ηλεκτρόνιου **του ατόμου του υδρογόνου.**
- **Μπορεί** βέβαια με **κατάλληλες προσεγγίσεις να εφαρμοστεί και σε πολυηλεκτρονικά άτομα,** παρόλο που η επίλυση της εξίσωσης και ο προσδιορισμός των κυματοσυναρτήσεων, ψ, για τα ηλεκτρόνια σ' αυτές τις περιπτώσεις είναι ένα πολύπλοκο μαθηματικό πρόβλημα. Ωστόσο, τα συμπεράσματα που προκύπτουν από το υδρογόνο, μπορούν να αποτελέσουν τη βάση για να μελετήσουμε την ηλεκτρονιακή δομή βαρύτερων ατόμων.

12. Ερώτηση: Ποια έννοια του προτύπου του Bohr καταρρίπτεται με την εξίσωση Schrödinger;

Η εξίσωση προσδιορίζει **την πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου σε ορισμένο χώρο,** πράγμα που βρίσκεται σε πλήρη αντίθεση με τις αντιλήψεις του Bohr για τις **καθορισμένες τροχιές.**

- Στην κβαντομηχανική δε μιλάμε για τη θέση ενός ηλεκτρονίου, αλλά για την πιθανότητα να βρίσκεται σε μια ορισμένη θέση ένα ηλεκτρόνιο.

Κβαντικοί αριθμοί

13. Ερώτηση: Ποιοι είναι οι κβαντικοί αριθμοί;

Στην κβαντομηχανική εισάγονται **τρεις κβαντικοί αριθμοί για τον καθορισμό της κατανομής των ηλεκτρονιακού νέφους (ατομικού τροχιακού)** και **ένας τέταρτος κβαντικός αριθμός**, **ο οποίος όμως δε συμμετέχει στη διαμόρφωση της τιμής της ενέργειας του ηλεκτρονίου** και κατά συνέπεια στο καθορισμό του ατομικού τροχιακού. Οι κβαντικοί αυτοί αριθμοί είναι οι:

1. Ο κύριος κβαντικός αριθμός (*n*),

2. Ο δευτερεύων κβαντικός αριθμός ή αζιμουθιακός (*l*)

3. Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l).

4. ο κβαντικός αριθμός του spin (m_s)

14. Ερώτηση Ποια είναι τα γενικά χαρακτηριστικά των κβαντικών αριθμών;

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

2. Οι κβαντικοί αυτοί αριθμοί μπορούν άνετα να εφαρμοστούν και σε άλλα άτομα εκτός του υδρογόνου και των υδρογονοειδών (π.χ. He^+, Li^{2+}).

3. Μόνο οι τρεις πρώτοι κβαντικοί αριθμοί προκύπτουν από την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου, ενώ ο τέταρτος απλώς καθορίζει τον τρόπο της ιδιοπεριστροφής του ηλεκτρονίου.

15. Ερώτηση: Τι είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός n;

Με βάση την κβαντομηχανική **ο κύριος κβαντικός αριθμός** (***n***):

1. Είναι φυσικός αριθμός και παίρνει τιμές 1, 2, 3 …

2. Καθορίζει το μέγεθος του ηλεκτρονιακού νέφους (ή τροχιακού). Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή του *n* τόσο πιο απομακρυσμένο από τον πυρήνα είναι, κατά μέσο όρο, το ηλεκτρονιακό νέφος.

3. Καθορίζει **την ενέργεια του ηλεκτρονίου. Όσο μεγαλύτερο είναι το n τόσο μεγαλύτερη ενέργεια έχει η στιβάδα.**

4. Είναι **ενδεικτικός της έλξης πυρήνα - ηλεκτρονίου. Όσο μεγαλύτερο είναι το n , τόσο μικρότερη είναι η έλξη πυρήνα - ηλεκτρονίου.**

5. Καθορίζει τη **στιβάδα ή φλοιό** στον οποίο ανήκει ατομικό τροχιακό. Έτσι **στιβάδα ή φλοιός είναι το σύνολο των τροχιακών με τον ίδιο κύριο κβαντικό αριθμό, n**.

Ο συμβολισμός των στιβάδων ή φλοιών γίνεται με γράμματα, όπως φαίνεται στον παρακάτω πίνακα:

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

16. Ερώτηση: Τι είναι ο δευτερεύων κβαντικός αριθμός ή αζιμουθιακός (l);

1 Οι τιμές του **καθορίζονται από την τιμή που έχει ο n, δηλαδή, *l* = 0,1,2,…(n-1).** Συνολικά υπάρχουν **n τιμές l**, για κάθε διαφορετικό n (π.χ. για $n=2$ υπάρχουν 2 τιμές l: $l=0$ και $l=1$

2. Καθορίζει το **σχήμα** του ηλεκτρονικού νέφους (τροχιακού).

3. Είναι **ενδεικτικός της άπωσης ηλεκτρονίου – ηλεκτρονίου** στο άτομο.

4. Το σύνολο των ατομικών τροχιακών που έχουν το **ίδιο (n, *l*)** αποτελούν **υποστιβάδα ή υποφλοιό.**

Παρατηρήσεις!!

Οι υποστιβάδες ή υποφλοιοί συμβολίζονται με γράμματα. Με τον ίδιο τρόπο συμβολίζονται και τα αντίστοιχα ατομικά τροχιακά[1], όπως φαίνεται στο παρακάτω πίνακα:

αζιμουθιακός καβαντικός αριθμός, *l*	**0**	**1**	**2**	**3**	**4**	**….**
υποστιβάδα	***s***	***p***	***d***	***f***	***g***	
ατομικό τροχιακό	***s***	***p***	***d***	***f***	***g***	**….**

5. Οι συμβολισμοί των τροχιακών προκύπτουν από τα αρχικά των λέξεων που χαρακτηρίζουν τις φασματικές γραμμές

s: sharp (οξύς), **p:** principal(κύριος), **d:** diffuse (διάχυτος), **f:** fundamental (θεμελιώδης).

17. Ερώτηση Ποια ειδική συνθήκη για τον κβαντικό αριθμό l ισχύει για το άτομο του υδρογόνου και τα υδρογονοειδή;

Στα **πολυηλεκτρονικά** άτομα **το l καθορίζει** την **ενέργεια της υποστιβάδας** και μάλιστα όσο πιο μεγάλη είναι οι τιμή του τόσο μεγαλύτερη είναι η ενέργεια των ατομικών τροχιακών της υποστιβάδας αυτής.

Στο άτομο του υδρογόνου και στα υδρογονοειδή άτομα, υπάρχει **μόνο ένα ηλεκτρόνιο**, με συνέπεια **ο κβαντικός αριθμός l να μην διαφοροποιεί την ενέργεια των ατομικών τροχιακών της ίδιας υποστιβάδας**. Γι αυτό όλες οι

[1] Αν και αυτό αναφέρεται στο βιβλίο, στην πράξη ισχύει μόνο για τα s ατομικά τροχιακά. Τα υπόλοιπα συνοδεύονται από δείκτες (π.χ p_x, p_y, p_z) που τα ξεχωρίζουν μεταξύ τους και φυσικά από τα σύμβολα των αντίστοιχων υποστιβάδων

υποστιβάδες της ίδιας στιβάδας **στο άτομο του υδρογόνου έχουν ίσες ενέργειες**[2], **κάτι που δεν ισχύει στα πολυηλεκτρονικά άτομα.**

Παράδειγμα:

Στο άτομο του υδρογόνου στη θεμελιώδη του κατάσταση, τα ατομικά τροχιακά της υποστιβάδας (2,1) έχουν ίση ενέργεια με αυτά της υποστιβάδας (2,0), ενώ **σε οποιοδήποτε πολυλεκτρονικό άτομο** στη θεμελιώδη του κατάσταση, τα ατομικά τροχιακά της υποστιβάδας (2,1) έχουν μεγαλύτερη ενέργεια από αυτά της υποστιβάδας (2,0).

18. Ερώτηση: Τι είναι ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός(ml);

1. Οι τιμές του καθορίζονται από την τιμή του l και συγκεκριμένα παίρνει τις τιμές: $0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$

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

3. Σε κάθε υποστιβάδα με τιμή δευτερεύοντος κβαντικού αριθμού *αντιστοιχούν* **(2*l*+ 1)** τροχιακά.

Για παράδειγμα: στην $l = 0$ (υποστιβάδα s), έχουμε $(2 \cdot 0 + 1) = 1$ **τροχιακό (το *s*).** Στην $l = 1$ (υποστιβάδα p), έχουμε $(2 \cdot 1 + 1) = 3$ τροχιακά (Τρία *p- τροχιακά).*

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

5. Το κάθε ατομικό τροχιακό καθορίζεται από μία τριάδα κβαντικών αριθμών, (n, l, m_l).

6. Για το τροχιακό *p* χρησιμοποιούνται τα παρακάτω σύμβολα:

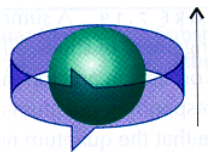
μαγνητικός κβαντικός αριθμός , m_l	-1	0	+1
ατομικό τροχιακό	p_y	p_z	p_x

7. Το όνομα «μαγνητικός» προέρχεται από το γεγονός ότι το ηλεκτρόνιο, ως κινούμενο φορτίο που είναι, δημιουργεί μαγνητικό πεδίο καθορισμένης φοράς.

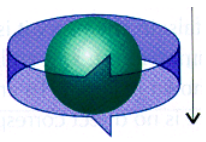
19. Ερώτηση: Τι είναι ο κβαντικός αριθμός του spin (m_s);

1. Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός του spin καθορίζει την ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου (spin).

2. Ο κβαντικός αριθμός του spin (m_s) παίρνει μόνο τις τιμές $+\frac{1}{2}$ **ή** $-\frac{1}{2}$, είναι δηλαδή ανεξάρτητος από τις τιμές των άλλων κβαντικών αριθμών.



m_s=+1/2



m_s = -1/2

[2] εκφυλισμός υποστιβάδων.

► Για τιμή m_s = **+1/2, λέμε ότι έχουμε παράλληλο spin ή spin προς τα πάνω (↑).** Αυτή προκύπτει για την περιστροφή του ηλεκτρονίου που είναι **αντίθετη από την περιστροφή των δεικτών του ρολογιού.**

► **Για τιμή m_s = -1/2, λέμε ότι έχουμε αντιπαράλληλο spin ή spin προς τα κάτω (↓).** Αυτή προκύπτει για την περιστροφή του ηλεκτρονίου που είναι **σύμφωνη με την περιστροφή των δεικτών του ρολογιού.**

3. Σε κάθε τροχιακό δε μπορούμε να έχουμε περισσότερα από δύο ηλεκτρόνια[3]. Μάλιστα το ένα περιστρέφεται γύρω από τον άξονά του αντίθετα από το άλλο, δηλαδή έχουν αντίθετη ιδιοπεριστροφή (spin).

4. Ο κβαντικός αριθμός του spin **δεν συμμετέχει στη διαμόρφωση της τιμής της ενέργειας του ηλεκτρονίου, ούτε στον καθορισμό του τροχιακού.**

5. Στο **κάθε ηλεκτρόνιο** ενός ατόμου αντιστοιχεί **μία τετράδα κβαντικών αριθμών (n, l ,m_l, m_s).**

20. Ερώτηση: Αναφέρετε με ποια στοιχεία της δομής του ατόμου συνδέεται καθένας από τους 4 κβαντικούς αριθμούς.

Οι τέσσερις κβαντικοί αριθμοί περιγράφουν πλήρως την κατάσταση του ηλεκτρονίου στο άτομο. Οι παρακάτω συνδυασμοί προσδιορίζουν, αντίστοιχα:

- Ο **n** τη **στιβάδα (φλοιό)**
- Ο **(n, l)** την **υποστιβάδα (υποφλοιό)** που βρίσκεται στη στιβάδα n
- Ο **(n, l ,m_l)** το **ατομικό τροχιακό** που βρίσκεται στην υποστιβάδα **(n, l)**.
- Ο **(n, l ,m_l, m_s)** το **ηλεκτρόνιο** που βρίσκεται στο ατομικό τροχιακό (n, l ,m_l).
-

21. Ερώτηση Γράψτε πόσες στιβάδες, υποστιβάδες, ατομικά τροχιακά, ηλεκτρόνια υπάρχουν σε κάθε στιβάδα, υποστιβάδα, ατομικό τροχιακό.

Η απάντηση προκύπτει από τα δεδομένα του πίνακα:

	Στη στιβάδα n	Στην υποστιβάδα (n.l)	Στο ατομικό τροχιακό (n.l, m_l)
Αριθμός στιβάδων	1		
Αριθμός υποστιβάδων	n	1	
Αριθμός ατομικών τροχιακών	n^2	2l+1	1
Αριθμός ηλεκτρονίων	$2n^2$	2(2l+1)	0 ή 1 ή 2

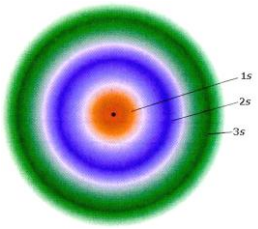
Τα κενά του πίνακα εξαιρέθηκαν από την απάντηση για να γίνει σαφές ότι το ατομικό τροχιακό περιέχεται στην υποστιβάδα και στη στιβάδα και ότι η υποστιβάδα περιέχεται στη στιβάδα.

[3] Θα το δικαιολογήσουμε στο επόμενο μάθημα με την απαγορευτική αρχή του Pauli.

22. Ερώτηση: Πως απεικονίζονται τα ατομικά τροχιακά;

Η απεικόνιση των ατομικών τροχιακών ή ακριβέστερα της πυκνότητας του ηλεκτρονιακού νέφους μπορεί να γίνει με πολλούς τρόπους.

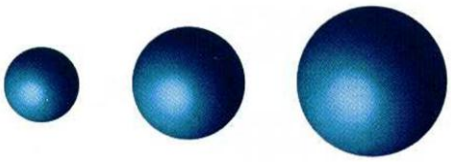
Η παράσταση των τροχιακών (συναρτήσεων ψ^2) **με οριακές καμπύλες είναι από τις πιο συνηθισμένες. Το περίγραμμα της καμπύλης περικλείει το 90-99% της πυκνότητας του ηλεκτρονιακού νέφους.**



Απεικόνιση *s* τροχιακών (συναρτήσεων ψ_s^2) με οριακές καμπύλες και σχετικά μεγέθη των 1s, 2s 3s τροχιακών.

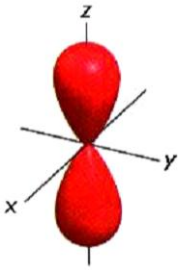
23. Ερώτηση: Πως απεικονίζονται τα s-τροχιακά;

Τα *s* τροχιακά (l = 0 και m_l=0) έχουν σφαιρική συμμετρία, που σημαίνει ότι η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε μια ορισμένη απόσταση από τον πυρήνα είναι ανεξάρτητη από την κατεύθυνση. **Συμβολίζονται** με **σφαίρες**, **το μέγεθος των οποίων εξαρτάται από τον κύριο κβαντικό αριθμό**. **Όσο μεγαλύτερος είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός *n*, στον οποίο ανήκει το τροχιακό *s*, τόσο μεγαλύτερη είναι και η ακτίνα της σφαίρας.**



1s **2s** **3s**

24. Ερώτηση: Πως απεικονίζονται τα p-τροχιακά;

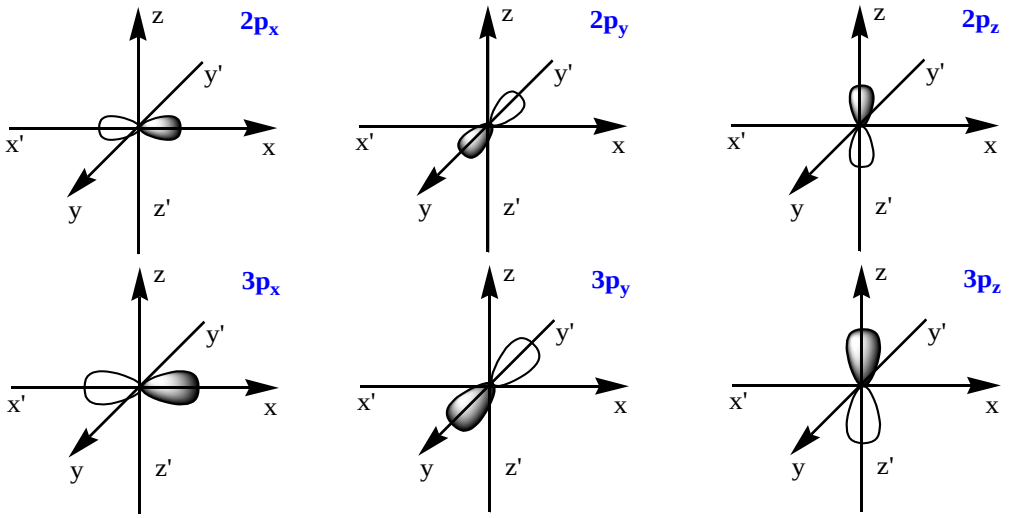


1. Τα *p* τροχιακά έχουν το σχήμα διπλού λοβού. Το σχήμα του λοβού είναι το σχήμα που προκύπτει αν ένα σφαιρικό μπαλόνι «τραβηχτεί» από κάποιο σημείο του, π.χ. από εκεί που είναι δεμένο.

2. Το ηλεκτρόνιο στο *p* τροχιακό, αντίθετα από ότι συμβαίνει στο *s*, **έχει ελάχιστη πιθανότητα να βρεθεί κοντά στον πυρήνα.**

3. Όπως γνωρίζουμε, **σε κάθε τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού με *n* ≥ 2, αντιστοιχούν τρία *p* τροχιακά, που έχουν ίδιο μέγεθος και σχήμα αλλά διαφορετικό προσανατολισμό.** Το καθένα απ' αυτά τα τροχιακά, p_x, p_y και p_z, προσανατολίζεται στον αντίστοιχο άξονα, x, y και z, όπως φαίνεται στο σχήμα:

4. Το μέγεθος του *p* τροχιακού καθορίζεται από την τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού. Δηλαδή, όσο μεγαλύτερος είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός *n* στον οποίο ανήκει το τροχιακό *p*, τόσο μεγαλύτερο είναι το μέγεθος του τροχιακού



25. Ερώτηση: Πως απεικονίζονται τα d και f -τροχιακά;

1. Τα d τροχιακά (l = 2) είναι πέντε (m_l: -2, -2, 0, +1, +2) με σχετικά πολύπλοκη απεικόνιση, που ξεφεύγει από τα όρια διδασκαλίας του παρόντος βιβλίου.
2. Το ίδιο ισχύει και για τα f τροχιακά (l = 3) που είναι συνολικά 7 (m_l: -3, -2, -2, 0, +1, +2, +3

ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

Α. Πρέπει να γνωρίζουμε πολύ καλά τη θεωρία του μαθήματος.

Β. Λυμένα Παραδείγματα

1. Δίνεται ένα ηλεκτρόνιο που καταλαμβάνει την υποστιβάδα 4p. Να προσδιορίσετε:
   - i. Τη δυάδα των κβαντικών που περιγράφει την υποστιβάδα.
   - ii. Όλες τις πιθανές τριάδες των κβαντικών που περιγράφουν το ατομικό τροχιακό. Πόσα τροχιακά έχει η συγκεκριμένη υποστιβάδα;
   - iii. Όλες τις πιθανές τετράδες των κβαντικών που περιγράφουν το ηλεκτρόνιο.
   - iv. Ποιος είναι ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων που χωρά η υποστιβάδα;

Απάντηση:

- i. (4,1)
- ii. το m_l = 0, -1, +1. Άρα οι ζητούμενες πιθανές τριάδες είναι: (4,1,-1), (4,1,0), (4,1,+1). Ο αριθμός των ατομικών τροχιακών ταυτίζεται με τον αριθμό των πιθανών τριάδων, δηλαδή είναι 3.
- iii. το m_s = - ½ , + ½ . Άρα οι ζητούμενες πιθανές τετράδες είναι οι: (4,1,-1, - ½), (4,1,-1, + ½), (4,1,0, - ½), (4,1,0, + ½), (4,1, +1, - ½), (4,1,+1, +½).
- iv. Ο αριθμός των ηλεκτρονίων ταυτίζεται με τον αριθμό των πιθανών τετράδων, δηλαδή είναι 6.

2. Να γράψετε όλες τις διαφορετικές τετράδες των κβαντικών αριθμών που περιγράφουν καθένα από τα ηλεκτρόνια της στιβάδας L.

Απάντηση:

Η στιβάδα L αντιστοιχεί στον κύριο κβαντικό αριθμό **n=2.**

Προσδιορίζουμε τους υπόλοιπους κβαντικούς αριθμούς:

▶ ***l*=0,1.** Το ζεύγος (2,0) αντιστοιχεί στην υποστιβάδα 2s. το ζεύγος (2,1) αντιστοιχεί στην υποστιβάδα 2p.

▶ **Για l=0, το m_l παίρνει τη μοναδική τιμή m_l=0.** Η τριάδα (2,0,0) αντιστοιχεί στο ατομικό τροχιακό 2s.

▶ **Για l=1, το m_l παίρνει τις τιμές m_l=0, - 1, + 1.**

Η τριάδα (2,1,0) αντιστοιχεί στο ατομικό τροχιακό $2p_z$.

Η τριάδα (2,1,-1) αντιστοιχεί στο ατομικό τροχιακό $2p_y$.

Η τριάδα (2,1,+1) αντιστοιχεί στο ατομικό τροχιακό $2p_x$.

Το m_s = - ½, + ½ . Άρα οι ζητούμενες τετράδες είναι οι:

(2,0,0, - ½), (2,0,0, + ½),
(2,1,0, - ½), (2,1,0, + ½), (2,1,-1, - ½), (2,1,-1, + ½), (2,1,+1, - ½), (2,1,+1, + ½)

3. Ποιες από τις παρακάτω τετράδες κβαντικών αριθμών είναι λανθασμένες;

Α. $(3,0,1,+\frac{1}{2})$ Β. $(2,2,1,-\frac{1}{2})$, Γ $(4,3,3,+\frac{1}{2})$, Δ. (5,2,1,0)

Απάντηση:

Α → Λ. αφού $l=0 \Rightarrow m_l=0$, Β→ Λ. αφού $n=2 \Rightarrow l=0,1$ Γ→Σ. Δ→Λ αφού $m_s=+\frac{1}{2}$ ή $-\frac{1}{2}$

4. Να βρείτε:

i. Το μέγιστο αριθμό ηλεκτρονίων στη στιβάδα Μ

ii. Τον αριθμό των ατομικών τροχιακών στην υποστιβάδα 4f

iii. Τον αριθμό των υποστιβάδων και των ατομικών τροχιακών στη στιβάδα Ο

Απάντηση:

i. **18.** αφού $n=3 \Rightarrow 2n^2=18$,

ii. **7.** αφού $l=3 \Rightarrow 2\cdot l+1=2\cdot 3+1 \Rightarrow 7$

iii. **5 υποστιβάδες και 25 ατομικά τροχιακά.** $(n=5 \Rightarrow n^2=5^2=25)$

5. Να υπολογίσετε την ταχύτητα του νετρονίου, το οποίο έχει χαρακτηριστικό μήκος κύματος 0,088 nm. Δίνεται η μάζα του νετρονίου ίση με $1,67\cdot 10^{-24}$ g.

Απάντηση:

$$\lambda=\frac{h}{m\cdot u} \Rightarrow u=\frac{h}{m\cdot \lambda} \Rightarrow u=\frac{6,63\cdot 10^{-34}}{1,67\cdot 10^{-27}\cdot 0,088\cdot 10^{-9}} \Rightarrow \lambda=45\cdot 10^{2}\,m$$

6. α. Από ποιους κβαντικούς αριθμούς χαρακτηρίζεται κάθε ατομικό τροχιακό;

β. Αντιστοιχίστε:

Στήλη (Ι)	*Στήλη (ΙΙ)*
α. n	*i. Σχήμα τροχιακού*
β. l	*ii. Μέγεθος τροχιακού*
γ. m_l	*iii.Προσανατολισμός τροχιακού*

Απάντηση:

α. **(n,l,m_l)**

β. **α→ii, β→I, γ→iii**

Ερωτήσεις σύμφωνες με το 1ο & 2ο θέμα των εξετάσεων

2-1. Ποιο από τα παρακάτω έρχεται σε αντίθεση με την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg;

Α. Ατομικό τροχιακό.

Β. Εκπομπή φωτονίου κατά τη μετάπτωση του ηλεκτρονίου.

Γ. Κυκλικές τροχιές.

Δ. Κβαντικοί αριθμοί.

Να αιτιολογήσετε την απάντηση σας.

2-2. Η αρχή της αβεβαιότητας αναφέρει ότι το ηλεκτρόνιο μπορεί να συμπεριφέρεται και ως σωματίδιο αλλά και ως κύμα. **Σ – Λ**

2-3. Σύμφωνα με τη θεωρία de Broglie κάθε ..... συμπεριφέρεται και ως κύμα με μήκος λ = ...

2-4. Τι μπορούμε να υπολογίσουμε από την εξίσωση Schrodinger για το ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου;

2-5. Να προσδιοριστεί το χαρακτηριστικό μήκος κύματος ενός ηλεκτρονίου ταχύτητας $5{,}97 \cdot 10^{6}$ m/s; Η μάζα του ηλεκτρονίου είναι ίση με $9{,}1 \cdot 10^{-28}$ Kg.

2-6. Να υπολογιστούν:

α. η συχνότητα,

β. η ενέργεια, γ. η μάζα που αντιστοιχεί σε φωτόνιο μήκους κύματος $1{,}5 \cdot 10^{-8}$ cm. Δίνονται $c = 3 \cdot 10^{8}$m/s, $h = 6{,}63 \cdot 10^{-34}$ J · s.

2-7. Ποιες είναι οι προϋποθέσεις, για να εκδηλωθεί η κυματική φύση ενός σωματιδίου;

2-8. Ποιες από τις παρακάτω προτάσεις είναι σωστές;

Α. Το μήκος κύματος μιας μπάλας ποδοσφαίρου που κινείται με ταχύτητα 50 km/h και ενός ηλεκτρονίου που κινείται με ταχύτητα 10^{8} m/s, είναι δυνατό να το ανιχνεύσουμε.

Β. Η κυματοσυνάρτηση ψ που προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης Schrodinger μάς δίνει την πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους του ηλεκτρονίου του ατόμου του υδρογόνου.

2-9. Η καθεμία από τις προτάσεις που ακολουθούν αποδίδονται σε έναν από τους επιστήμονες: Heisenberg, Bohr, Schröndinger, Planck, De Broglie, Einstein. Σημειώστε στο διάστικτο που βρίσκεται στο τέλος της κάθε πρότασης το όνομα του αντίστοιχου επιστήμονα.

- Είναι αδύνατος ο ταυτόχρονος προσδιορισμός της θέσης και της ορμής του ηλεκτρονίου. .....
- Τα κινούμενα υλικά σωματίδια συμπεριφέρονται και ως κύμα. .....
- Η ενέργεια της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας είναι κβαντισμένη. .....
- Τα ηλεκτρόνια διαγράφουν γύρω από τον πυρήνα κυκλικές τροχιές καθορισμένης ακτίνας.....

2-11. Ο κύριος κβαντικός αριθμός

ορίστηκε αυθαίρετα στο ατομικό πρότυπο του Bohr. Σ – Λ

2-12. Από τη λύση της εξίσωσης Schrodinger προκύπτει μια τετράδα κβαντικών αριθμών. Σ – Λ

2-13. Να συμπληρωθεί ο πίνακας:

Τιμή	0	1		
Είδος τροχιακού			*d*	

2-14. Κάθε λύση της εξίσωσης Schrodinger εκφράζει ένα ατομικό τροχιακό. Σ – Λ

2-15. Η υποστιβάδα μιας στιβάδας ορίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς l και m_l. Σ – Λ

2-16. Στη σύγχρονη ατομική θεωρία ο κύριος κβαντικός αριθμός n εκφράζει την ακτίνα της κυκλικής τροχιάς. Σ – Λ

2-17. Ποιο από τα παρακάτω ατομικά τροχιακά δεν υπάρχει;

α. s ατομικό τροχιακό της Ο.

β. ρ ατομικό τροχιακό της L.

γ. d ατομικό τροχιακό της Ν.

δ. f ατομικό τροχιακό της Μ.

2-18. Αντιστοιχίστε:

Στήλη (Ι)	***Στήλη (ΙΙ)***
α. Ηλεκτρόνιο	***i.*** *Στιβάδες K, L, M,...*
β. m_s	***ii.*** *Σωματίδιο - Κύμα*
γ. Είδος τροχιακού	***iii.*** *Ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου*
δ Ηλεκτρονιακό νέφος	***iv.*** *Κατανομή ηλεκτρονιακής πυκνότητας*
ε. *n*	***v.*** *s, ρ, d, f*

2-19. α. Ο κύριος κβαντικός αριθμός η μπορεί να πάρει τις παρακάτω τιμές:

Α. Ακέραιες τιμές.

Β. Τις τιμές 1, 2, 3,4, 5,6 και 7.

Γ. Δεν έχει διευκρινιστεί πλήρως ακόμη. Δ. Τις ακέραιες τιμές 1,2,3,... .

ρ.

2-20. α. Πώς χαρακτηρίζεται μια υποστιβάδα με l = 3;

β. Σε ποια στιβάδα από τις παρακάτω μπορεί να ανήκει;

Α. Στην L. Β. Στην Ν.

Γ. Στην Κ. Δ. Στην Μ.

γ. Να προσδιορίσετε για την υποστιβάδα αυτή τον αριθμό των ατομικών τροχιακών της.

2-11. Ένα τροχιακό είναι ο χώρος στον οποίο υπάρχει ένα ηλεκτρόνιο. Σ – Λ

2-21. Τι εκφράζει ο κύριος κβαντικός αριθμός n στο ατομικό πρότυπο του Bohr και τι στη σύγχρονη θεωρία;

2-22. Η τετράδα των κβαντικών αριθμών: (4,1,-1,+1/2) χαρακτηρίζει ένα ηλεκτρόνιο του βαρίου σε θεμελιώδη κατάσταση. Να αναλύσετε τις πληροφορίες που μας δίνουν οι συγκεκριμένοι κβαντικοί αριθμοί.

2-23. Τι εκφράζουν οι παρακάτω συνδυασμοί των κβαντικών αριθμών:

α. η = 4, β. η = 3 και l= 2,

γ. η = 7, l = 0 και m_l = 0, δ. η = 4,l = 2, m_l = -2 και m_s = +1/2;

2-24. Να εξηγήσετε, γιατί δύο ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν το ίδιο τροχιακό δε δημιουργούν μαγνητικό πεδίο.

2-25. Ποιες είναι οι κυριότερες διαφορές ανάμεσα σε ένα τροχιακό 2s και ένα τροχιακό 2ρ;

2-26. Ο μέγιστος αριθμός των d ατομικών τροχιακών σε μια στιβάδα είναι:

Α. 1 Β. 7 Γ. 5 Δ. 2 Ε. Εξαρτάται από τη στιβάδα.

β. Ο αριθμός των υποστιβάδων που μπορεί να έχουμε στην τέταρτη στιβάδα είναι:

Α.4 Β.5 Γ.2 Δ.3

2-27. Να γίνουν όλες οι δυνατές αντιστοιχίσεις μεταξύ των υποστιβάδων της στήλης (Ι) και των τιμών των κβαντικών αριθμών της στήλης (ΙΙ).

Στήλη (Ι)			Στήλη (ΙΙ)	
Ατομικό τροχιακό			Κβαντικός αριθμός ℓ	
α.	d	• •	i.	0
β.	f	• •	ii.	1
γ.	s	• •	iii.	2
δ.	p	• •	iv.	3

2-28. Να δοθούν οι πιθανές τιμές για τον m_l στις παρακάτω περιπτώσεις:

α. l. = 2 β. l = 3 γ. n = 4

δ. n = 3, l = 1 ε. n = 4, l= 3 στ. n = 7, l = 0

2-29. Όταν ο δευτερεύων ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός l έχει τιμή l = 2, ποιες είναι οι επιτρεπτές τιμές m_l;

2-30. Στη στιβάδα L ο κύριος κβαντικός αριθμός n έχει τιμή n = 2. Ποιες είναι οι τιμές των άλλων κβαντικών αριθμών στη στιβάδα αυτή;

2-31. α. Πώς ορίζεται ο αριθμός των ατομικών τροχιακών σε μια υποστιβάδα και σε μια στιβάδα;

β. Να προσδιορίσετε το μέγιστο αριθμό ατομικών τροχιακών: i) στην υποστιβάδα 5f και ii) στη στιβάδα L.

2-32. Ποια είναι η μικρότερη τιμή του n αν: α. l = 2, β. m_l = 3, γ. m_s = + 1/2;

2-33. α. Να διατάξετε τις παρακάτω υποστιβάδες κατά αύξοντα αριθμό ατομικών τροχιακών που αυτές περιέχουν:

i. 7s ii. 3d iii. 6p iv. 4f ρ.

Στις παραπάνω περιπτώσεις τροχιακών κάθε υποστιβάδας , να γράψετε τους συνδυασμούς των κβαντικών αριθμών που περιγράφουν αυτά τα τροχιακά.

2-34. α. Μια υποθετική υποστιβάδα με l = 4(g) μπορεί να ανήκει στη στιβάδα:

Α. Κ Β. Μ Γ. Ο Δ. Ν

Να αιτιολογήσετε την απάντηση σας.

β. Πόσα ατομικά τροχιακά θα περιείχε αυτή η υποστιβάδα;

2-35. α. Δίνονται οι παρακάτω τριάδες κβαντικών αριθμών:

i. n = 3,l = 2, m_l = -2. ii. n = 3, l=1 , m_l=0. iii. n = 3, l = 0, m_l = -1.

iv. n = 3,l = 2, m_l = 0. v. n = 3, l = 3, m_l = -2.

Από τις παραπάνω τριάδες ποιες δεν περιγράφουν μια επιτρεπόμενη κατάσταση ηλεκτρονίου ενός ατόμου;

Α. Οι (i) και (v), Β. Οι (ii) και (iii).Γ. Οι (iii) και (iv). Δ. Οι (i) και (iv).Ε. Οι (iii) και (v),

β. Να αιτιολογήσετε την απάντηση σας.

2-36. Ποιες από τις επόμενες τετράδες κβαντικών αριθμών ανταποκρίνονται σε πραγματικές καταστάσεις και ποιες όχι;
α. 2,2,+1,+1/2. β. 3, 0,+1,-1/2.
γ. 3,2,-2,-1/2. δ.2,1,0,1.
Στην περίπτωση των τετράδων που δεν ανταποκρίνονται σε πραγματικές καταστάσεις, να τις διορθώσετε κατάλληλα, ώστε να αντιστοιχούν σε πιθανή πραγματική τετράδα.

2-37. Να ορίσετε τις υποστιβάδες που υπάρχουν στην 4η στιβάδα.
β. Να χαρακτηρίσετε τις υποστιβάδες αυτές.
γ. Πόσα ατομικά τροχιακά έχουμε στις υποστιβάδες και πόσα στη στιβάδα;

2-38. Ποιες από τις επόμενες τριάδες κβαντικών αριθμών μπορούν να είναι τροχιακά ενός ατόμου;
Δίπλα σε κάθε αποδεκτή τριάδα να αναγράψετε πώς συμβολίζεται ο αντίστοιχος υποφλοιός (υποστιβάδα) που ανήκουν, όπως φαίνεται στην πρώτη γραμμή. Στις μη αποδεκτές τριάδες, να διαγράψετε το αντίστοιχο τετράγωνο του υποφλοιού.

n	l	m_l	υποφλοιός
3	2	-2	3d
3	2	0	
2	0	1	
2	1	0	
2	1	1	
4	1	1	

2-39. Να προσδιορίσετε μέσω των κβαντικών αριθμών το μέγιστο αριθμό ατομικών τροχιακών στη στιβάδα Μ.

2-40. Πόσα τροχιακά αντιστοιχούν σε καθεμία από τις επόμενες υποστιβάδες;
α. 2s β. 5s γ. 3pδ. 6p ε. 5f στ. 4f
Από τι καθορίζεται το πλήθος αυτό;

2-41. Στη στιβάδα Ν ενός γνωστού στοιχείου ένα ατομικό τροχιακό έχει τιμή μαγνητικού κβαντικού αριθμού m_l = +1. Να χαρακτηρίσετε αυτό το τροχιακό.

2-42. Γιατί δεν μπορούν να υπάρχουν:
α. d ατομικό τροχιακό στη στιβάδα L και
β. f ατομικό τροχιακό στη στιβάδα Μ;
Να αιτιολογήσετε την απάντηση σας.

2-43. α. Ένα ηλεκτρόνιο ανήκει σε d ατομικό τροχιακό. Το ηλεκτρόνιο αυτό θα έχει κβαντικό αριθμό:
Α. n = 4 Β. m_l = -2 Γ. l = 2 Δ. n = 2
β. Να βρεθεί ο μέγιστος αριθμός των τροχιακών μιας υποστιβάδας συναρτήσει του l.

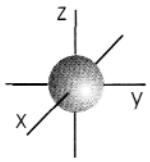
2-44. Να δοθούν οι κβαντικοί αριθμοί που εκφράζουν:
α. τη στιβάδα L, β. την υποστιβάδα 4d,
γ. το τροχιακό $3p_z$, δ. ένα τροχιακό της υποστιβάδας 5f.

2-45. Να σημειώσετε ποια από τα παρακάτω τροχιακά μπορούν να υπάρχουν και ποια δεν μπορούν:
α. 6s β. 2p γ. 3f δ. 4d
ε. 2d στ. 4g
Να αιτιολογηθεί η απάντηση για τα τροχιακά που δεν υπάρχουν.

Παναγιώτης Αθανασόπουλος
Χημικός – Διδάκτωρ Πανεπιστημίου Πατρών

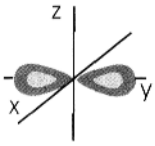
2-46. Ένα ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε ένα από τα: i. f ii. 3d ατομικά τροχιακά ενός ατόμου.
Ποιες είναι οι πιθανές τιμές των n, l, m_l και m_s ια το ηλεκτρόνιο αυτό;

2-47. α. Το παρακάτω σχήμα απεικονίζει ένα ατομικό τροχιακό.



Το ατομικό τροχιακό
Α. το ρ_x Β. το p_y. Γ. το s. Δ. το ρ_Z.
β. Τι συμπεράσματα προκύπτουν από τη μορφή του παραπάνω τροχιακού;

2-48. α. Το παρακάτω σχήμα απεικονίζει ένα ατομικό τροχιακό.



α. το ρ_x β. το p_y. γ. το s. δ. το ρ_z.
Τι συμπεραίνετε από τη μορφή του παραπάνω ατομικού τροχιακού;