



Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών

Χημεία

Ενότητα 2: Κβαντομηχανική προσέγγιση του ατόμου

Τόλης Ευάγγελος

e-mail: etolis@uowm.gr

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών



Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ψηφιακά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Κεφάλαιο 2^ο

2

Κβαντομηχανική
προσέγγιση του ατόμου



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (1/38)

- Σύμφωνα με το ατομικό πρότυπο του Rutherford, εάν ένα ηλεκτρικά φορτισμένο σωματίδιο όπως είναι το ηλεκτρόνιο περιστρέφεται γύρω από ένα κέντρο (πυρήνα), τότε θα χάνει συνεχώς ενέργεια υπό τη μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.
- Αδυναμία του ατομικού προτύπου του Rutherford, να εξηγήσει την σταθερότητα του ατόμου!!
- Λύση στο πρόβλημα αυτό έδωσε το 1913 ο Δανός φυσικός Niels Bohr, ο οποίος βασιζόμενος στην **κβαντική θεωρία** που είχε αναπτυχθεί από τους Einstein και Planck, και στηριζόμενος σε φασματοσκοπικά δεδομένα κατάφερε να εξηγήσει την δομή του ατόμου τουλάχιστον για το απλούστερο άτομο του Υδρογόνου.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (2/38)

Η κβάντωση της ενέργειας του Planck:

- Το 1900 ο Γερμανός φυσικός Planck, παρατηρώντας την ένταση της ακτινοβολίας που εκπέμπεται από ένα θερμό σώμα το οποίο βρίσκεται σε διάφορες θερμοκρασίες κατέληξε στον τύπο για την Ενέργεια (E) της ακτινοβολίας που εκπέμπεται από ένα άτομο:

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

- Όπου h η σταθερά του Planck η οποία ισούται με $6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ και ν η συχνότητα της ακτινοβολίας.
- Η ακτινοβολία από ένα σώμα εκπέμπεται όχι με συνεχή τρόπο αλλά σε “πακέτα” ενέργειας $h\nu$ (κβάντα), η τιμή των οποίων εξαρτάται από την συχνότητα της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας.



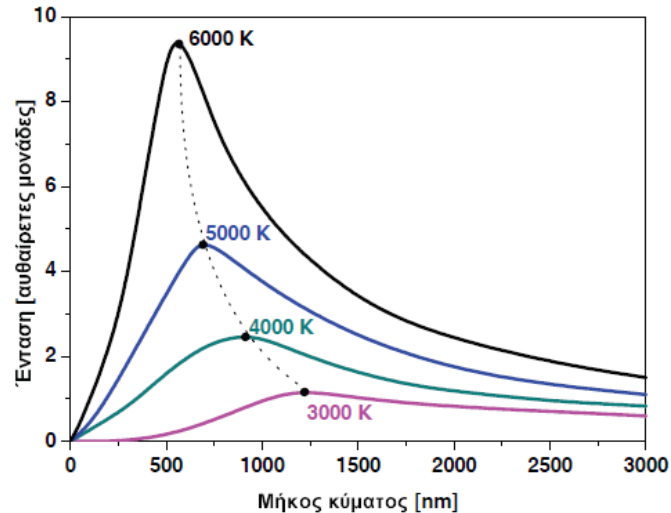
Max Planck (1858 - 1947)

Από τους σημαντικότερους φυσικούς του 20ου αιώνα. Θεωρείται ο θεμελιωτής της κβαντικής θεωρίας.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (3/38)



Σχήμα 2.1: Φάσμα θερμικής ακτινοβολίας που λαμβάνεται κατά τη θέρμανση ενός μέλανος σώματος σε διάφορες θερμοκρασίες. Ως μέλαν σώμα ορίζεται το ιδανικό σώμα το οποίο μπορεί να απορροφά και να εκπέμπει όλες τις συχνότητες της ακτινοβολίας.

- Σε χαμηλή T , χαμηλή E , άρα χαμηλό ν , και επειδή $\lambda=c/\nu$, το λ θα είναι μεγάλο.
- Αύξηση της T , αύξηση της E άρα αυξημένο ν με συνέπεια λ μικρό.
- Κλασική φυσική: Η ένταση της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας θα αυξάνεται συνεχώς με την αύξηση της συχνότητας.



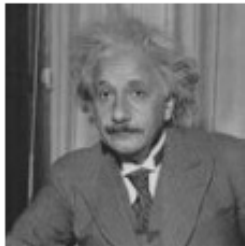
Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (4/38)

Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο του Einstein:

- *Ο Einstein επέκτεινε την θεωρία του Plank ώστε να συμπεριλάβει και την φύση του ίδιου του φωτός.*
- *Έτσι ο Einstein υπέθεσε ότι εάν για κάποιο λόγο η ενέργεια ενός ατόμου μεταβληθεί κατά $h\nu$, τότε αυτή η μεταβολή της ενέργειας θα εκπεμφθεί υπό την μορφή φωτεινής ενέργειας. Και το φως δηλαδή κατά τον Einstein αποτελείται από κβάντα ενέργειας (φωτόνια), από σωματίδια δηλαδή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας με ενέργεια ίση με :*

$$E = h \cdot \nu$$



Albert Einstein (1879 - 1955)

Ίσως ο μεγαλύτερος φυσικός όλων των εποχών. Έγινε ιδιαίτερα γνωστός από τη θεωρία της σχετικότητας και ειδικότερα από την ισοδυναμία μάζας-ενέργειας ($E = m \cdot c^2$). Το 1921 τιμήθηκε με το βραβείο Νόμπελ φυσικής για την ερμηνεία του φωτοηλεκτρικού φαινομένου.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (5/38)

Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο: Εκπομπή ηλεκτρονίων από την επιφάνεια ενός μετάλλου όταν πάνω σε αυτό προσπίπτει φως (φωτόνια) συγκεκριμένης συχνότητας.

Διττή φύση του φωτός : σωματιδιακή και κυματική.

Ε είναι η ενέργεια ενός σωματιδίου φωτός (ενός φωτονίου) και ν είναι η συχνότητα του κύματος που αντιστοιχεί σε αυτή την ενέργεια. Για να περιγραφεί λοιπόν πλήρως το φως απαιτείται να λάβουμε υπόψη τόσο την σωματιδιακή όσο και την κυματική του φύση.

- Η ενέργεια \rightarrow με την σωματιδιακή ($E=m \cdot c^2$)
- Η συχνότητα \rightarrow με την κινηματική ($E=h \cdot \nu$)



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (6/38)

Αν αναλύσουμε με ένα πρίσμα το φως μιας λάμπας φωτισμού τότε αυτό που θα πάρουμε είναι ένα **συνεχές φάσμα**, ένα φάσμα δηλαδή που περιέχει όλα τα μήκη κύματος του ορατού φωτός.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (7/38)

Αντίθετα, αν αναλύσουμε το φως που εκπέμπεται από ένα **θερμαινόμενο αέριο** αυτό που θα παρατηρήσουμε είναι ένα **γραμμικό φάσμα** ένα φάσμα δηλαδή που περιέχει ορισμένα μόνο χρώματα που αντιστοιχούν σε συγκεκριμένα μήκη κύματος.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (8/38)

Το φάσμα του Υδρογόνου αποτελείται από **τέσσερις μόνο γραμμές** (μια **κόκκινη**, μια **κυανοπράσινη**, μια **κυανή** και μια **ιώδη**) στην περιοχή του ορατού.

Ο Balmer έδειξε ότι τα μήκη κύματος λ στο ορατό φάσμα του H_2 μπορούν να προκύψουν από την παρακάτω εξίσωση:

$$\frac{1}{\lambda} = 1,097 \times 10^7 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Για $n=3,4,5$ και 6 .



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (9/38)

Ατομικό πρότυπο του Bohr:

- Σταθερότητα του ατόμου δεν εξηγείται από το πρότυπο του Rutherford.
- Γραμμικό φάσμα του H_2 .



Υιοθέτησε της ιδέες της κβαντικής θεωρίας και πρότεινε τις παρακάτω παραδοχές:

- Το e^- μπορεί να κινείται σε ορισμένες μόνο επιτρεπτές κυκλικές τροχιές (στοιβάδες) γύρω από τον πυρήνα στις οποίες αντιστοιχεί ένα ορισμένο ποσό ενέργειας (**1^η, ή μηχανική συνθήκη του Bohr**).
- Η ενέργεια των e^- που κινούνται σε συγκεκριμένες τροχιές είναι σταθερή. Δηλαδή κατά την κίνηση του e^- δεν εκπέμπεται ακτινοβολία (**2^η ή οπτική συνθήκη του Bohr**).



Niels Bohr (1885 - 1962)

Δανός φυσικός. Σπούδασε στο Πανεπιστήμιο της Κοπεγχάγης και συνεργάστηκε με επιφανείς επιστήμονες από όλο τον κόσμο. Ιδιαίτερα σημαντική θεωρείται η συνεισφορά του στην κατανόηση της δομής του ατόμου, για την οποία και βραβεύτηκε με το βραβείο Νόμπελ φυσικής το 1921.

Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (10/38)

- **1^η , ή μηχανική συνθήκη του Bohr:**

Η ενέργεια των ενεργειακών σταθμών του e⁻ του ατόμου του Υδρογόνου δίνεται από:

$$E = -\frac{R_H}{n^2}$$

Όπου $R_H = 2,179 \times 10^{-18} \text{ J}$,

και $n = 1, 2, 3, \dots$ λαμβάνει μόνο ακέραιες τιμές και καθορίζει την τροχιά που κινείται το e⁻.

- Η φυσική σημασία του $-$ στην σχέση δηλώνει ότι όσο απομακρυνόμαστε από τον πυρήνα η ενέργεια μειώνεται (για $n = \infty$, $E = 0$).

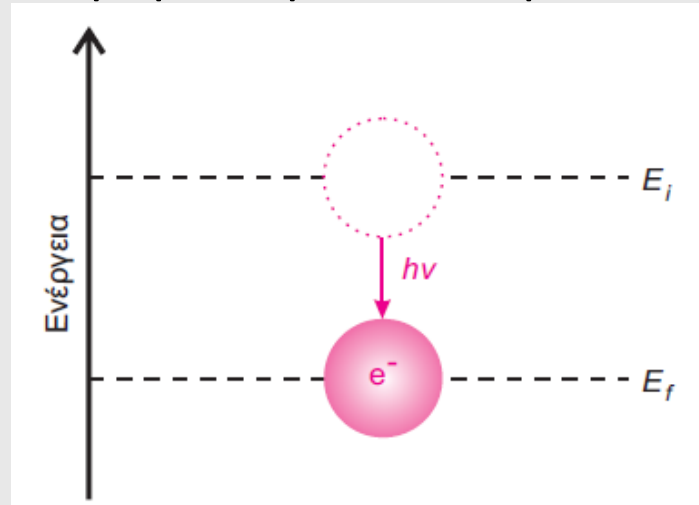


Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (11/38)

- **2^η ή οπτική συνθήκη του Bohr:**

Η ενέργεια των e⁻ που κινούνται σε συγκεκριμένες τροχιές είναι σταθερή. Κατά την κίνηση αυτή δεν εκπέμπεται ενέργεια.



Εκπομπή ακτινοβολίας κατά την μετάπτωση ενός ηλεκτρονίου από ένα ενεργειακό επίπεδο (**E_i**) σε ένα επίπεδο χαμηλότερης ενέργειας (**E_f**).

$$E_i - E_f = h\nu$$



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (12/38)

Και επειδή:

$$E_i = \frac{-R_H}{n_i^2} \quad E_{f_i} = \frac{-R_H}{n_{f_i}^2}$$

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

Αντικαθιστώντας το ν με: $c=\lambda\nu$,

c η ταχύτητα του φωτός $2,998 \times 10^8$ m/s

λ το μήκος κύματος της ακτινοβολίας

ν η συχνότητα της ακτινοβολίας

$$h \frac{c}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \text{ή} \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{R_H}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \xrightarrow{\text{Αντικατάσταση των σταθερών}}$$

$$\frac{1}{\lambda} = 1,097 \times 10^7 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \xrightarrow{\text{red arrow}}$$

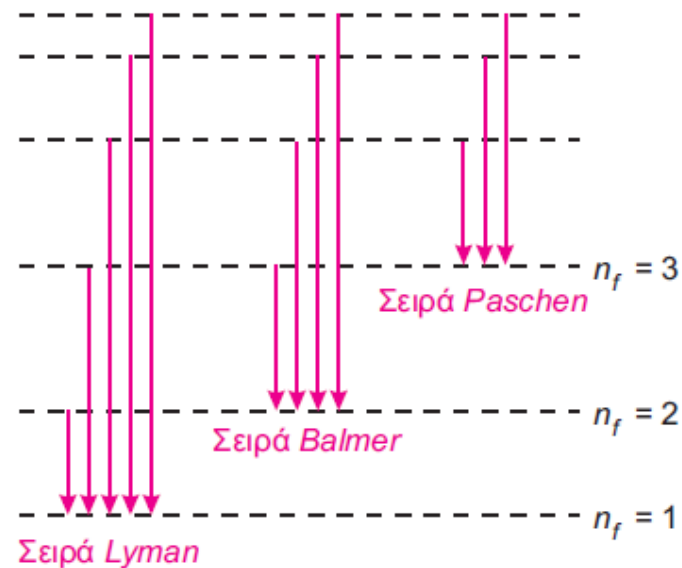
Ταυτίζεται με την εξίσωση Balmer για $n_f=2$ του γραμμικού φάσματος του ατόμου του H



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (13/38)

- Μεταπτώσεις e προς την στιβάδα $L(n_f=2)$: εκπομπή στο Vis (*Balmer*).
- Μεταπτώσεις e προς την στιβάδα $K(n_f=1)$: εκπομπή στο UV (*Lyman*).
- Μεταπτώσεις e προς την στιβάδα $M(n_f=3)$: εκπομπή στο IR (*Paschen*).



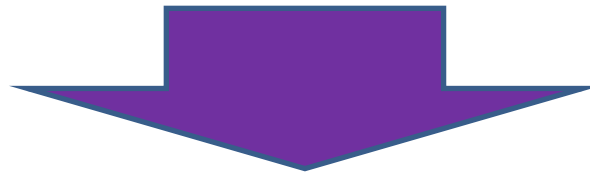
Μεταπτώσεις ηλεκτρονίων στο άτομο του Υδρογόνου



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (14/38)

Παρά το γεγονός ότι η θεωρία του *Bohr* κατάφερε να εξηγήσει το φάσμα του υδρογόνου, δυστυχώς αδυνατούσε να εξηγήσει, τόσο τα φάσματα πιο πολύπλοκων ατόμων, όσο και τη λεπτή υφή των φασμάτων (κάθε γραμμή στα γραμμικά φάσματα εκπομπής απαρτίζεται από άλλες λεπτότερες).



Λύση στην λεπτή υφή των φασμάτων του H έδωσε ο Sommerfeld (1915):

- “ Τα e εκτός από τις κυκλικές τροχιές κινούνται και σε άλλες ελλειπτικές τροχιές με παραπλήσια ενέργεια και κοινή εστία τον πυρήνα”.
- Για κάθε στοιβάδα αντιστοιχεί ένας συγκεκριμένος αριθμός **υποστοιβάδων**, μεταπτώσεις ανάμεσα στις υποστοιβάδες αποτέλεσμα εμφάνιση επιπλέον φασματικών γραμμών με παραπλήσια μήκη κύματος.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (15/38)

Θεωρία των υλοκυμάτων του de Broglie (1924):

- Αδυναμία των μοντέλων Bohr και Sommerfeld να περιγράψουν την συμπεριφορά ατόμων βαρύτερων του Υδρογόνου, στα οποία γύρω από τον πυρήνα κινούνταν πολλά ηλεκτρόνια.
- Η λύση στο πρόβλημα της σύγχυσης που είχε δημιουργηθεί δόθηκε μέσα από μια νέα θεωρία που άρχισε να αναπτύσσεται προκειμένου να εξηγηθούν οι ιδιότητες υποατομικών σωματιδίων, **την κβαντομηχανική.**

Louis de Broglie: Το ηλεκτρόνιο έχει διττή φύση σωματιδίου-κύματος, πρόκειται δηλαδή για ένα κυματοσωματίδιο:

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot u}, \text{ εξίσωση de Broglie}$$



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (16/38)

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις των Plank και Einstein:

$$E = m \cdot c^2 = h \cdot \nu$$



Louis de Broglie (1892 - 1987)

Γάλλος φυσικός, γνωστός για την κυματική θεωρία της ύλης. Στη διδακτορική του διατριβή με θέμα, «έρευνες πάνω στη θεωρία των κβάντα», διατύπωσε για πρώτη φορά την άποψη της διττής φύσης των ηλεκτρονίων, της κυματικής και της σωματιδιακής. Για την εργασία του αυτή τιμήθηκε με το βραβείο Νόμπελ Φυσικής το 1929, και αποτέλεσε τον πρώτο επιστήμονα που έλαβε το βραβείο Νόμπελ για τη διδακτορική του διατριβή.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (17/38)

Αρχή της απροσδιοριστίας του Heisenberg (1927):

- Στην ανάπτυξη της κβαντομηχανικής ώστε να μπορέσει τελικά να περιγράψει πλήρως την εικόνα που έχουμε σήμερα για το άτομο σημαντική υπήρξε η συμβολή του Heisenberg ο οποίος διετύπωσε την άποψη ότι :

“Είναι αδύνατον να γνωρίζουμε ταυτόχρονα με ακρίβεια την θέση και την ταχύτητα πολύ μικρών σωματιδίων όπως είναι το ηλεκτρόνιο”.

- Η αρχή αυτή η οποία είναι γνωστή ως **αρχή της αβεβαιότητας ή απροσδιοριστίας του Heisenberg** διαφοροποιεί τελείως την κατάσταση που επικρατεί ανάμεσα στην κλασική μηχανική και στην κβαντομηχανική όσον αφορά την θέση και την ταχύτητα ενός σώματος.

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



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (18/38)

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

το γινόμενο της αβεβαιότητας προσδιορισμού της θέσης (Δx) επί της αβεβαιότητας προσδιορισμού της ορμής (Δp) δε μπορεί να είναι μικρότερο από την τιμή $\frac{h}{4\pi}$.

Αν, δηλαδή, είμαστε σίγουροι για τη θέση ενός σωματιδίου (άρα η αβεβαιότητα Δx είναι μηδέν), τότε η αβεβαιότητα προσδιορισμού της ορμής του σωματιδίου αυτού είναι άπειρη ($\Delta p \rightarrow \infty$).



Werner Heisenberg (1901 - 1976)

Γερμανός φυσικός, γνωστός από την φερώνυμη αρχή της απροσδιοριστίας. Τιμήθηκε σε ηλικία 32 ετών με το βραβείο Νόμπελ φυσικής για τις εργασίες του στην Κβαντική Μηχανική.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (19/38)

Η εξίσωση (1926) του Schrödinger:

- Η κβαντομηχανική θεωρία δεν μας επιτρέπει να περιγράψουμε τα ηλεκτρόνια ως κινούμενα σωματίδια σε μια συγκεκριμένη τροχιά, εντούτοις μας επιτρέπει να πιθανολογήσουμε για την θέση του ηλεκτρονίου σε κάποιο σημείο γύρω από τον πυρήνα.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (20/38)

- Κυματική εξίσωση του **Schrödinger** :

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \Psi = 0$$

- **m**: μάζα του σωματιδίου,
- **E**: συνολική ενέργεια του σωματιδίου,
- **U**: δυναμική ενέργεια του σωματιδίου.

Όλες οι πληροφορίες για το e^- περιέχονται στην μαθηματική έκφραση Ψ η οποία ονομάζεται **κυματοσυνάρτηση** και προκύπτει από επίλυση της εξίσωσης Schrödinger.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (21/38)

Η εξίσωση του Schrödinger:

- Για να είναι αποδεκτή μια λύση Ψ , οι κυριότερες προϋποθέσεις που πρέπει να πληρούνται είναι :
 - Να είναι **μονότιμη**, να έχει δηλαδή μόνο μια τιμή για κάθε σημείο του χώρου.
 - Να είναι **συνεχής** (να μην αλλάζει απότομα τιμή σε κοντινά σημεία).
 - Να είναι **πεπερασμένη**, (να μην 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 την μονάδα.



Κβαντομηχανική

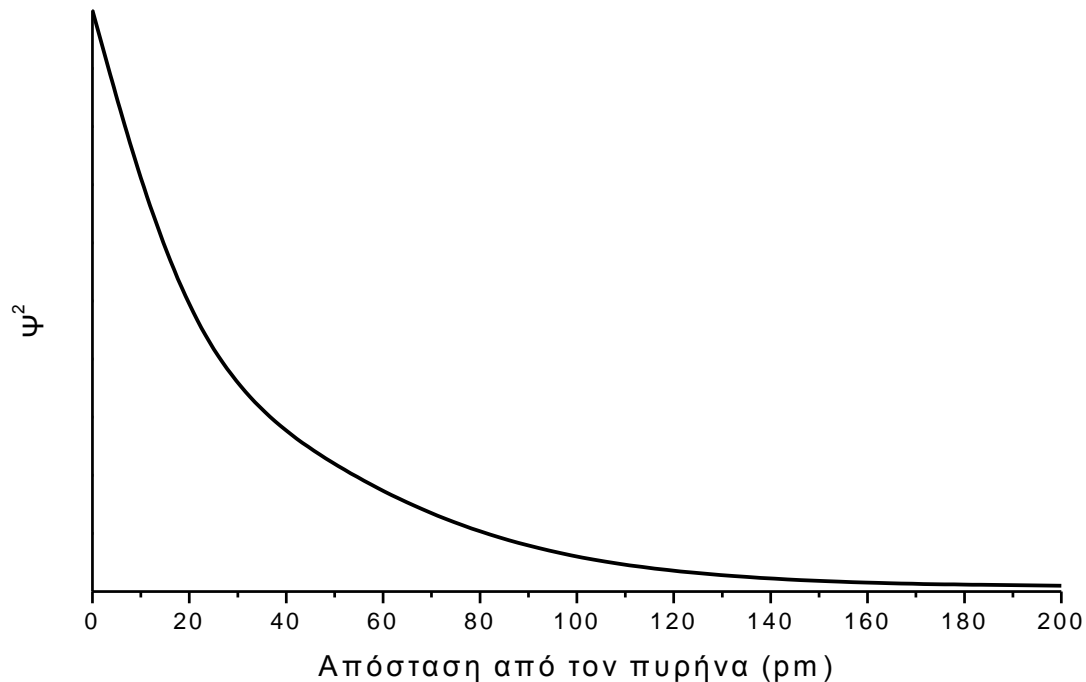
προσέγγιση του ατόμου (22/38)

- Η **συνολική ενέργεια E** 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 για τα υδρογονοειδή ιόντα (He^+ , Li^{+2} , κλπ.).
- Η **κυματοσυνάρτηση Ψ** δεν έχει καμία φυσική σημασία.
- Το **τετράγωνο της κυματοσυνάρτησης, $|\Psi^2|$** , μας δίνει την πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου μέσα σε κάποια περιοχή του χώρου και είναι αυτό που θα καθορίζει το μέγεθος και το σχήμα του ηλεκτρονικού νέφους.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (23/38)



Μεταβολή του $|\Psi^2|$, σε συνάρτηση με την **απόσταση** από τον πυρήνα για το ηλεκτρόνιο του ατόμου του Υδρογόνου.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (24/38)

Κβαντικοί Αριθμοί και Ατομικά Τροχιακά:

- Για να έχει η εξίσωση Schrödinger αποδεκτές λύσεις, θα πρέπει η συνολική ενέργεια E να πάρει μόνο κάποιες κατάλληλες τιμές οι οποίες θα αντιστοιχούν στις επιτρεπτές λύσεις Ψ .
- Οι επιτρεπτές τιμές ενέργειας για ένα ηλεκτρόνιο από ένα συνδυασμό **τεσσάρων αριθμών** οι οποίοι ονομάζονται **κβαντικοί αριθμοί**.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (25/38)

Κβαντικοί Αριθμοί και Ατομικά Τροχιακά:

- Κάθε αποδεκτή κυματική συνάρτηση Ψ αντιστοιχεί σε καθορισμένη ενέργεια E και ουσιαστικά περιγράφει το χώρο γύρω από τον πυρήνα μέσα στον οποίο υπάρχει πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο. Ακριβώς αυτός ο χώρος ονομάζεται **ατομικό τροχιακό (Atomic Orbital, AO)**.
- Κάθε Α.Ο παριστάνει μια κατάσταση συγκεκριμένης ενέργειας η οποία καθορίζεται από τον συνδυασμό των κβαντικών αριθμών και ουσιαστικά αντιπροσωπεύει ένα **ηλεκτρονικό νέφος** το οποίο χαρακτηρίζεται από **μέγεθος, σχήμα** και **προσανατολισμό**.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (26/38)

Ο κύριος κβαντικός αριθμός (n):

Ο κύριος κβαντικός αριθμός n , μπορεί να πάρει μόνο ακέραιες θετικές τιμές.

$$n=1, 2, 3, \dots \infty$$

Καθορίζει :

- Την στιβάδα στην οποία κινείται το ηλεκτρόνιο.
- Το **μέγεθος** του ηλεκτρονικού νέφους.
- Σε μεγάλο βαθμό και την ενέργεια του ηλεκτρονίου σε ένα άτομο.



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (27/38)

Ο κύριος κβαντικός αριθμός (n):

ΚΥΡΙΟΣ ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ (n)	1	2	3	4
στιβάδα	K	L	M	N



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (28/38)

Ο δευτερεύων ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός (ℓ):

- Ο αζιμουθιακός αριθμός (ℓ), καθορίζει το **σχήμα** του ηλεκτρονικού νέφους και μπορεί να πάρει τιμές από 0 έως ($n-1$).

Για $n = 4$ (κύριος κβαντικός αριθμός) (στιβάδα N)				
αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός (ℓ)	0	1	2	3
υποστιβάδα	s	p	d	f
Αριθμός ατομικών τροχιακών ($2\ell+1$)	1	3	5	7



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (29/38)

Τρίτος μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l):

Ο τρίτος κβαντικός αριθμός καθορίζει τον **προσανατολισμό** του ηλεκτρονικού νέφους και οι αποδεκτές τιμές που μπορεί να πάρει είναι :

$$m_l = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell-1, +\ell$$

- Η ονομασία “μαγνητικός” οφείλεται στην δημιουργία μαγνητικού πεδίου λόγω της κίνησης ηλεκτρικού φορτίου (ηλεκτρονίου).
- Π.χ. για $\ell=1$ (αντιστοιχεί σε p τροχιακό) ο $m_l = -1, 0, +1$ (άρα 3 τροχιακά p).



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (30/38)

Τέταρτος μαγνητικός κβαντικός αριθμός του spin (m_s):

- Ο κβαντικός αυτός αριθμός παίρνει **μόνο δυο τιμές** $+1/2$ και $-1/2$ και αναφέρεται στην **ιδιοπεριστροφή** του ηλεκτρονίου.
- Όταν παίρνει την τιμή $+1/2$, θεωρούμε ότι το ηλεκτρόνιο κινείται γύρω από τον άξονά του κατά την φορά των δεικτών του ρολογιού (δεξιόστροφα) και τότε έχουμε spin προς τα πάνω (\uparrow) ενώ όταν $m_s = -1/2$ τότε κινείται προς την αντίθετη κατεύθυνση (αριστερόστροφα) και έχουμε spin προς τα κάτω (\downarrow).



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (31/38)

Τροχιά	n	l	m_l	τροχιακό
K	1	0	0	1s
L	2	0	0	2s
	2	1	0	2p _z
	2	1	+1	2p _x
	2	1	-1	2p _y
M	3	0	0	3s
	3	1	0	3p _z
	3	1	+1	3p _x
	3	1	-1	3p _y
	3	2	0	3d _{z²}
	3	2	+1	3d _{xz}
	3	2	-1	3d _{yz}
	3	2	+2	3d _{x²-y²}
	3	2	-2	3d _{xy}

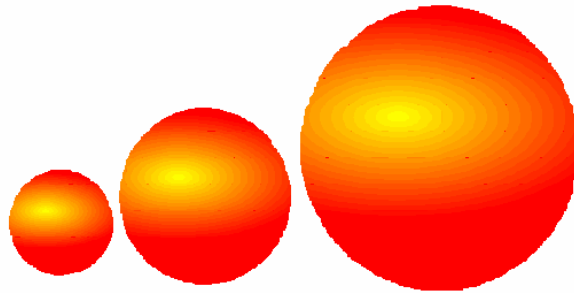


Κβαντομηχανική

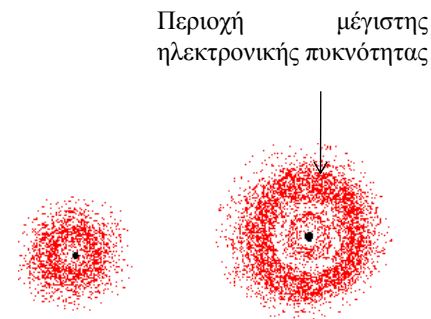
προσέγγιση του ατόμου (32/38)

Ατομικά τροχιακά s:

- Τα τροχιακά αυτά **αντιστοιχούν σε δευτερεύοντα κβαντικό αριθμό $\ell=0$** . Ανάλογα με την τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού προκύπτουν τα τροχιακά 1s (για $n=1$), 2s (για $n=2$), 3s (για $n=3$), κ.ο.κ.



τροχιακά 1s, 2s και 3s



τροχιακά 1s και 2s

Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (33/38)

Ατομικά τροχιακά p :

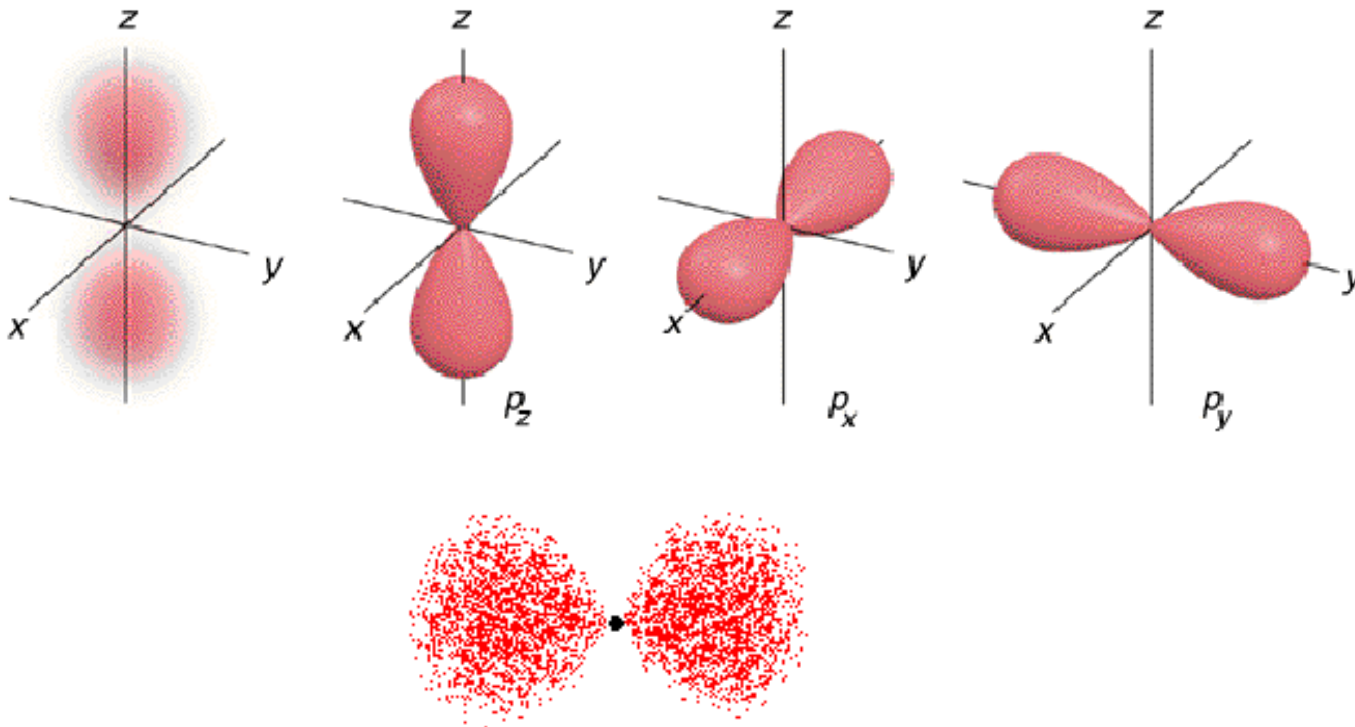
- Τα τροχιακά αυτά **αντιστοιχούν** σε δευτερεύοντα κβαντικό αριθμό $\ell=1$.
- Στην τιμή αυτή αντιστοιχούν τρία όμοιου σχήματος και ενέργειας τροχιακά, τα οποία διαφέρουν ως προς τον **προσανατολισμό** (διαφορετικό m_l) του ηλεκτρονικού νέφους.
- Όλα τα p τροχιακά αποτελούνται από δυο λοβούς σε ευθεία γραμμή γύρω από τον πυρήνα, οι οποίοι κατευθύνονται κατά μήκος ενός από τους άξονες x , y και z και συμβολίζονται αντίστοιχα ως p_x , p_y και p_z .



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (34/38)

Ατομικά τροχιακά p :



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (35/38)

Ατομικά τροχιακά d:

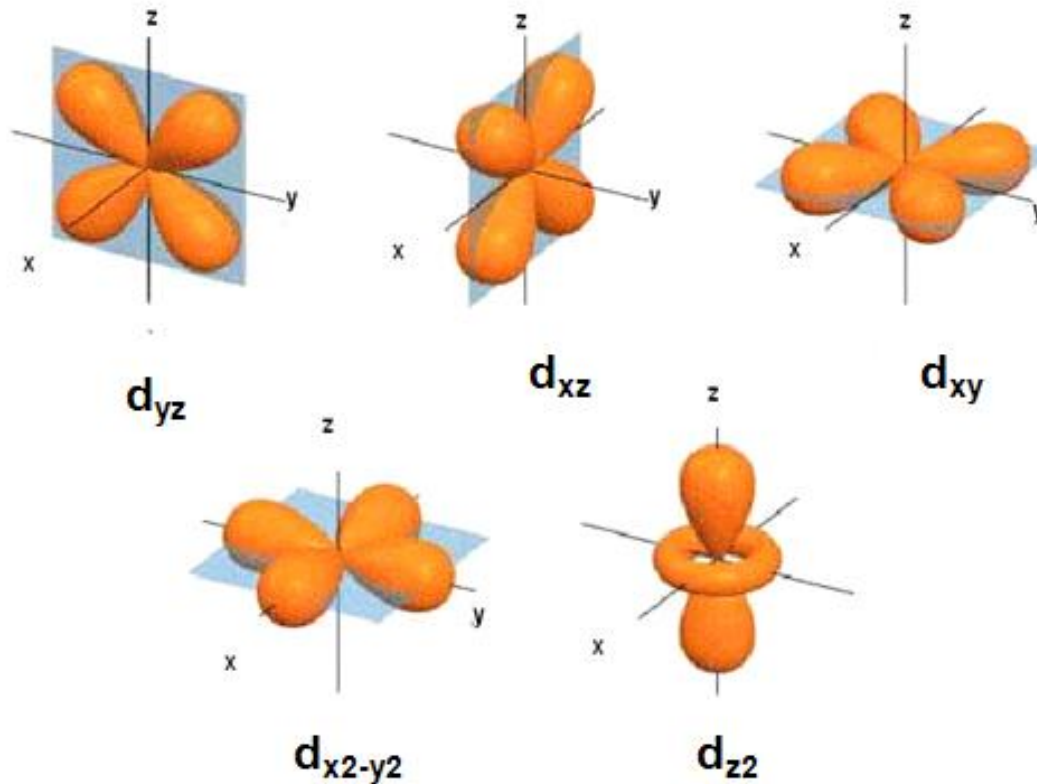
- Τα τροχιακά αυτά **αντιστοιχούν** σε δευτερεύοντα κβαντικό αριθμό $\ell=2$ (άρα $m_\ell=-2,-1,0,+1,+2$).
- Στην τιμή αυτή αντιστοιχούν πέντε τροχιακά, εκ των οποίων τα τέσσερα αποτελούνται από τέσσερις λοβούς ενώ το ένα αποτελείται από δυο λοβούς και ένα δακτύλιο (τροχιακό d_z^2).



Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (36/38)

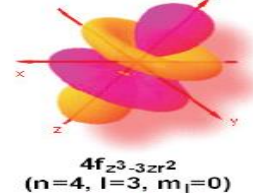
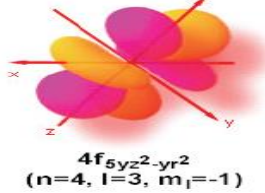
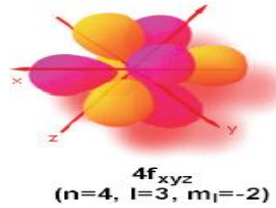
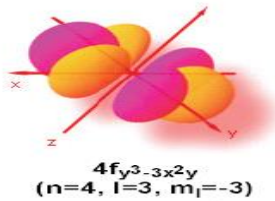
Ατομικά τροχιακά d:



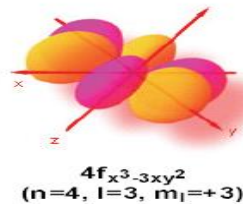
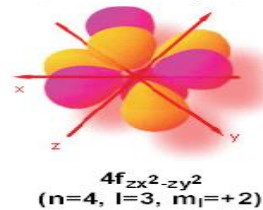
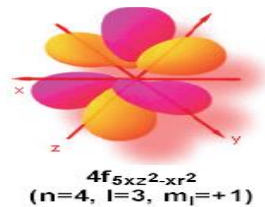
Κβαντομηχανική

προσέγγιση του ατόμου (37/38)

Ατομικά τροχιακά f:



Αντιστοιχούν σε $l=3$



Κβαντομηχανική προσέγγιση του ατόμου (38/38)

2 Κβαντομηχανική προσέγγιση του ατόμου

ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΑ ΜΕΛΕΤΗΣ

Μετά από προσεκτική μελέτη αυτού του κεφαλαίου, θα πρέπει να γνωρίζετε:

- ✓ Ποια είναι τα βασικά σημεία της κβαντικής θεωρίας και ποια η ανάγκη εισαγωγής της στην περιγραφή της ατομικής δόμησης
- ✓ Ποιος είναι ο ρόλος των ατομικών φασμάτων στην πορεία περιγραφής του ατόμου
- ✓ Ποια είναι τα βήματα που οδήγησαν στη σημερινή εικόνα για τη δομή του ατόμου
- ✓ Πως περιγράφεται η κίνηση των ηλεκτρονίων γύρω από τον πυρήνα
- ✓ Ποιοι είναι οι τέσσερις κβαντικοί αριθμοί και τι εκφράζουν
- ✓ Τι είναι τα ατομικά τροχιακά



Τέλος Ενότητας



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
ανάπτυξη στην κοινωνία της γνώσης

ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



Σημείωμα Αναφοράς

- Copyright Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Μαρνέλλος Γεώργιος. «Χημεία». Έκδοση: 1.0. Κοζάνη 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: [https:// eclass.uowm.gr/courses/MECH100/](https://eclass.uowm.gr/courses/MECH100/)



Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά, Όχι Παράγωγα Έργα Μη Εμπορική Χρήση 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

Ως Μη Εμπορική ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό



Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων

Το Έργο αυτό κάνει χρήση των ακόλουθων έργων:

Εικόνες/Σχήματα/Διαγράμματα/Φωτογραφίες

- Γενική Χημεία. Θεωρία & Εφαρμογές, Μ.Ι. Κονσολάκης, Εκδόσεις ΑΕΝΑΟΣ, 2008



Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
- το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)

μαζί με τους συνοδευόμενους
υπερσυνδέσμους.

