

Το άτομο του Υδρογόνου- Υδρογονοειδή άτομα

Το πιο απλό κβαντομηχανικό ρεαλιστικό σύστημα, το οποίο λύνεται ακριβώς, είναι το άτομο του Υδρογόνου (1 πρωτόνιο και 1 ηλεκτρόνιο). Το δυναμικό στην περίπτωση αυτή οφείλεται στην έλξη πυρήνα-ηλεκτρονίου και είναι δυναμικό Coulomb:

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{ke^2}{r} \quad (1)$$

όπου r είναι η απόσταση ηλεκτρονίου πυρήνα (ο πυρήνας λαμβάνεται ως αρχή των αξόνων). Το κατάλληλο σύστημα συνετεταγμένων για τη μελέτη του προβλήματος αυτού, είναι το σφαιρικό: $\mathbf{r}=(r,\theta,\phi)$ (η εξ. Schrodinger χωρίζεται στο σύστημα αυτό, ενώ δεν χωρίζεται στο καρτεσιανό). Λύνοντας την εξ. Schrodinger για το άτομο του Υδρογόνου βρίσκουμε τις κυματοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν στις επιτρεπτές καταστάσεις του ηλεκτρονίου στο σύστημα,

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = R_n(r)\Theta_{l,m_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi), \quad (2)$$

καθώς και τις επιτρεπτές ενέργειες,

$$E_n = -\frac{k^2me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13.6}{n^2} \text{eV} \quad \text{με} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{mke^2} \approx 0.5A \quad (3)$$

Όπως φαίνεται από την (2) σε τρισδιάστατα προβλήματα, όπως στο άτομο του υδρογόνου, οι καταστάσεις του συστήματος χαρακτηρίζονται από τρεις κβαντικούς αριθμούς (ένας για κάθε βαθμό ελευθερίας). Ο καθένας από τους αριθμούς αυτούς συνδέεται άμεσα με μία φυσική ποσότητα και εκφράζει την κβάντωση της ποσότητας αυτής. Παρακάτω αναφέρουμε τους κβαντικούς αριθμούς, τα όριά τους και την ποσότητα με την κβάντωση της οποίας συνδέονται.

Κβαντικός αριθμός	Όνομα	Συνδέεται με	Όρια
n	κύριος κβαντικός αριθμός	Ενέργεια, μέσω της σχέσης $E_n = -\frac{k^2me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13.6}{n^2} \text{eV}$	1,2,3,...
l	τροχιακός ή αζιμουθιακός ή της στροφορμής	Μέτρο στροφορμής, μέσω της $L = \mathbf{L} = \sqrt{l(l+1)}\hbar$	0,1,2,...,n-1
m_l	μαγνητικός	z-συνιστώσα στροφορμής, μέσω της $L_z = m_l\hbar$	-1,-1+1,...,1-1,1



Όπως φαίνεται από την (3) η ενέργεια του σωματιδίου εξαρτάται μόνο από τον κύριο κβαντικό αριθμό, δηλαδή καταστάσεις με το ίδιο n αλλά διαφορετικά l και m_l αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια (εκφυλισμός). Η θεμελιώδης στάθμη αντιστοιχεί σε $n=1$ και ενέργεια -13.6 eV .

Αν αντί για άτομο Υδρογόνου είχαμε υδρογονοειδές ιόν ατομικού αριθμού Z (Z πρωτόνια και ένα μόνο ηλεκτρόνιο), οι παραπάνω τύποι θα είχαν την ίδια μορφή, με $e^2 \rightarrow Ze^2$.

Κεντρικά δυναμικά και κβάντωση στροφορμής: Οι σχέσεις

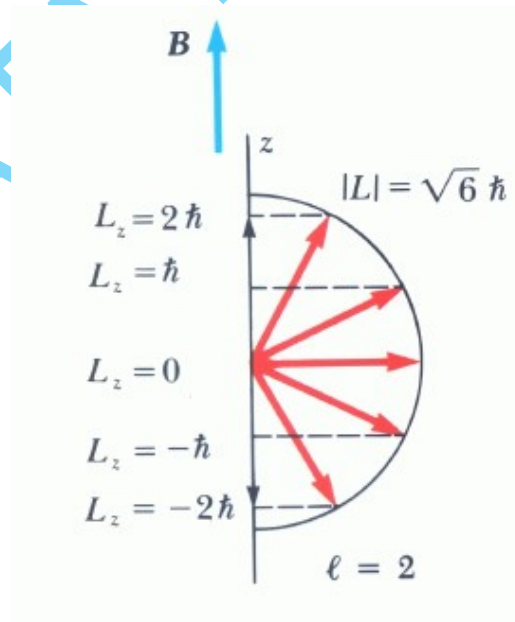
$$L = |\mathbf{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad \text{και} \quad L_z = m_l\hbar \quad (4)$$

είναι οι συνθήκες κβάντωσης της στροφορμής και ισχύουν για κάθε κεντρικό δυναμικό, $V(\mathbf{r})=V(r)$ (δύναμη στην κατεύθυνση του διανύσματος θέσης). Από τις (4) φαίνεται ότι η γωνία που σχηματίζει το διάνυσμα της στροφορμής με τον άξονα z μπορεί να πάρει μόνο ορισμένες τιμές (είναι κβαντισμένη), τις

$$\cos\theta = \frac{L_z}{L} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

Το φαινόμενο αυτό λέγεται **κβάντωση του προσανατολισμού ή της κατεύθυνσης ή του χώρου**.

Επιπλέον, η σχέση αβεβαιότητας δεν επιτρέπει το διάνυσμα της στροφορμής να είναι απόλυτα καθορισμένο. Μπορούμε να ξέρουμε το μέτρο του και το πολύ μία συνιστώσα του.



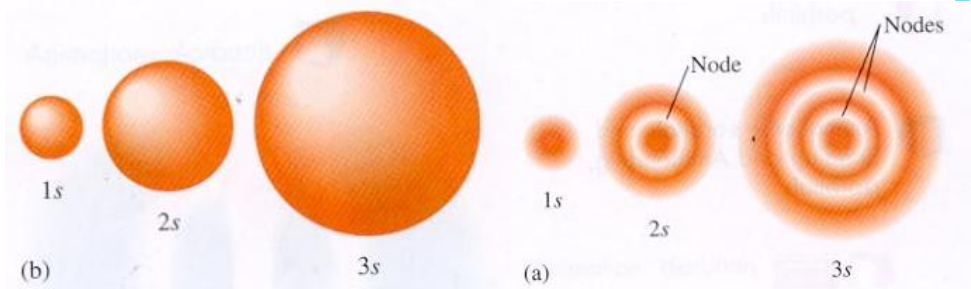
Σχ. 1: Η κβάντωση του προσανατολισμού για τροχιακό αριθμό $l=2$.



Κυματοσυναρτήσεις του Η: Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης του ατόμου του Η, ψ_{100} , είναι σφαιρικά συμμετρική (όπως και όλες οι καταστάσεις με $l=0$) και έχει τη μορφή (κανονικοποιημένη)

$$\psi_{1,0,0}(\mathbf{r}) = \psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

(για υδρογονοειδή άτομα $a_0 \rightarrow a_0/Z$). Η μορφή της κυματοσυνάρτησης ψ_{100} στο χώρο δείχνεται στο Σχ. 2 (δείτε την 1s)

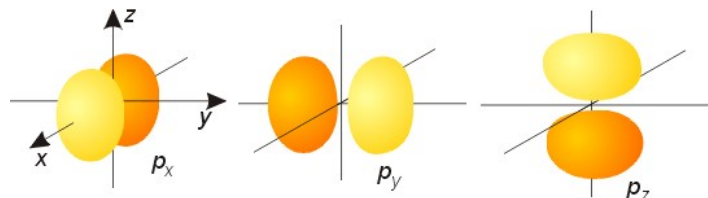


Σχ. 2: Η μορφή στο χώρο των κυματοσυναρτήσεων ψ_{100} (1s), ψ_{200} (2s) και ψ_{300} (3s).

Εν γένει, αντί να χρησιμοποιούμε στους υπολογισμούς (π.χ. μέσω τιμών θέσης) την πυκνότητα πιθανότητας $|\psi(r)|^2$ και να υπολογίζουμε τριδιάστατα ολοκληρώματα, είναι χρήσιμο να εισάγουμε την ακτινική πυκνότητα πιθανότητας, $P(r) = 4\pi r^2 |\psi(r)|^2$ (για σφαιρικά συμμετρικές κυματοσυναρτήσεις), όπου $P(r)dr$ είναι η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στο σφαιρικό φλοιό μεταξύ r και $r+dr$ ($\int_0^\infty P(r)dr = 1$).

Χρησιμοποιώντας την $P(r)$ μπορούμε να χειριστούμε τα προβλήματα εύρεσης μέσω των τιμών ως μονοδιάστατα.

Οι καταστάσεις με $l > 0$ είναι καταστάσεις με γωνιακή εξάρτηση. Η γωνιακή αυτή εξάρτηση δεν οφείλεται στην επίδραση του δυναμικού (αφού αυτό είναι σφαιρικά συμμετρικό), και άρα είναι η ίδια για κάθε σφαιρικά συμμετρικό δυναμικό. Συνεπώς για να βρούμε τη γωνιακή εξάρτηση των κυματοσυναρτήσεων μπορούμε να διαλέξουμε το δυναμικό ώστε η εξ. Schrodinger να οδηγεί στην πολύ πιο απλή εξίσωση $\text{grad}^2 = 0$, την οποία να λύσουμε σε καρτεσιανές συντεταγμένες. Οι λύσεις με την πιο απλή γωνιακή εξάρτηση (εκτός τις σφαιρικά συμμετρικές) είναι οι συναρτήσεις $x=r \sin\theta \cos\phi$, $y=r \sin\theta \sin\phi$, $z=r \cos\theta$. Αυτή η γωνιακή εξάρτηση αντιστοιχεί στις καταστάσεις με $l=1$. Η μορφή τους στο χώρο δείχνεται στο Σχ. 3.



Σχ. 3: Η μορφή στο χώρο των κυματοσυναρτήσεων με $l=1$. Οι p_x και p_y είναι γραμμικοί συνδυασμοί των καταστάσεων με $m=1$ και -1 , και η p_z αντιστοιχεί σε $m=0$.



Φασματοσκοπικός συμβολισμός κυματοσυναρτήσεων: Για το συμβολισμό των κυματοσυναρτήσεων οι φασματοσκόποι χρησιμοποιούν τον κύριο κβαντικό αριθμό (n) και ένα γράμμα, που αντιστοιχεί σε κάθε τιμή του τροχιακού κβαντικού αριθμού l . Η αντιστοιχία δείχνεται στον παρακάτω πίνακα. Επίσης δείχνεται και η γωνιακή εξάρτηση της σχετικής κυματοσυνάρτησης (η γωνιακή εξάρτηση της κυματοσυνάρτησης καθορίζεται από την τιμή του l). Οι καταστάσεις σταθερού n , l , m_l χαρακτηρίζονται ως **ατομικά τροχιακά**.

l	Μορφή
$l=0 \rightarrow s$ (sharp) $l=1 \rightarrow p$ (principal) $l=2 \rightarrow d$ (diffuse) $l=3 \rightarrow f$ (fundamental)	

Παραδείγματα συμβολισμού: $\psi_{1,0,0} \rightarrow 1s$, $\psi_{3,2,1} \rightarrow 3d$.

Τα ηλεκτρόνια τείνουν να μεταβαίνουν από μια κατάσταση υψηλής ενέργειας σε μια χαμηλότερη εκπέμποντας φωτόνια. Οι μεταβάσεις αυτές όμως δεν είναι αυθαίρετες αλλά υπακούουν σε κάποιους κανόνες επιλογής. Για να είναι επιτρεπτή μια μετάβαση θα πρέπει οι καταστάσεις μεταξύ των οποίων γίνεται να έχουν

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_l = 0, \pm 1 \quad (5)$$

Αυτό οφείλεται στην αρχή διατήρησης της στροφορμής (σημειώστε ότι το φωτόνιο φέρει μία μονάδα στροφορμής).

Άτομο σε μαγνητικό πεδίο - Spin

Όπως είδαμε πιο πάνω, οι ενεργειακές καταστάσεις του ατόμου του H και των υδρογονειδών εξαρτώνται μόνο από τον κύριο κβαντικό αριθμό n . Καταστάσεις με το ίδιο n και διαφορετικά l και m αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια (εκφυλισμός). Το φαινόμενο αυτό του εκφυλισμού αίρεται μερικώς όταν το άτομο βρεθεί μέσα σε μαγνητικό πεδίο, \mathbf{B} . Γιατί; Το γεγονός ότι το ηλεκτρόνιο κινείται "γύρω" από τον πυρήνα έχει ως αποτέλεσμα την ύπαρξη στροφορμής και άρα μαγνητικής ροπής,



$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m} \mathbf{L}, \quad (6)$$

δηλαδή το ηλεκτρόνιο συμπεριφέρεται σαν μαγνητάκι, αλληλεπιδρώντας με εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Η δυναμική ενέργεια της αλληλεπίδρασης αυτής, για μαγνητικό πεδίο προσανατολισμένο κατά τον z-αξόνα, είναι

$$U = -\boldsymbol{\mu} \mathbf{B} = -\mu_z B = -\frac{e\hbar}{2m} B m_l \quad (7)$$

Η ενέργεια αυτή προστίθεται στην ενέργεια των "αδιατάρακτων" καταστάσεων του ηλεκτρονίου στο άτομο. Άρα καταστάσεις με διαφορετικό m_l αποκτούν διαφορετική ενέργεια. Το φαινόμενο αυτό της άρσης του εκφυλισμού μέσα σε μαγνητικό πεδίο λέγεται **φαινόμενο Zeeman**.

Από την (6) συνεπάγεται $\mu = -\frac{e\hbar}{2m} \sqrt{l(l+1)}$ (άρα $\mu_z = -\frac{e\hbar}{2m} m_l$, το οποίο χρησιμοποιήθηκε στην (7)), δηλαδή η μαγνητική ροπή είναι πολλαπλάσιο της ποσότητας

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}, \text{ που λέγεται μαγνητόνη του Bohr και έχει τιμή } 9,27 \times 10^{-24} \text{ J/T.}$$

Σημειώστε ότι η κβάντωση και η αρχή της αβεβαιότητας της στροφορμής μεταφέρονται και στη μαγνητική ροπή. Η μαγνητική ροπή δεν μπορεί να είναι απόλυτα ευθυγραμμισμένη με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, ούτε μπορεί να είναι πλήρως καθορισμένη ως διάνυσμα. Αποδεικνύεται ότι το μ για μια ορισμένη τιμή του κβαντικού αριθμού l εκτελεί μεταπτωτική κίνηση γύρω από τον άξονα του μαγνητικού πεδίου.

Spin: Εκτός από τη στροφορμή λόγω της περιφοράς του γύρω από τον πυρήνα (τροχιακή στροφορμή), το ηλεκτρόνιο, όπως και κάθε άλλο κβαντομηχανικό σωματίδιο, φέρει και μία "εσωτερική" στροφορμή (ιδιοστροφορμή). Η στροφορμή αυτή λέγεται spin και ο πιο ευκολος τρόπος για να την κατανοήσει κανείς είναι να την αποδώσει σε ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου (παρόλο που αυτό δεν είναι ακριβώς σωστό).

Στο spin, όπως και στην τροχιακή στροφορμή, αντιστοιχούν επίσης δύο κβαντικοί αριθμοί, s και m_s . Ο s λέγεται **κβαντικός αριθμός του spin**, για το ηλεκτρόνιο έχει πάντα την τιμή $1/2$, και σχετίζεται με το μέτρο του spin σύμφωνα με τη σχέση

$$S = |\mathbf{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar = (\sqrt{3}/2) \hbar$$

Ο m_s (ανάλογα με τον m_l) σχετίζεται με την προβολή του spin κατά τον άξονα z:

$$S_z = m_s \hbar.$$

Ο m_s παίρνει τιμές στο διάστημα $[-s, s]$ (με βήμα 1), άρα για το ηλεκτρόνιο οι δυνατές τιμές του είναι $-1/2$ και $1/2$. Σημειώστε ότι ισχύει κι εδώ η ίδια αρχή αβεβαιότητας και κβάντωση του προσανατολισμού που ισχύει και για την τροχιακή στροφορμή (βλ. Σχ. 3).



Συνέπεια της στροφορμής σπιν είναι η ύπαξη μιας επιπλέον μαγνητικής ροπής για το ηλεκτρόνιο, μ_s (μαγνητική ροπή σπιν), που δίδεται από

$$\mu_s = -\frac{e}{m} \mathbf{S} = -\frac{e\hbar}{m} \sqrt{s(s+1)}$$

Η ύπαρξη του σπιν πρωτοδιαπιστώθηκε το 1921, στο πείραμα των Stern-Gerlach, στο οποίο δέσμη ατόμων Ag σε ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο χωρίστηκε σε συνιστώσες διαφορετικές από αυτές που προέβλεπε η κλασική φυσική και η γνωστή τότε κβαντομηχανική, και αποδείχθηκε οριστικά το 1927, με την επανάληψη του ίδιου πειράματος από τους Rhipps και Taylor, με χρήση ατόμων υδρογόνου. (Η δύναμη στη δέσμη των ατόμων H θα δίδεται από (δείτε την (7))

$$\mathbf{F} = -\nabla U = \nabla(\mu_s \mathbf{B}) = \mu_{sz} (\partial B_z / \partial z) \hat{z} (m_l=0).$$

Απαγορευτική αρχή του Pauli: Το ηλεκτρόνιο, όπως και το πρωτόνιο και όλα τα σωματίδια που ανήκουν στα δομικά συστατικά της ύλης, έχει σπιν ημιακέραιο. Τα σωματίδια με σπιν ημιακέραιο ονομάζονται με μια λέξη **φερμιόνια**. Για τα σωματίδια αυτά ισχύει μια πολύ βασική για τη δομή του κόσμου μας αρχή, η απαγορευτική αρχή του Pauli, η οποία λέει ότι *στο ίδιο άτομο δεν είναι δυνατόν να υπάρξουν δύο όμοια φερμιόνια στην ίδια ακριβώς κατάσταση, δηλαδή με όλους τους κβαντικούς αριθμούς ίδιους*. Η αρχή αυτή δεν ισχύει για τα σωματίδια με σπιν ακέραιο, τα οποία είναι γνωστά ως **μποζόνια**. Μποζόνια είναι όλα τα σωματίδια που είναι φορείς δυνάμεων, όπως π.χ. το φωτόνιο, ο φορέας της ηλεκτρομαγνητικής δύναμης, που έχει σπιν 1.

Πολυηλεκτρονικά άτομα - Περιοδικός πίνακας

Η πιο πάνω απαγορευτική αρχή του Pauli αποτελεί τη βάση για την κατανόηση της ατομικής δομής και των χημικών και φυσικών ιδιοτήτων των στοιχείων. Λόγω της αρχής αυτής σε κάθε ηλεκτρονική κατάσταση ατόμου καθορισμένων n, l, m_l μπορούν να υπάρξουν μόνο δύο ηλεκτρόνια, ένα με $m_s=1/2$ και ένα με $m_s=-1/2$. Έτσι, η στάθμη 1s χωράει δύο ηλεκτρόνια, η 2s 2 e, η 2p 6 e (δύο σε κάθε υποστάθμη καθορισμένου n, l, m_l) κοκ.

Όπως είπαμε πιο πάνω, στο άτομο του Υδρογόνου και στα υδρογονοειδή η ενέργεια κάθε κατάστασης εξαρτάται μόνο από τον κύριο κβαντικό αριθμό, n . Τί γίνεται τώρα αν σε ένα άτομο υπάρχουν περισσότερα από ένα ηλεκτρόνια; Τότε εκτός από την έλξη μεταξύ ηλεκτρονίων-πυρήνα υπεισέρχονται στο πρόβλημα και οι ηλεκτροστατικές απώσεις των ηλεκτρονίων. Ένας τρόπος να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα είναι να σκεφτούμε ότι τα ηλεκτρόνια δεν βρίσκονται όλα στην ίδια "απόσταση" από τον πυρήνα. Τα ηλεκτρόνια μικρότερου n βρίσκονται κατά μέσο όρο κοντύτερα στον πυρήνα από ό,τι αυτά με μεγαλύτερο n . Έτσι, στα πιο εξωτερικά ηλεκτρόνια ο πυρήνας δεν θα εμφανίζεται γυμνός αλλά καλυμμένος (θωρακισμένος) από το νέφος των εσωτερικών ηλεκτρονίων. Άρα μια καλή προσέγγιση στο πρόβλημα είναι να θεωρήσουμε ότι τα εξωτερικά ηλεκτρόνια του ατόμου έλκονται από έναν πυρήνα που φέρει "ενεργό φορτίο" Z_{eff} , όπου Z_{eff} είναι το φορτίο του πυρήνα (Z) θωρακισμένο από το νέφος των εσωτερικότερων ηλεκτρονίων.

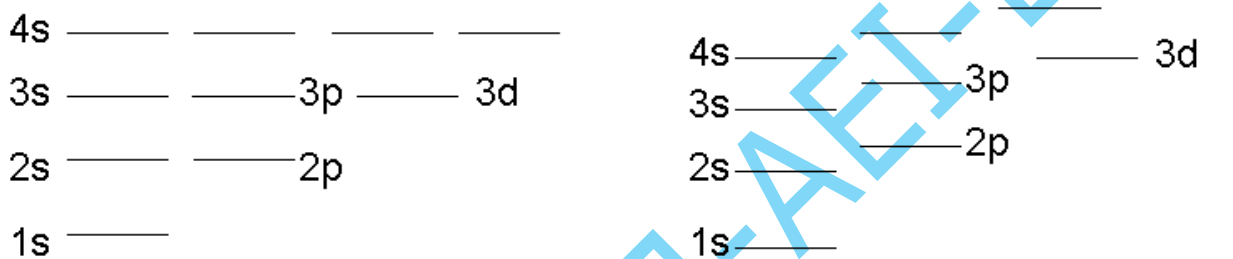


Στην περίπτωση αυτή το έργο ιονισμού του ατόμου (που ισούται με το αντίθετο της ενέργειας της τελευταίας κατειλημμένης στάθμης) θα δίνεται από

$$W = \frac{Z_{eff}^2 k^2 m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = Z_{eff}^2 \frac{13.6}{n^2} eV$$

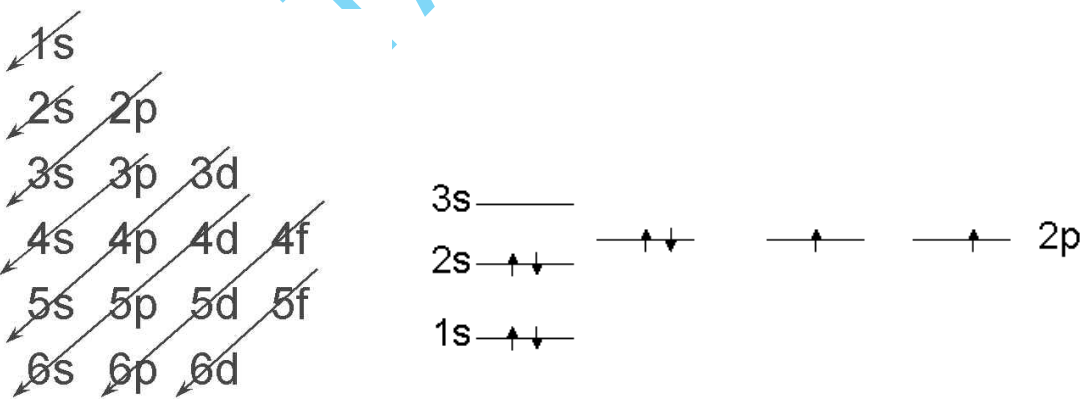
όπου το n είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός της τελευταίας κατειλημμένης στάθμης.

Το πιο δραματικό αποτέλεσμα της θωράκισης του πυρήνα από τα ηλεκτρόνια είναι το ότι οι ενέργειες των σταθμών των πολυηλεκτρονικών ατόμων δεν εξαρτώνται πλέον μόνο από τον κύριο κβαντικό αριθμό αλλά και από τον τροχιακό, l . Οι στάθμες με $l=1$ έχουν υψηλότερη ενέργεια από αυτές με $l=0$, οι $l=2$ ακόμα υψηλότερη κ.ο.κ. Το φαινόμενο αυτό δείχνεται στο Σχ. 4.



Σχ. 4: Οι ενεργειακές στάθμες υδρογονοειδούς (αριστερά) και πολυηλεκτρονικού ατόμου (δεξιά).

Η ανύψωση των σταθμών αυξανόμενου l στα πολυηλεκτρονικά άτομα έχει ως αποτέλεσμα στάθμες μεγαλύτερου n να βρίσκονται πολλές φορές χαμηλότερα ενεργειακά από στάθμες μικρότερου n με μεγαλύτερο μέτρο στροφορμής. Ένας εύκολος μνημονικός κανόνας για να θυμάται κάποιος την ιεραρχία στην ενέργεια των σταθμών και άρα τον τρόπο συμπλήρωσής τους δείχνεται στο Σχ. 5. Επίσης δείχνεται και ο τρόπος συμπλήρωσης των σταθμών για το άτομο του Ο ($Z=8$).



Σχ. 5: Αριστερά: Η σειρά με την οποία συμπληρώνονται οι στάθμες των πολυηλεκτρονικών ατόμων (ακολουθήστε τα βέλη). Δεξιά: Ο τρόπος συμπλήρωσης των σταθμών του ατόμου του Οξυγόνου. Τα βελάκια δείχνουν ηλεκτρόνια με σπιν πάνω και κάτω.



Η συμπλήρωση των υποστοιβάδων της ίδιας ενέργειας (καθορισμένου n και l) γίνεται ακολουθώντας τον κανόνα του Hund, σύμφωνα με τον οποίο οι υποστοιβάδες της ίδιας ενέργειας συμπληρώνονται έτσι ώστε να μεγιστοποιείται ο αριθμός των καταστάσεων που έχουν το ίδιο σπιν. Ένα παράδειγμα δείχνεται το δεξιό από τα Σχήματα 5.

Έχοντας τοποθετήσει τα ηλεκτρόνια του ατόμου στις κατάλληλες στάθμες, μπορεί κανείς να γράψει την **ηλεκτρονική διάταξη** του ατόμου, χρησιμοποιώντας τον φασματοσκοπικό συμβολισμό, ως [φασματοσκοπικός συμβολισμός στάθμης]^[αριθμός ηλεκτρονίων]. Π.χ. η ηλεκτρονική διάταξη του Οξυγόνου (Σχ. 4) γράφεται $1s^2 2s^2 2p^4$.

Η χημική συμπεριφορά και η σταθερότητα των ατόμων εξαρτώνται κυρίως από τα ηλεκτρόνια της τελευταίας κατειλημμένης στάθμης τους και από το πόσο εύκολα μπορούν αυτά να μεταπηδήσουν σε άλλη στάθμη ή σε άλλο άτομο και να φτιάξουν χημικό δεσμό (είναι τα λιγότερο δέσμια ηλεκτρόνια). Οι σημαντικότερες παράμετροι οι οποίοι ρυθμίζουν τη συμπεριφορά των ηλεκτρονίων αυτών και άρα τη χημική συμπεριφορά του ατόμου είναι

1) Ο βαθμός κατάληψης της τελευταίας κατειλημμένης στάθμης.

2) Η απόστασή της από την αμέσως απόμενη μη κατειλημμένη στάθμη.

Τα πιο σταθερά άτομα είναι αυτά που η τελευταία στάθμη τους είναι πλήρως κατειλημμένη, με μεγάλη απόσταση από την επόμενη, κενή στάθμη.

Το **περιοδικό σύστημα** των στοιχείων (βλ. Σχ. 6) είναι μια κατάταξη των στοιχείων ανάλογα με τις χημικές τους ιδιότητες. Τα στοιχεία που βρίσκονται στην ίδια γραμμή έχουν συμπληρωμένο τον ίδιο φλοιό (ή υποφλοιό) ενώ τα στοιχεία που βρίσκονται στην ίδια στήλη έχουν τον ίδιο βαθμό κατάληψης της τελευταίας στάθμης και άρα παραπλήσιες χημικές ιδιότητες.



		s										p												
												17		18										
												VIIA		VIIIA										
												H						He						
												$1s^1$						$1s^2$						
		s										p												
1												13		14		15		16		17		18		
IA												IIIA		IVA		VA		VIA		VIIA		VIIIA		
1	H											B		C		N		O		F		Ne		
	$1s^1$											$2p^1$		$2p^2$		$2p^3$		$2p^4$		$2p^5$		$2p^6$		
2	Li	Be	d										Al		Si		P		S		Cl		Ar	
	$2s^1$	$2s^2$											$3p^1$		$3p^2$		$3p^3$		$3p^4$		$3p^5$		$3p^6$	
3	Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Ga		Ge		As		Se		Br		Kr	
	$3s^1$	$3s^2$	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB			IB	IIB	$4p^1$		$4p^2$		$4p^3$		$4p^4$		$4p^5$		$4p^6$	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	In		Sn		Sb		Te		I		Xe	
	$4s^1$	$4s^2$	$3d^1$	$3d^2$	$3d^3$	$3d^4$	$3d^5$	$3d^6$	$3d^7$	$3d^8$	$3d^9$	$3d^{10}$	$5p^1$		$5p^2$		$5p^3$		$5p^4$		$5p^5$		$5p^6$	
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	Tl		Pb		Bi		Po		At		Rn	
	$5s^1$	$5s^2$	$4d^1$	$4d^2$	$4d^3$	$4d^4$	$4d^5$	$4d^6$	$4d^7$	$4d^8$	$4d^9$	$4d^{10}$	$6p^1$		$6p^2$		$6p^3$		$6p^4$		$6p^5$		$6p^6$	
6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl		Pb		Bi		Po		At		Rn	
	$6s^1$	$6s^2$		$5d^2$	$5d^3$	$5d^4$	$5d^5$	$5d^6$	$5d^7$	$5d^9$	$5d^{10}$	$5d^{10}$	$6p^1$		$6p^2$		$6p^3$		$6p^4$		$6p^5$		$6p^6$	
7	Fr	Ra	†	Unq	Unp	Unh	Uns	Uno	Une															
	$7s^1$	$7s^2$		$6d^2$	$6d^3$	$6d^4$	$6d^5$	$6d^6$	$6d^7$															
			f																					
*Lanthanide series			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu							
			$5d^1$	$4f^2$	$4f^3$	$4f^4$	$4f^5$	$4f^6$	$4f^7$	$4f^7$	$4f^9$	$4f^{10}$	$4f^{11}$	$4f^{12}$	$4f^{13}$	$4f^{14}$	$4f^{14}$							
†Actinide series			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr							
			$6d^1$	$6d^2$	$5f^2$	$5f^3$	$5f^4$	$5f^6$	$5f^7$	$5f^7$	$5f^8$	$5f^{10}$	$5f^{11}$	$5f^{12}$	$5f^{13}$	$5f^{14}$	$5f^{14}$							

Σχ. 6: Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων.

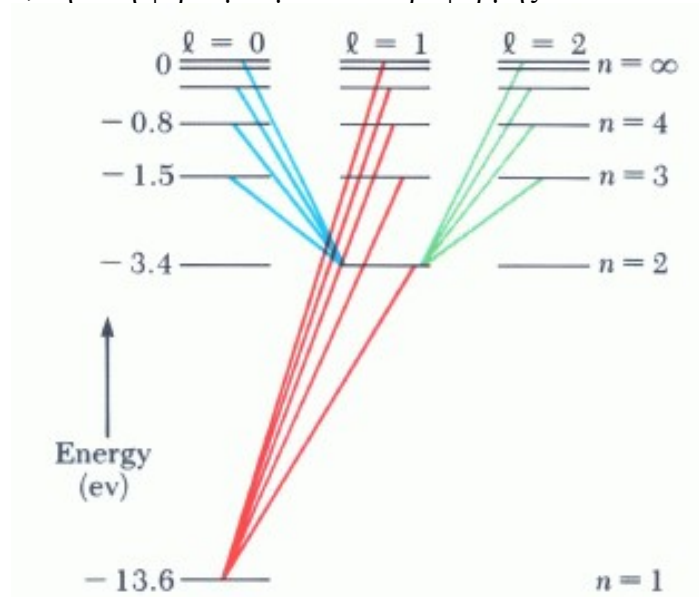
Κανόνες επιλογής

Στις συνηθισμένες θερμοκρασίες τα ηλεκτρόνια των ατόμων βρίσκονται εν γένει στη θεμελιώδη κατάσταση τους. Αν με κάποιους τρόπους (π.χ. κρούσεις) βρεθούν σε υψηλότερες ενεργειακές (διεγερμένες) καταστάσεις, τείνουν αποδιεγερθούν μεταπίπτοντας σε χαμηλότερες καταστάσεις και εκπέμποντας φωτόνια (τα οποία φέρουν το περίσυμα της ενέργειας). Οι μεταβάσεις αυτές όμως δεν μπορούν να γίνουν αυθαίρετα, αλλά υπακούουν σε κάποιους κανόνες επιλογής. Για να είναι επιτρεπτή μια μετάβαση θα πρέπει οι καταστάσεις μεταξύ των οποίων γίνεται να έχουν

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_l = 0, \pm 1.$$



Αυτό οφείλεται στην αρχή διατήρησης της στροφορμής σε συνδυασμό με το ότι το φωτόνιο έχει spin 1, δηλαδή φέρει μία μονάδα στροφορμής.



Σχ. 7: Οι διαγώνιες γραμμές δείχνουν μερικές από τις επιτρεπτές μεταβάσεις του ηλεκτρονίου του ατόμου του Υδρογόνου.

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας



Άσκηση 1

Για ηλεκτρόνιο σε άτομο του Υδρογόνου γνωρίζουμε ότι: (α) βρίσκεται σε στάσιμη κατάσταση ενέργειας $E = -1.51 \text{ eV}$ (β) η γωνία που σχηματίζει το διάνυσμα της στροφορμής με τον άξονα των z είναι 35.3°

- A) Βρείτε τους κβαντικούς αριθμούς της κατάστασης του ηλεκτρονίου.
B) Βρείτε την πλήρη κυματοσυνάρτηση $\psi(r, \theta, \phi)$ του ηλεκτρονίου.

Άσκηση 2

Για ένα ιόν Ηλίου το οποίο βρίσκεται σε στάσιμη κατάσταση γνωρίζετε τα παρακάτω στοιχεία

- (i) Η ενέργειά του είναι $E = -6.04 \text{ eV}$
(ii) Η γωνία που σχηματίζει το διάνυσμα της στροφορμής του με τον άξονα των z είναι 35.25°

- A) Να γραφεί η πλήρης κυματοσυνάρτηση του ιόντος.
B) Να υπολογιστεί ο λόγος της μέσης τιμής της απόστασης του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα ως προς την αντίστοιχη ακτίνα που προβλέπει το μοντέλο του Bohr.

Άσκηση 3

Το ηλεκτρόνιο ενός υδρογονοειδούς ιόντος βρίσκεται σε στάσιμη κατάσταση της οποίας η κυματοσυνάρτηση δίνεται από

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{C}{a_0^{5/2}} r e^{-\frac{2r}{a_0}} \sin \theta e^{i\phi}$$

όπου C μια αριθμητική σταθερά και a_0 η ακτίνα του Bohr .

- A) Ποια η ακριβής τιμή του C καθώς και για ποιο ιόν πρόκειται;
B) Ποιες από τις παρακάτω ποσότητες έχουν καθορισμένη τιμή και ποια είναι αυτή:
(i) Ενέργεια (ii) Μέτρο Στροφορμής (iii) Συνιστώσες Στροφορμής (L_x, L_y, L_z);
Γ) Υπολογίστε σε ποια απόσταση από τον πυρήνα έχει τη μεγαλύτερη πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο και συγκρίνετε με την αντίστοιχη ακτίνα που προβλέπει η θεωρία του Bohr.

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας

