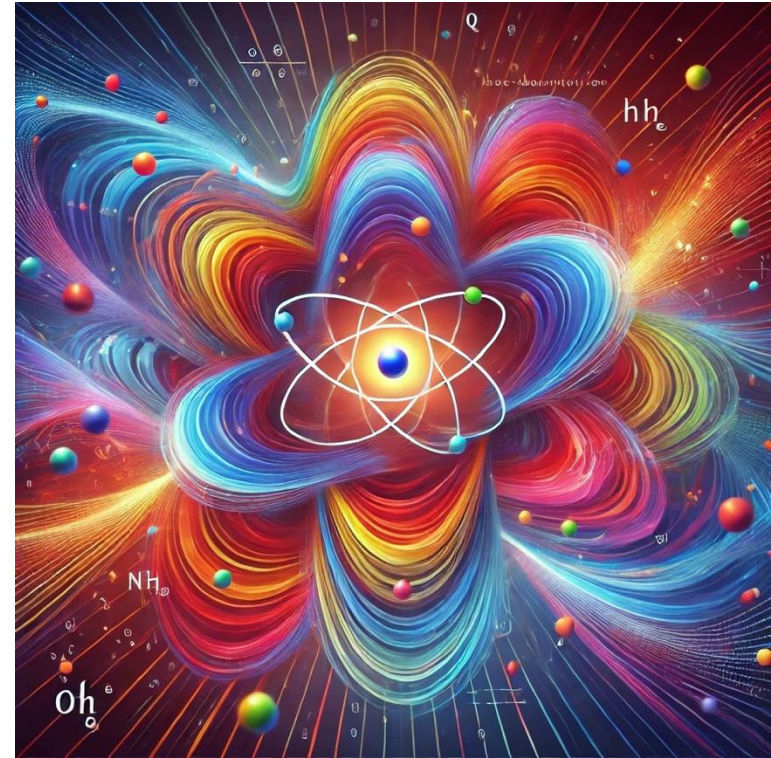


# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## ΣΚΟΠΟΣ

- Η κυματική φύση του φωτός
- Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο
- Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου
- Ατομικά φάσματα εκπομπής



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

---

## ΠΡΟΣΔΟΚΩΜΕΝΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

- Ορισμοί: μήκος κύματος, συχνότητα ενός κύματος και ταχύτητα του φωτός.
- Περιοχές ηλεκτρομαγνητικού φάσματος
- Ατομικό φάσμα του υδρογόνου
- Ορισμοί: κβάντο, φωτόνιο, κβάντωση ενέργειας και σταθερά του Planck
- Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο: περιγραφή και ερμηνεία
- Παραδοχές του Bohr για το άτομο του υδρογόνου
- Σχέση ενέργειας φωτονίου και διαφόρων επιπέδων ενέργειας ενός ατόμου
- Προσδιορισμός μήκους κύματος και συχνότητας μιας μετάπτωσης στο άτομο του υδρογόνου
- Διαφορά μεταξύ εκπομπής και απορρόφησης φωτός από ένα άτομο

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

---

## ΕΝΝΟΙΕΣ ΚΛΕΙΔΙΑ

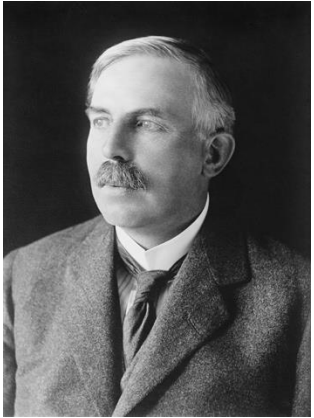
- ✓ Γραμμικό φάσμα
- ✓ Επίπεδα ενέργειας
- ✓ Ηλεκτρομαγνητικό φάσμα
- ✓ Μήκος κύματος ( $\lambda$ )
- ✓ Σταθερά του Planck
- ✓ Συνεχές φάσμα
- ✓ Συχνότητα ( $\nu$ )
- ✓ Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο
- ✓ Φωτόνια

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

Από την κλασική φυσική στην κβαντική θεωρία

Ernest Rutherford

1911



Πυρηνικό  
μοντέλο



Σε ένα συγκεκριμένο άτομο:

1. Πόσα ηλεκτρόνια υπάρχουν?
2. Πού μπορούν να βρεθούν?
3. Τι ενέργειες κατέχουν?

Όταν πυρώνονται μεταλλικές ενώσεις

εκπέμπουν ζωηρά χρώματα

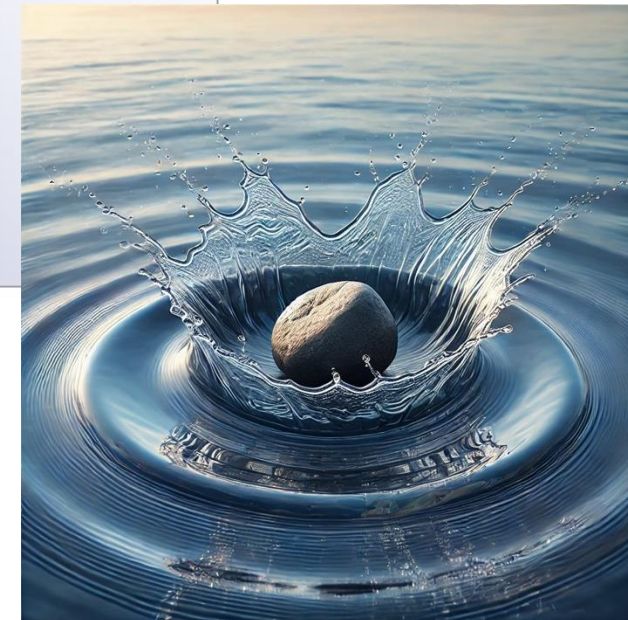
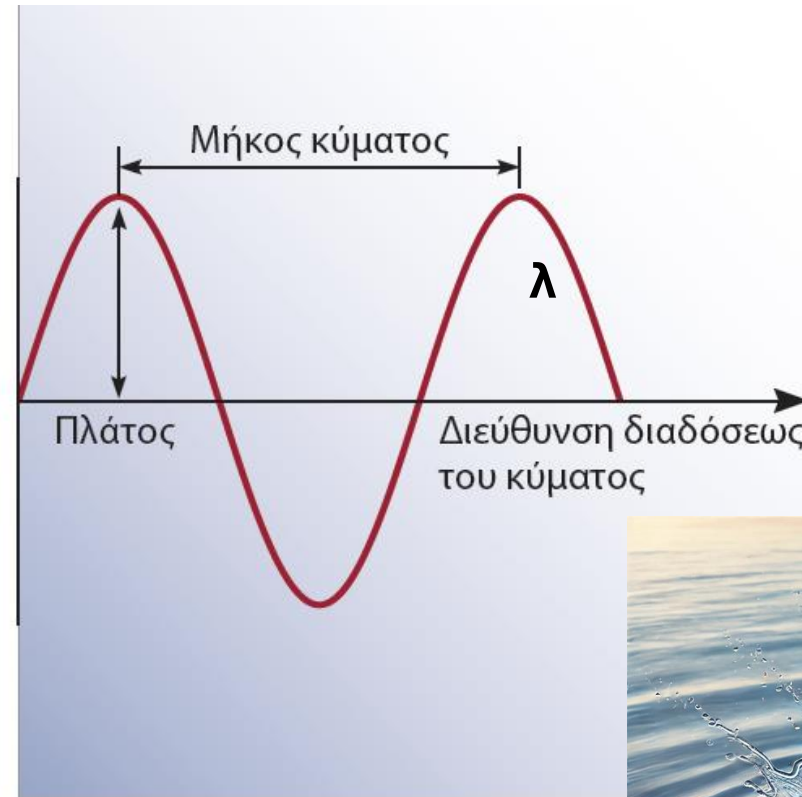


Κβαντική θεωρία του Plank

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

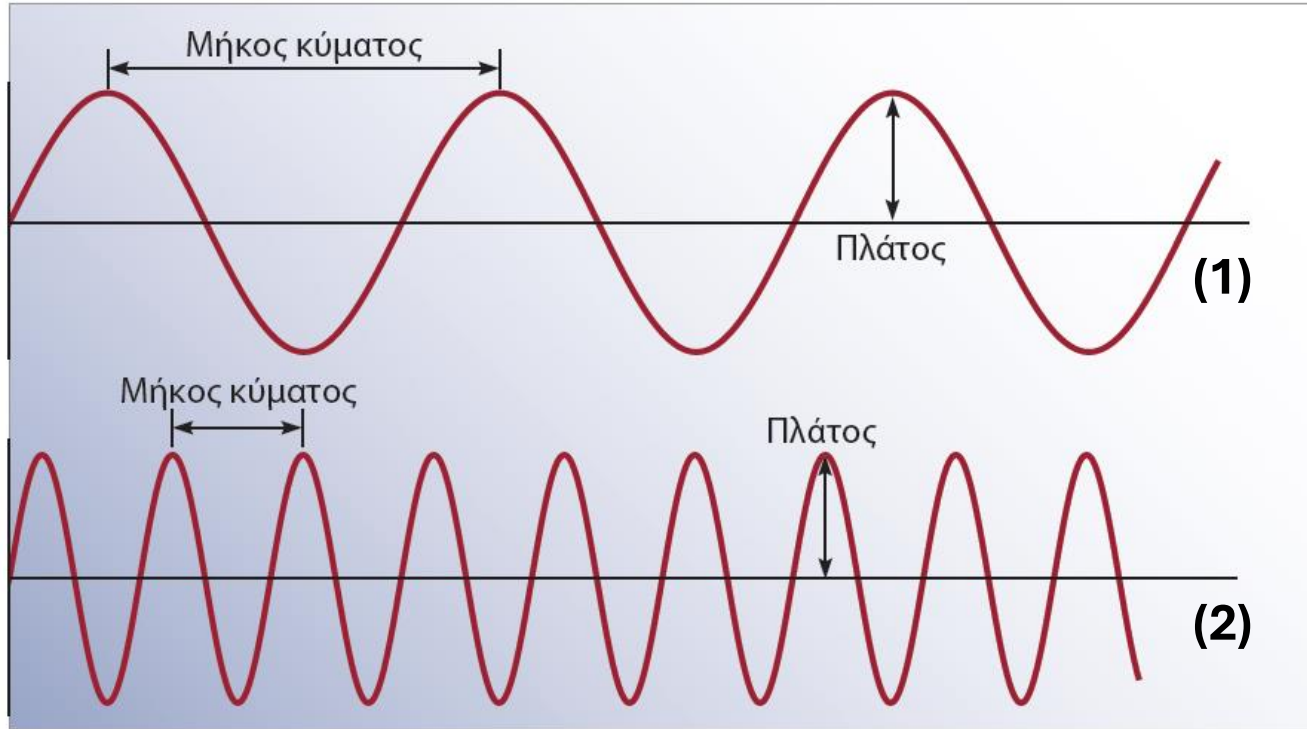
## Οι ιδιότητες των κυμάτων

- Κύμα μπορεί να θεωρηθεί μια δονητική διαταραχή με την οποία μεταδίδεται η ενέργεια
- Μήκος κύματος ( $\lambda$ ) είναι η απόσταση μεταξύ πανομοιότυπων σημείων σε διαδοχικά κύματα
- Συχνότητα ( $\nu$ ) είναι ο αριθμός των κυμάτων που διέρχονται από ένα συγκεκριμένο σημείο σε ένα δευτερόλεπτο ( $\text{Hz} = \text{s}^{-1}$ )
- Πλάτος είναι η κατακόρυφη απόσταση από τη μέση γραμμή ενός κύματος μέχρι την κορυφή ή την κατώτατη απόσταση



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Οι ιδιότητες των κυμάτων



Δυο κύματα που έχουν διαφορετικά μήκη κύματος και συχνότητες

Και τα δυο κύματα έχουν την ίδια ταχύτητα και πλάτος

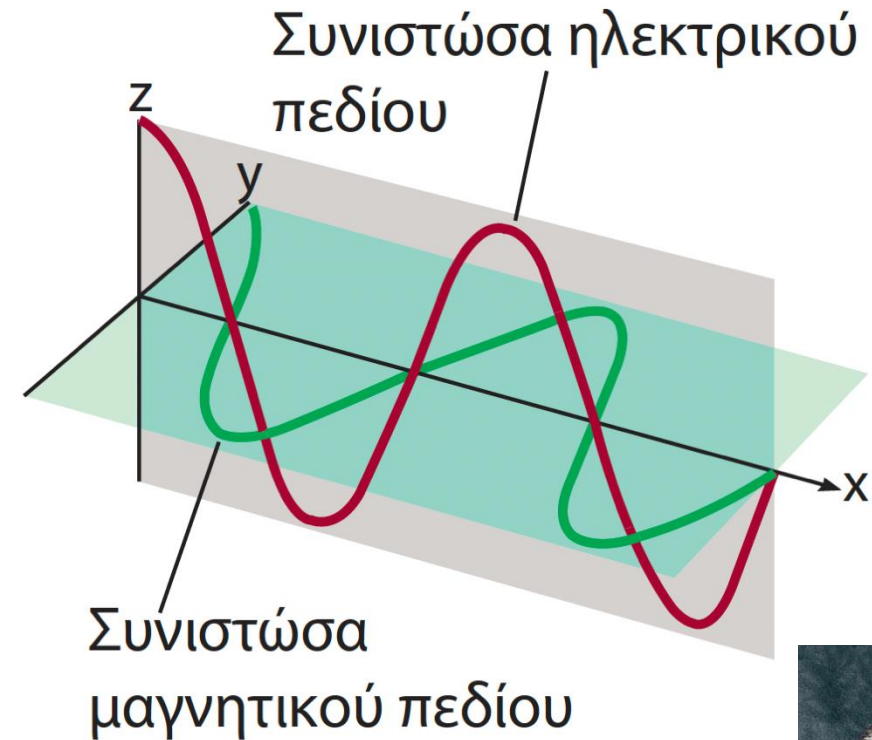
Ταχύτητα:

$$c = \nu \times \lambda$$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

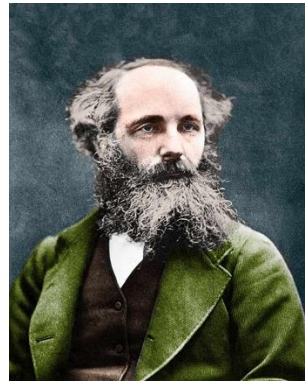
## Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία

- ορατό φως συνίσταται από ηλεκτρομαγνητικά κύματα
- ηλεκτρομαγνητικό κύμα έχει 2 συνιστώσες: μια ηλεκτρικού πεδίου και μια μαγνητικού πεδίου
- Οι δύο συνιστώσες έχουν το ίδιο μήκος κύματος, την ίδια συχνότητα και το ίδιο πλάτος
- ταλαντώνονται σε επίπεδα που είναι κάθετα τόσο μεταξύ τους, όσο και ως προς την κατεύθυνση διαδόσεως του κύματος



Ταχύτητα του φωτός στο κενό

$$c = 3,00 \times 10^8 \text{ m/s}$$



J. C. Maxwell

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία

Παράδειγμα:

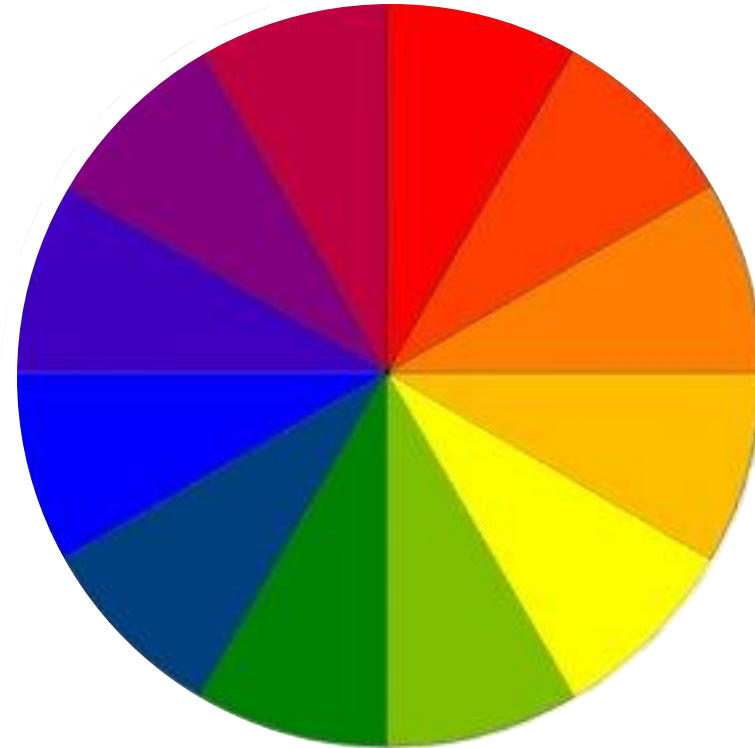
Το μήκος κύματος του πράσινου φωτός από ένα σήμα κυκλοφορίας έχει μέγιστο στα 522 nm.

Ποια είναι η συχνότητα αυτής της ακτινοβολίας;

Απάντηση:

$$c = v \times \lambda \Rightarrow v = \frac{c}{\lambda} = \frac{3,00 \times 10^8 \text{ m/s}}{522 \text{ nm}} \times \frac{1 \text{ nm}}{1 \times 10^{-9} \text{ m}}$$

$$= 5,75 \times 10^{14} \text{ s}^{-1} \text{ ή Hz}$$

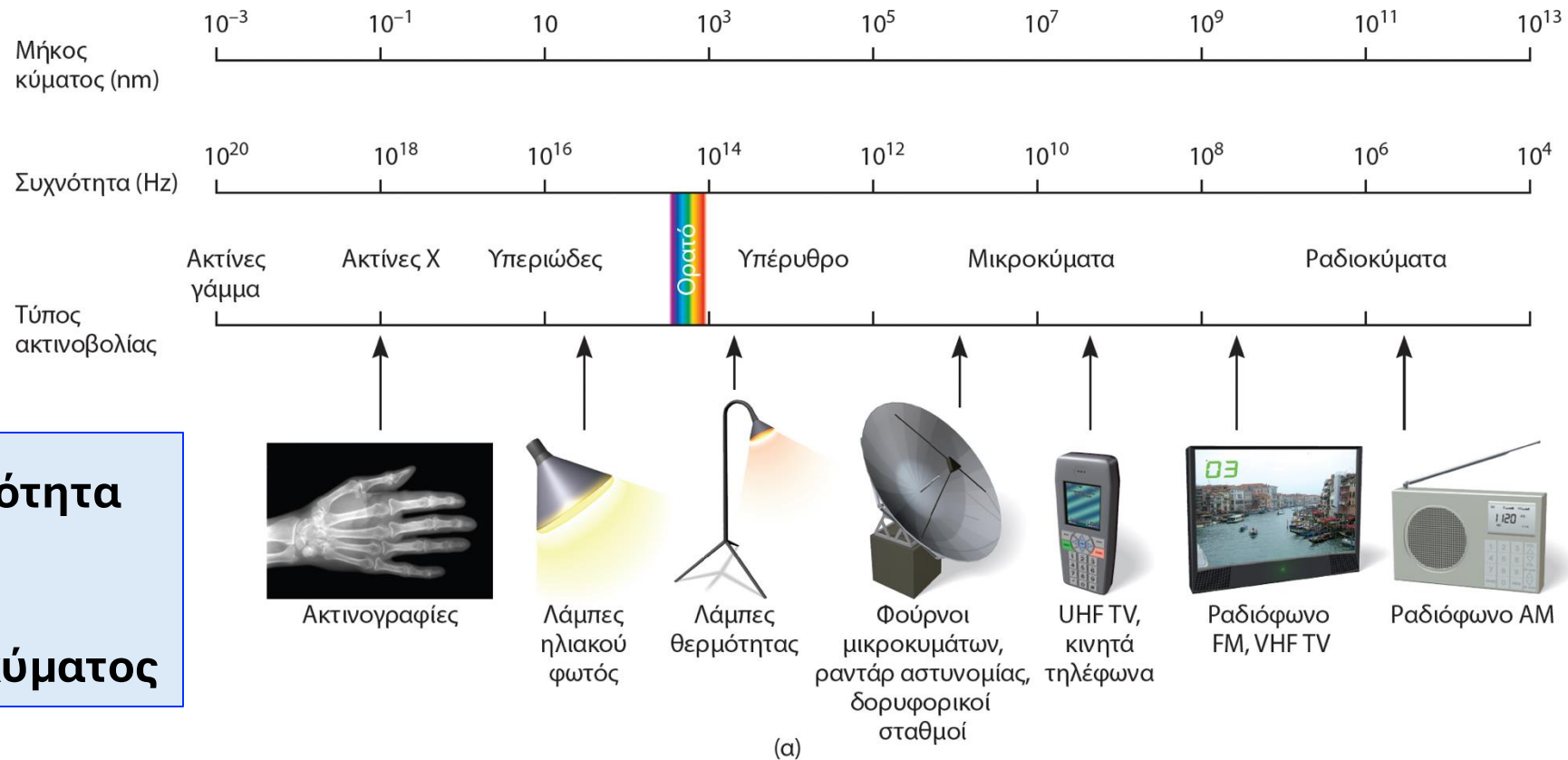




# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Ηλεκτρομαγνητικό φάσμα:

περιοχή συχνοτήτων ή μηκών κύματος της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας



Υψηλή συχνότητα



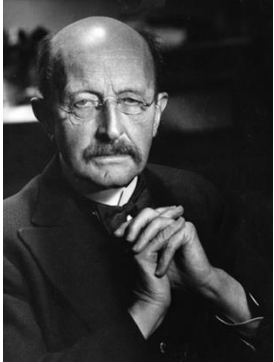
μικρό μήκος κύματος

Ορατό φως: ~400-700 nm



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η κβαντική θεωρία του Plank



Max Planck (1858-1947)

Nobel Φυσικής 1918

**MAX PLANCK**  
GESELLSCHAFT



Η ενέργεια ενός κβάντου

$$E = h\nu \text{ ή } E = h \frac{c}{\lambda}$$

Σταθερά Planck:

$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

➤ Κλασική φυσική:

Η ύλη μπορεί να απορροφά ή να εκπέμπει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία οποιασδήποτε ενέργειας

➤ Max Plank:

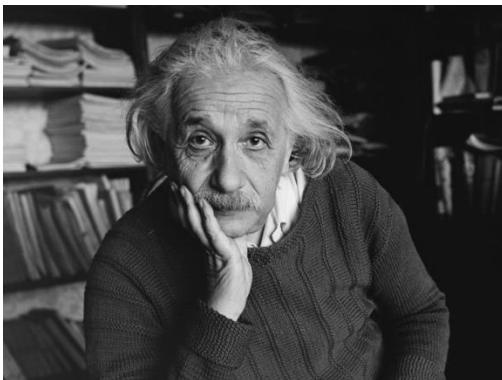
Η ηλεκτρομαγνητική ενέργεια απορροφάται ή εκπέμπεται από την ύλη, όχι κατά τρόπο συνεχή, αλλά κατά στοιχειώδεις ποσότητες ενέργειας, τα κβάντα

Η ενέργεια είναι κβαντισμένη εκπέμπεται πάντα ως ακέραιο πολλαπλάσιο του  $h\nu$  π.χ.  $h\nu, 2 h\nu, 3 h\nu...$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

- Η εκπομπή ηλεκτρονίων από μια μεταλλική επιφάνεια όταν φως ή άλλη ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία προσπίπτει σε αυτή την επιφάνεια
- Η συχνότητα του φωτός πρέπει να είναι μεγαλύτερη από συχνότητα κατωφλίου
- Συχνότητα κατωφλίου είναι η ελάχιστη συχνότητα και είναι χαρακτηριστική του μετάλλου



Albert Einstein (1879-1955)

Nobel Φυσικής 1921

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Η ερμηνεία του Einstein:

1. Το φως αποτελείται από κβάντα που ονομάζονται φωτόνια
2. Η ενέργεια ενός φωτονίου είναι:  $E = h\nu$
3. Τα ηλεκτρόνια συγκρατούνται σε ένα μέταλλο με ελκτικές δυνάμεις
4. Όταν ένα φωτόνιο προσπίπτει σε μια επιφάνεια μεταφέρει όλη του την ενέργεια σε ένα μόνο ηλεκτρόνιο
5.  $E_{\phi} < E_o \rightarrow$  το ηλεκτρόνιο διατηρεί τη θέση του
6.  $E_{\phi} = E_o$  (ενέργεια σύνδεσης)  $\rightarrow$  το ηλεκτρόνιο ελευθερώνεται  
 $h\nu = W$ ,  $W =$  έργο απόσπασης
7.  $E_{\phi} > E_o \rightarrow$  το ηλεκτρόνιο ελευθερώνεται και αποκτά και κάποια κινητική ενέργεια (KE)  
 $h\nu = W + KE$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Η ερμηνεία του Einstein:

$$h\nu = W + KE$$

- Όσο μεγαλύτερη ένταση έχει το φως τόσο μεγαλύτερος είναι και ο αριθμός των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων
- Όσο μεγαλύτερη συχνότητα έχει το φως τόσο μεγαλύτερη είναι και η κινητική ενέργεια των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων

Το φως διαθέτει τόσο σωματιδιακές όσο και κυματικές ιδιότητες

Η δυαδική φύση είναι χαρακτηριστικό ολόκληρης της ύλης

Πώς η εξίσωση  $E = h\nu$  δείχνει τη δυαδική φύση;  $E$  είναι η ενέργεια ενός σωματιδίου φωτός ή φωτονίου

$\nu$  είναι η συχνότητα του συνδεδεμένου με αυτό κύματος

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Παράδειγμα:

Υπολογίσατε την ενέργεια (σε J) ενός φωτονίου με μήκος κύματος: (α)  $5,00 \times 10^4$  nm και (β)  $5,00 \times 10^{-2}$  nm.

Απάντηση:

$$E = h \frac{c}{\lambda} = \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}) \times (3,00 \times 10^8 \text{ m/s})}{5,00 \times 10^4 \text{ nm}} \times \frac{1 \text{ nm}}{1 \times 10^{-9} \text{ m}}$$

$$= 3,98 \times 10^{-21} \text{ J} \quad (\alpha)$$

$$(\beta) 3,98 \times 10^{-15} \text{ J}$$

Πόση είναι η ενέργεια σε eV;

$$1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Παράδειγμα:

Ποιο από τα παρακάτω μέταλλα απαιτεί το μεγαλύτερο (ελάχιστο) μήκος κύματος φωτός για την απομάκρυνση ηλεκτρονίων, δεδομένου ότι έχουν τα εξής έργα απόσπασης:

Li (2,3 eV), Ca (2,9 eV), Cu (4,7 eV), Ag (4,3 eV);

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Παράδειγμα:

Το έργο εξαγωγής του Cs είναι  $3,42 \times 10^{-19} \text{ J}$ . (α) υπολογίσατε το ελάχιστο μήκος κύματος του φωτός για να εκδιωχθούν ηλεκτρόνια, (β) αν η συχνότητα του φωτός είναι  $1,00 \times 10^{15} \text{ Hz}$  υπολογίσατε την ταχύτητα ενός ηλεκτρονίου

Απάντηση:

$$(α) \quad h\nu = W + KE \Rightarrow W = h \frac{c}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}) \times (3,00 \times 10^8 \text{ m/s})}{3,42 \times 10^{-19} \text{ J}} \times \frac{1 \times 10^9 \text{ nm}}{1 \text{ m}} = 5,82 \times 10^2 \text{ nm} \text{ ή } 582 \text{ nm}$$

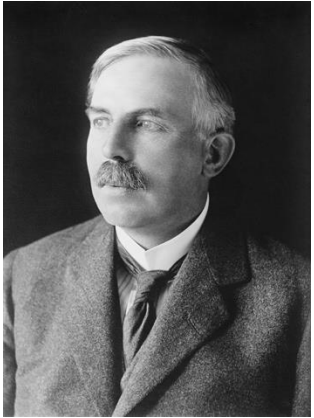
$$(β) \quad h\nu = W + KE \Rightarrow KE = h\nu - W = (6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}) \times (1,00 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}) - 3,43 \times 10^{-19} \text{ J} = 3,21 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$KE = \frac{1}{2} mu^2 \Rightarrow u = 839 \text{ m/s} \quad \text{πράξεις με μονάδες}$$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

Ernest Rutherford

1911



Πυρηνικό  
μοντέλο



Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου

Το πρότυπο του Rutherford και η κλασική φυσική:

πρότυπο του Rutherford:

το άτομο αποτελείται από έναν μικρό, θετικά φορτισμένο πυρήνα, γύρω από τον οποίο περιστρέφονται τα ηλεκτρόνια.

κλασική φυσική:

ένα ηλεκτρόνιο που περιστρέφεται γύρω από τον πυρήνα θα εξέπεμπε συνεχώς ακτινοβολία και τελικά θα κατέρρεε στον πυρήνα

**Σταθερότητα του ατόμου ?**

Ο Bohr:

στηρίχθηκε στην κβαντική θεωρία του Max Planck και του Albert Einstein, έννοια της κβαντοποίησης της ενέργειας

εφάρμοσε την ιδέα ότι τα ηλεκτρόνια στα άτομα δεν μπορούν να κινούνται σε οποιαδήποτε τροχιά, αλλά μόνο σε ορισμένες επιτρεπτές κβαντισμένες τροχιές



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

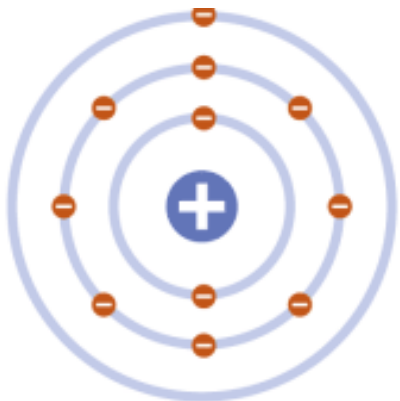
## Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου

Niels Bohr

1913



Πλανητικό  
μοντέλο



Κβαντισμένες τροχιές: Τα ηλεκτρόνια κινούνται μόνο σε συγκεκριμένες τροχιές γύρω από τον πυρήνα, στις οποίες δεν εκπέμπουν ενέργεια

Μετάβαση μεταξύ τροχιών: Όταν ένα ηλεκτρόνιο απορροφά ή εκπέμπει ενέργεια, μεταβαίνει μεταξύ αυτών των επιτρεπτών τροχιών.

Η ενέργεια του φωτονίου που απορροφάται ή εκπέμπεται κατά τη μετάβαση είναι ίση με τη διαφορά ενέργειας μεταξύ των δύο τροχιών.

$$E = h\nu$$

Εφαρμογές: Φάσμα εκπομπής και απορρόφησης

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

---

## Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου

Φάσματα εκπομπής:

είναι τα φάσματα φωτός που παράγονται όταν τα άτομα ή τα μόρια μιας ουσίας εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία καθώς τα ηλεκτρόνια τους επιστρέφουν από διεγερμένες καταστάσεις σε χαμηλότερα επίπεδα ενέργειας

Συνεχές φάσμα εκπομπής:

Παράγεται όταν ένα στερεό, υγρό ή πυκνό αέριο σε υψηλή θερμοκρασία εκπέμπει ακτινοβολία σε ένα συνεχές εύρος μηκών κύματος, χωρίς διακριτές γραμμές

π.χ. ο ήλιος

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

---

## Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου

**Φάσματα εκπομπής:**

είναι τα φάσματα φωτός που παράγονται όταν τα άτομα ή τα μόρια μιας ουσίας εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία καθώς τα ηλεκτρόνια τους επιστρέφουν από διεγερμένες καταστάσεις σε χαμηλότερα επίπεδα ενέργειας

**Γραμμικό φάσμα εκπομπής:**

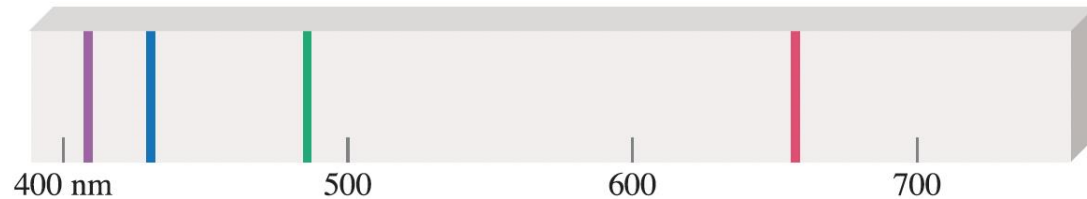
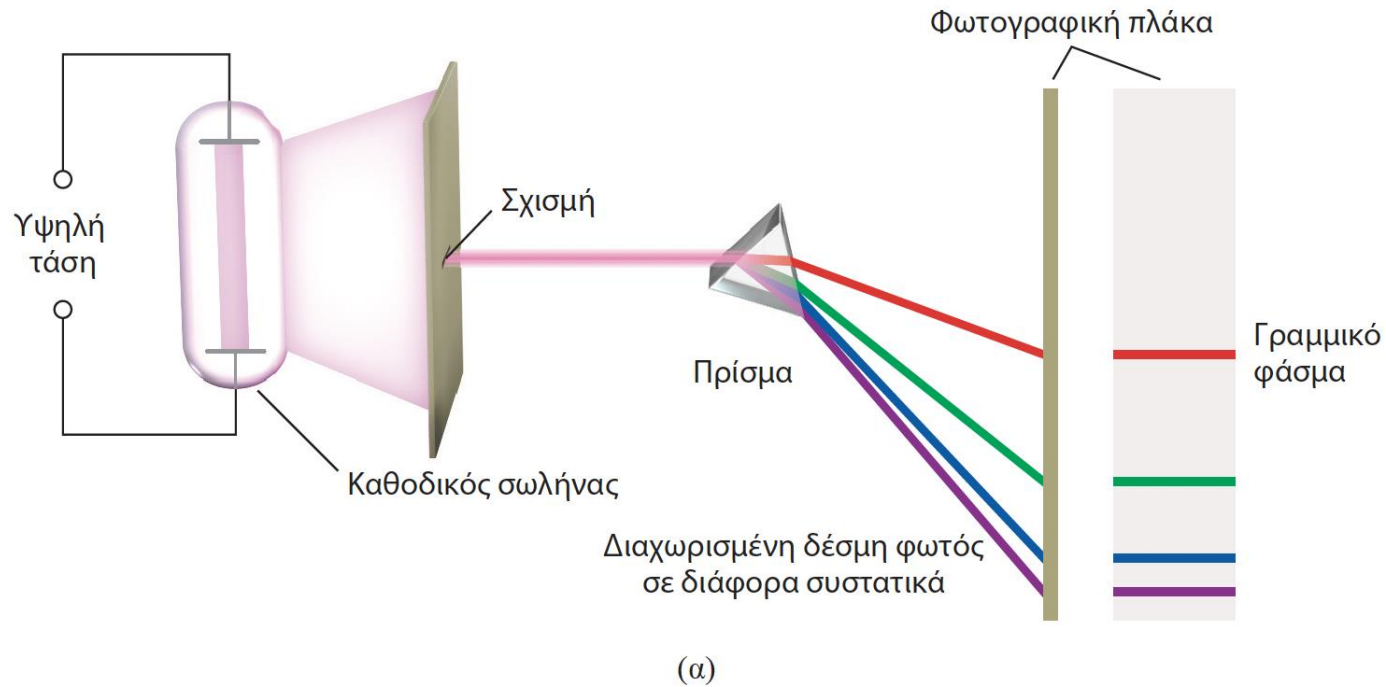
Εμφανίζεται όταν η εκπομπή φωτός από αέρια ή ατομικές ουσίες δημιουργεί διακριτές γραμμές σε συγκεκριμένα μήκη κύματος.

Κάθε γραμμή αντιστοιχεί σε μια μετάβαση ηλεκτρονίου από ένα υψηλότερο σε ένα χαμηλότερο ενεργειακό επίπεδο

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου

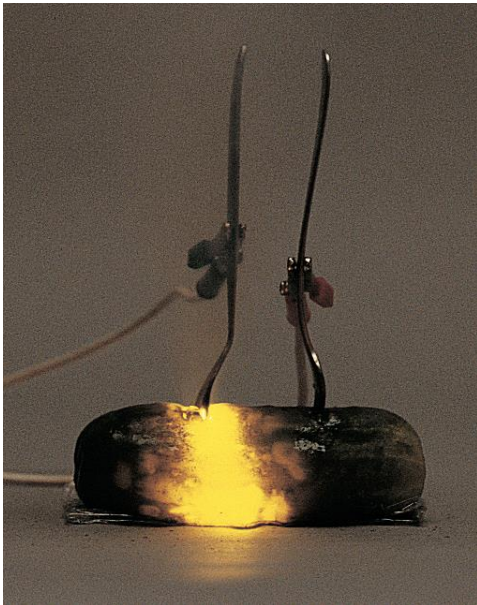
### Γραμμικό φάσμα εκπομπής



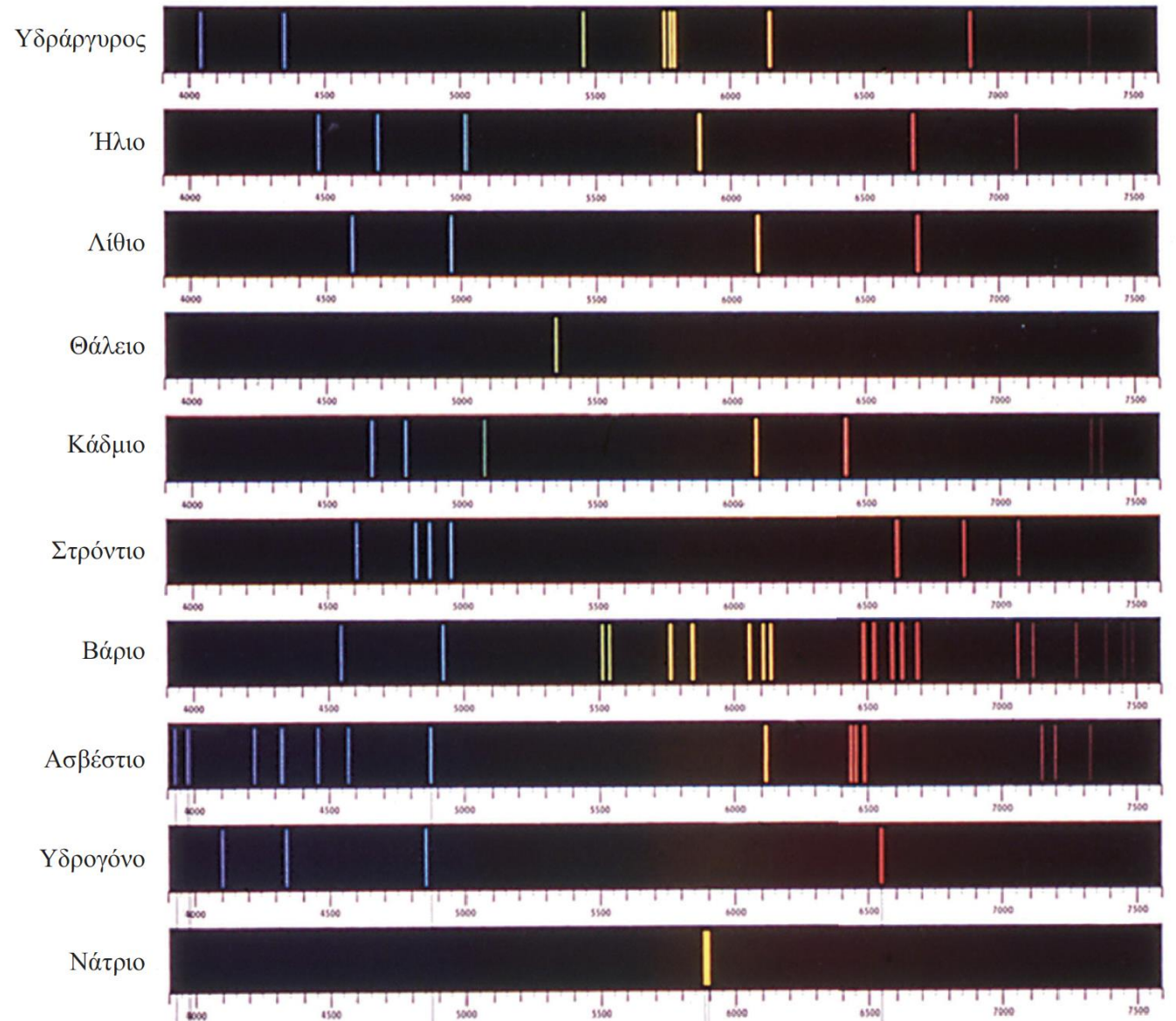
# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου

Γραμμικό φάσμα εκπομπής

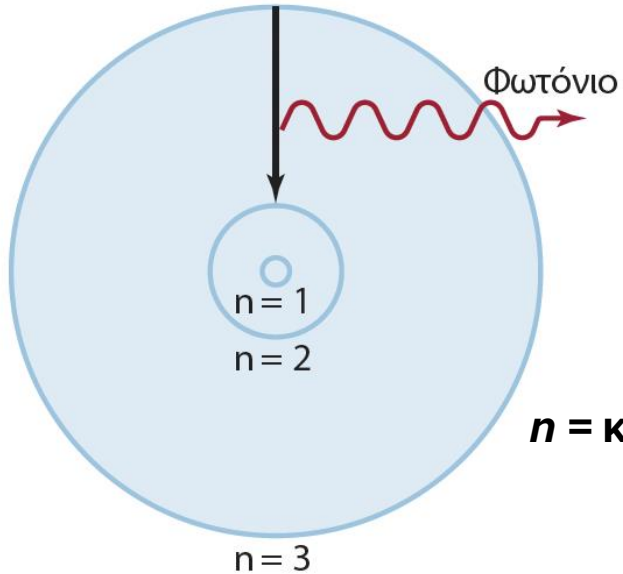


NaCl



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου



$$E_n = -R_H \left( \frac{1}{n^2} \right)$$

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

$n$  = κύριος κβαντικός αριθμός

$n = \infty \rightarrow E_\infty = 0 \rightarrow$  ελεύθερη κατάσταση

$n = 1 \rightarrow E_1 = -R_H \rightarrow$  θεμελιώδης κατάσταση

$n > 1 \rightarrow E_n > E_1 \rightarrow$  διεγερμένη κατάσταση

$$\Delta E = E_f - E_i$$

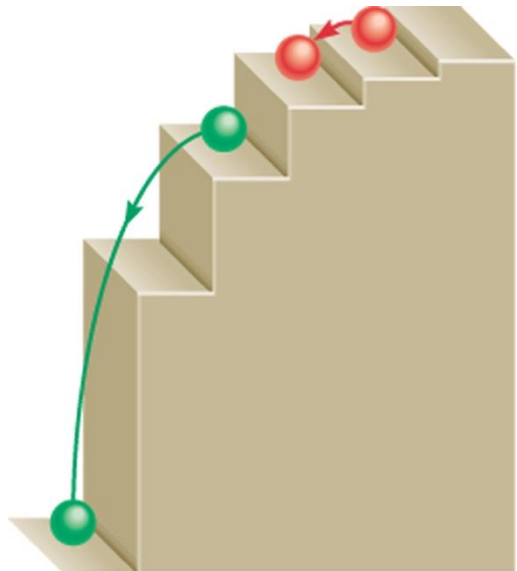
$$E_f = -R_H \left( \frac{1}{n_f^2} \right)$$

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

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

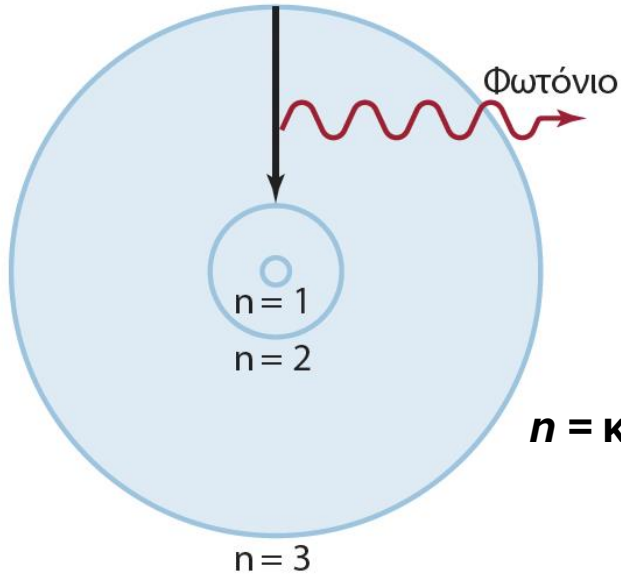
$n_i > n_f \rightarrow \Delta E < 0 \rightarrow$  ενέργεια προς το περιβάλλον

$n_i < n_f \rightarrow \Delta E > 0 \rightarrow$  πρόσληψη ενέργειας



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου



$$E_n = -R_H \left( \frac{1}{n^2} \right)$$

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

$n$  = κύριος κβαντικός αριθμός

$$\Delta E = E_f - E_i$$

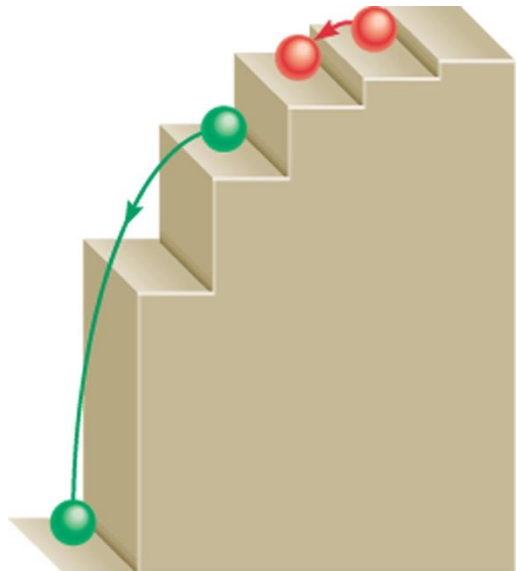
$$E_f = -R_H \left( \frac{1}{n_f^2} \right)$$

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

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

### Οι διάφορες σειρές στο φάσμα εκπομπής του ατομικού υδρογόνου

Σειρές	$n_f$	$n_i$	Περιοχή φάσματος
Lyman	1	2, 3, 4, ...	Υπεριώδες
Balmer	2	3, 4, 5, ...	Ορατό και υπεριώδες
Paschen	3	4, 5, 6, ...	Υπέρυθρο
Brackett	4	5, 6, 7, ...	Υπέρυθρο



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

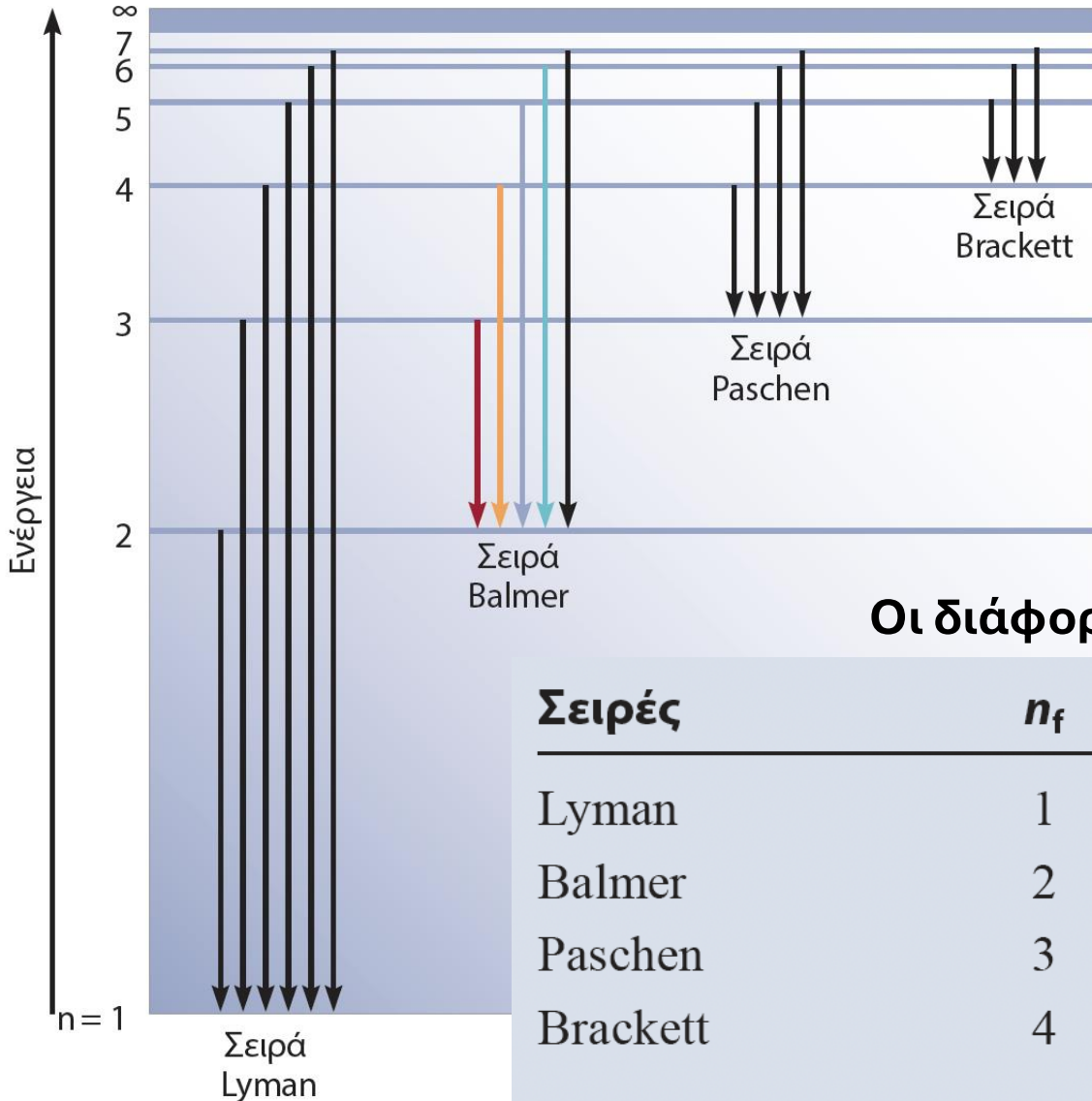
## Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου

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

- φάσματα εκπομπής πολυηλεκτρονιακών ατόμων
- Φαινόμενο Zeeman

Οι διάφορες σειρές στο φάσμα εκπομπής του ατομικού υδρογόνου

Σειρές	$n_f$	$n_i$	Περιοχή φάσματος
Lyman	1	2, 3, 4, ...	Υπεριώδες
Balmer	2	3, 4, 5, ...	Ορατό και υπεριώδες
Paschen	3	4, 5, 6, ...	Υπέρυθρο
Brackett	4	5, 6, 7, ...	Υπέρυθρο





# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου

Παράδειγμα:

Ποιο είναι το μήκος κύματος ενός φωτονίου (σε nm) που εκπέμπεται κατά τη διάρκεια μιας μετάπτωσης από την κατάσταση  $n_i = 5$  στην κατάσταση  $n_f = 2$  στο άτομο του υδρογόνου;

Απάντηση:

$$\Delta E = h\nu = R_H \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J} \left( \frac{1}{5^2} - \frac{1}{2^2} \right) = -4,58 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\Delta E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} \Rightarrow \lambda = h \frac{c}{\Delta E} = \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}) \times (3,00 \times 10^8 \text{ m/s})}{4,58 \times 10^{-19} \text{ J}} \times \frac{1 \text{ nm}}{1 \times 10^{-9} \text{ m}} = 434 \text{ nm}$$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η θεωρία του Bohr για το άτομο του υδρογόνου

Παράδειγμα:

Ένα άτομο υδρογόνου διεγείρεται στην τρίτη διεγερμένη κατάσταση ( $n = 4$ ). Ποιος είναι ο μέγιστος αριθμός των διαφορετικών φασματικών γραμμών που μπορεί να παρατηρηθεί κατά την αποδιέγερση του ατόμου;

Απάντηση:

Οι πιθανές μεταπτώσεις του ηλεκτρονίου από το επίπεδο  $n = 4$  είναι:

Από  $n = 4$  σε  $n = 3$

Από  $n = 4$  σε  $n = 2$

Από  $n = 4$  σε  $n = 1$

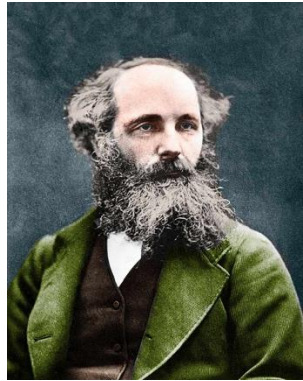
Από  $n = 3$  σε  $n = 2$

Από  $n = 3$  σε  $n = 1$

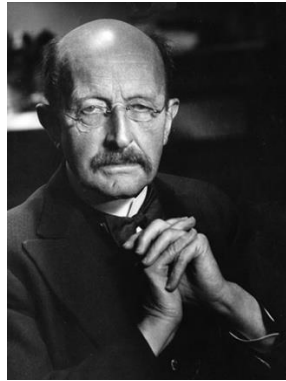
Από  $n = 2$  σε  $n = 1$  ➡ Σύνολο: 6

$$\text{Πιθανές μεταπτώσεις} = \frac{n(n-1)}{2}$$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

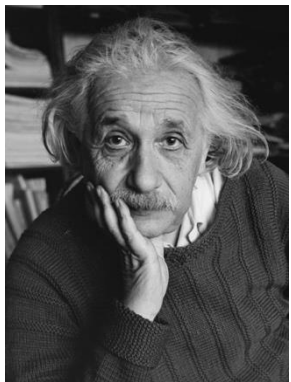


J. C. Maxwell



Max Planck

Nobel Φυσικής 1918



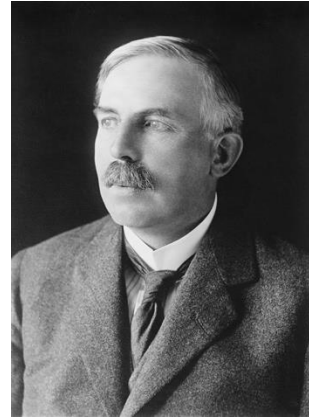
Albert Einstein

Nobel Φυσικής 1921

Ένα φωτεινό κύμα μπορεί να συμπεριφερθεί και ως σωματίδιο

Ernest Rutherford

1911

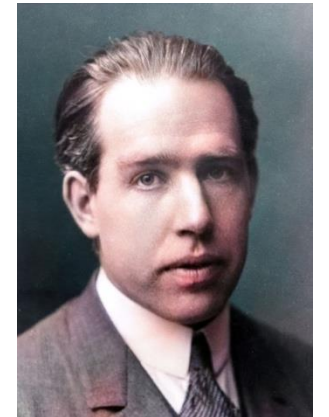


Πυρηνικό  
μοντέλο

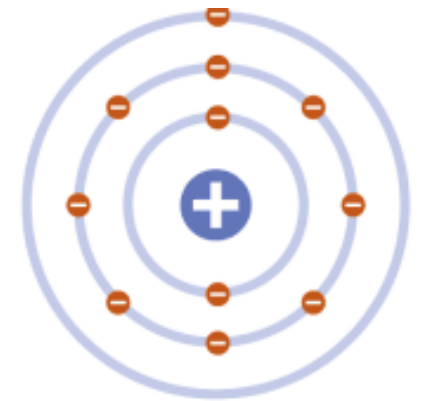


Niels Bohr

1913



Πλανητικό  
μοντέλο



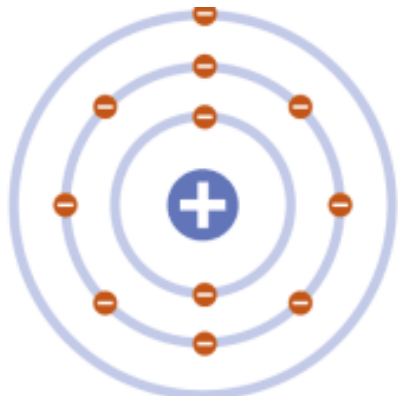
# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

Niels Bohr

1913



Πλανητικό  
μοντέλο



1. Το  $e$  του ατόμου H κινείται σε ορισμένες κυκλικές τροχιές γύρω από τον πυρήνα, έχοντας στροφορμή  $\rightarrow mur = nh/2\pi$  (κβαντισμένη)
2. Σε καθεμία επιτρεπόμενη τροχιά το  $e$  έχει ορισμένη  $E$  η οποία διατηρείται σταθερή  $\rightarrow E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2}\right)$  (κβαντισμένη)
3. Το  $e$  μπορεί να μεταπηδά μεταξύ των επιτρεπόμενων τροχιών με απορρόφηση ή εκπομπή φωτονίων με ενέργεια  $E = h\nu$

Άτομο του υδρογόνου:

1. Γιατί οι ενέργειες του  $e$  είναι κβαντισμένες?
2. Γιατί περιορίζεται σε ορισμένες σταθερές κυκλικές τροχιές?

Niels Bohr:

Σωματιδιακές ιδιότητες  $e$



Luis de Broglie

Κυματικές ιδιότητες  $e$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

---

## Η διπλή φύση του ηλεκτρονίου

Γιατί το ηλεκτρόνιο σε ένα άτομο Bohr περιορίζεται στην τροχιά γύρω από τον πυρήνα σε ορισμένες σταθερές αποστάσεις;



**Luis de Broglie**

**(1892-1987)**

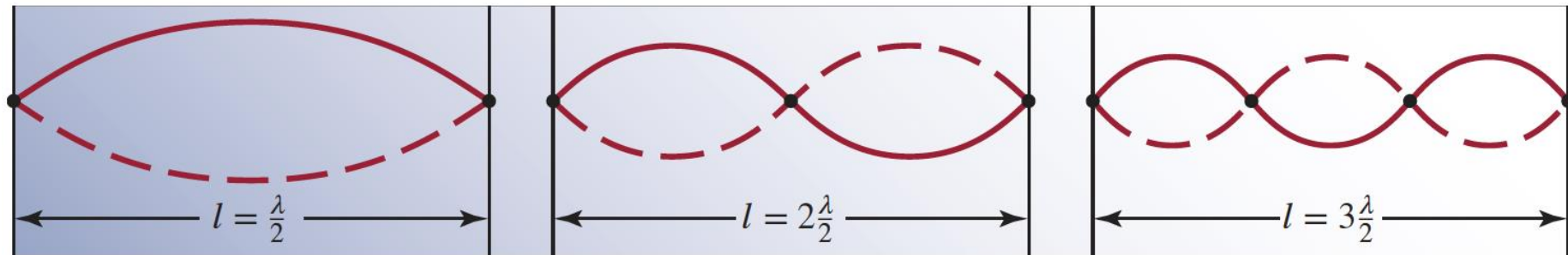
**Nobel Φυσικής 1929**

- Τα ηλεκτρόνια δεν συμπεριφέρονται μόνο ως σωματίδια που κινούνται σε τροχιές, αλλά μπορούν να συμπεριφέρονται και ως κύματα.
- Αυτά τα κύματα που σχηματίζονται γύρω από έναν πυρήνα μοιάζουν με τα στάσιμα κύματα.

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η διπλή φύση του ηλεκτρονίου

- Στάσιμα κύματα: δεν ταξιδεύουν αλλά παραμένουν σταθερά
- Κόμβοι: σημεία όπου το πλάτος του κύματος είναι μηδέν
- Στο στάσιμο κύμα, οι κορυφές και οι κόμβοι δεν αλλάζουν θέση

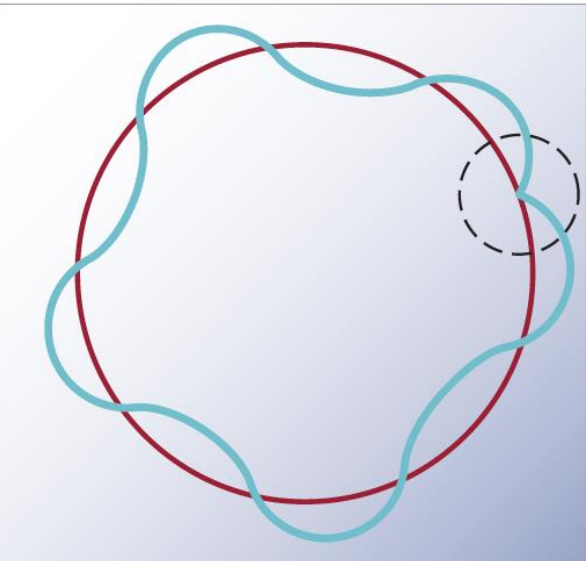
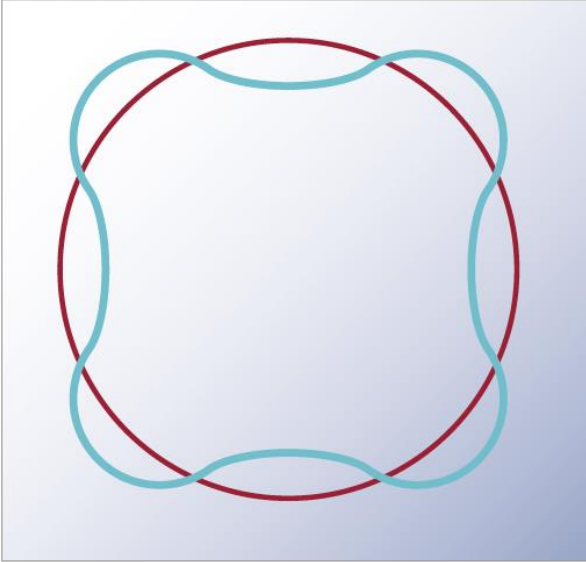


Όσο μεγαλύτερη είναι η  $n$ , τόσο μικρότερο είναι το  $\lambda$ , τόσο μεγαλώνει ο αριθμός των κόμβων

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η διπλή φύση του ηλεκτρονίου

### Η θεωρία του de Broglie



- Όταν το ηλεκτρόνιο κινείται γύρω από τον πυρήνα του ατόμου, σχηματίζει ένα στασίμο κύμα το οποίο πρέπει να κλείνει ακριβώς γύρω από την τροχιά του ηλεκτρονίου
- Για να είναι σταθερή μια τροχιά, το μήκος του κύματος πρέπει να είναι τέτοιο ώστε να χωράει ακριβώς στην περιφέρεια της τροχιάς του ηλεκτρονίου. Μόνο συγκεκριμένα μήκη κύματος και συγκεκριμένες τροχιές είναι επιτρεπτές για το ηλεκτρόνιο

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η διπλή φύση του ηλεκτρονίου

### Η θεωρία του de Broglie

Σχέση περιφέρειας και μήκους κύματος

$$2\pi r = n\lambda$$

$r$  = ακτίνα τροχιάς

$\lambda$  = μήκος κύματος

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

Εξίσωση de Broglie

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mu}$$

$p$  = ορμή

$m$  = μάζα

$u$  = ταχύτητα

κάθε κινούμενο σωματίδιο έχει ένα μήκος κύματος που εξαρτάται από τη μάζα και την ταχύτητά του

Το  $r$  μπορεί να παίρνει μόνο συγκεκριμένες τιμές  
η ενέργεια του ηλεκτρονίου είναι κβαντισμένη



Το ηλεκτρόνιο δεν μπορεί να έχει οποιαδήποτε ενέργεια, αλλά μόνο ορισμένες τιμές ενέργειας που αντιστοιχούν σε αυτές τις επιτρεπτές τροχιές

Τα σωματίδια μπορούν να έχουν κυματικές ιδιότητες και τα κύματα μπορούν να έχουν σωματιδιακές ιδιότητες (διπλή φύση)

Βασική αρχή της κβαντομηχανικής



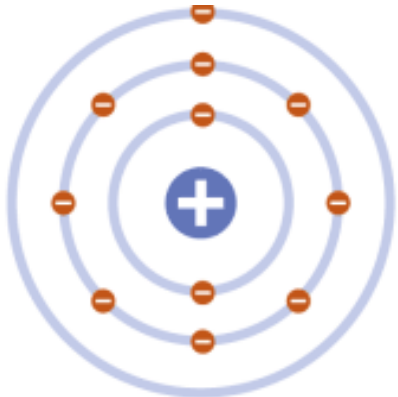
# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

Niels Bohr

1913



Πλανητικό  
μοντέλο



1. Το  $e$  του ατόμου H κινείται σε ορισμένες κυκλικές τροχιές γύρω από

τον πυρήνα, έχοντας στροφορμή  $\rightarrow mvr = \frac{nh}{2\pi}$  αυθαίρετη  
συνθήκη

Απόδειξη:

$$2\pi r = n\lambda$$

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η διπλή φύση του ηλεκτρονίου

Παράδειγμα:

Υπολογίσατε το μήκος κύματος του “σωματιδίου” στις ακόλουθες δυο περιπτώσεις: (α) Το ταχύτερο εναρκτήριο χτύπημα στην αντισφαίριση είναι περίπου 150 μίλια την ώρα, ή 68 m/s. Υπολογίσατε το μήκος κύματος μιας μπάλας του τένις  $6,0 \times 10^{-2}$  kg που κινείται με αυτήν την ταχύτητα. (β) Υπολογίσατε το μήκος κύματος ενός ηλεκτρονίου ( $9,1094 \times 10^{-31}$  kg) που κινείται με 68 m/s.

Απάντηση:

$$(α) \quad \lambda = \frac{h}{mu} = \frac{6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{(6,0 \times 10^{-2} \text{ kg}) \times 68 \text{ m/s}} = 1,6 \times 10^{-34} \text{ m} \quad \text{Μη ανιχνεύσιμες κυματικές ιδιότητες}$$

$$(β) \quad \lambda = \frac{h}{mu} = \frac{6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{(9,1094 \times 10^{-31} \text{ kg}) \times 68 \text{ m/s}} = 1,1 \times 10^{-5} \text{ m} \text{ ή } 1,1 \times 10^4 \text{ nm}$$

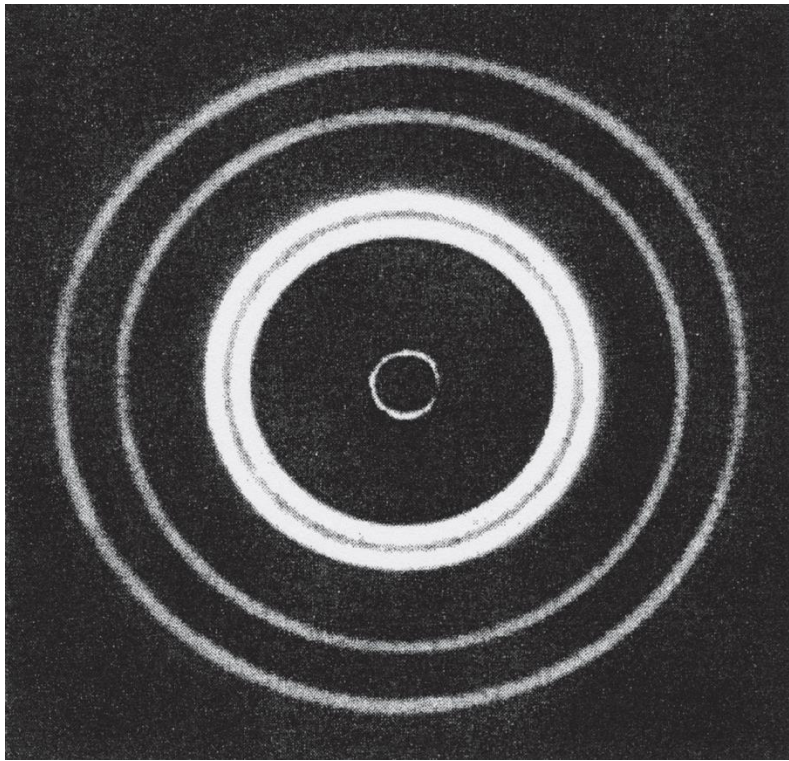
Υπέρυθρη περιοχή

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

Η διπλή φύση του ηλεκτρονίου

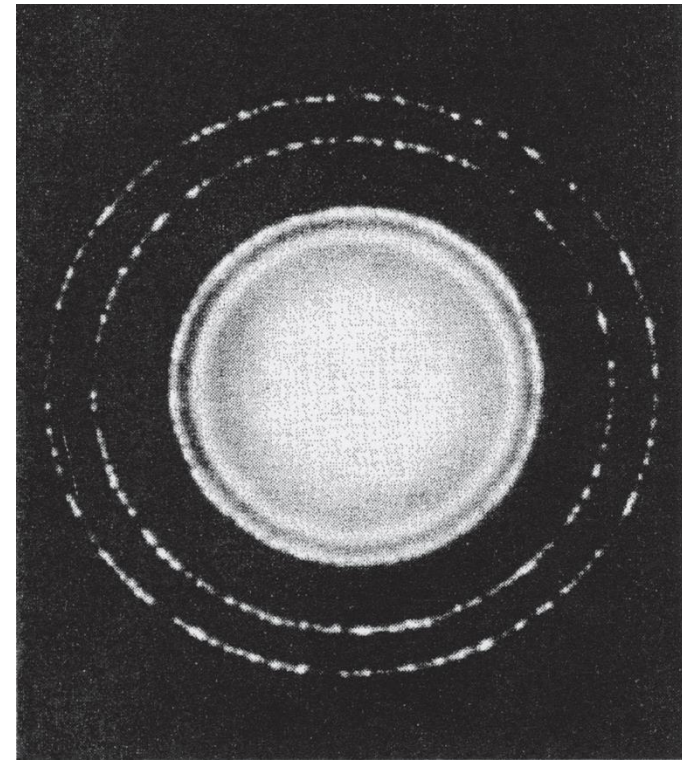
Η θεωρία του de Broglie: Επιβεβαίωση

Πείραμα Clinton Davisson – Lester Germer



Φύλλο αργιλίου

Περίθλαση ακτίνων Χ



Φύλλο αργιλίου

Περίθλαση ηλεκτρονίων

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

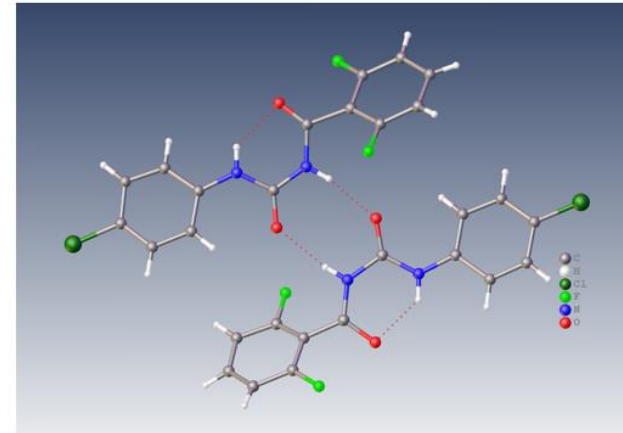
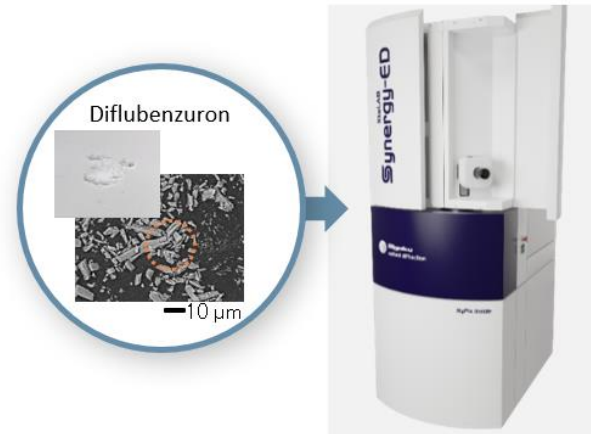
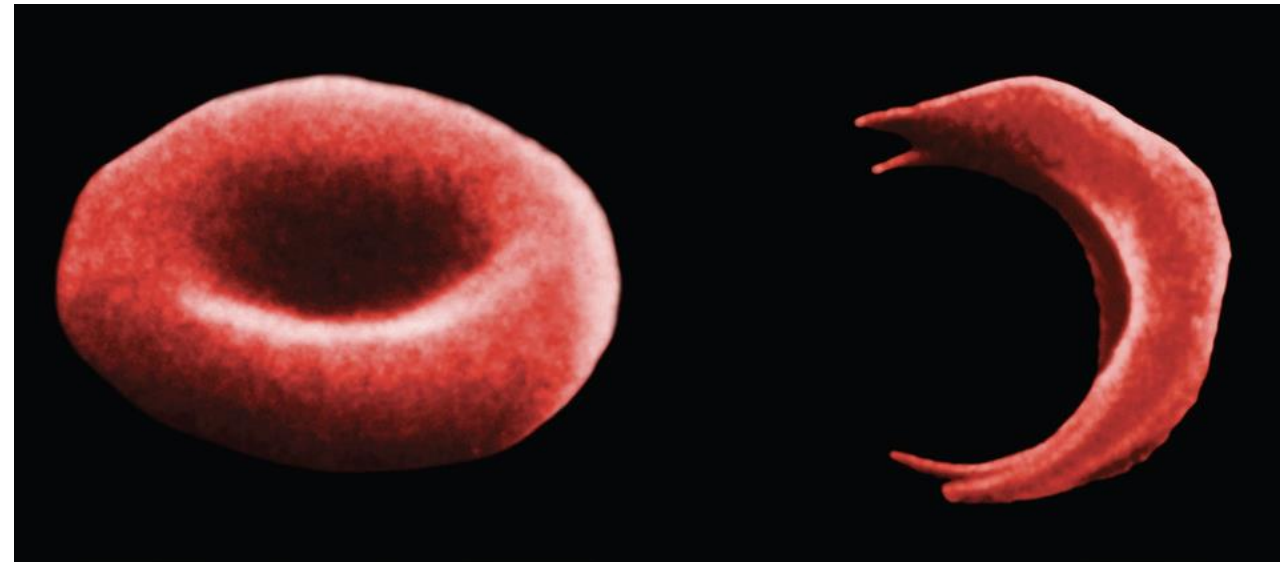
Η διπλή φύση του ηλεκτρονίου

Η θεωρία του de Broglie: Εφαρμογές

Ηλεκτρονική μικροσκοπία

- Transmission Electron Microscope - TEM
- Scanning Electron Microscope - SEM

Πειράματα περίθλασης ηλεκτρονίων



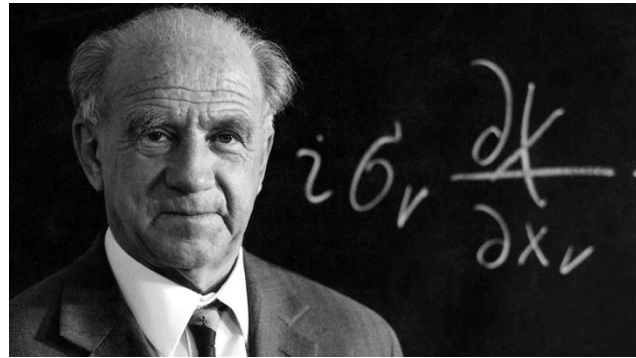
# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η διπλή φύση του ηλεκτρονίου

### Κβαντομηχανική

Πώς μπορεί να καθοριστεί η “θέση” ενός κύματος;  
Δεν μπορούμε να καθορίσουμε την ακριβή τοποθεσία ενός κύματος επειδή ένα κύμα εκτείνεται στο χώρο

Werner K. Heisenberg  
(1901-1976)  
Nobel Φυσικής 1932



### Αρχή της αβεβαιότητας

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

είναι αδύνατο να γνωρίζουμε ταυτόχρονα και με απόλυτη ακρίβεια τόσο τη θέση όσο και την ορμή ενός σωματιδίου



το ηλεκτρόνιο δεν έχει μια καλά καθορισμένη τροχιά όπως πίστευε ο Bohr

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η διπλή φύση του ηλεκτρονίου

Παράδειγμα:

(α) Ένα ηλεκτρόνιο κινείται με ταχύτητα  $8,0 \times 10^6$  m/s. Εάν η αβεβαιότητα στη μέτρηση της ταχύτητας είναι 1,0% της ταχύτητας, υπολογίσατε την αβεβαιότητα της θέσης του ηλεκτρονίου. Η μάζα του ηλεκτρονίου είναι  $9,1094 \times 10^{-31}$  kg. (β) Μια μπάλα του μπέιζμπολ μάζας 0,15 kg που εκσφενδονίζεται με 100 mph έχει ορμή 6,7 kg · m/s. Εάν η αβεβαιότητα μέτρησης αυτής της ορμής είναι  $1,0 \times 10^{-7}$ , υπολογίσατε την αβεβαιότητα θέσης της μπάλας του μπέιζμπολ.

Απάντηση:

$$(α) \Delta u = 0,010 \times 8,0 \times 10^6 \text{ m/s} = 8,0 \times 10^4 \text{ m/s}$$

$$\Delta p = m \Delta u = 9,1094 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 8,0 \times 10^4 \text{ m/s} = 7,3 \times 10^{-26} \text{ kg m/s}$$

$$\Delta x \Delta p = \frac{h}{4\pi} \Rightarrow \Delta x = \frac{h}{4\pi \Delta p} = \frac{6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{4\pi (7,3 \times 10^{-26} \text{ kg m/s})} = 7,24 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$(β) \Delta x = 7,24 \times 10^{-29} \text{ m}$$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η διπλή φύση του ηλεκτρονίου

Erwin Schrödinger

Κβαντομηχανική

1926



Κβαντικό  
μοντέλο

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$\hat{H}$  = τελεστής χαμιλτονιανής

$E$  = ολική ενέργεια

$\psi$  = κυματική συνάρτηση

$$-\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi}_{E_{\text{κιν}}}} + \underbrace{V\Psi}_{E_{\text{δυν}}} = \underbrace{E\Psi}_{E_{\text{ολική}}}$$

Η εξίσωση Schrödinger - 1926:

- συνδυάζει τη **σωματιδιακή** (μέσω της μάζας) και την **κυματική** φύση (μέσω της κυματικής συνάρτησης) των e
- υπολογισμός επιτρεπτών ενεργειακών καταστάσεων
- αντικατέστησε την παλαιότερη θεωρία του Bohr



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η διπλή φύση του ηλεκτρονίου

### Κβαντομηχανική

#### Επίλυση εξίσωσης Schrödinger

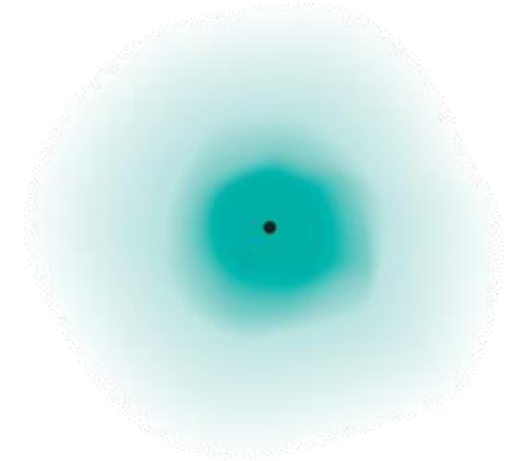
$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Ακριβείς λύσεις ΜΟΝΟ για άτομο υδρογόνου

Αποδεκτές λύσεις: κυματικές συναρτήσεις ( $\psi$ ) ή ατομικά τροχιακά

Αξιόπιστες περιγραφές για πολυηλεκτρονιακά άτομα

$\psi$  δεν έχει καμία φυσική σημασία!  
 $\psi^2$  έχει ιδιαίτερη φυσική σημασία



➤ σωματιδιακή φύση e:

το  $\psi^2$  εκφράζει την πιθανότητα εύρεσης του e σε κάποιο συγκεκριμένο σημείο του ατόμου

➤ κυματική φύση e:

το  $\psi^2$  δίνει την ηλεκτρονική ή ηλεκτρονιακή πυκνότητα στα διάφορα σημεία γύρω από τον πυρήνα του ατόμου



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Οι κβαντικοί αριθμοί

Αριθμοί που χρησιμοποιούνται στην κβαντομηχανική για να περιγράψουν τις ιδιότητες των ηλεκτρονίων σε ένα άτομο. Δεν είναι απλά τυχαίοι αριθμοί, αλλά προκύπτουν από τις λύσεις της εξίσωσης Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου

Κβαντικός αριθμός	Ιδιότητα	Επιτρεπτές τιμές
Κύριος κβαντικός αριθμός ( $n$ )	Ενέργεια και μέγεθος τροχιακού	$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$
Αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός ( $l$ )	Σχήμα τροχιακού	$l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$
Μαγνητικός κβαντικός αριθμός ( $m_l$ )	Προσανατολισμός τροχιακού	$m_l = -l, (-l+1), \dots, 0, \dots, (+l-1), +l$
Κβαντικός αριθμός του spin ( $m_s$ )	Κατεύθυνση περιστροφής του ηλεκτρονίου	$m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Οι κβαντικοί αριθμοί

Δευτερεύων ή Αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός ( $l$ )

Εάν  $n = 1$   $l = 0$

Εάν  $n = 2$   $l = 0, 1$

Εάν  $n = 3$   $l = 0, 1, 2$

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός ( $m_l$ )

$n$	$l$	$m_l$	Αριθμός τροχιακών
1	0	0	1
2	0	0	1
	1	-1, 0, 1	3
3	0	0	1
	1	-1, 0, 1	3
	2	-2, -1, 0, 1, 2	5

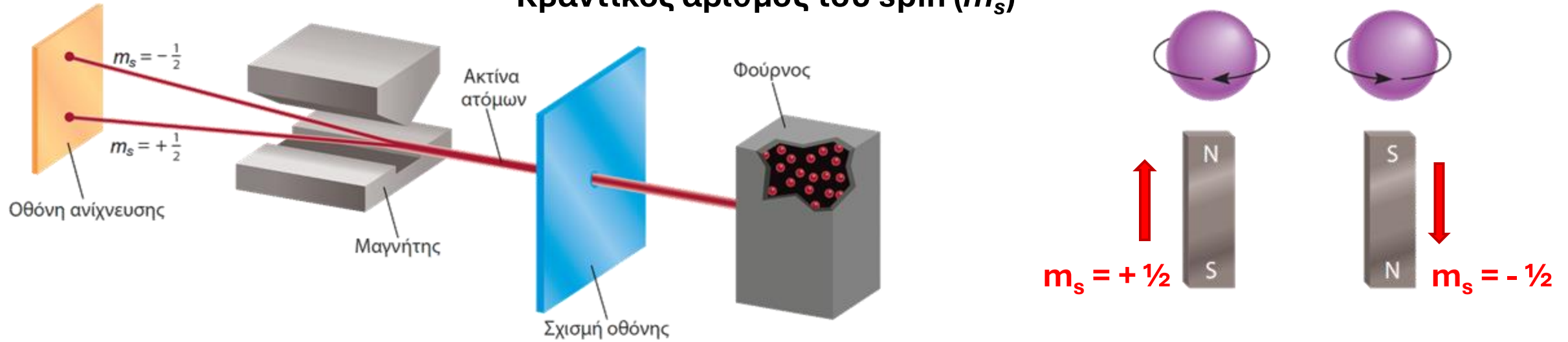
$l$	0	1	2	3	4	5
-----	---	---	---	---	---	---

Όνομα τροχιακού	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>
-----------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Οι κβαντικοί αριθμοί

### Κβαντικός αριθμός του spin ( $m_s$ )



Το  $e$ , ως σωματίδιο, συμπεριφέρεται όπως μία φορτισμένη σφαίρα, η οποία περιστρέφεται γύρω από έναν άξονα που διέρχεται από το κέντρο της  $\rightarrow$  spin  $\rightarrow$  παραγωγή μαγνητικού πεδίου

Έτσι το  $e$  συμπεριφέρεται ως ένας μικροσκοπικός μαγνήτης

Επιτρεπτές τιμές: Το δεξιόστροφο spin χαρακτηρίζεται από  $m_s = +\frac{1}{2}$ , ενώ το αριστερόστροφο spin από  $m_s = -\frac{1}{2}$

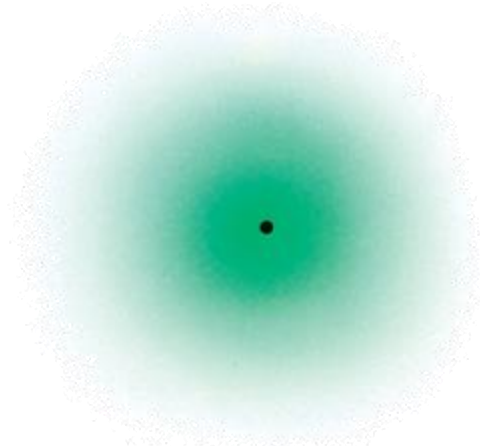
# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Τα ατομικά τροχιακά

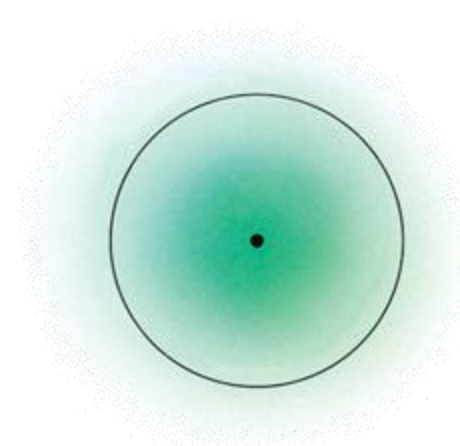
$n$	$l$	Υποφλοιός	$m_l$	Αριθμός τροχιακών υποφλοιού	Χαρακτηρισμοί ατομικών τροχιακών	Αριθμός τροχιακών φλοιού
1	0	1s	0	1	1s	1
2	0	2s	0	1	2s	
2	1	2p	-1, 0, 1	3	$2p_x, 2p_y, 2p_z$	4
3	0	3s	0	1	3s	
3	1	3p	-1, 0, 1	3	$3p_x, 3p_y, 3p_z$	
3	2	3d	-2, -1, 0, 1, 2	5	$3d_{xy}, 3d_{yz}, 3d_{xz}, 3d_{x^2-y^2}, 3d_{z^2}$	9
4	0	4s	0	1	4s	
4	1	4p	-1, 0, 1	3	$4p_x, 4p_y, 4p_z$	
4	2	4d	-2, -1, 0, 1, 2	5	$4d_{xy}, 4d_{yz}, 4d_{xz}, 4d_{x^2-y^2}, 4d_{z^2}$	
4	3	4f	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7	$4f_{xyz}, 4f_{yz^2}, 4f_{xz^2}, 4f_{y(3x^2-y^2)},$ $4f_{x(x^2-3y^2)}, 4f_{z(x^2-y^2)}, 4f_{z^3}$	16

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

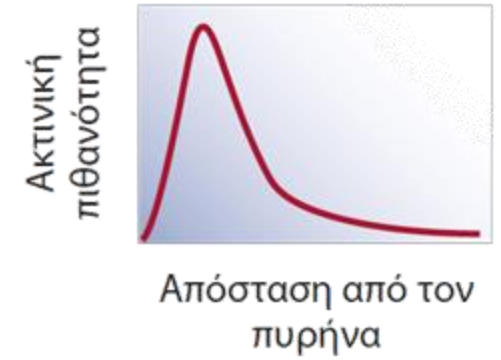
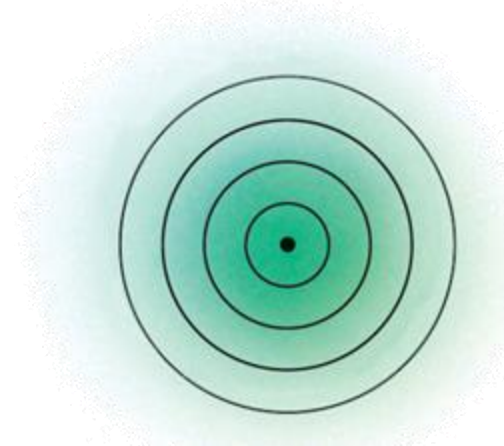
## Τα ατομικά τροχιακά



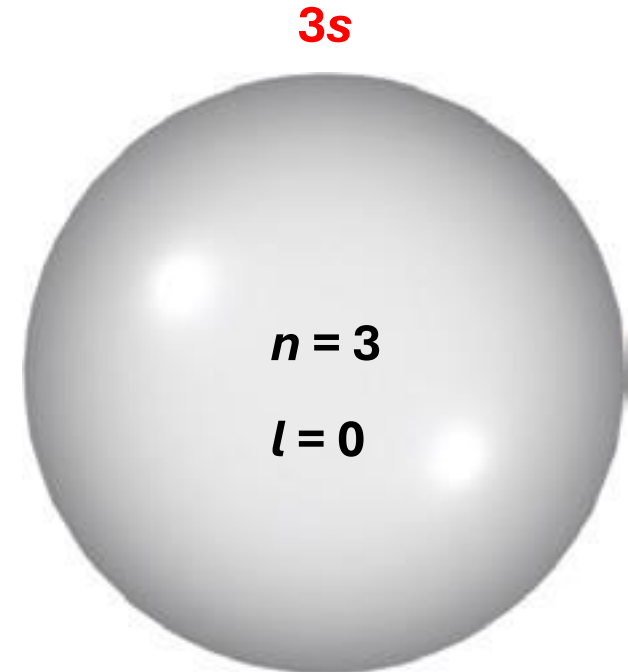
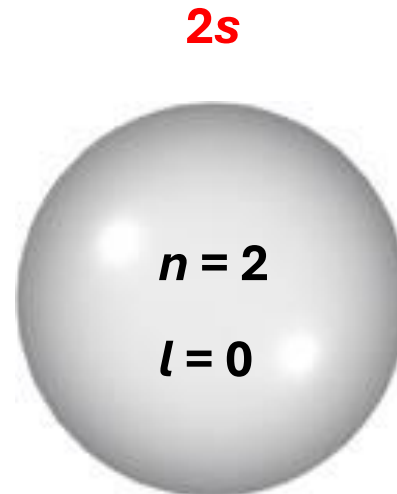
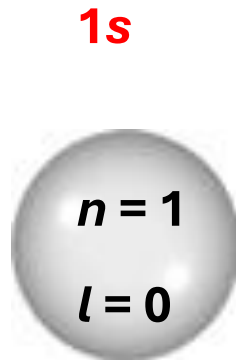
Ηλεκτρονιακή πυκνότητα



Οριακή επιφάνεια



s τροχιακά



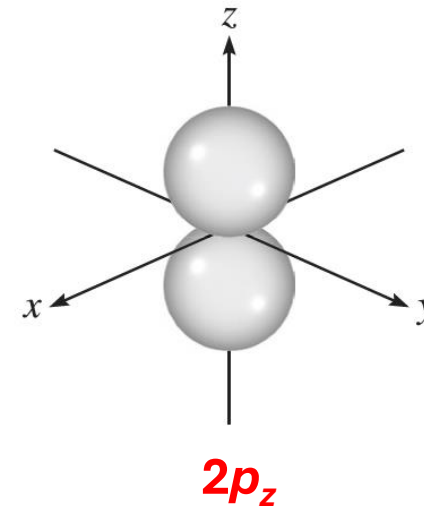
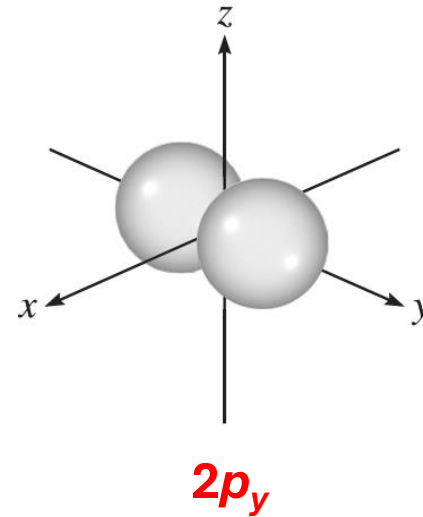
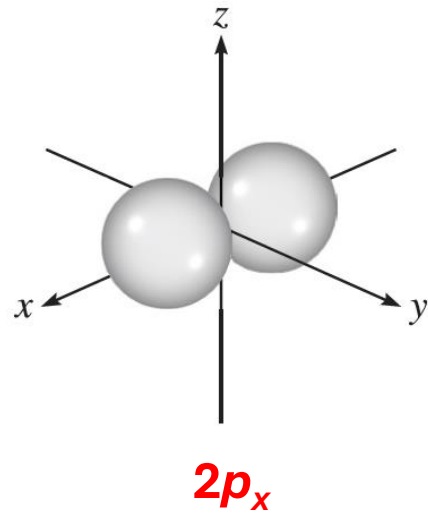
# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Τα ατομικά τροχιακά

*p* τροχιακά

$n = 2$

$l = 1$



<https://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/>

<https://www.chemtube3d.com/orbitals-f/>

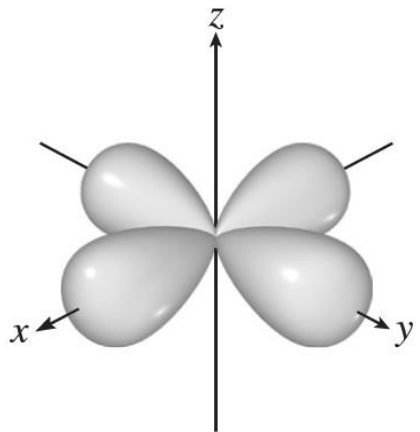
# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Τα ατομικά τροχιακά

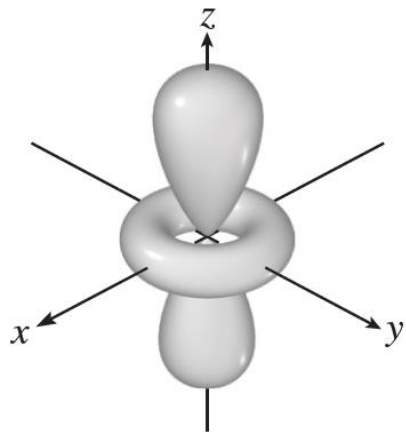
*d* τροχιακά

$$n = 3$$

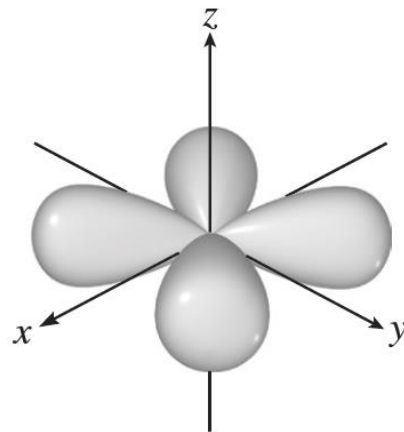
$$l = 2$$



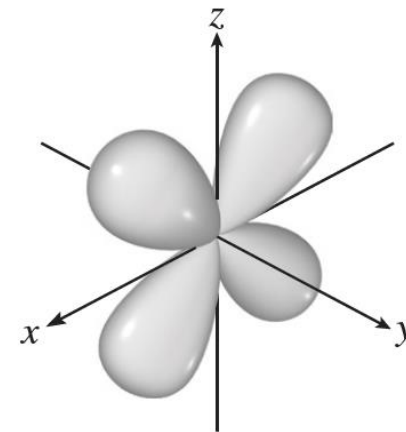
$3d_{x^2-y^2}$



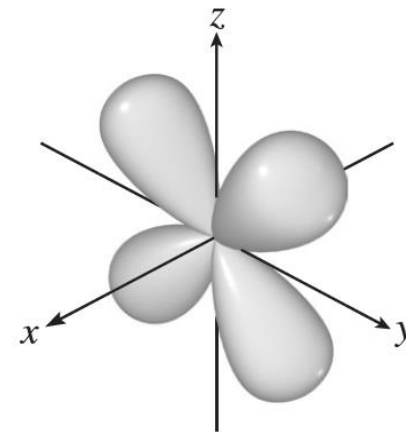
$3d_{z^2}$



$3d_{xy}$



$3d_{xz}$



$3d_{yz}$

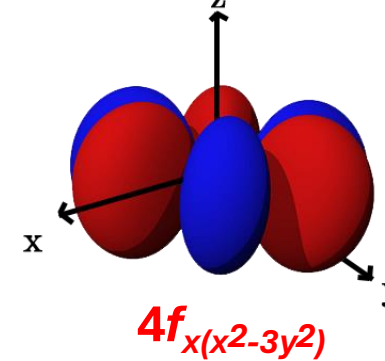
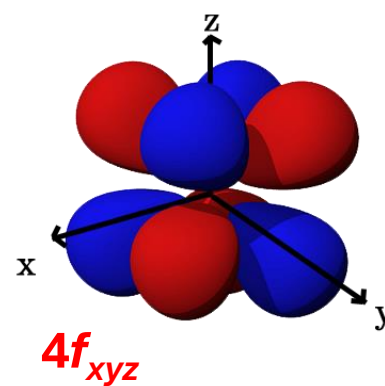
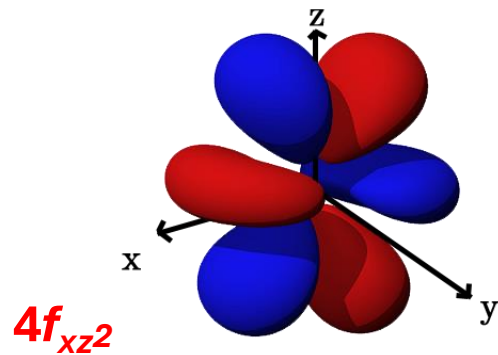
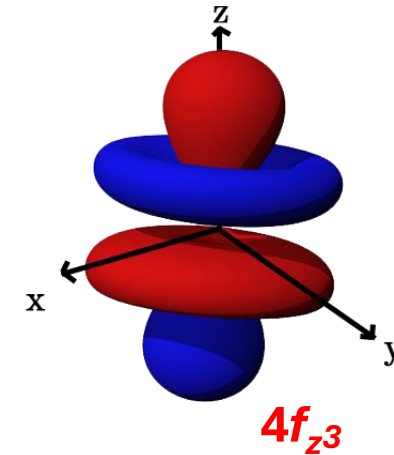
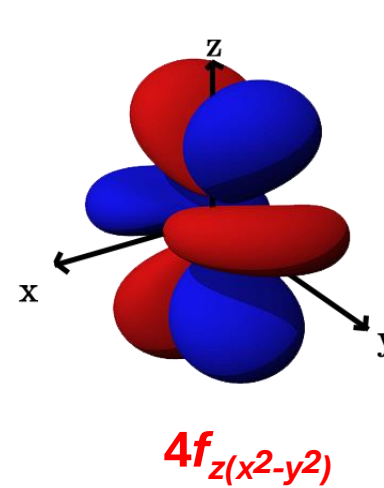
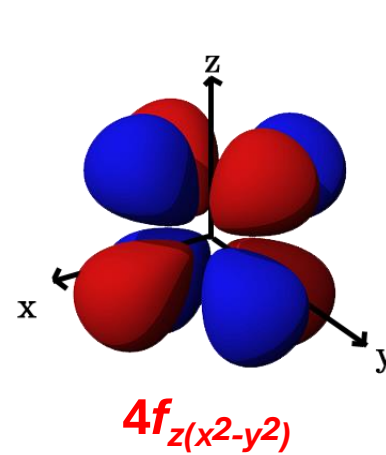
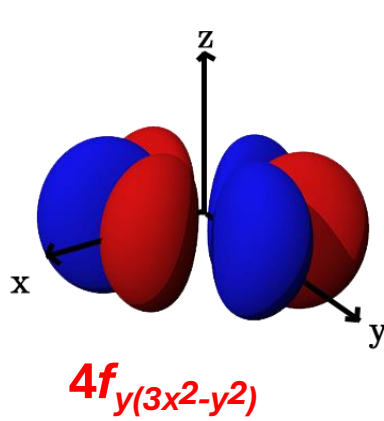
# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Τα ατομικά τροχιακά

$f$  τροχιακά

$n = 4$

$l = 3$





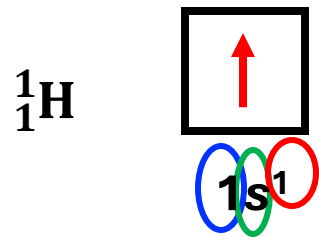
# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η ηλεκτρονιακή απεικόνιση

Αρχή δόμησης:

είναι ένα σχήμα που χρησιμοποιείται για αναπαραγωγή των ηλεκτρονικών δομών των θεμελιωδών καταστάσεων ατόμων, μέσω διαδοχικής συμπλήρωσης υποφλοιών με ηλεκτρόνια κατά μια ορισμένη σειρά (τη σειρά δόμησης)

Πως κατανέμονται τα e στα ατομικά τροχιακά



$(n, l, m_l, m_s)$

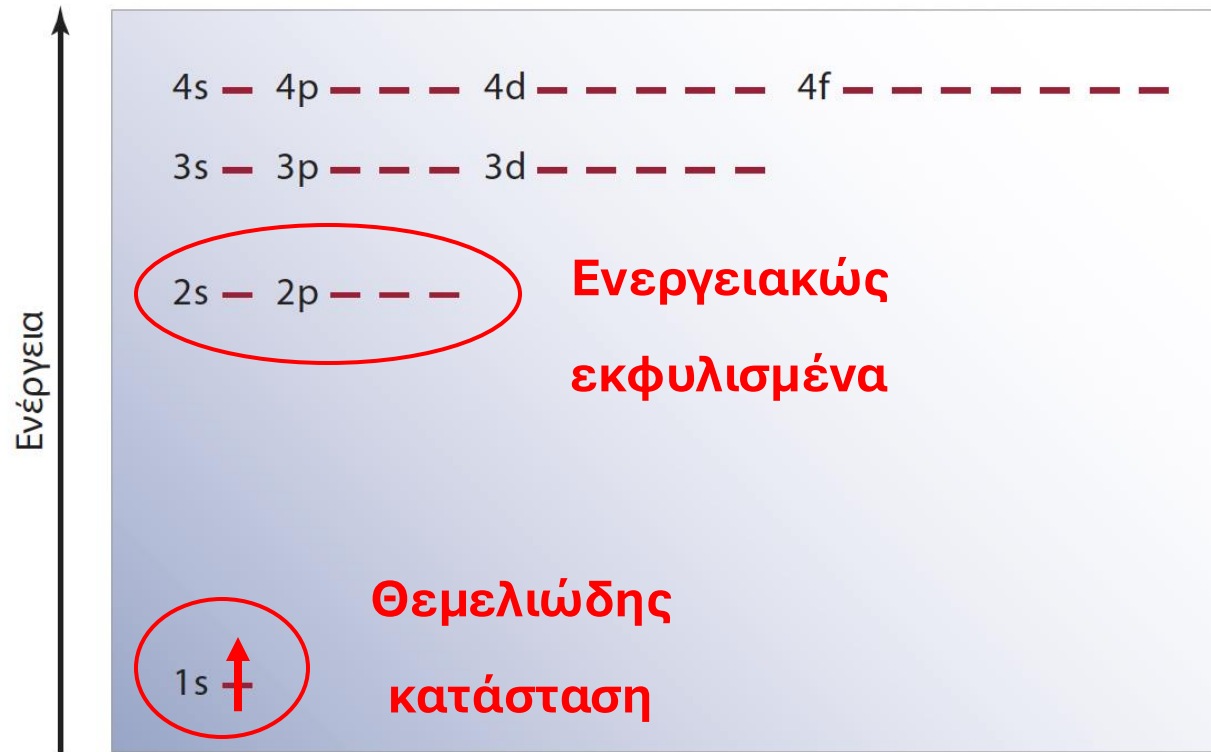
$(1, 0, 0, +\frac{1}{2})$

1. Κανόνας ελάχιστης ενέργειας
2. Απαγορευτική αρχή Pauli
3. Κανόνας του Hund

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Οι ενέργειες των τροχιακών

Ενεργειακές στάθμες για το άτομο Υδρογόνου



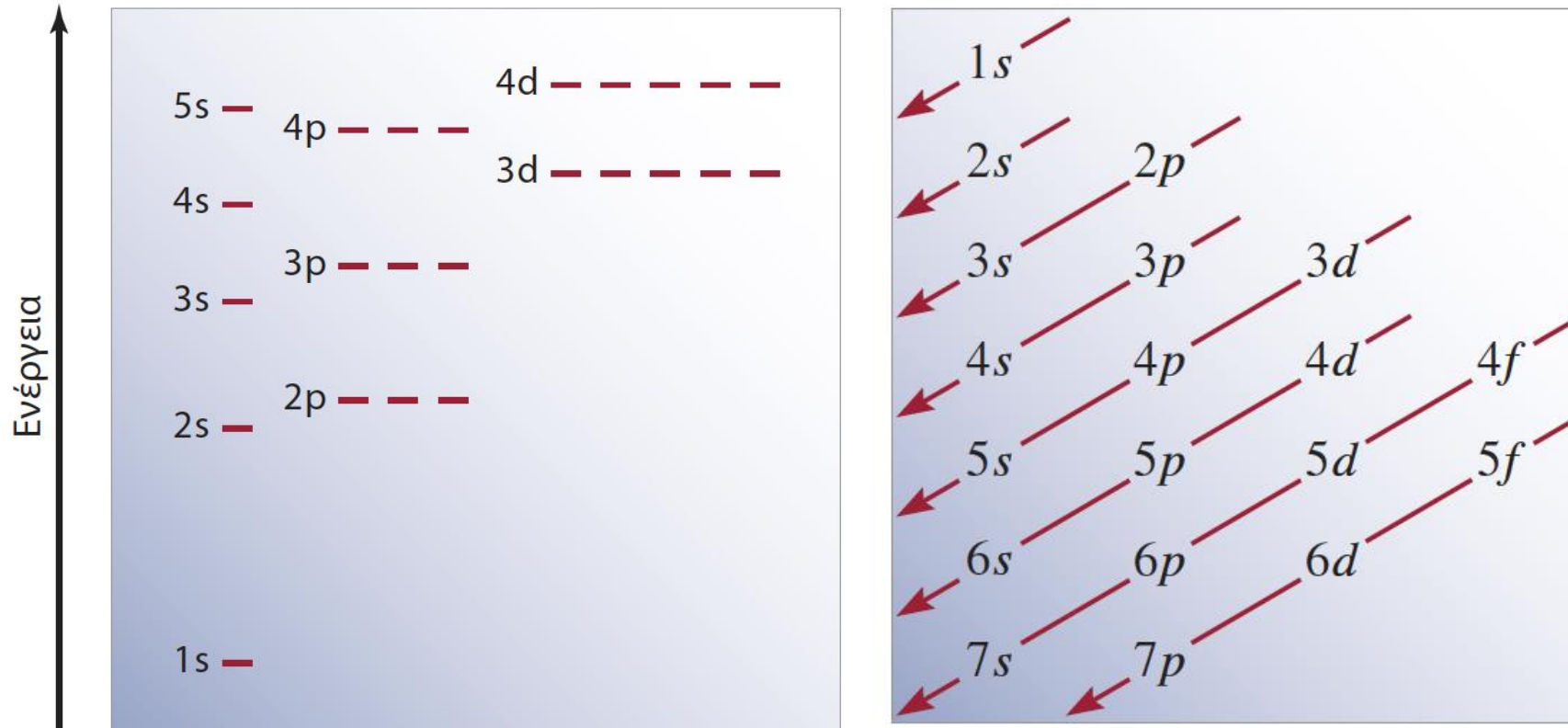
Ενέργεια των τροχιακών:  $1s < 2s = 2p < 3s = 3p = 3d < 4s = 4p = 4d = 4f < \dots$

Ενέργεια των τροχιακών: εξαρτάται μόνο από τον κύριο κβαντικό αριθμό ( $n$ )

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Οι ενέργειες των τροχιακών

Ενεργειακές στάθμες για ένα πολυηλεκτρονικό Άτομο



Εμπειρική σειρά, δεν δείχνει πάντα τα ηλεκτρόνια που συμμετέχουν σε δεσμούς ή αποσπώνται κατά τους ιοντισμούς

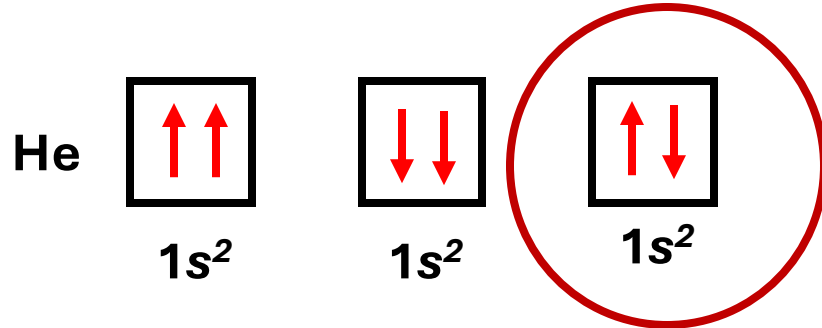
Ενέργεια των τροχιακών: εξαρτάται τόσο από τον κύριο κβαντικό αριθμό ( $n$ )

όσο και από το δευτερεύων κβαντικό αριθμό ( $l$ )

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η απαγορευτική αρχή του Pauli

δύο ηλεκτρόνια του ίδιου ατόμου δεν μπορούν να έχουν την ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών



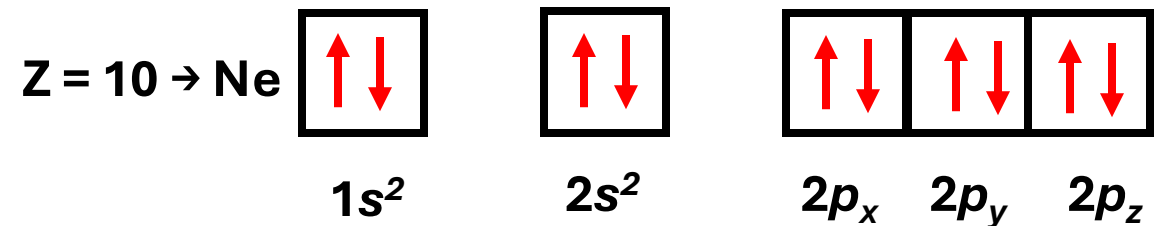
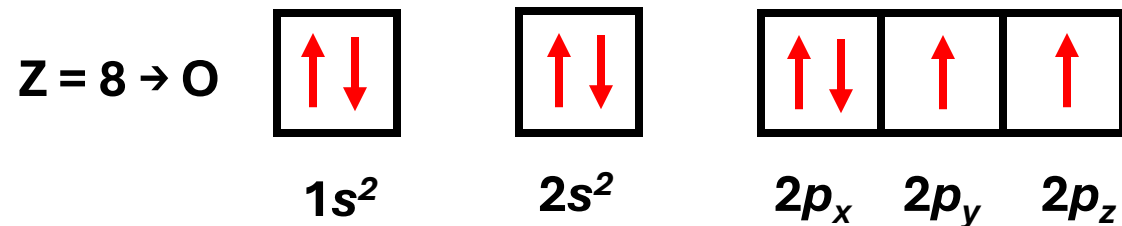
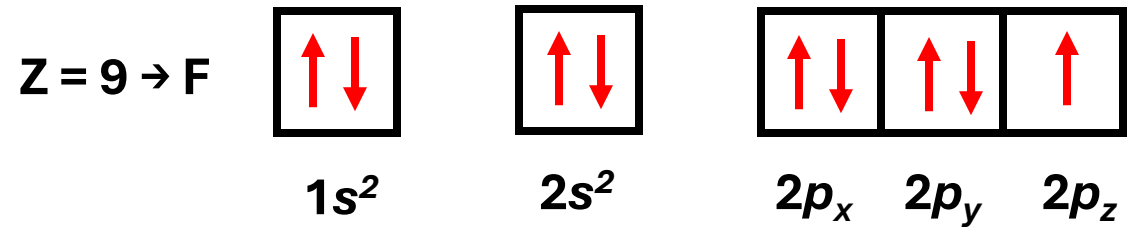
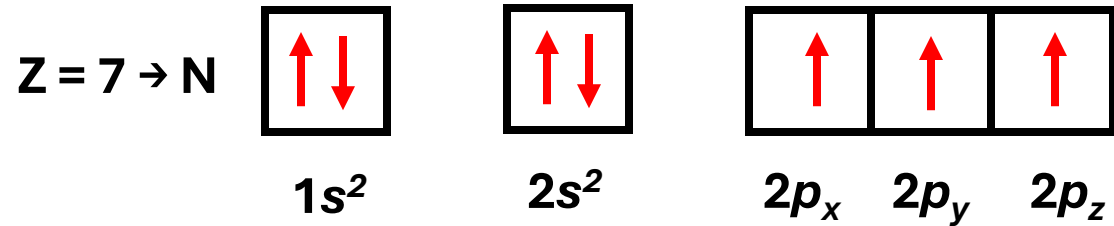
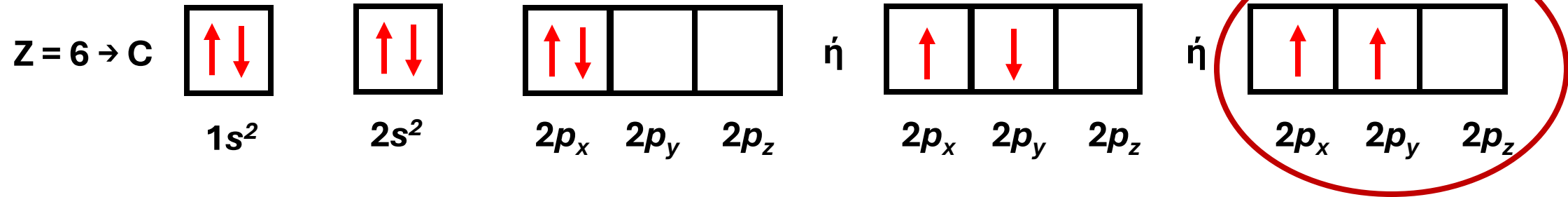
Ένα τροχιακό χωράει μέχρι 2 e  
τα οποία θα έχουν αντίθετα spin

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Ο κανόνας του Hund ή μέγιστης πολλαπλότητας του spin

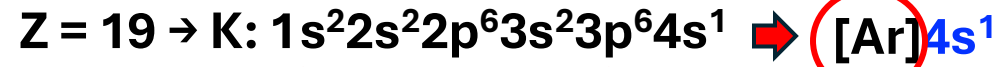
Τα ηλεκτρόνια τοποθετούνται σε διαφορετικά τροχιακά του ίδιου υποφλοιού με παράλληλα spin,

πριν από κάθε σύζευξη ηλεκτρονίων



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

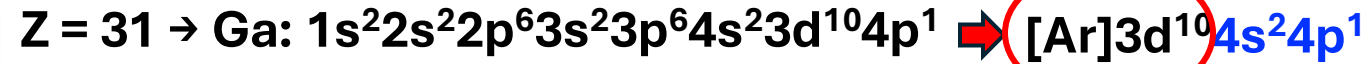
## Η αρχή της δόμησης



Κορμός ευγενούς αερίου



Κορμός ψευδοευγενούς αερίου



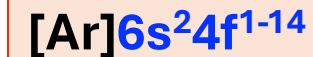
Ηλεκτρόνια σθένους

Φλοιός σθένους

Z = 21 – 30: μέταλλα μετάπτωσης



Z = 57 – 71: λανθανίδες ή σπάνιες γαίες

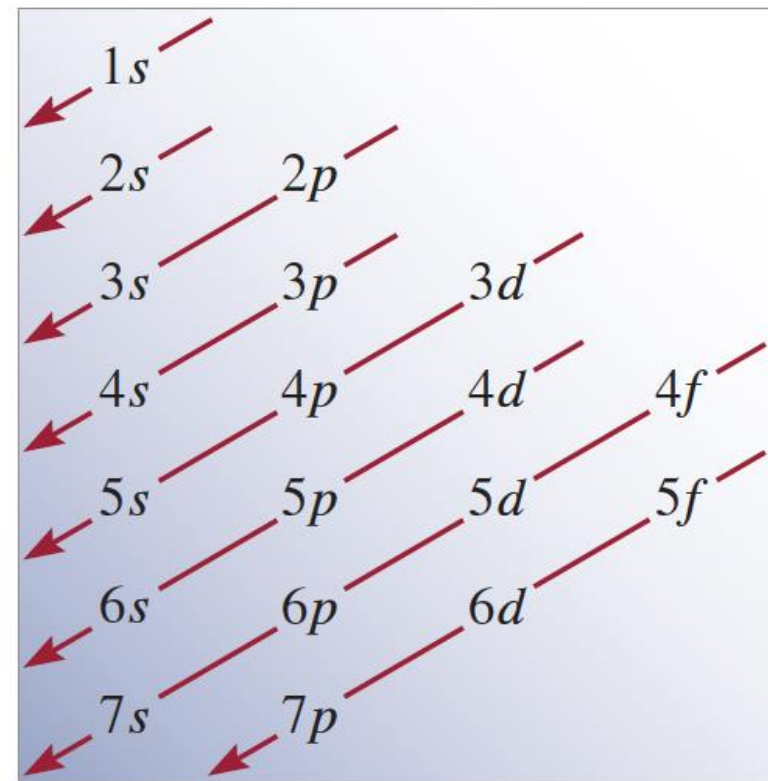


Εξαιρέσεις: Z = 24 → Cr:  $[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$  ΟΧΙ  $[\text{Ar}] 3d^4 4s^2$

Z = 29 → Cu:  $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$  ΟΧΙ  $[\text{Ar}] 3d^9 4s^2$

Εξαιρέσεις:

Z = 64 → Gd:  $[\text{Xe}] 4f^7 5d^1 6s^2$  ΟΧΙ  $[\text{Xe}] 4f^8 6s^2$



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Η αρχή της δόμησης

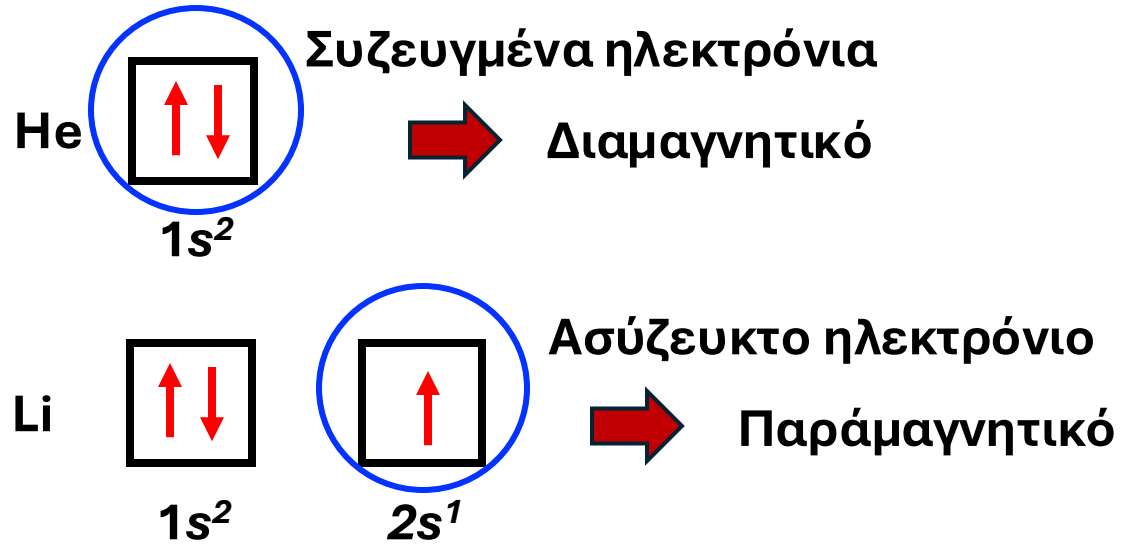
	1s		1s
	2s	<b>d block</b>	2p
	3s	$(n-1)d^x ns^y$	3p
<b>s block</b>		$x = 1 - 10, y = 1 - 2$	<b>p block</b>
$ns^x$	4s	3d	4p
$x = 1 - 2$	5s	4d	5p
	6s	5d	6p
	7s	6d	7p

**f block**  
 $(n-2)f^x(n-1)d^y ns^2$   
 $x = 1 - 14, y = 0 - 1$

4f
5f

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Διαμαγνητισμός και παραμαγνητισμός



## Ζυγός Gouy



Προσδιορισμός  
ασυζεύκτων ηλεκτρονίων



Πότε ένα άτομο έχει ασύζευκτα ηλεκτρόνια:

Περιττός αριθμός ηλεκτρονίων →

τουλάχιστον ένα ασύζευκτο ηλεκτρόνιο

Άρτιος αριθμός ηλεκτρονίων →

μπορεί να έχει ή να μην έχει ασύζευκτα ηλεκτρόνια

διαμόρφωση των ηλεκτρονίων στα τροχιακά



# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Τα ατομικά τροχιακά

Παράδειγμα:

- (α) Ποιες είναι οι επιτρεπτές τιμές για τον  $m_l$  όταν  $n = 4$  και  $l = 1$ ;
- (β) Καταγράψατε τις τιμές των  $n$ ,  $l$  και  $m_l$  για τα τροχιακά του υποφλοιού 4d.
- (γ) Ποιος είναι ο συνολικός αριθμός των τροχιακών με κύριο κβαντικό αριθμό  $n = 3$ ;
- (δ) Ποιος είναι ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων που μπορεί να υπάρχουν στη στάθμη με  $n = 3$ ;

Απάντηση:

(α)  $m_l = -l$  έως  $l \rightarrow -1, 0, 1$

(β)  $n = 4, l = 2, m_l = -2, -1, 0, 1, 2$

(γ)  $n = 3, l = 0, m_l = 0$

$l = 1, m_l = -1, 0, 1$

$l = 2, m_l = -2, -1, 0, 1, 2$

} 9 ή  $n^2$

(δ)  $2n^2 = 18$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## Τα ατομικά τροχιακά

Παράδειγμα:

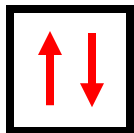
Γράψατε τις ηλεκτρονιακές απεικονίσεις της θεμελιώδους καταστάσεως για (α) θείο (S) και (β) παλλάδιο (Pd).

Απάντηση:

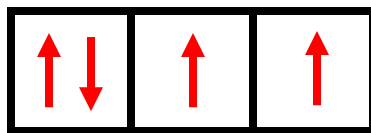
(α) S  $\rightarrow$  Z = 16:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$  ή [Ne] $3s^2 3p^4$

(β) Pd  $\rightarrow$  Z = 46:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 4d^{10}$

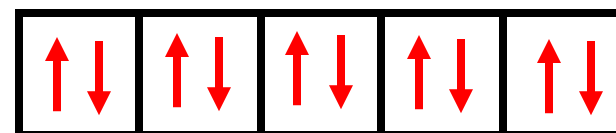
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10}$  ή [Kr] $4d^{10}$



$3s^2$



$3p_x$   $3p_y$   $3p_z$



$4d_{xy}$   $4d_{xz}$   $4d_{yz}$   $4d_{z^2}$   $4d_{x^2-y^2}$

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

---

## Ερωτήσεις – Ασκήσεις – Προβλήματα

**9.1.** (α) Ποιο είναι το μήκος κύματος (σε nm) φωτός με συχνότητα  $8,6 \times 10^{13}$  Hz; (β) Ποια είναι η συχνότητα (σε Hz) φωτός που έχει μήκος κύματος 566 nm;

**9.2.** Ένα φωτόνιο έχει μήκος κύματος 624 nm. Υπολογίσατε την ενέργεια του φωτονίου σε joules.

**9.3.** Το κυανό χρώμα του ουρανού οφείλεται στη σκέδαση του ηλιακού φωτός από τα μόρια του αέρα. Το κυανό φως έχει συχνότητα περίπου  $7,5 \times 10^{14}$  Hz. (α) Υπολογίσατε το μήκος κύματος, σε νανόμετρα, που σχετίζεται με αυτήν την ακτινοβολία και (β) υπολογίστε την ενέργεια, σε joules, ενός φωτονίου που σχετίζεται με αυτή τη συχνότητα.

**9.4.** Ποιο είναι το μήκος κύματος, σε nm, ακτινοβολίας που έχει ενεργειακό περιεχόμενο  $1,0 \times 10^3$  kJ/mol; Σε ποια περιοχή του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος ευρίσκεται αυτή η ακτινοβολία;

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

---

## Ερωτήσεις – Ασκήσεις – Προβλήματα

**9.5.** Όταν φως συχνότητας ίσης με  $2,11 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  φωτίζει στην επιφάνεια του μεταλλικού χρυσού, η κινητική ενέργεια των εκτοξευμένων ηλεκτρονίων ισούται με  $5,83 \times 10^{-19} \text{ J}$ . Ποιο είναι το έργο εξαγωγής του χρυσού;

**9.6.** Η πρώτη γραμμή της σειράς Balmer εμφανίζεται σε μήκος κύματος 656,3 nm. Ποια είναι η ενεργειακή διαφορά μεταξύ των δύο ενεργειακών σταθμών που εμπλέκονται στην εκπομπή που οδηγεί σε αυτή τη φασματική γραμμή;

**9.7.** Ένα ηλεκτρόνιο στο άτομο υδρογόνου μεταβαίνει από μια ενεργειακή κατάσταση των κύριων κβαντικών αριθμών  $n_i$  στην κατάσταση  $n = 2$ . Εάν το εκπεμπόμενο φωτόνιο έχει μήκος κύματος 434 nm, ποια είναι η τιμή του  $n_i$ ;

**9.8.** Ποια από τα ακόλουθα τροχιακά δεν υπάρχουν: 1p, 2s, 2d, 3p, 3d, 3f, 4g;

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

---

## Ερωτήσεις – Ασκήσεις – Προβλήματα

**9.9.** (i) Δώσατε τις τιμές των κβαντικών αριθμών που σχετίζονται με τα τροχιακά: (α) 2p, (β) 3s, (γ) 5d; (ii) Δώσατε τις τιμές των τεσσάρων κβαντικών αριθμών ενός ηλεκτρονίου στα ακόλουθα τροχιακά: (α) 3s, (β) 4p, (γ) 3d.

**9.10.** Ποιος είναι ο συνολικός αριθμός των ηλεκτρονίων που μπορούν να διατηρηθούν σε όλα τα τροχιακά που έχουν τον ίδιο κύριο κβαντικό αριθμό  $n$ ;

**9.11.** Υποδείξατε τον αριθμό των ασυζεύκτων ηλεκτρονίων που υπάρχουν σε καθένα από τα άτομα: B, Ne, P, Sc, Mn, Se, Kr, Fe, Cd, I, Pb.

**9.12.** Γράψατε τις ηλεκτρονιακές απεικονίσεις της θεμελιώδους καταστάσεως των στοιχείων: B, V, Ni, As, I, Au.

**9.13.** Ποιο από τα παρακάτω είδη έχει τα πλέον ασύζευκτα ηλεκτρόνια:  $S^+$ , S, ή  $S^-$ ; Εξηγήσατε πώς φτάσατε στην απάντησή σας.

# 7. ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

---

## Ερωτήσεις – Ασκήσεις – Προβλήματα

**9.14.** (α) Ποια είναι η μικρότερη δυνατή τιμή του  $n$  όταν ο κβαντικός αριθμός  $\ell$  είναι 1; (β) Ποιες είναι οι πιθανές τιμές του  $\ell$  όταν ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός ( $m_\ell$ ) είναι 0, δεδομένου ότι ο  $n \leq 4$ ;

**9.15.** Εάν ο Rutherford και οι συνεργάτες του είχαν χρησιμοποιήσει ηλεκτρόνια αντί σωματίδια άλφα για να διερευνήσουν τη δομή του πυρήνα όπως περιγράφεται στην Ενότητα 2.2, τι θα ανακάλυπταν;