



ΑΤΟΜΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

ΔΙΔΑΚΤΙΚΟΙ ΣΤΟΧΟΙ

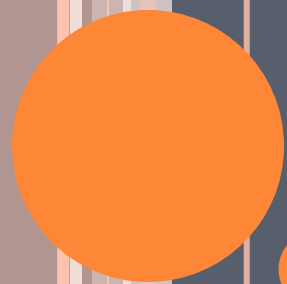
- Να μελετήσετε το άτομο του υδρογόνου με βάση το πρότυπο του Bohr.
- Να γνωρίζετε τις βασικές ιδέες του προτύπου του υδρογόνου σύμφωνα με το κβαντομηχανικό μοντέλο.
- Να κατανοήσετε πως εφαρμόζεται η απαγορευτική αρχή του Pauli στα άτομα με πολλά ηλεκτρόνια.



ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΙΣΗ ΣΤΙΣ ΕΝΟΤΗΤΕΣ ΤΩΝ ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΩΝ ΒΙΒΛΙΩΝ

- Από το βιβλίο του J. Newman «Φυσική της Ζωής»
την §25.1, §25.3, §24.1, §25.4.
- Από το βιβλίο των Freeman/Ruskell/Kesten/
Tauck §26.6.





ΠΡΟΤΥΠΟ ΒΟΗΘ

ΜΟΝΤΕΛΟ ΒΟΗΡ

- Ήταν το πρώτο μη κλασικό μοντέλο που εισήγαγε βασικές ιδέες της κβαντικής μηχανικής στη μελέτη του ατόμου.



ΜΟΝΤΕΛΟ ΒΟΗΡ

○ Βασίζεται στις εξής υποθέσεις:

1) Η κίνηση του ηλεκτρονίου γύρω από το άτομο γίνεται υπό την επίδραση της δύναμης Coulomb.

2) Το ηλεκτρόνιο κινείται μόνο σε συγκεκριμένες τροχιές που ονομάζονται **ΕΠΙΤΡΕΠΟΜΕΝΕΣ** και σε αυτές η στροφορμή είναι κβαντισμένη

$$L = m \cdot v \cdot r = n \cdot \frac{h}{2 \cdot \pi}$$



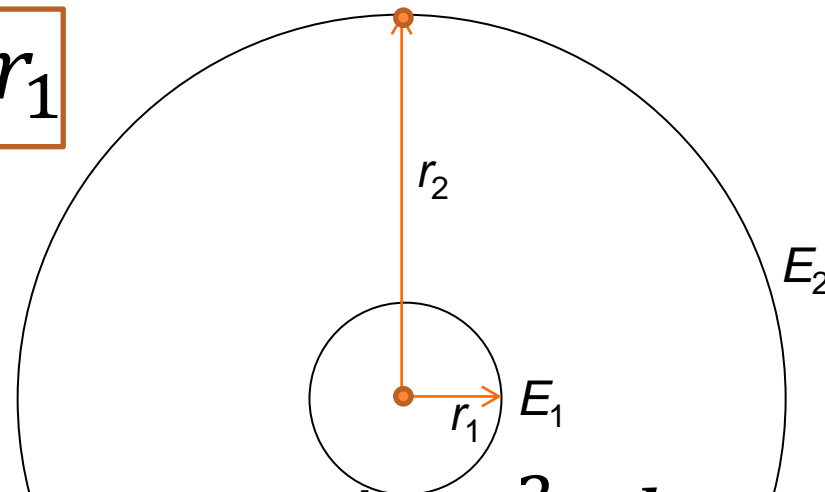
ΜΟΝΤΕΛΟ ΒΟΗΡ

$$r_1 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} =$$

Ακτίνα Bohr

○ Σχηματικά

$$r_n = n^2 \cdot r_1$$



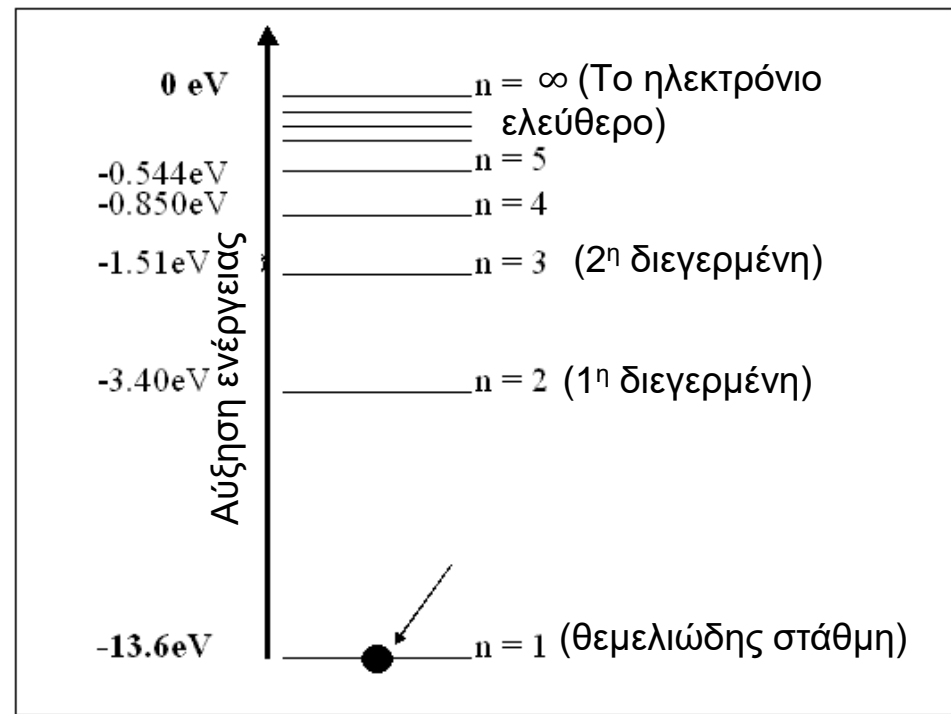
$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

$$E_1 = -\frac{4 \cdot \pi^2 \cdot k_{\eta\lambda} \cdot Z^2 \cdot m_e \cdot e^4}{2 \cdot h^2}$$
$$= -21,76 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$
$$= -13,6 \text{ eV}$$



ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΩΝ ΣΤΑΘΜΩΝ

- Αντί για τις τροχιές πολλές φορές χρησιμοποιούμε ένα διάγραμμα που ονομάζεται διάγραμμα ενεργειακών σταθμών όπως το διπλανό.



ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΩΝ ΣΤΑΘΜΩΝ

- Η ενεργειακές στάθμες έχουν όλες ενέργεια $E_n \leq 0$, γεγονός που σημαίνει ότι το ηλεκτρόνιο είναι δεσμευμένο στον πυρήνα.
- Όσο πιο αρνητική είναι η ενέργεια τόσο πιο ισχυρά δεσμευμένο είναι το ηλεκτρόνιο (απαιτείται μεγαλύτερη προσφορά ενέργειας για αν ελευθερωθεί).

ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΩΝ ΣΤΑΘΜΩΝ

- Προσέξτε ότι επειδή $E_n \propto -\frac{1}{n^2}$ καθώς n αυξάνεται η ενέργεια επίσης αυξάνεται, αλλά η απόλυτη τιμή μειώνεται.
- Το ηλεκτρόνιο συνήθως βρίσκεται στη θεμελιώδη στάθμη $n = 1$.



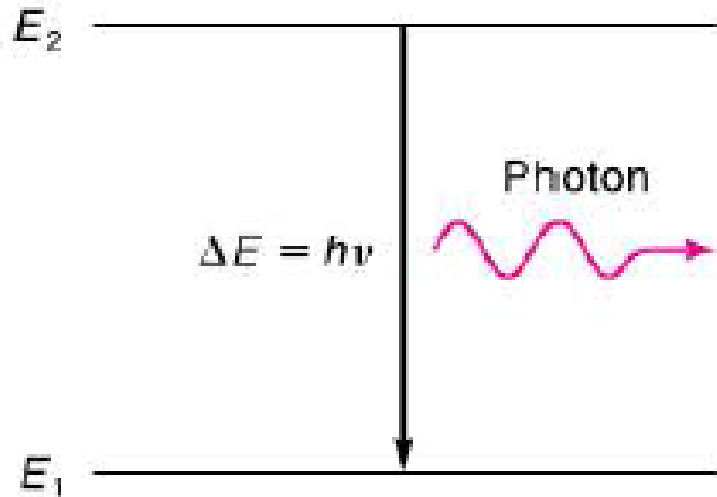
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΩΝ ΣΤΑΘΜΩΝ

- Η απόσταση μεταξύ των ενεργειακών επιπέδων μειώνεται καθώς αυξάνεται το n και καθώς πλησιάζουμε στη στάθμη $n = \infty$ συσσωρεύονται κάτω από την $E_{\infty} = 0$ τείνοντας να δημιουργήσουν μια ενεργειακή ζώνη.



ΜΟΝΤΕΛΟ ΒΟΗΡ

3) Το ηλεκτρόνιο εκπέμπει ενέργεια κάθε φορά που μεταβαίνει από εξωτερική σε εσωτερική τροχιά.

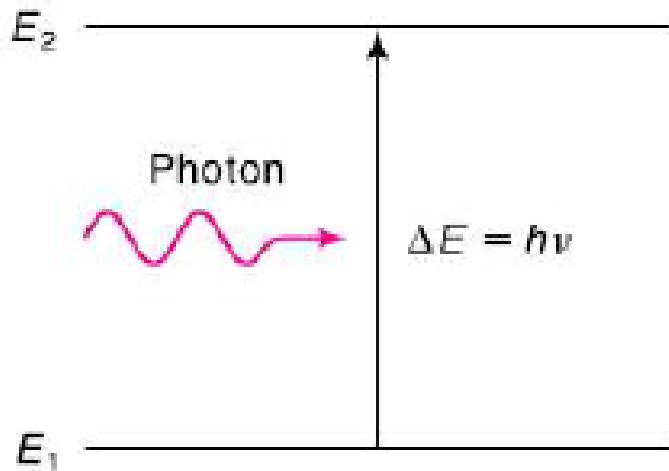


$$\begin{aligned}\Delta E &= E_2 - E_1 = h\nu \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{E_1}{4} - E_1 &= h\nu\end{aligned}$$



ΜΟΝΤΕΛΟ ΒΟΗΡ

3) Αντιθέτως, το ηλεκτρόνιο απορροφά ενέργεια κάθε φορά που μεταβαίνει από εσωτερική σε εξωτερική τροχιά.



$$\begin{aligned}\Delta E &= E_2 - E_1 = h\nu \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{E_1}{4} - E_1 &= h\nu\end{aligned}$$



ΜΟΝΤΕΛΟ ΒΟΗΡ

- Γενικά για οποιαδήποτε μετάβαση μεταξύ δύο σταθμών n και m ($m > n$) είναι:

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_m - E_n = \\ &= \frac{E_1}{m^2} - \frac{E_1}{n^2} = E_1 \cdot \left(\frac{n^2 - m^2}{n^2 \cdot m^2} \right) > 0\end{aligned}$$



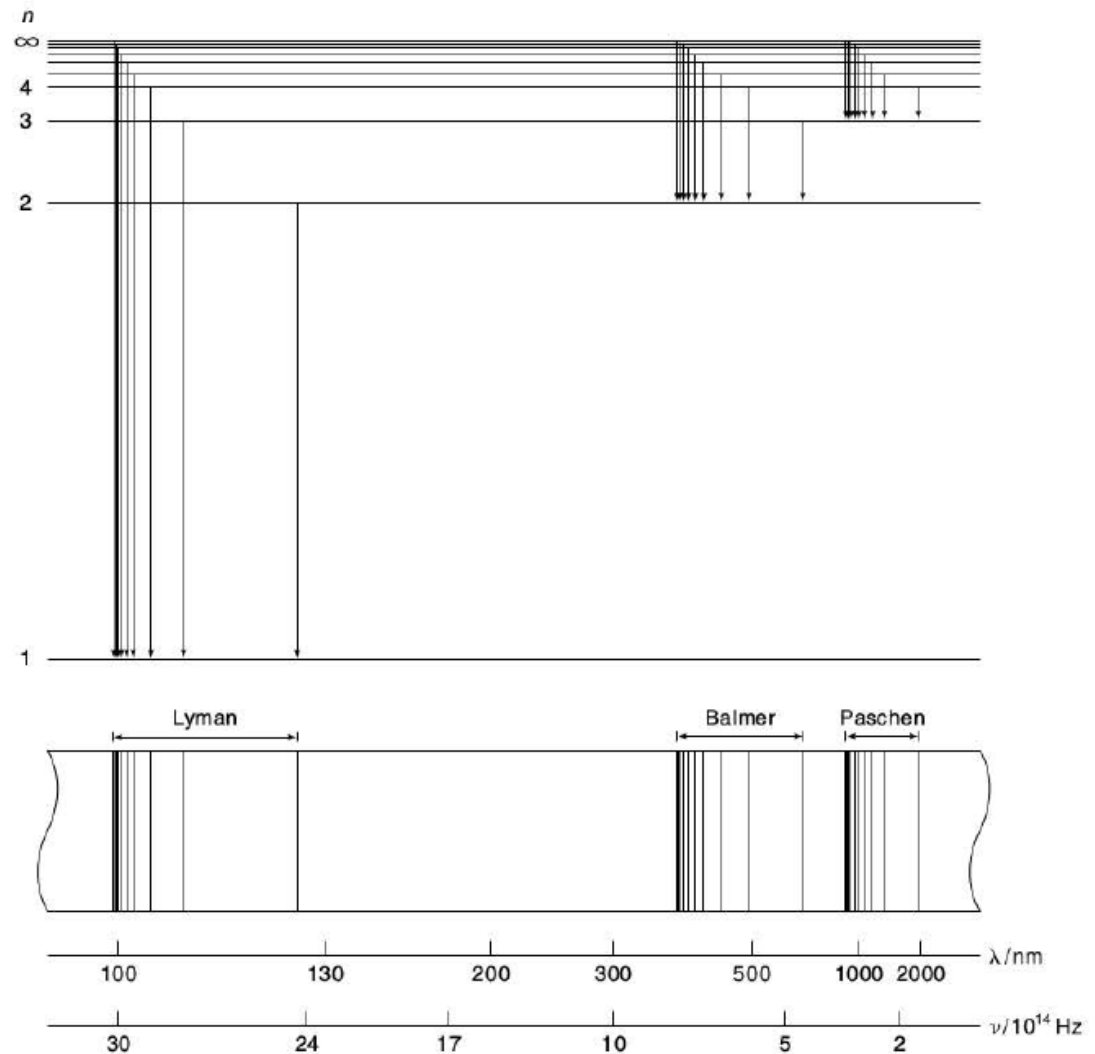
ΕΞΗΓΗΣΗ ΤΟΥ ΓΡΑΜΜΙΚΟΥ ΦΑΣΜΑΤΟΣ ΕΚΠΟΜΠΗΣ

- Μπορούμε να εξηγήσουμε το γραμμικό φάσμα εκπομπής με βάση αυτές τις μεταβάσεις του ηλεκτρονίου από εξωτερικές σε εσωτερικές τροχιές.



ΕΞΗΓΗΣΗ ΤΟΥ ΓΡΑΜΜΙΚΟΥ ΦΑΣΜΑΤΟΣ ΕΚΠΟΜΠΗΣ

○ Σχηματικά



ΚΡΙΤΙΚΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΟΥ ΒΟΗΡ

- Αποτελεί μια μίξη κλασικών (κλασική τροχιά) και κβαντικών ιδεών (κβάντωση της ενέργειας).
- Δίνει σε πολλές περιπτώσεις σωστά αποτελέσματα με απλά μαθηματικά.
- Επιτρέπει μια απλή αναπαράσταση του ατόμου.






ΑΤΟΜΟ ΤΟΥ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ

ΤΟ ΑΤΟΜΟ ΤΟΥ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ

- Η εξ. Schrödinger στις 3 διαστάσεις επιλύεται για δυναμικό Coulomb $V = -k_{ηλ} \cdot \frac{e^2}{r}$ και δίνει ότι:

α) Η ενέργεια του μορίου είναι ΚΒΑΝΤΙΣΜΕΝΗ και δίνεται από τη σχέση:

$$E_n = -\frac{m_e \cdot e^4}{8 \cdot h^2 \cdot \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots$$


ΤΟ ΑΤΟΜΟ ΤΟΥ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ

β) Η έκφραση για την ενέργεια είναι ίδια με αυτή που προκύπτει από το πρότυπο Bohr και συνήθως γράφεται ως:

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

όπου

$$E_1 = - \frac{m_e \cdot e^4}{8 \cdot h^2 \cdot \epsilon_0^2} \cdot$$



ΤΟ ΑΤΟΜΟ ΤΟΥ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ

γ) Οι κυματοσυναρτήσεις που μπορούν να περιγράψουν το άτομο είναι αρκετά πολύπλοκες και δεν θα μας απασχολήσουν. Το μόνο που χρειάζεται να γνωρίζουμε είναι ότι εξαρτώνται από 3 ΚΒΑΝΤΙΚΟΥΣ αριθμούς που συμβολίζονται με n , l , m_l .





ΚΒΑΝΤΙΚΟΙ ΑΡΙΘΜΟΙ

Ο ΚΥΡΙΟΣ ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ

Ο n = κύριος κβαντικός αριθμός καθορίζει την ενέργεια του ατόμου καθώς και το μέγεθος της κατανομής πυκνότητας.

Παίρνει τις ακέραιες θετικές τιμές $n = 1, 2, 3 \dots$



Ο ΔΕΥΤΕΡΕΥΩΝ ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ

Ο $l =$ δευτερεύων ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός καθορίζει το μέτρο της στροφορμής καθώς και το σχήμα της κατανομής της πιθανότητας.

Παίρνει τις ακέραιες τιμές $l = 0, 1, 2 \dots n-1$.



Ο ΔΕΥΤΕΡΕΥΩΝ ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ

- Ο αριθμός l προσδιορίζει τη στροφορμή του ηλεκτρονίου μέσω της σχέσης

$$L = \sqrt{l \cdot (l + 1)} \cdot \frac{h}{2 \cdot \pi}$$



Ο ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΣ ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ

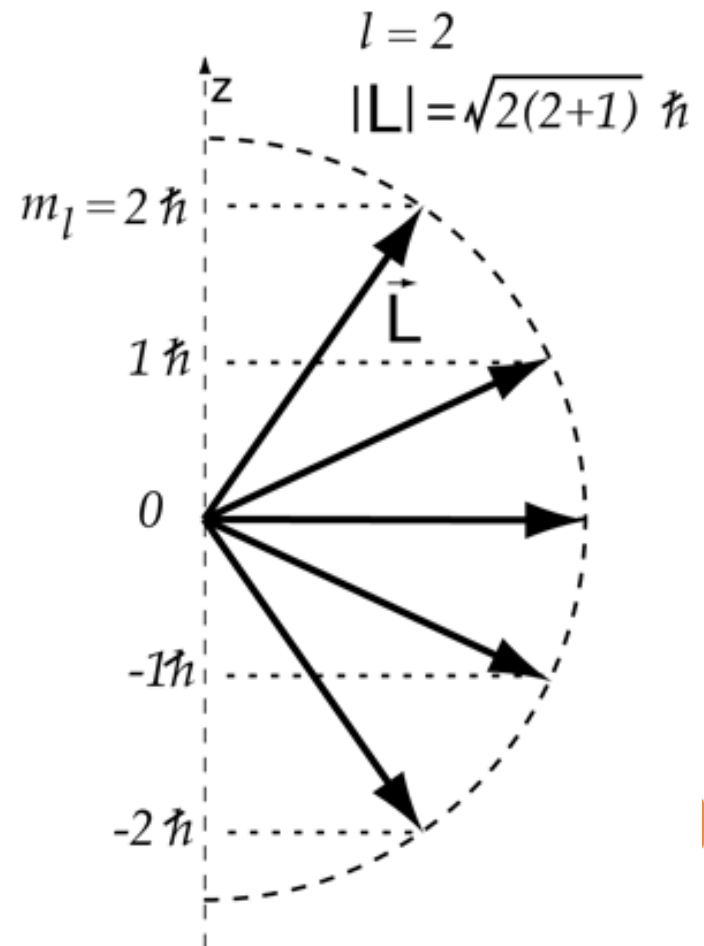
Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_l προσδιορίζει τη διεύθυνση του διανύσματος της στροφορμής καθώς και τον προσανατολισμό της κατανομής πιθανότητας στο χώρο.

Παίρνει τις ακέραιες τιμές $m_l = -l, -l+1, \dots, 0, 1, 2, \dots, l-1, l$.



Ο ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΣ ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ

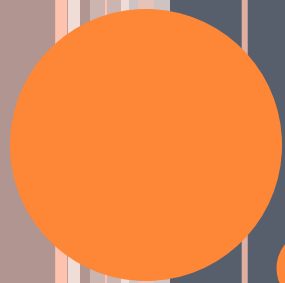
- Ο m_l δείχνει ότι εκτός από το μέτρο και η κατεύθυνση του διανύσματος της στροφορμής είναι κβαντισμένα.



Ο ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ SPIN

- Πέρα από αυτούς τους τρεις κβαντικούς αριθμούς χρειάστηκε να προστεθεί και ένας τέταρτος, ο κβαντικός αριθμός του spin (m_s) που σχετίζεται με την ιδιοστροφορμή του ηλεκτρονίου.
- Οι επιτρεπόμενες τιμές για τον αριθμό αυτό είναι $m_s = \pm \frac{1}{2}$.





APXH PAULI



ΠΟΛΥΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΑ ΑΤΟΜΑ

- Οι 4 κβαντικοί αριθμοί περιγράφουν τις δυνατές καταστάσεις στις οποίες μπορεί να βρίσκεται το άτομο του υδρογόνου.
- Το άτομο του υδρογόνου στη θεμελιώδη κατάσταση χαρακτηρίζεται από $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$ και $m_s = \frac{1}{2}$ ή $-\frac{1}{2}$.



ΠΟΛΥΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΑ ΑΤΟΜΑ

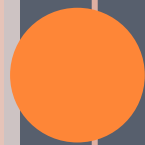
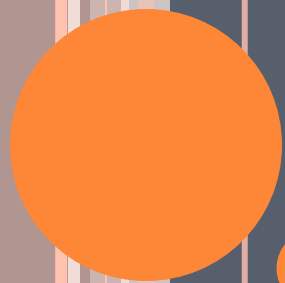
- Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε αυτούς τους 4 κβαντικούς αριθμούς για να περιγράψουμε προσεγγιστικά τα ηλεκτρόνια στα άτομα με περισσότερα ηλεκτρόνια.



ΑΠΑΓΟΡΕΥΤΙΚΗ ΑΡΧΗ ΤΟΥ ΡΑΥΛΙ

- Σε ένα άτομο με πολλά ηλεκτρόνια, δεν μπορεί να υπάρχουν δύο ηλεκτρόνια με την ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών.
- Με βάση την αρχή αυτή δομείται το περιοδικό σύστημα των στοιχείων.





ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ

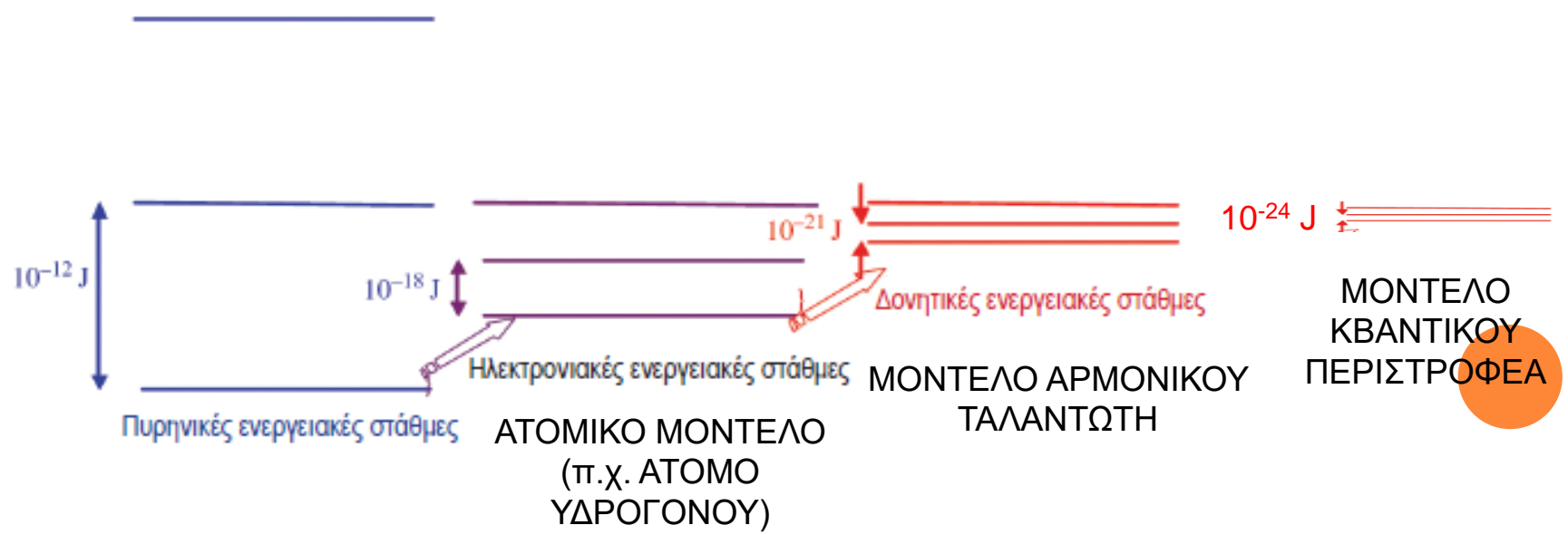
ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑ/ΜΕΙΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΚΩΝ ΤΕΧΝΙΚΩΝ

- Οι φασματοσκοπικές τεχνικές χρησιμοποιούνται γιατί μας δίνουν πληροφορίες σε ατομικό επίπεδο.

ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ	ΜΕΙΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ
Εφαρμόζονται σε διαλύματα που είναι μια κοινή κατάσταση για τα δείγματά μας.	Δεν είναι πάντα εύκολο να ερμηνευθούν τα αποτελέσματά τους καθώς υπάρχουν πολλά ενεργειακά επίπεδα που εμπλέκονται.
Μπορεί να χρησιμοποιηθούν για την μελέτη δυναμικών φαινομένων, δηλαδή, διεργασιών ενώ εξελίσσονται χρονικά.	
Είναι αρκετά ευαίσθητες και μπορούν να αποκαλύψουν μικρές μεταβολές στο δείγμα μας.	

ΒΑΣΙΚΗ ΙΔΕΑ ΤΩΝ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΚΩΝ ΤΕΧΝΙΚΩΝ

- Χρησιμοποιώντας ακτινοβολία κατάλληλης ενέργειας μπορούμε να μελετήσουμε τις διαφορετικές ενεργειακές στάθμες ενός δείγματος ανάλογα με τις πληροφορίες που θέλουμε να πάρουμε (πχ. σκληρότητα δεσμού, δονητικές στάθμες).
- Σχηματικά



ΒΑΣΙΚΗ ΙΔΕΑ ΤΩΝ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΚΩΝ ΤΕΧΝΙΚΩΝ

- Στη συνέχεια, εφόσον αυτό είναι εφικτό, επιχειρούμε να συσχετίσουμε κάποια χαρακτηριστικά του φάσματος (π.χ. τις κορυφές του) σε συγκεκριμένες ατομικές διαδικασίες.
- Το βήμα αυτό μπορεί να είναι εξαιρετικά δύσκολο όταν το μόριο γίνεται μεγάλο και περίπλοκο.



ΒΑΣΙΚΗ ΙΔΕΑ ΤΩΝ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΚΩΝ ΤΕΧΝΙΚΩΝ

○ Επομένως, κάθε περιοχή του Η/Μ φάσματος συνδέεται με τη μελέτη συγκεκριμένων ενεργειακών σταθμών.

○ Σχηματικά

	γ-ray	X-ray	Ultraviolet		Visible		Infrared		Microwave	Radio frequency	
Wavelength/ nm	0.0003	0.03	10	30	400	800	1000	3×10^5	3×10^7	3×10^{11}	3×10^{13}
Frequency/ Hz	1×10^{21}	1×10^{19}	3×10^{16}	1×10^{16}	8×10^{14}	4×10^{14}	3×10^{14}	1×10^{12}	1×10^{10}	1×10^6	1×10^4
Wavenumber/ cm^{-1}	3×10^{10}	3×10^8	1×10^6	3×10^5	3×10^4	1.3×10^4	1×10^4	33	3	3×10^{-5}	3×10^{-7}
Energy/ (kJ mol^{-1})	4×10^8	4×10^6	1.2×10^4	4×10^3	330	170	125	0.4	4×10^{-3}	4×10^{-7}	4×10^{-9}
Phenomenon observed	Nuclear transitions		Inner electronic transitions $\sigma \rightarrow \sigma^*$		Outer electronic transitions $\pi \rightarrow \pi^*, n \rightarrow \pi^*$		Molecular vibration		Molecular rotation, electron spin resonance		Nuclear magnetic resonance
Type of spectroscopy	Mössbauer		UV		UV, Visible		IR		Microwave, ESR		NMR