

# Ατομική Φυσική

Η Φυσική των ηλεκτρονίων και των ηλεκτρομαγνητικών δυνάμεων.

Μικρόκοσμος → Κβαντική Φυσική

*Σωματιδιακή φύση του φωτός (γενικότερα της ακτινοβολίας)*

*Κυματική φύση των ηλεκτρονίων (γενικότερα της ύλης)*

*Διακριτές στάθμες ενέργειας*

*Διακριτή εκπομπή – απορρόφηση ενέργειας από την ύλη*

*Φάσματα – Ηλεκτρονική Μικροσκοπία*

## • 1900 – Planck

Η ενέργεια ενός φωτεινού κύματος είναι κβαντισμένη:

Οι μόνες επιτρεπόμενες τιμές της είναι τα ακέραια πολλαπλάσια της ποσότητας  $h \cdot f$  όπου  $f$  η συχνότητα του κύματος και η σταθερά αναλογίας  $h = 6.6256 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$  είναι γνωστή ως **σταθερά του Planck**.

Σχέση συχνότητας με μήκος κύματος:

$f = c/\lambda$ , άρα η ενέργεια

$E = h \cdot c/\lambda$ ,

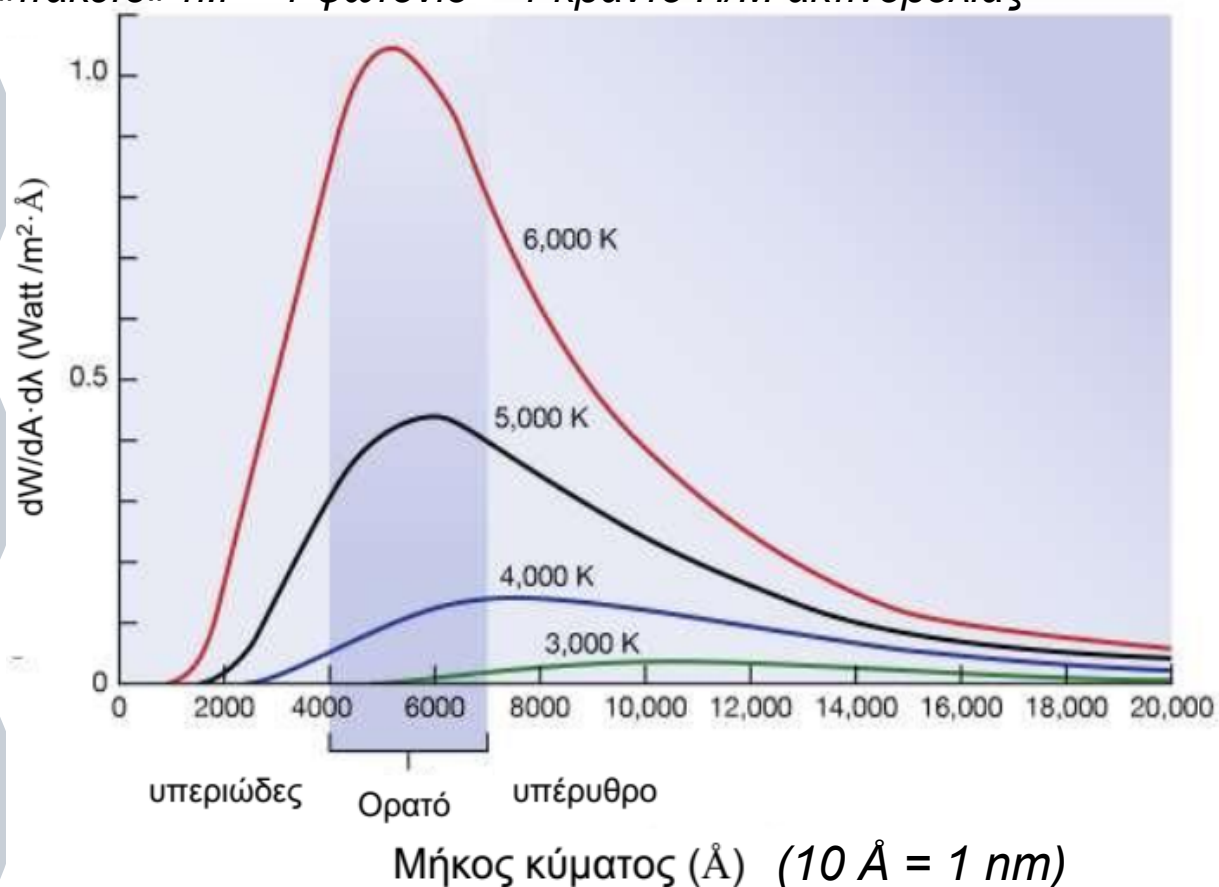
$c$ : ταχύτητα φωτός

**H/M Ακτινοβολία «μέλανος σώματος»:** η ενέργεια εξαρτάται από την συχνότητα ( $f = c/\lambda$ ). Όσο αυξάνεται η θερμοκρασία, τόσο η εκπεμπόμενη ενέργεια μετατοπίζεται σε χαμηλότερα μήκη κύματος (~ ψηλότερες συχνότητες).

**Νόμος Planck:**  $E = h \cdot f = h \cdot c/\lambda$  η ενέργεια λαμβάνει τιμές πολλαπλάσιες του  $h \cdot f$

**Συμπέρασμα:** η ενέργεια δεν εξαρτάται από την ένταση της ακτινοβολίας, αλλά από την συχνότητά της.

Μεγαλύτερη ένταση = περισσότερα «πακέτα» της ίδιας ενέργειας. 1 «πακέτο»  $h \cdot f = 1$  φωτόνιο = 1 κβάντο H/M ακτινοβολίας

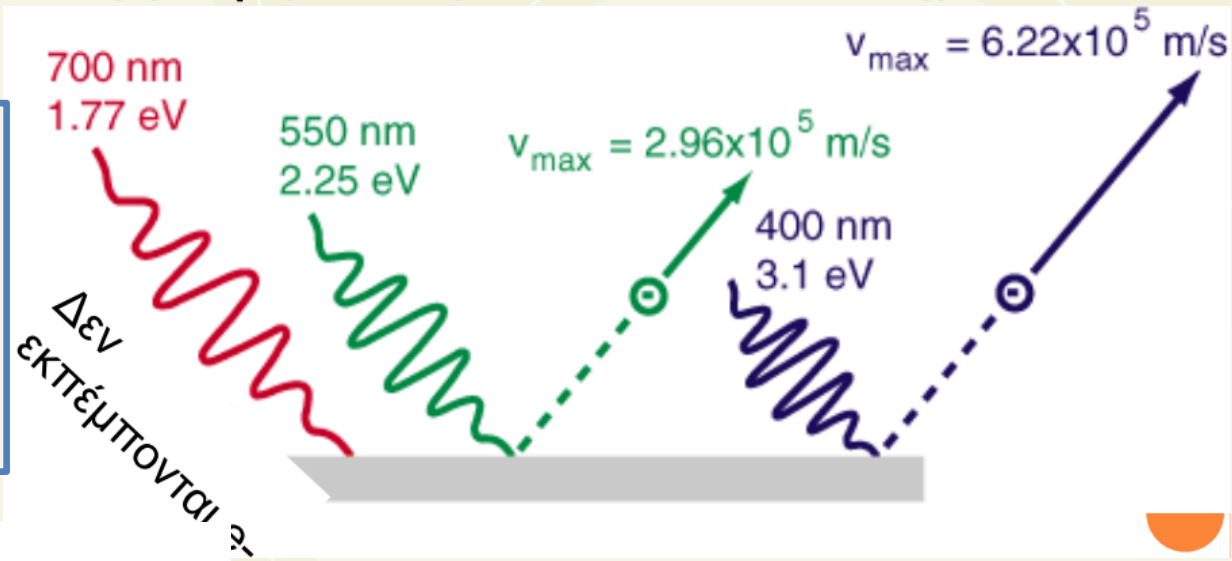


## 1905 – Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (Einstein)

Η ενεργειακή αποτελεσματικότητα του φωτός εξαρτάται από την συχνότητα και όχι από την ένταση. Η ενέργεια μιας φωτεινής ακτίνας αποτελείται από ένα πεπερασμένο αριθμό κβάντων τα οποία μπορούν να παραχθούν ή να απορροφηθούν μόνο σαν ολόκληρες μονάδες.

Απορρόφηση Η/Μ ακτινοβολίας από μέταλλο: Χρειάζεται το φως να έχει μια ελάχιστη συχνότητα ώστε να απορροφηθεί.

Η απορρόφηση της Η/Μ ακτινοβολίας είναι επίσης κβαντισμένη.



- Δεν παράγονται  $e^-$  όταν η συχνότητα είναι κάτω από μια ορισμένη τιμή.
- Το πλήθος των εκπεμπόμενων  $e^-$  είναι ανάλογο της έντασης του φωτός.
- Η κινητική ενέργεια των εκπεμπόμενων φωτονίων είναι ανάλογη της συχνότητας.

Φαινόμενα που αφορούν τη δράση φωτός πάνω στην ύλη.

Όλοι ξέρουμε π.χ. ότι μαυρίζουμε όταν εκτεθούμε σε υπεριώδες φως, το οποίο σημαίνει ότι οι χημικές αντιδράσεις που προκαλούν το μαύρισμα ενεργοποιούνται μόνο όταν η συχνότητα της προσπίπτουσας ακτινοβολίας υπερβεί μια τιμή. Για να γίνει μια χημική αντίδραση πρέπει να δοθεί στα αντιδρώντα μόρια μια ελάχιστη ενέργεια. Αν η H/M ακτινοβολία είχε συνεχή χαρακτήρα, τότε η απαιτούμενη ενέργεια θα μπορούσε να απορροφηθεί σιγά-σιγά και η αντίδραση θα συνέβαινε ανεξάρτητα από τη συχνότητα του προσπίπτοντος φωτός. Δηλ. θα μαυρίζαμε ακόμα και δίπλα σε μια ραδιοφωνική κεραία.

Χωρίς την κβάντωση της H/M ακτινοβολίας, τα ηλεκτρόνια των ατόμων και των μορίων θα απορροφούσαν συνεχώς ενέργεια από H/M ακτινοβολία οποιασδήποτε συχνότητας και η ύπαρξη σταθερών μοριακών δομών θα ήταν αδύνατη.

Η κβάντωση του φωτός (γενικότερα της H/M ακτινοβολίας) είναι **στοιχείο που συνδέεται με την ύπαρξη του έμβριου κόσμου.**



## φωτόνια – κυματοσωματιδιακός δυϊσμός του φωτός

- Το Η/Μ κύμα αποτελείται από φωτόνια (κβάντα) ενέργειας  $E = h \cdot f$
- Αύξηση της φωτεινής έντασης  $I$  σημαίνει αύξηση της ροής των φωτονίων (περισσότερα φωτόνια ανά μονάδα επιφάνειας και χρόνου).
- Τα Η/Μ κύματα έχουν ταυτόχρονα κυματικό και σωματιδιακό χαρακτήρα.
- Ο ασυνεχής σωματιδιακός χαρακτήρας της Η/Μ ακτινοβολίας έχει ανιχνεύσιμες επιπτώσεις μόνο στην περιοχή των μεγάλων συχνοτήτων (δηλ. μικρών μηκών κύματος), γιατί μόνο εκεί η ενέργεια του φωτεινού κβάντου είναι αρκετά μεγάλη ώστε η ατομική δράση του να έχει ανιχνεύσιμες συνέπειες. Αντίθετα, στην περιοχή των ραδιοφωνικών κυμάτων, π.χ, ο σωματιδιακός χαρακτήρας είναι τελείως ανεπαίσθητος. Οι ραδιοηλεκτρολόγοι εξακολουθούν να χρησιμοποιούν στους υπολογισμούς τους την κλασική Η/Μ θεωρία η οποία δίνει αξιόπιστες προβλέψεις στις χαμηλές συχνότητες.

# ΕΠΕΚΤΑΣΗ ΤΟΥ ΚΥΜΑΤΟΣΩΜΑΤΙΔΙΚΟΥ ΔΥΙΣΜΟΥ ΣΤΗΝ ΥΛΗ – ΚΥΜΑΤΑ DE BROGLIE

Όπως το φως (και γενικότερα η Η/Μ ακτινοβολία) έχει και σωματιδιακή φύση (τα φωτόνια - κβάντα ενέργειας  $h \cdot f$ ), κατ' αναλογία, τα υλικά σώματα έχουν και κυματική φύση. Ο **de Broglie** πρότεινε η θεώρηση του κυματοσωματιδιακού δυϊσμού να επεκταθεί και στην ύλη.

**ορμή φωτεινού κύματος  $p$ :  $E = p \cdot c$  και  $E = h \cdot c / \lambda \rightarrow p = h / \lambda \rightarrow \lambda = h / p$**

**Τα υλικά αντικείμενα με  $p = m v$  (m: μάζα, v: ταχύτητα) θα έχουν ισοδύναμο μήκος κύματος de Broglie  $\lambda = h / (m v)$**

**Ηλεκτρόνιο κινητικής ενέργειας 1eV -->  $\lambda \sim 1$  nm, παρόμοιο με των ακτίνων Χ --> μελέτη της δομής της ύλης --> ηλεκτρονικό μικροσκόπιο**

**από την ενέργεια στο μήκος κύματος για υλικά σωματίδια με μάζα m:**

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = p^2 / 2m \rightarrow p = \sqrt{2mE} \rightarrow \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

## Υπολογισμός Μήκους κύματος De Broglie

I) Ηλεκτρόνιο επιταχυνόμενο από δυναμικό  $V = 100 \text{ kV}$

$$(m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}, e^- = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C})$$

ii) Άτομο Ηλίου που κινείται με  $1000 \text{ m/s}$  ( $m_{\text{He}} = 6,645 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ )

iii) Σφαίρα  $1 \text{ g}$  που κινείται με  $100 \text{ m/s}$

$$\text{i) } K = eV = \frac{1}{2} m_e v_e^2 = \frac{p_e^2}{2m_e}$$

$$p_e = \sqrt{2m_e eV} \quad (m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}, e^- = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C})$$

$$\lambda = \frac{h}{p_e} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}}$$

$$1 \text{ pm} = 10^{-3} \text{ nm} = 10^{-12} \text{ m}$$

$$\lambda_e = 6,625 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} / \dots = 3,87 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 3,87 \text{ pm}$$

} ΚΒΑΝΤΙΚΗ  
ΦΥΣΙΚΗ

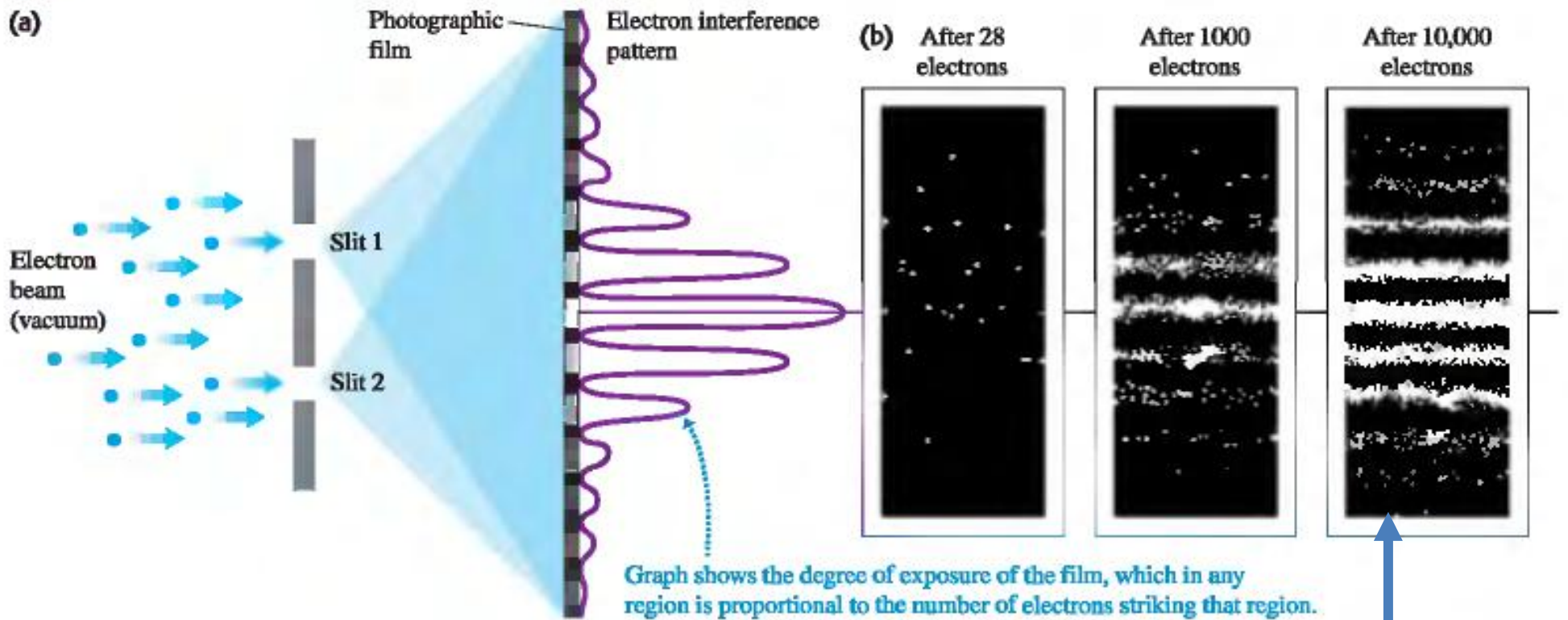
$$\text{ii) } \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v} = 9,97 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 99,7 \text{ pm}$$

$$\text{iii) } \lambda_{\text{σφαιρας}} = 6,625 \cdot 10^{-33} \text{ m}$$

→  $\lambda_{\text{σφαιρας}}$  μη ανιχνεύσιμο  
→ ΚΛΑΣΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

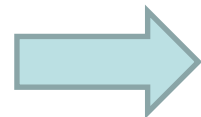
# Κυματική φύση των ηλεκτρονίων – πειραματική επιβεβαίωση ΠΕΡΙΘΛΑΣΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ – ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΟ ΜΙΚΡΟΣΚΟΠΙΟ Το πείραμα των 2 σχισμών με ηλεκτρόνια

**39.9** (a) Formation of an interference pattern for electrons incident on two slits, (b) after 28, 1000, and 10,000 electrons.



Εικόνα περίθλασης κύματος: φωτεινές και σκοτεινές περιοχές

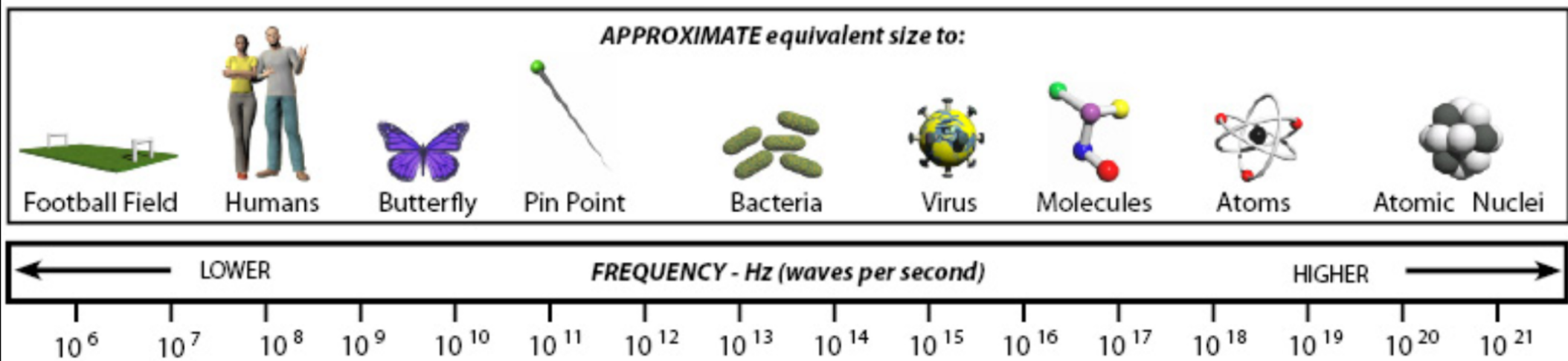
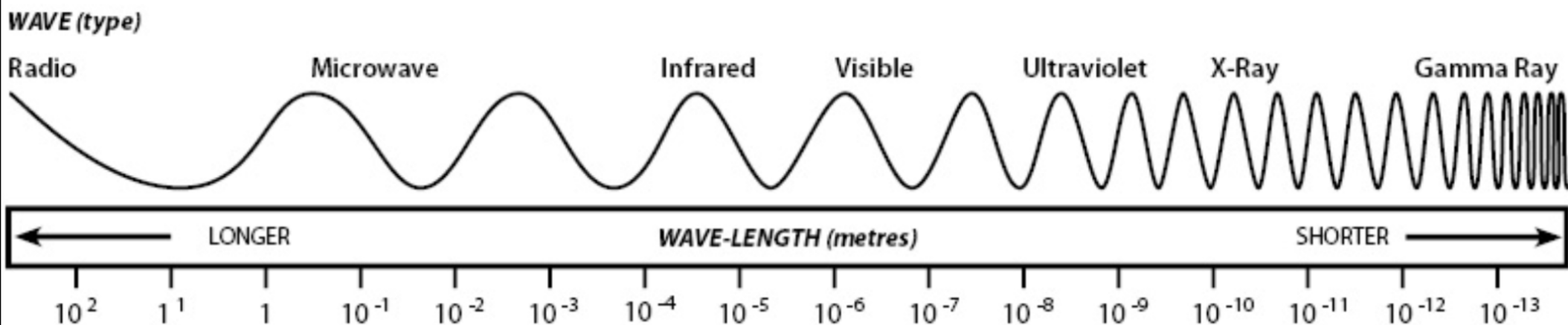
Μεμονωμένα ηλεκτρόνια περνάνε και από τις 2 σχισμές και αλληλεπιδρούν με τον εαυτό τους



ΦΑΙΝΕΤΑΙ ΑΔΙΑΝΟΗΤΟ !!!!

# THE ELECTRO MAGNETIC SPECTRUM

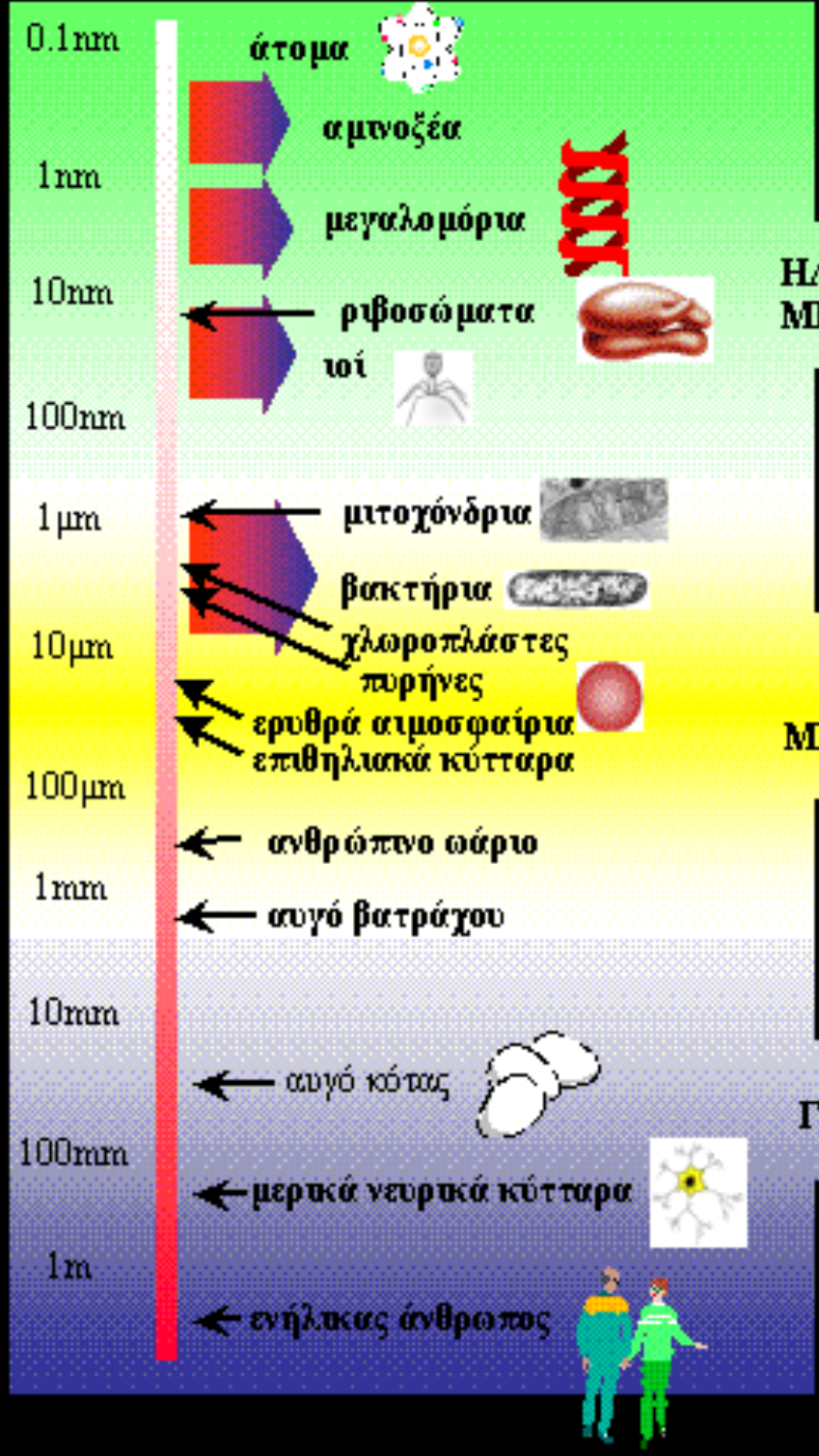
1 metre = 100cm   1 cm = 10mm   1 millimetre = 1000 microns   1 micron = 1000 nanometres (nm) - one nanometre is one billionth of a metre  
 $10^{-5} = 0.00001$     $10^5 = 100,000$



Electromagnetic Radiation detected by the human eye is called visible light and falls approximately between 700 and 400 nanometres







**ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΟ  
ΜΙΚΡΟΣΚΟΠΙΟ**



**ΟΠΤΙΚΟ  
ΜΙΚΡΟΣΚΟΠΙΟ**



**ΓΥΜΝΟ ΜΑΤΙ**



## Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο

ορατό φως: διακριτική ικανότητα  $\sim 200 \text{ nm}$

Για μελέτη σωμάτων σε μικρότερη κλίμακα  $\rightarrow$  πρέπει να μειώσουμε το  $\lambda$

Τα ηλεκτρονικά μικροσκόπια χρησιμοποιούν δέσμη ηλεκτρονίων αντί για δέσμη φωτός.

Επειδή  $\lambda = h / p = h / m u$ , ρυθμίζοντας την ταχύτητα  $u$  των ηλεκτρονίων ρυθμίζουμε και το  $\lambda$ , άρα την διάκριτική ικανότητα.

Πρακτικά, ρυθμίζεται η ηλεκτρική τάση  $V$  που επιταχύνει τα ηλεκτρόνια.

$e \cdot V = \frac{1}{2} m v^2 = p^2 / 2m$  σχέση τάσης – ταχύτητας – ορμής

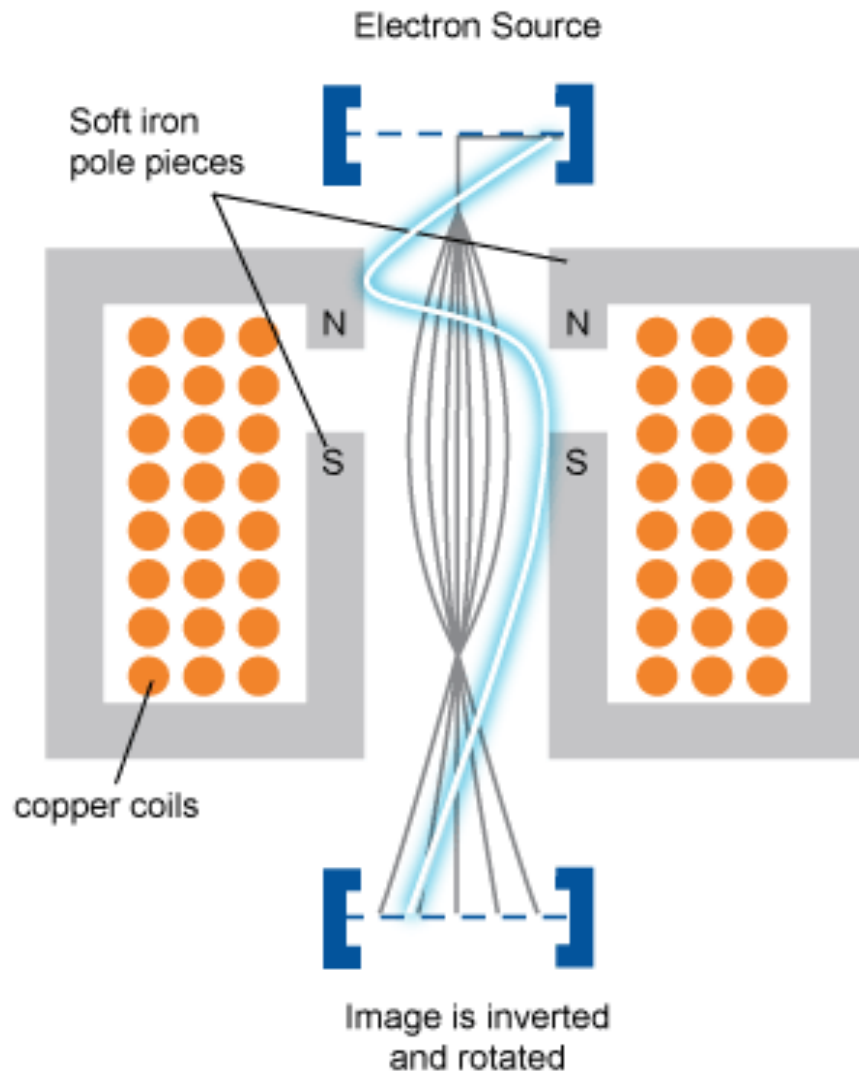
Ενέργεια ηλεκτρικού πεδίου

# Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο

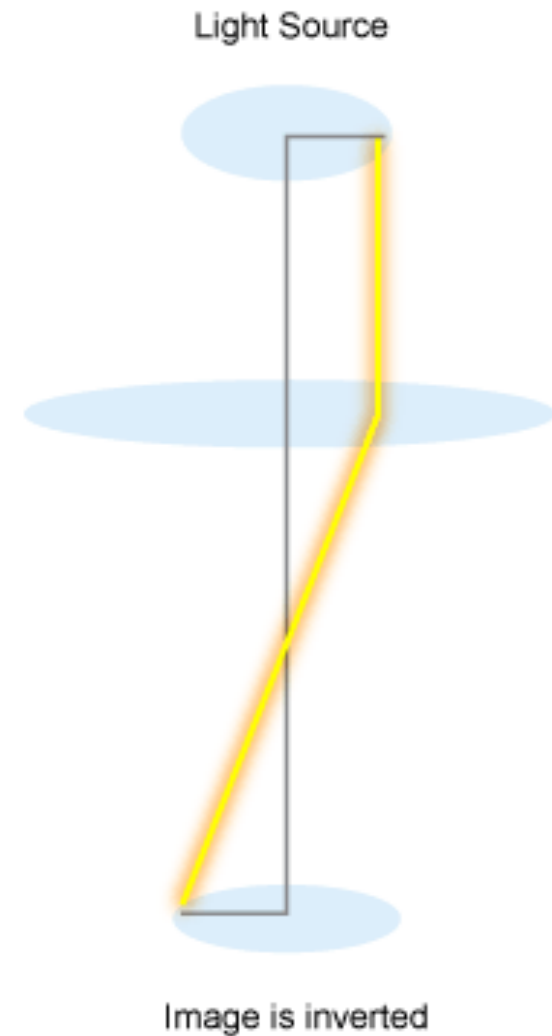
Η εστίαση της δέσμης ηλεκτρονίων γίνεται με μαγνητικούς φακούς

Ρυθμίζοντας την τάση  $V$  (που επιταχύνει τα ηλεκτρόνια), ρυθμίζουμε το  $\lambda$

## Μαγνητικός φακός



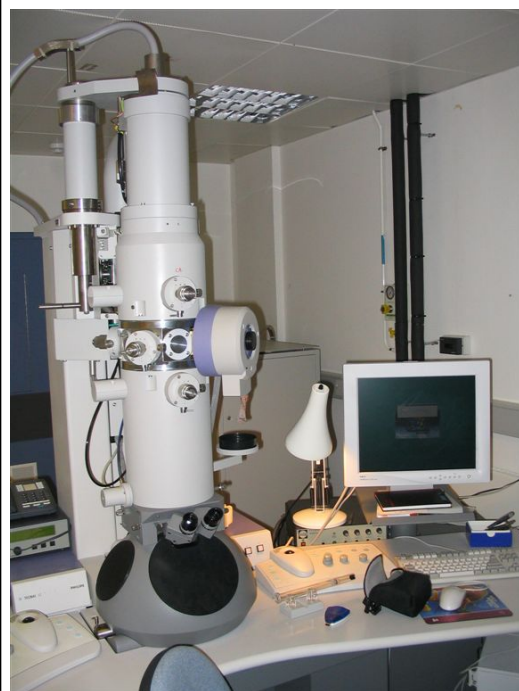
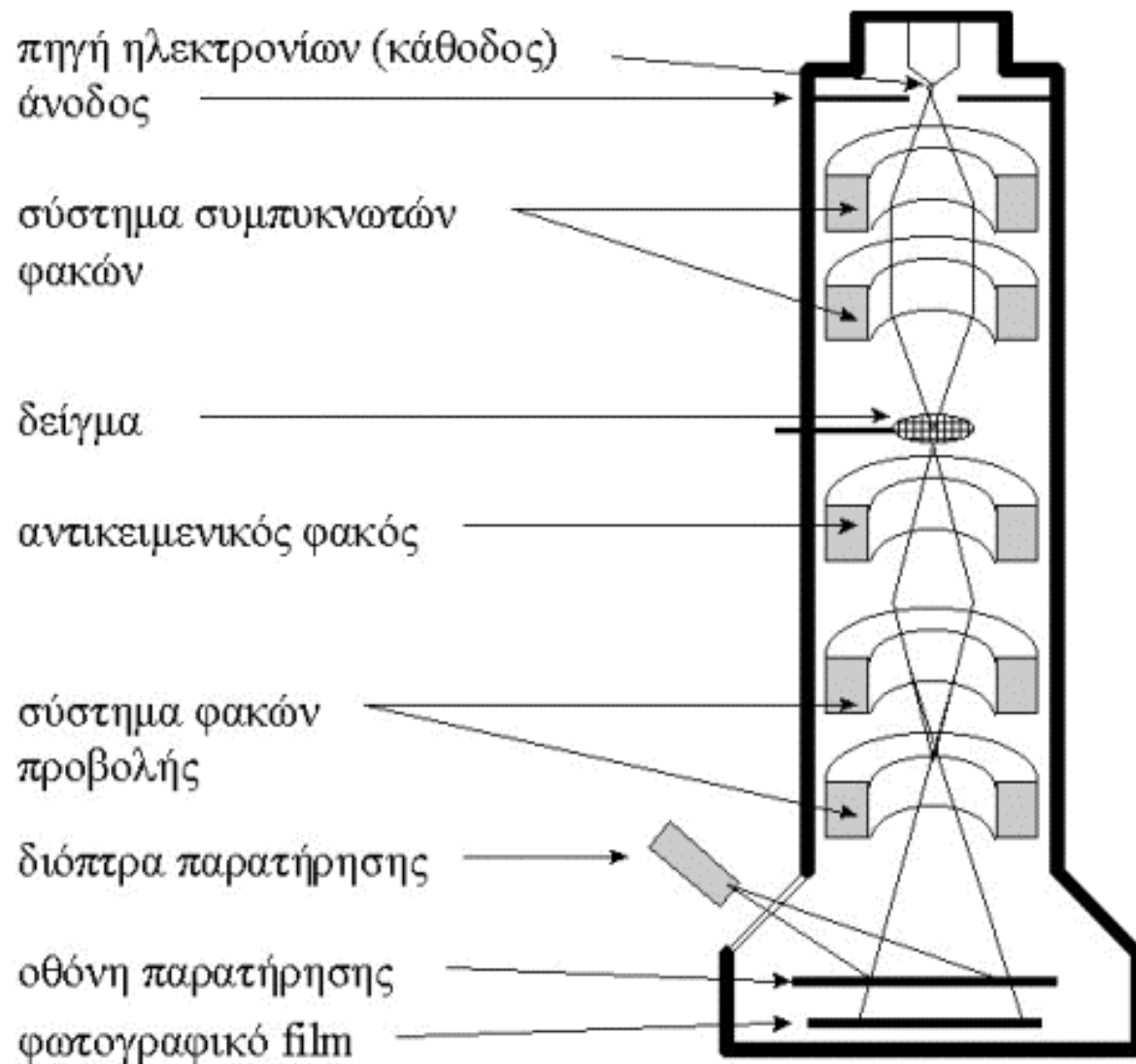
## Οπτικός φακός



# Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διέλευσης ΗΜΔ (TEM, transmission electron microscope)

Η δέσμη ηλεκτρονίων περνά μέσα από το δείγμα και δημιουργεί εικόνα σε οθόνη ή φιλμ.

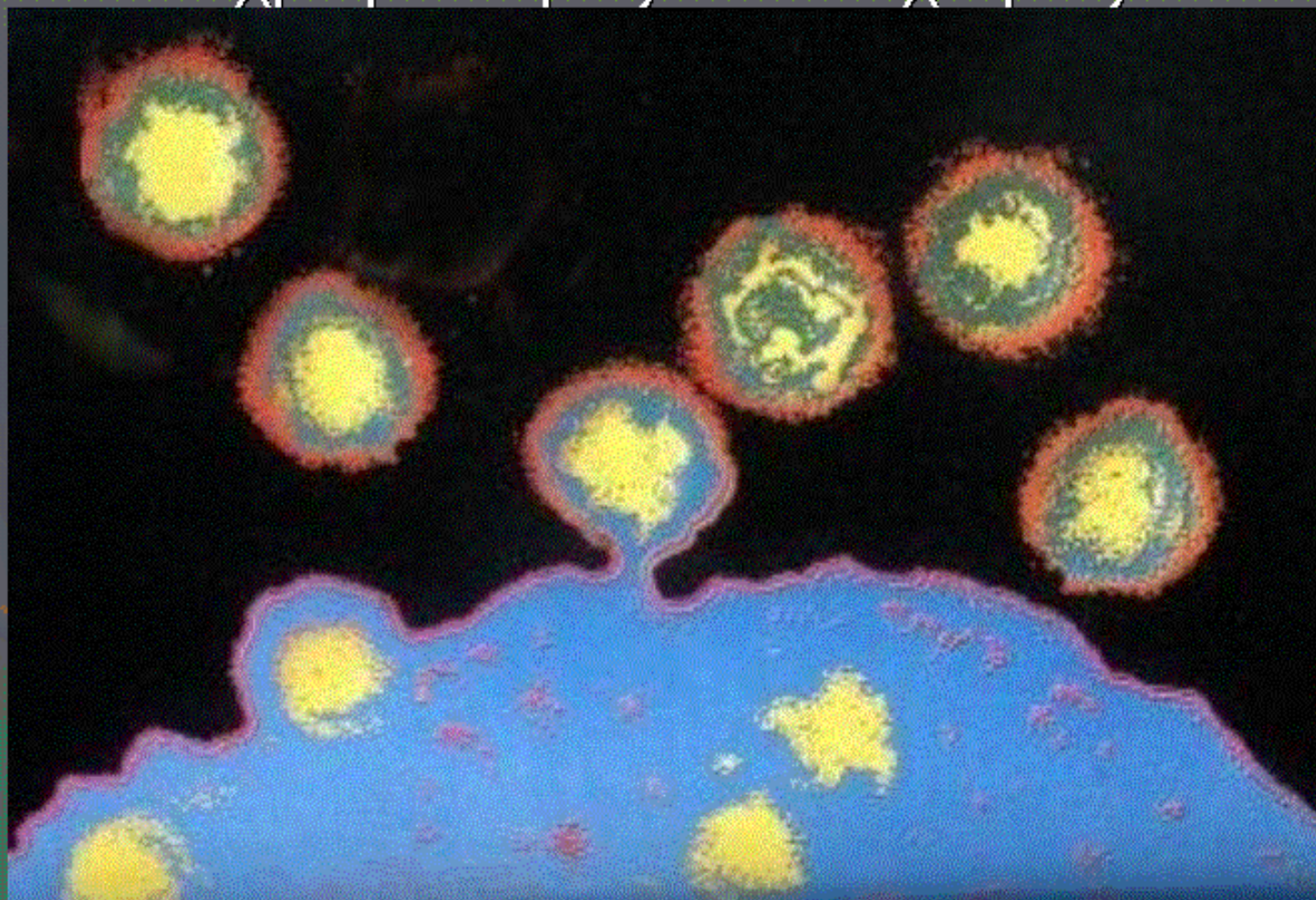
Απαιτείται χρώση του δείγματος με βαριά μέταλλα ώστε να βελτιωθεί η αντίθεση εικόνας (διακριτική ικανότητα  $\sim 2 \text{ \AA} = 0,2 \text{ nm}$ )





## Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο

Ο ιός HIV με το ΗΜΔ.  
Ο χρωματισμός είναι τεχνητός





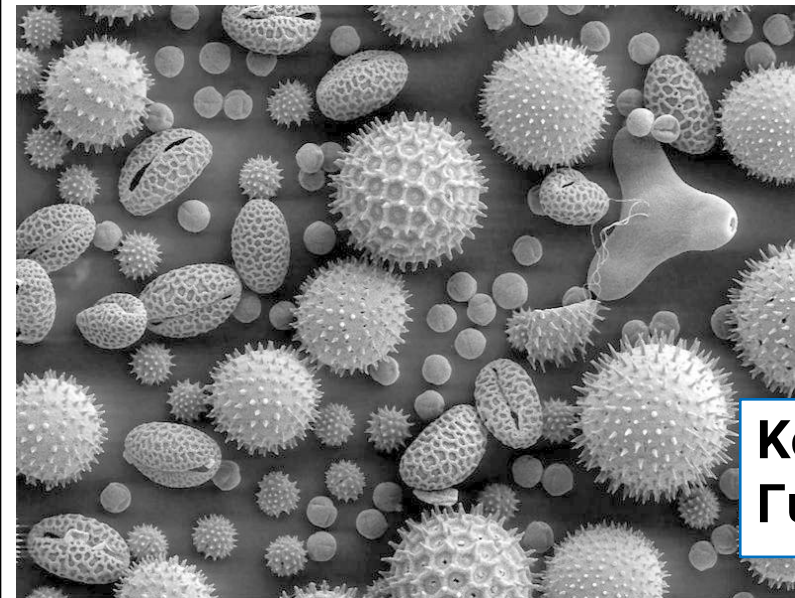
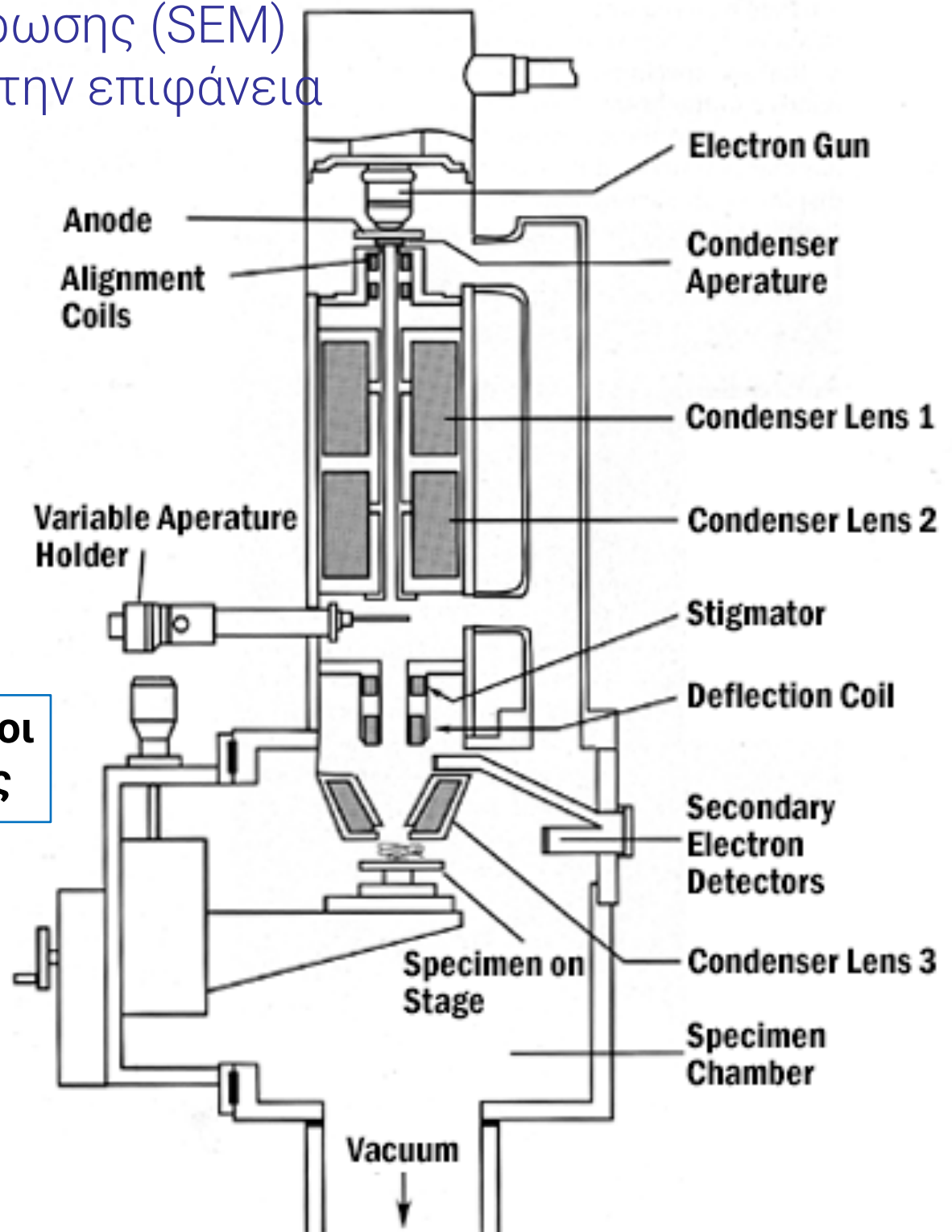
Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο Σάρωσης (SEM)  
Δέση ηλεκτρονίων σαρώνει την επιφάνεια

Απεικόνιση 3D επιφανειών

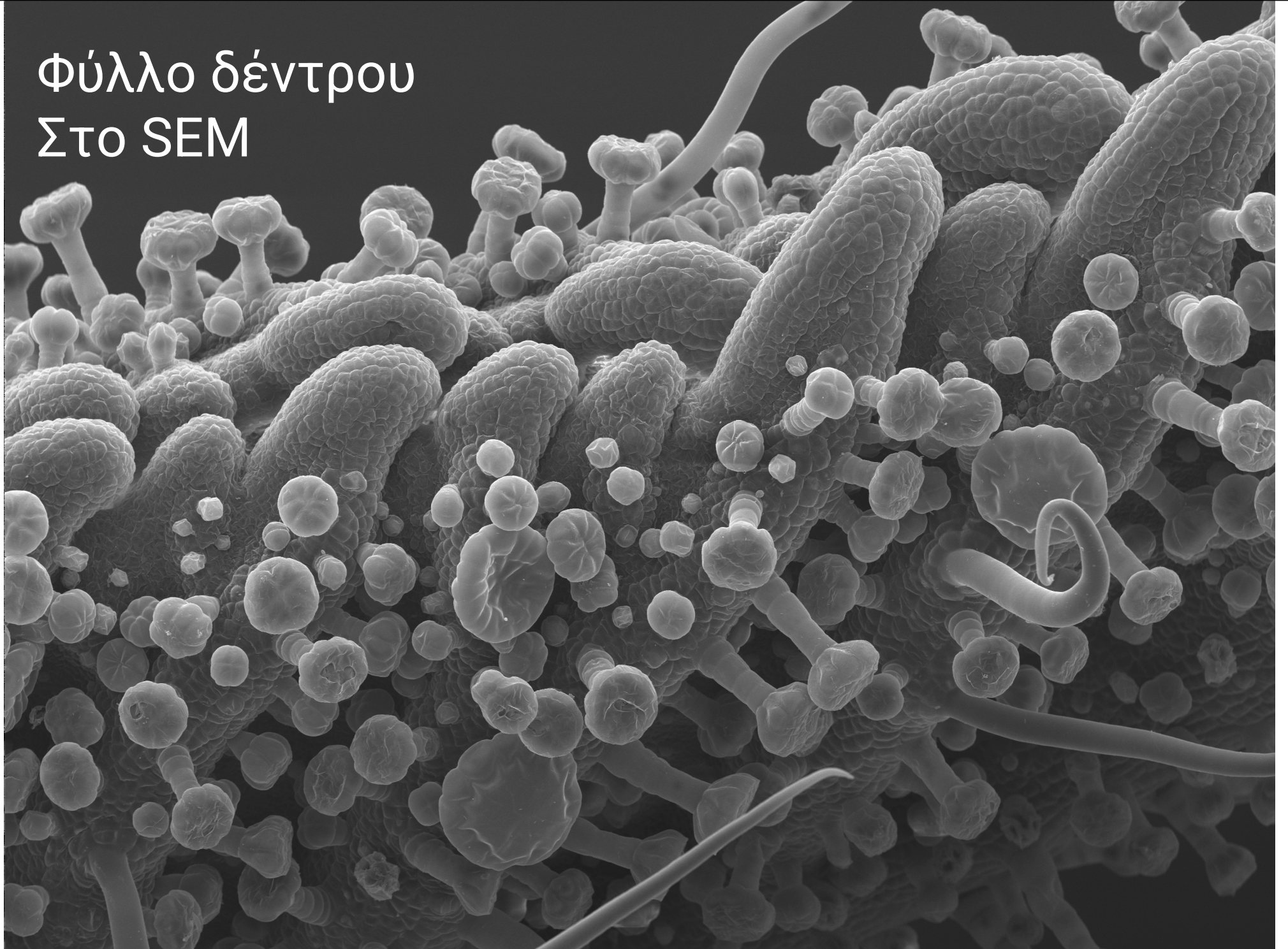
Στοιχειακή ανάλυση

Διακριτική ικανότητα:

$\sim 1 \text{ nm} = 10 \text{ \AA}$



Φύλλο δέντρου  
Στο SEM

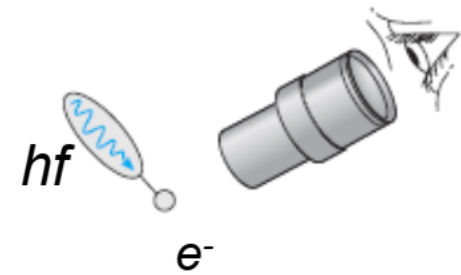


Acc.V Spot Magn Det WD  
15.00 kV 3.0 200x SE 9.2

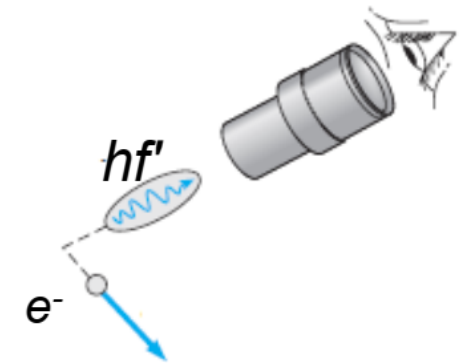
100  $\mu$ m  
Dartmouth E. M. Facility

- Έστω ότι θέλουμε να παρατηρήσουμε ένα ηλεκτρόνιο με τη βοήθεια ενός μικροσκοπίου (ιδεατό πείραμα).
- Θα πρέπει στο ηλεκτρόνιο να προσπέσει τουλάχιστον ένα φωτόνιο.
- Το φωτόνιο όμως θα προσδώσει ενέργεια στο ηλεκτρόνιο αλλάζοντας την ταχύτητά του.

Πριν τη σύγκρουση



Μετά τη σύγκρουση



- Ο Heisenberg έδειξε ότι όσο μειώνουμε το μήκος κύματος (για να αυξήσουμε τη διακριτική ικανότητα) οπότε εντοπίζουμε καλύτερα τη θέση του ηλεκτρονίου, τόσο αυξάνουμε τη συχνότητα οπότε το φωτόνιο έχει μεγαλύτερη ενέργεια με συνέπεια να μεταβάλλει πολύ περισσότερο την ταχύτητα του ηλεκτρονίου.



# Πώς μελετάται η ενεργειακή κατάσταση κβαντικού συστήματος

## Αρχή απροσδιοριστίας ή αβεβαιότητας του Heisenberg:

Δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε ταυτόχρονα την θέση και ορμή ενός σωματιδίου:

$$\Delta x \cdot \Delta p > h/2\pi$$

Ούτε ταυτόχρονα την ενέργεια μιας κατάστασης και τον χρόνο ζωής της:

$$\Delta E \cdot \Delta t > h/2\pi$$

Μας βοηθά να αντιληφθούμε καλύτερα την κυματική φύση της ύλης του μικρόκοσμου

Αντί για θέση  $\rightarrow$  νέφος “πιθανότητας να βρεθεί ένα σωματίδιο σε μία θέση”  
Θέση  $\rightarrow$  “Κυματοσυνάρτηση  $\Psi(x,y,z)$ ”

$\Psi^2(x,y,z)$  = Πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί στο σημείο  $(x,y,z)$

$\Psi^2(x,y,z) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$  = Πιθανότητα να βρεθεί στην περιοχή μεταξύ  $(x,y,z)$  και  $(x+\Delta x, y+\Delta y, z+\Delta z)$ .

Αφού η συνάρτηση  $\psi$  εκφράζει την πιθανότητα, και δεδομένου ότι το σωματίδιο βρίσκεται κάπου θα πρέπει να ισχύει

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 \cdot dx = 1$$

Στην 1 διάσταση.  
Στις 3 διαστάσεις η ολοκλήρωση γίνεται ως προς  $dx \cdot dy \cdot dz$

Το ολοκλήρωμα έχει την έννοια του αθροίσματος των τιμών της  $|\psi^2|$  σε όλον τον συνεχή χώρο



## Η κυματοσυνάρτηση και η εξίσωση Schrodinger:

Ο υπολογισμός της κυματοσυνάρτησης  $\Psi$  μας επιτρέπει να προβλέψουμε την συμπεριφορά ενός κβαντικού συστήματος.

Η Κυματοσυνάρτηση  $\Psi$  υπακούει στην εξίσωση Schrodinger, που είναι μία γενίκευση του νόμου του Νεύτωνα για τον μικρόκοσμο.

Η απλούστερη μορφή της εξίσωσης του Schrodinger είναι η **Στάσιμη, μη χρονοεξαρτώμενη μορφή**, που μας επιτρέπει τον υπολογισμό των ενεργειακών καταστάσεων ενός συστήματος, όταν αυτό βρίσκεται σε ισορροπία. Σε 1 διάσταση:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V \psi = E \psi.$$

είναι μία διαφορική εξίσωση,  
δηλ. μία εξίσωση  
όπου υπάρχουν παράγωγοι της  
ζητούμενης συνάρτησης

όπου  $V(x)$  είναι το δυναμικό  $V$  για το συγκεκριμένο σύστημα που μελετάμε.

π.χ  $V = Ke^2/r$  (Δυναμικό Coulomb) αν πρόκειται για άτομο υδρογόνου

Εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V \psi = E \psi.$$

Το  $E$  είναι οι ενέργειες που αντιστοιχούν στις συναρτήσεις – λύσεις της εξίσωσης.

Εξίσωση Schrodinger => διακριτές λύσεις  $\Psi_n$

$E_n$  είναι η ενέργεια που αντιστοιχεί στη λύση  $\Psi_n$ .

$n$  είναι κβαντικός αριθμός (π.χ  $n=1,2,3..$ ) → για κάθε  $n$  και

μία **ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΛΥΣΗ**

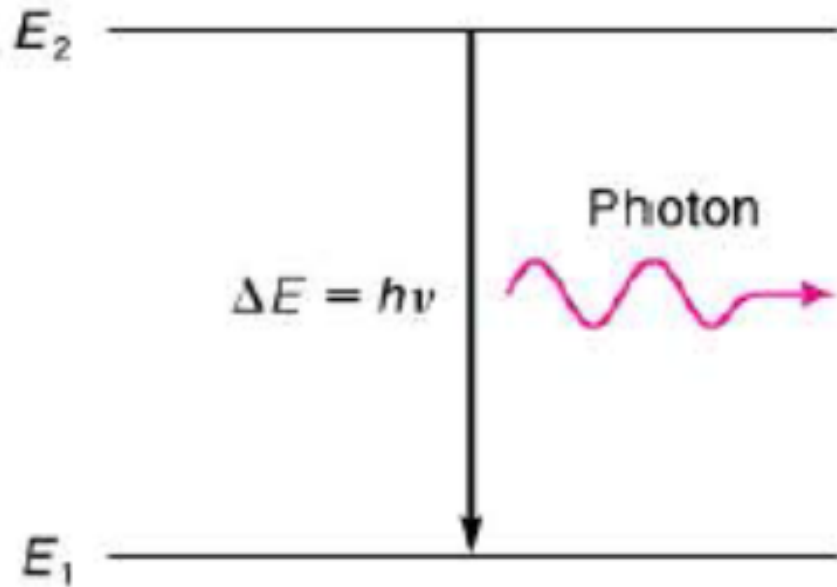
**Η χαμηλότερη στάθμη είναι η θεμελιώδης, οι υψηλότερες**

**είναι οι διεγερμένες**

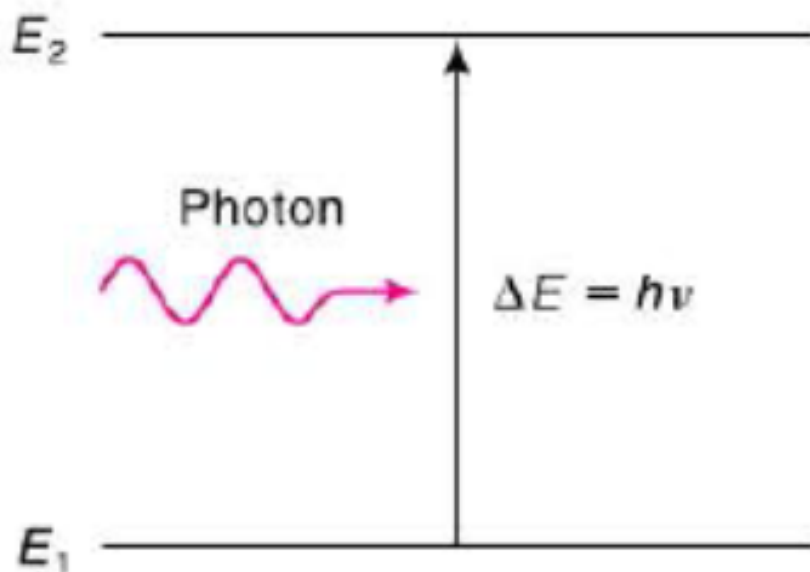
## Βασική συνέπεια: Τα άτομα έχουν διακριτές ενεργειακές στάθμες

- **Τα άτομα και μόρια, βρίσκονται σε διακριτές ενεργειακές στάθμες και**
- **Υφίστανται μεταβάσεις μεταξύ αυτών των ενεργειακών σταθμών όταν αλληλεπιδρούν με την ακτινοβολία.**
- Εάν, ένα ποσό ενέργειας απορροφηθεί από ένα μόριο ή άτομο, όπως π.χ. μπορεί να συμβεί με την απορρόφηση ακτινοβολίας, τότε διεγείρεται σε μία υψηλότερη ενεργειακή στάθμη.
- Όταν ένα μόριο ή άτομο χάνει ενέργεια παρατηρείται *εκπομπή* ακτινοβολίας.
- Η μεταβολή της ενέργειας είναι:
  - $\Delta E = h f = hc/\lambda$

Εκπομπή Η/Μ ακτινοβολίας = αποδιέγερση



Απορρόφηση Η/Μ ακτινοβολίας = διέγερση



# 1° Παράδειγμα κβαντικού συστήματος:

Μονοδιάστατο κουτί δυναμικού μήκους  $L$  (π.χ ένας ατομικός πυρήνας),  
 $V=0$  για  $-L/2 < x < L/2$ , αλλιώς  $V=\infty$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

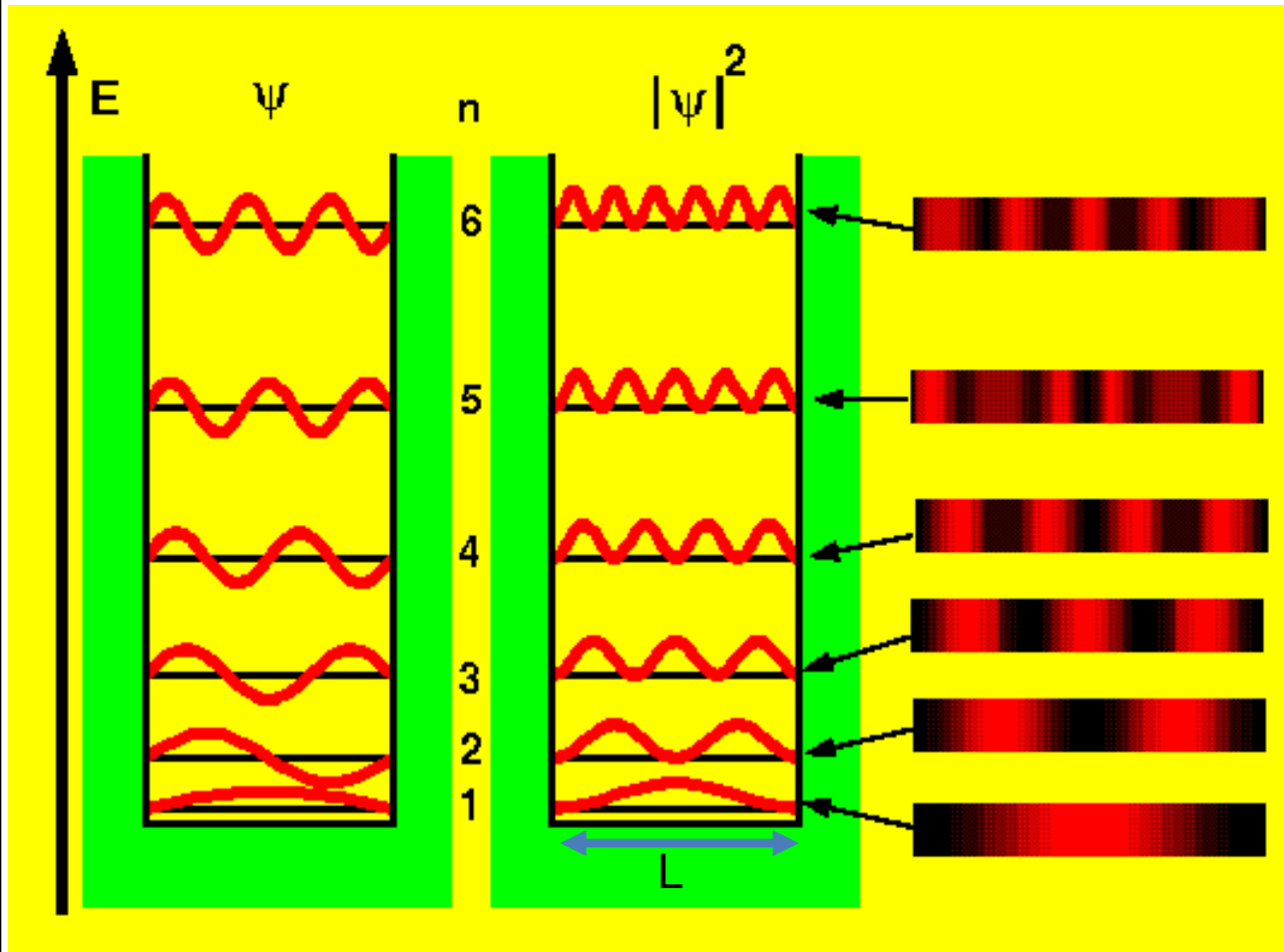
Λύσεις  $\psi_n$ :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

με αντίστοιχες ενέργειες:

$$E_n = n^2 h^2 / 8mL^2,$$

όπου  $n \geq 1$  ακέραιος



Συμπεριφέρονται σαν **στάσιμα κύματα**. Το  $\Psi^2$  μας δείχνει τις πιο πιθανές περιοχές που μπορεί να βρεθεί το σωματίο.

Σε αντίθεση με την κλασική φυσική, η πιθανότητα δεν είναι ομοιόμορφη.

Όταν το  $L$  γίνεται πολύ μεγάλο (μακροσκοπικό), η  $\psi$  τείνει να γίνει ομοιόμορφη και οι ενεργειακές τιμές συνεχείς, πλησιάζοντας την κλασική περιγραφή.



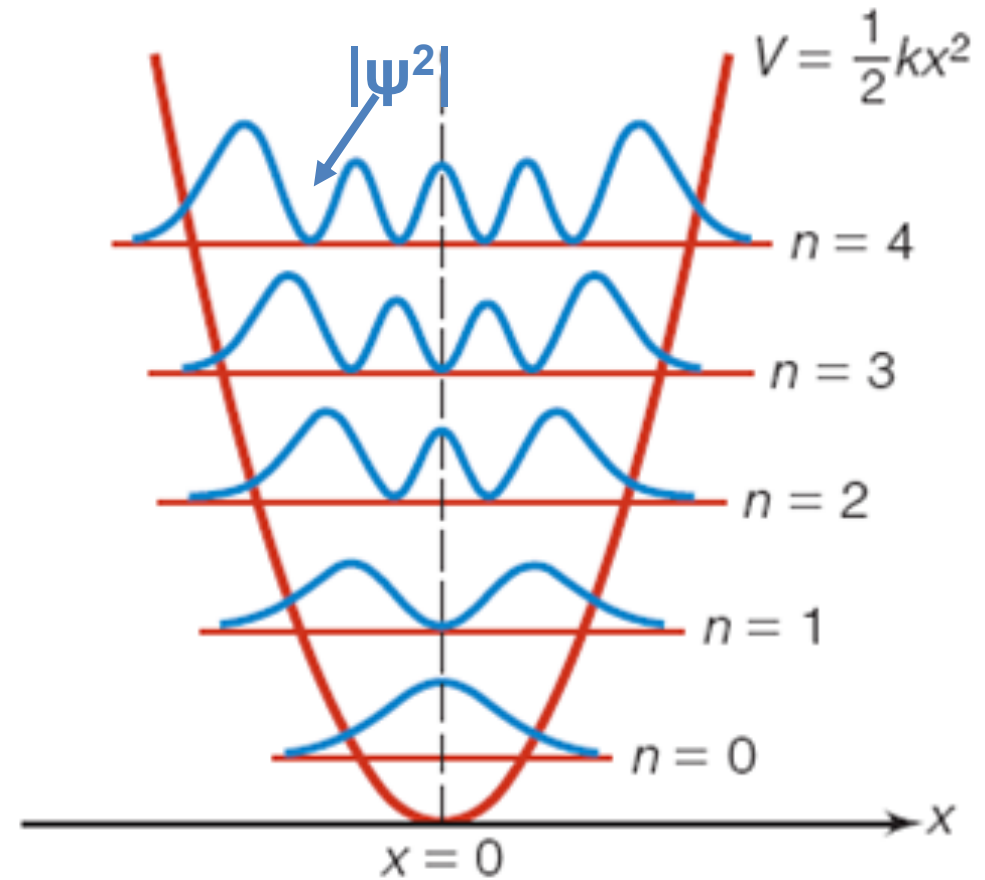
## 2ο Παράδειγμα κβαντικού συστήματος: Αρμονικός ταλαντωτής (μπορεί να περιγράψει π.χ ένα διατομικό μόριο) Στην εξίσωση Schrodinger το δυναμικό είναι $V=1/2 kx^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

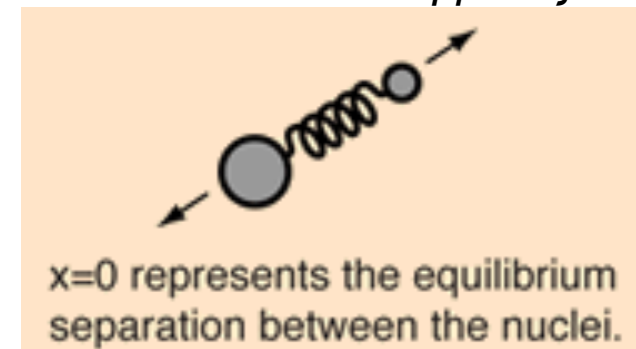
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{h\omega}{2\pi} = \left(n + \frac{1}{2}\right) hf$$

$n = 0, 1, 2, \dots$  όπου  $\omega = 2\pi f$

$E_0 = (1/2)h.f =$  ενέργεια  
μηδενικού σημείου  $\neq 0$

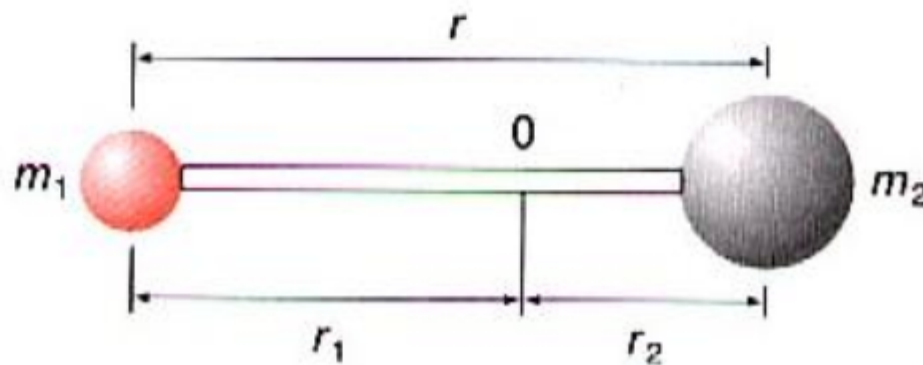


Απόσταση μεταξύ ατόμων



## ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΠΕΡΙΣΤΡΟΦΕΑΣ\*

- Πρόκειται για το κβαντικό μοντέλο του αλτήρα δηλ. δύο άτομα που συνδέονται με άκαμπτο τρόπο και μπορούν να περιστρέφονται γύρω από κάποιο άξονα που διέρχεται από το  $O$ .



- Από την κλασική φυσική γνωρίζουμε ότι η ροπή αδράνειας για άξονα από το Ο είναι:

$$I = m_1 \cdot r_1^2 + m_2 \cdot r_2^2 = \mu \cdot r^2$$

όπου  $\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$  η ανηγμένη μάζα.

- Η εξ. Schrödinger επιλύεται και δίνει ότι η ενέργεια είναι ΚΒΑΝΤΙΣΜΕΝΗ και δίνεται από τη σχέση:

$$E_J = J \cdot \left( J + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{h^2}{8 \cdot \pi^2 \cdot I} \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

- \* Οι μεταπτώσεις ανάμεσα σε κβαντικές καταστάσεις (ατομικές, ταλάντωσης, περιστροφής) είναι κβαντισμένες και αντιστοιχούν σε εκπομπή ή απορρόφηση H/M ακτινοβολίας συγκεκριμένων μηκών κύματος.
- Άρα, η μελέτη διαφόρων ειδών φασμάτων εκπομπής ή απορρόφησης μπορεί να μας δώσει πολύτιμες πληροφορίες για την δομή ατόμων, μορίων και πολύπλοκων χημικών ενώσεων.

## Βασικά σημεία

Φως (H/M κύματα): διάδοση σε «πακέτα ενέργειας»

(σωματίδια = φωτόνια) ενέργειας  $E = h.f$

Ορμή H/M κύματος:  $p = h/\lambda \rightarrow \lambda = h/p$

Γενίκευση για σωματίδια μάζας  $m$  και ταχύτητας  $v$ :

$\lambda = h/p = h/(m.v)$ . Αντιστοιχία σωματιδίου – κύματος.

Σωματίδιο – Κύμα: Αντί για ακριβή θέση  $(x, y, z) \rightarrow$

$\rightarrow$  **Κυματοσυνάρτηση  $\Psi(x, y, z)$ .**

$\rightarrow \Psi^2$ : πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στην θέση  $(x, y, z)$ .

Εξίσωση Schrodinger: Όταν ένα σωματίδιο βρεθεί σε επίδραση

δυναμικού  $V(x, y, z)$ , η λύση της μας δίνει τις κυματοσυναρτήσεις -

λύσεις  $\Psi_n(x, y, z)$  και τις αντίστοιχες επιτρεπτές ενέργειες  $E_n$ .

$\Psi_n(x, y, z)$ : Στάσιμες λύσεις, μη χρονοεξαρτώμενες  $\rightarrow$  ισορροπία

Οι λύσεις  $\Psi_n(x, y, z)$  και  $E_n$  είναι διακριτές.



## Παράδειγμα κβαντικού συστήματος: Άτομο υδρογόνου.

Το δυναμικό Coulomb περιγράφει το άτομο υδρογόνου.

Στην εξίσωση Schrodinger το δυναμικό Coulomb είναι  $V=Ke^2/r$

Άτομο H: 1 πρωτόνιο – 1 ηλεκτρόνιο

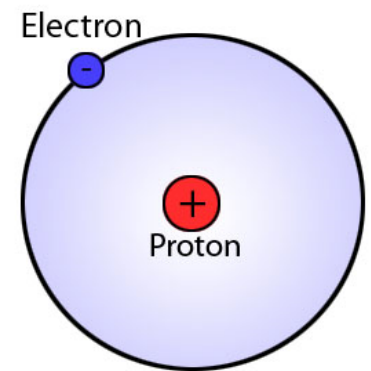
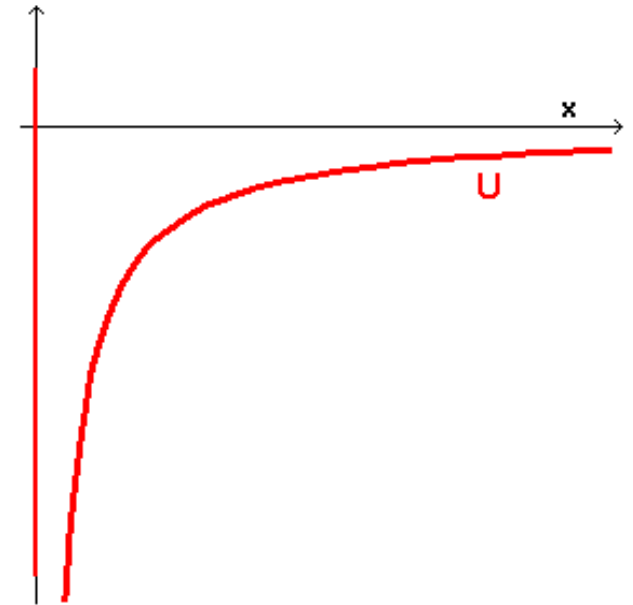
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

Λύσεις εξίσωσης Schrodinger  
→ Διακριτές ενεργ στάθμες

### Ενέργειες

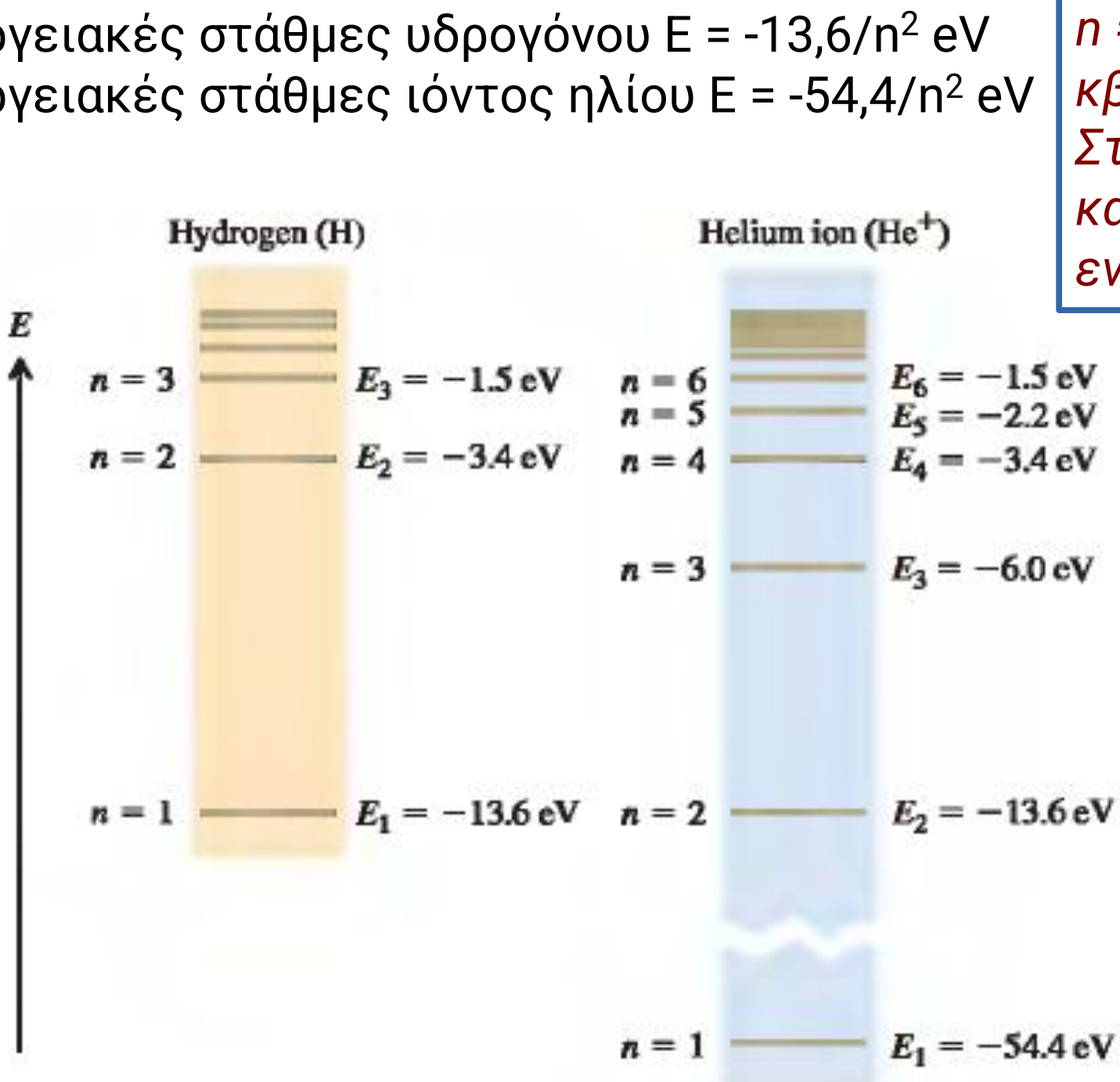
$$E_n = E_0 / n^2, n=1,2,\dots \quad \text{Όπου } E_0 = -13,6 \text{ eV}$$

$n$  : κύριος κβαντικός αριθμός, καθορίζει την ενέργεια



# Υδρογονοειδή άτομα ( άτομα ή ιόντα με 1 ηλεκτρόνιο)

*n = κύριος  
κβαντικός αριθμός  
Στα Υδρογονοειδή  
καθορίζει την  
ενέργεια*



Για το άτομο του Υδρογόνου, η ενέργεια εξαρτάται μόνο από το  $n$ .

Στις 3 διαστάσεις εκτός από τον κύριο κβαντικό αριθμό  $n$ , υπάρχουν άλλοι 3 κβαντικοί αριθμοί:

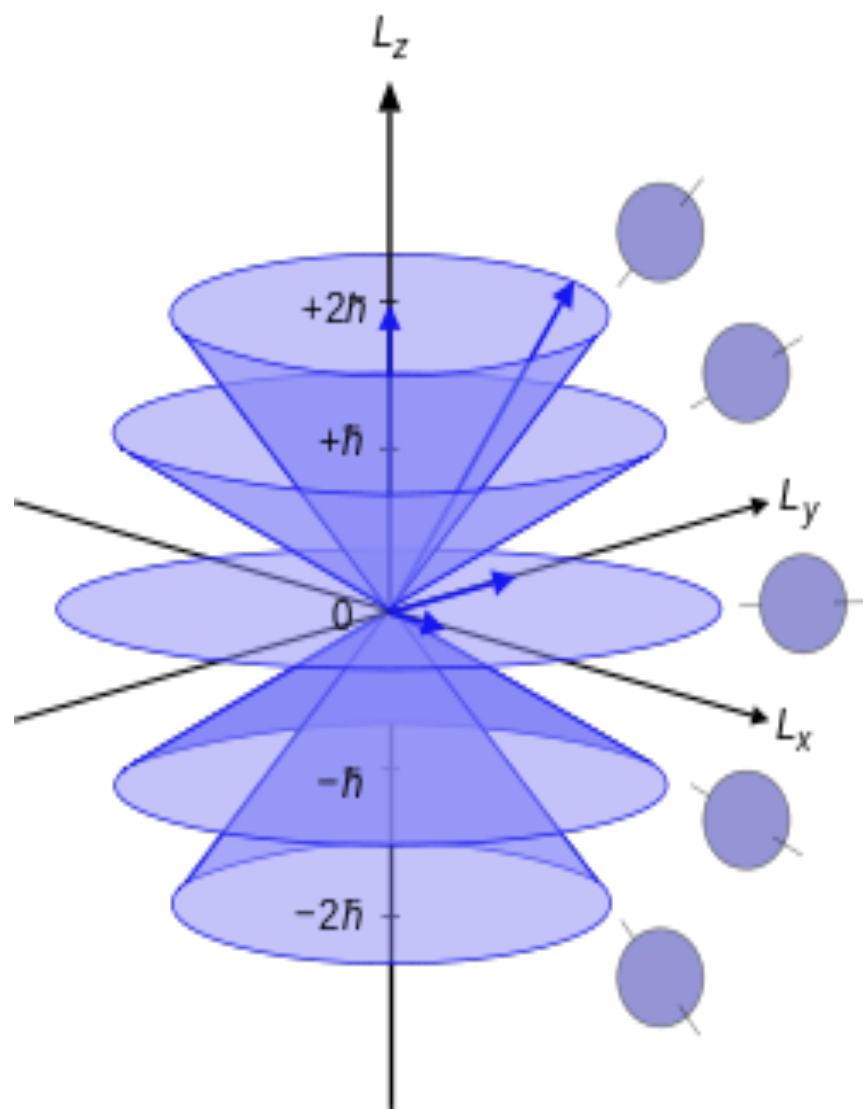
1. Τροχιακός κβαντικός αριθμός  $\ell$ : Η στροφορμή  $L$  του ηλεκτρονίου είναι κβαντισμένη

Το  $\ell$  περιγράφει το σχήμα του χώρου που καταλαμβάνει η κυματοσυνάρτηση και παίρνει τιμές από 0 ως  $n - 1$ .

Η στροφορμή του ηλεκτρονίου είναι  $L$ :

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \hbar \quad \begin{array}{l} \ell = \text{angular momentum quantum number} \\ \ell = 0, 1, 2, \dots, n-1 \end{array}$$

κβάντωση της στροφορμής:  
επιτρεπτές τιμές



## 2. Μαγνητικός κβαντικός αριθμός $m_\ell$

Δίνει τους δυνατούς προσανατολισμούς της κυματοσυνάρτησης αν εφαρμοστεί μαγνητικό πεδίο. Παίρνει τιμές από  $-\ell$  ως  $+\ell$ .

Εκφυλισμός ενέργειας ως προς  $\ell, m_\ell$  για δεδομένο  $n$ . (= η ενέργεια δεν εξαρτάται από  $\ell, m_\ell$ )

Σε μαγνητικό πεδίο γίνεται άρση του εκφυλισμού (η ενέργεια εξαρτάται από  $\ell, m_\ell$ )

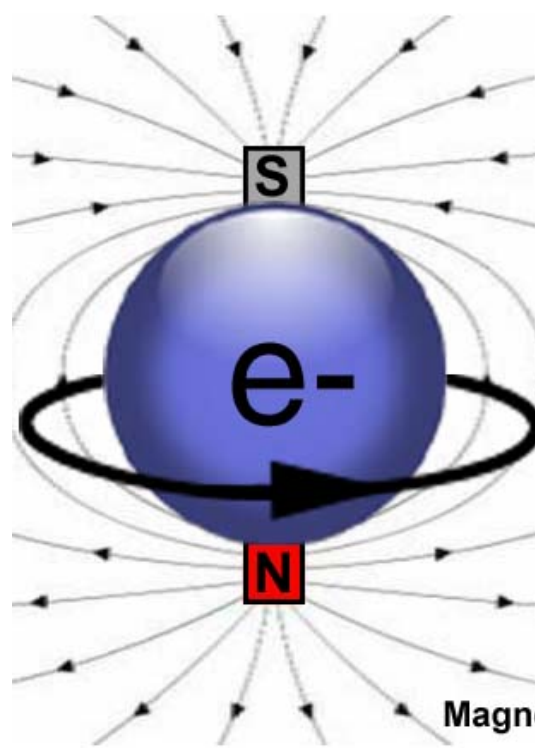
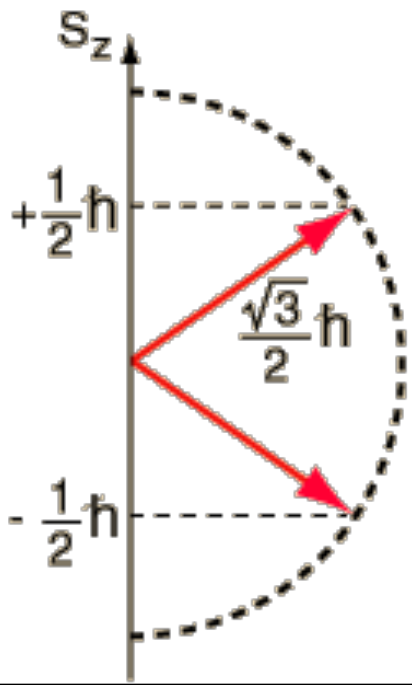
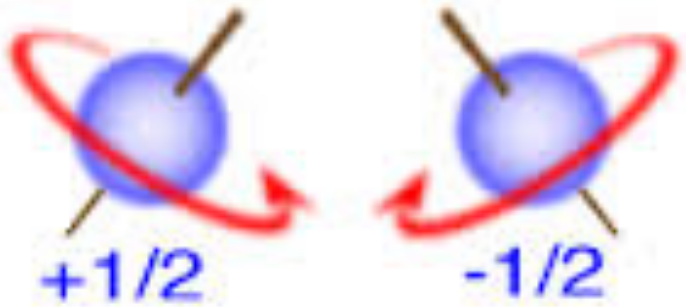


### 3. Κβαντικός αριθμός spin (ιδιοστροφορμή)

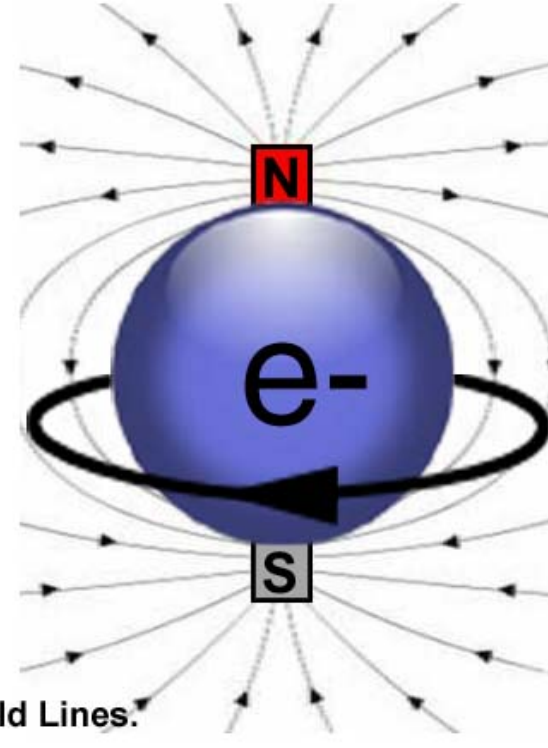
$m_s = 1/2$  ή  $-1/2$  κβαντικός

αριθμός σπιν, αντιστοιχεί στους 2 δυνατούς προσανατολισμούς

$$S = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

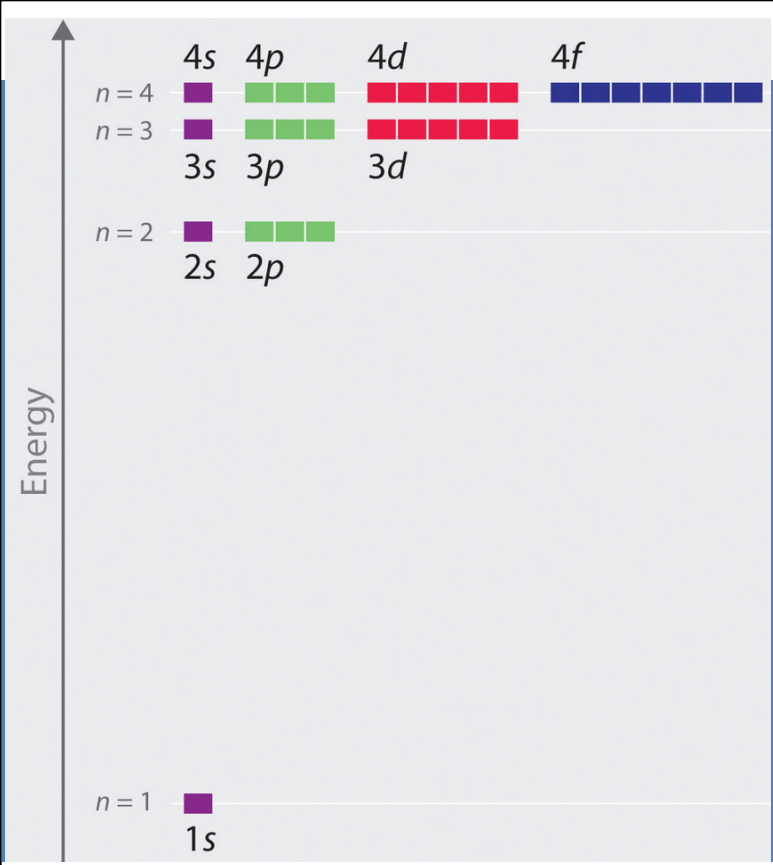


$$m_s = +\frac{1}{2}$$



$$m_s = -\frac{1}{2}$$

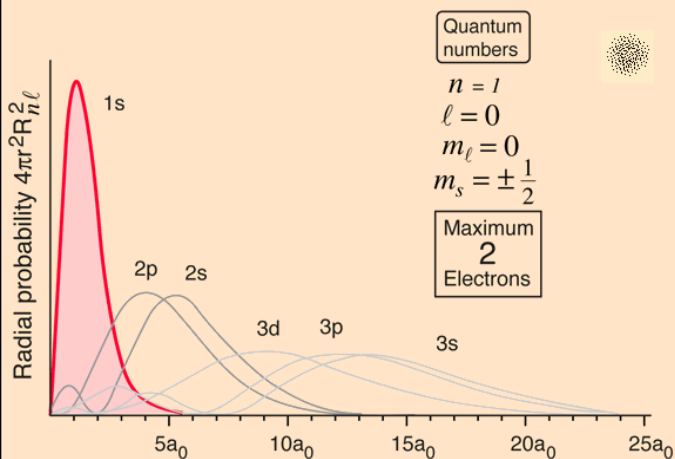
Magnetic Field Lines.



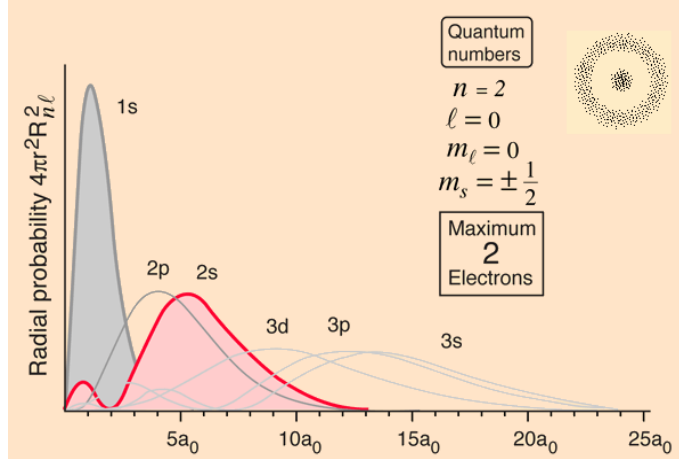
Κάθε τροχιακό μπορεί να δεχθεί ως 2 ηλεκτρόνια (σπιν  $\pm \frac{1}{2}$ ).

$n$	$l$	Subshell Designation	$m_l$	Number of Orbitals in Subshell	Number of Orbitals in Shell
1	0	$1s$	0	1	1
2	0	$2s$	0	1	4
	1	$2p$	-1, 0, 1	3	
3	0	$3s$	0	1	9
	1	$3p$	-1, 0, 1	3	
	2	$3d$	-2, -1, 0, 1, 2	5	
4	0	$4s$	0	1	16
	1	$4p$	-1, 0, 1	3	
	2	$4d$	-2, -1, 0, 1, 2	5	
	3	$4f$	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7	

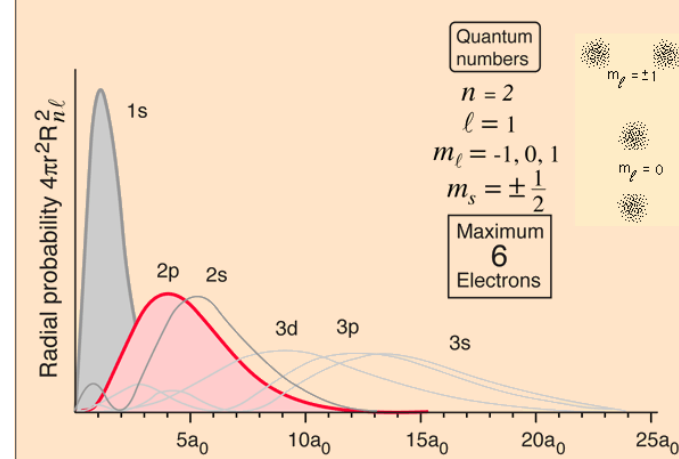
### Hydrogen 1s Radial Probability



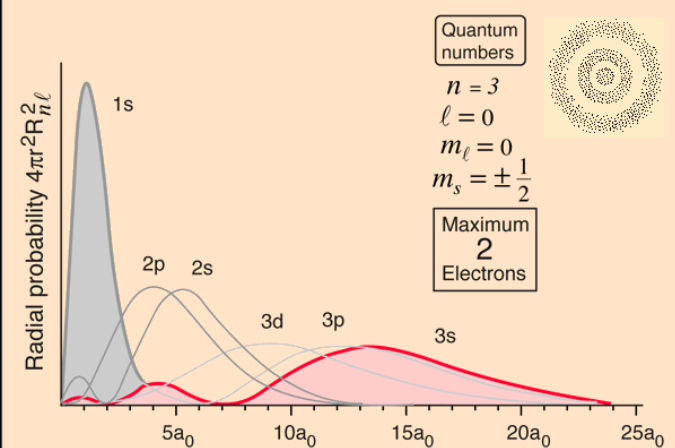
### Hydrogen 2s Radial Probability



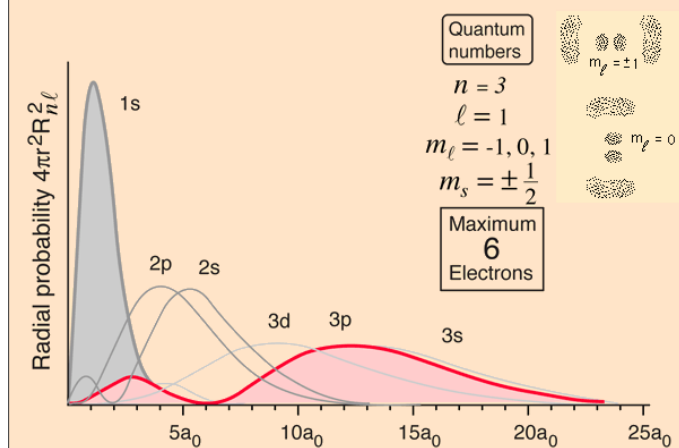
### Hydrogen 2p Radial Probability



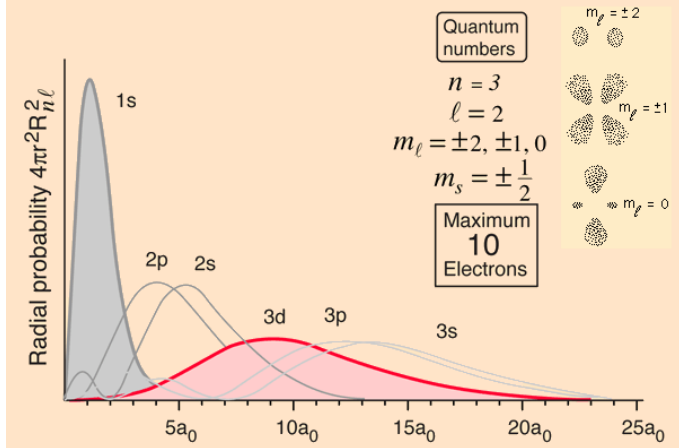
### Hydrogen 3s Radial Probability



### Hydrogen 3p Radial Probability



### Hydrogen 3d Radial Probability





3. Υπολογίστε την ενέργεια και την ορμή φωτονίων με τα ακόλουθα μήκη κύματος: 150pm (ακτίνες-X), 250nm (υπεριώδες), 500nm (ορατό) και 1cm (μικροκύματα).

$$E = h \cdot f$$

$$c = \lambda \cdot f$$

=====

$$a. \quad E = h \cdot c / \lambda = 6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 2,998 \cdot 10^8 / 150 \cdot 10^{-12} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1} / \text{m} = 1,324 \cdot 10^{-15} \text{ J}$$

$$p = h / \lambda = 6,625 \cdot 10^{-34} / 150 \cdot 10^{-12} \text{ J} \cdot \text{s} / \text{m} = 4,416 \cdot 10^{-24} \text{ kg m/s}$$

$$b. \quad E = h \cdot c / \lambda = 6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 2,998 \cdot 10^8 / 250 \cdot 10^{-9} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1} / \text{m} = 7,944 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$p = 2,65 \cdot 10^{-27} \text{ kg m/s}$$

$$c. \quad E = h \cdot c / \lambda = 6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 2,998 \cdot 10^8 / 500 \cdot 10^{-9} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1} / \text{m} = 3,972 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$p = 1,325 \cdot 10^{-27} \text{ kg m/s}$$

$$d. \quad E = h \cdot c / \lambda = 6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 2,998 \cdot 10^8 / 10^{-2} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1} / \text{m} = 1,986 \cdot 10^{-23} \text{ J}$$

$$p = h / \lambda = 6,625 \cdot 10^{-34} / 10^{-2} \text{ J} \cdot \text{s} / \text{m} = 6,625 \cdot 10^{-32} \text{ kg m/s}$$



4. Οι απαιτούμενες ενέργειες για το σπάσιμο του C-C δεσμού του αιθανίου, του τριπλού δεσμού του CO και ενός δεσμού υδρογόνου είναι αντίστοιχα 88, 257 και 4 kcal/mol. Τι μήκους κύματος ακτινοβολίες απαιτούνται για το σπάσιμο αυτών των δεσμών; (1 cal = 4,184 joules)

$$E_{C-C} = 88 \text{ kcal/mol} = 88 \cdot 4,184 \text{ kJoules/mol} = 368,192 \text{ kJ/mol} = 368,192 \cdot 10^3 / 6,022 \cdot 10^{23} \text{ J/μόριο} = 6,114 \cdot 10^{-19} \text{ J/μόριο}$$

$$E = h \cdot f$$

$$E = h \cdot c / \lambda \rightarrow \lambda = h \cdot c / E \rightarrow \lambda = 6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 2,998 \cdot 10^8 / 6,114 \cdot 10^{-19} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1} / \text{J} = 3,248 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 324 \text{ nm}$$

$$E_{C-O} = 257 \text{ kcal/mol} = 257 \cdot 4,184 \text{ kJoules/mol} = 1075,288 \text{ kJ/mol} = 1075,288 \cdot 10^3 / 6,022 \cdot 10^{23} \text{ J/μόριο} = 1,78 \cdot 10^{-17} \text{ J/μόριο}$$

$$E = h \cdot c / \lambda \rightarrow \lambda = h \cdot c / E \rightarrow \lambda = 6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 2,998 \cdot 10^8 / 1,78 \cdot 10^{-17} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1} / \text{J} = 1,115 \cdot 10^{-8} \text{ m} = 11,15 \text{ nm}$$

$$E_{H\text{-bond}} = 4 \text{ kcal/mol} = 4 \cdot 4,184 \text{ kJoules/mol} = 16,736 \text{ kJ/mol} = 16,736 \cdot 10^3 / 6,022 \cdot 10^{23} \text{ J/μόριο} = 2,78 \cdot 10^{-20} \text{ J/μόριο}$$

$$E = h \cdot c / \lambda \rightarrow \lambda = h \cdot c / E \rightarrow \lambda = 6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 2,998 \cdot 10^8 / 2,78 \cdot 10^{-20} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1} / \text{J} = 7,1445 \cdot 10^{-6} \text{ m} = 7144,5 \text{ nm}$$