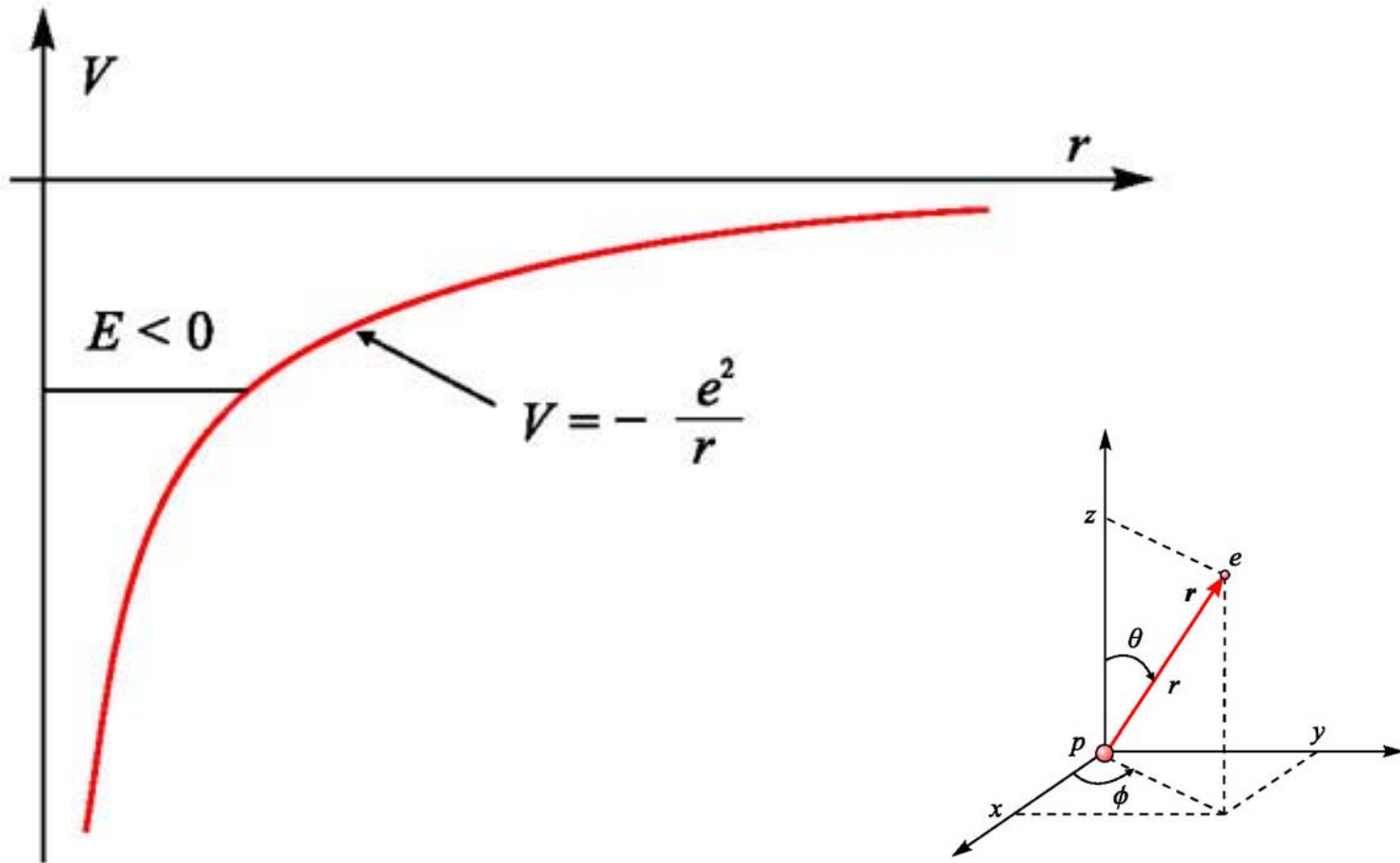


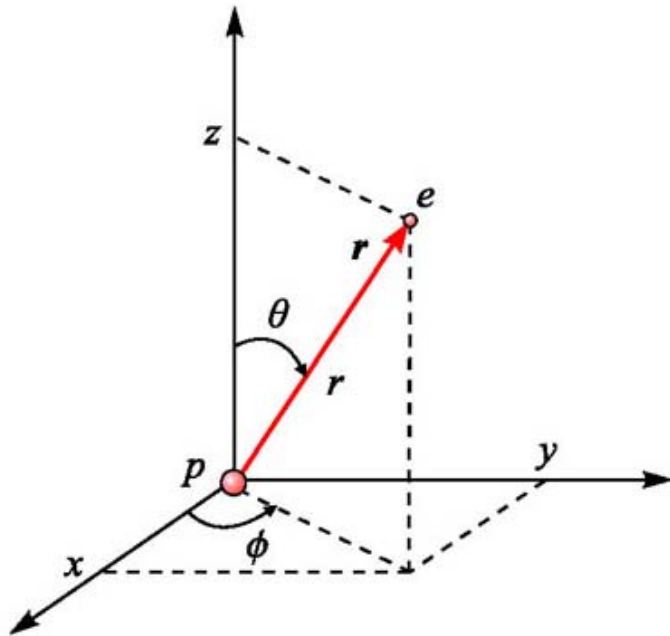
Το άτομο του Υδρογόνου

Δυναμικό Coulomb



Εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, \theta, \phi) - \frac{e^2}{r} \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$



Συνθήκες

$$\psi(r, \theta, \phi) = \text{πεπερασμένη}$$

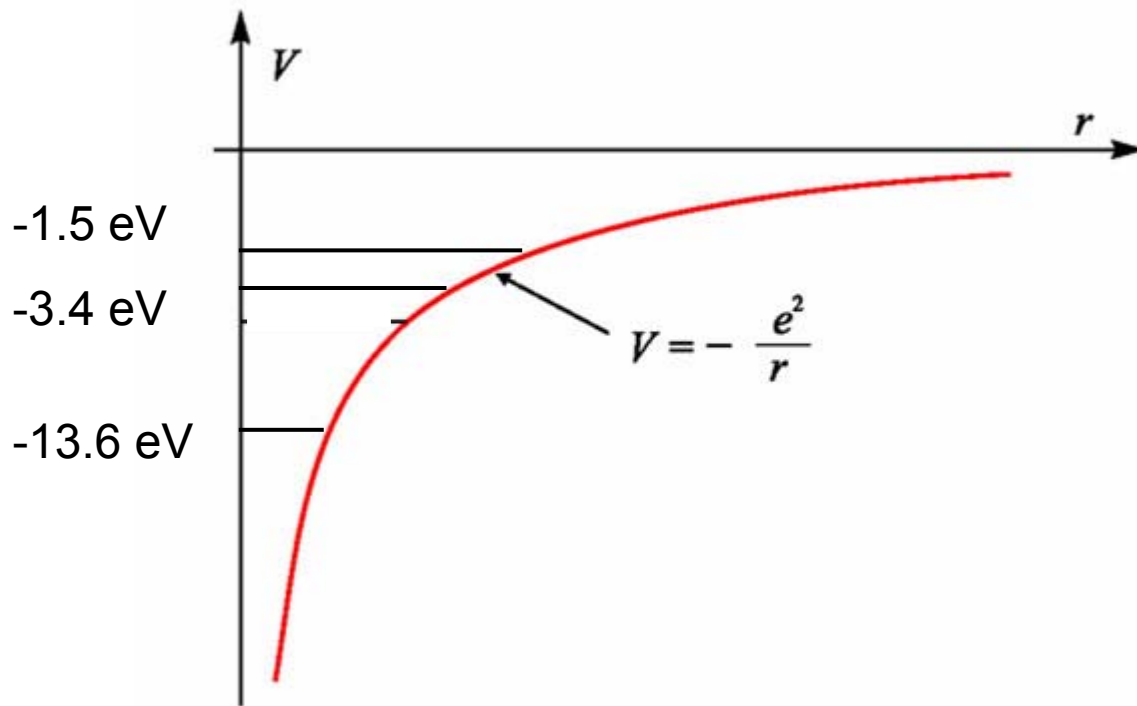
$$\psi(r \rightarrow \infty) = 0$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi + 2\pi)$$

Επιτρεπτές ενέργειες

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{1}{n^2}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad \text{Ακτίνα Bohr}$$



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

Επιτρεπτές ενέργειες και κυματοσυναρτήσεις

Ενέργειες: $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{1}{n^2}$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ **Ακτίνα Bohr**

Κυματοσυναρτήσεις: $\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$

(Συνδυασμοί εκθετικών και πολυωνύμων)

$Y_{lm}(\theta, \phi) = P_{lm}(\cos \theta)e^{im\phi}$ ← **Σφαιρικές αρμονικές**

n, l, m , ακέραιοι
(κβαντικοί αριθμοί)

Στροφορμή (μέτρο): $L = |\mathbf{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar$

z-Στροφορμή: $L_z = m \hbar$

$$n \in [1, \infty)$$

$$l \in [0, n-1]$$

$$m = m_l \in [-l, l]$$

Αρχή αβεβαιότητας για L . Κβάντωση χώρου

n : κύριος κβαντικός αριθμός (ή της ενέργειας)

l : τροχιακός κβαντικός αριθμός (ή της στροφορμής)

m : μαγνητικός αριθμός (ή της z-στροφορμής)

Η στροφορμή – Κβάντωση του προσανατολισμού

Στροφορμή (μέτρο): $L = |\mathbf{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar$

z-Στροφορμή: $L_z = m \hbar$

$$l \in [0, n-1]$$

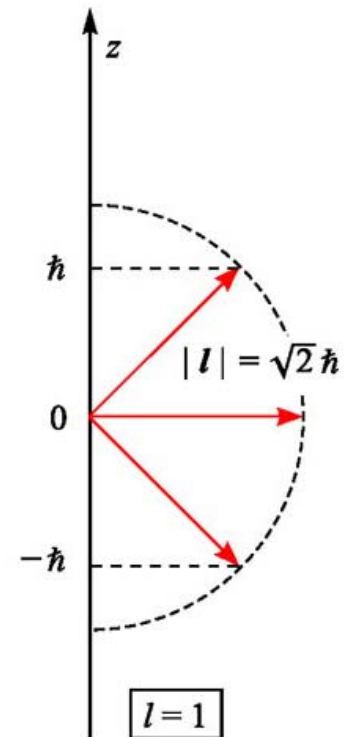
$$m = m_l \in [-l, l]$$

Αρχή αβεβαιότητας για τη στροφορμή: Το διάνυσμα της στροφορμής δεν μπορεί να είναι πλήρως γνωστό. Αν γνωρίζουμε το μέτρο μπορούμε να γνωρίζουμε μόνο μία συνιστώσα.

Απορρέει από την αρχή αβεβαιότητας θέσης ορμής, δεδομένου ότι $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$

Κβάντωση του προσανατολισμού: Και το μέτρο της στροφορμής και η z-συνιστώσα της παίρνουν διάκριτες τιμές. Άρα και η μεταξύ τους γωνία, θ :

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



Το ατομικό σύστημα μονάδων (A.U.)

Θεμελιώδη
μεγέθη και
μονάδες

Μάζα	Φορτίο	Στροφορμή
m_e	e	\hbar

$$m_e = e = \hbar = 1$$

Μονάδα
μήκους?

$$\frac{\hbar}{m_e e^2} = a_0$$

Μονάδα
ενέργειας?

$$\frac{m_e e^4}{\hbar^2} = 1 \text{ Hartree} = 27.2 \text{ eV}$$

$$E_1 = \frac{1}{2} \text{ Hartree} = 13.6 \text{ eV}$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{a_0^3}} \Psi_{\text{A.U.}}(r/a_0)$$

Επιτρεπτές Κυματοσυναρτήσεις (σε A.U.)

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$n \in [1, \infty)$$

$$l \in [0, n-1]$$

$$m = m_l \in [-l, l]$$

$$R_{nl}(r) = f_{nl}(r)e^{-r/n}$$



Πολυώνυμο του r , που αρχίζει με r^l και τελειώνει με r^{n-1} ($n-1$ βαθμού)

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = P_{lm}(\cos \theta)e^{im\phi}$$

Σφαιρικές αρμονικές

$$P_{l,m}(\xi) = P_{l,-m}(\xi) = c \sqrt{(1-\xi^2)^{|m|}} \frac{d^{|m|} P_l(\xi)}{d\xi^{|m|}}$$

Συναφή
πολυώνυμα
Legendre

m παραγωγίσεις πολωνύμου Legendre βαθμού l

$$P_0(\xi) = 1$$

Πρώτα πολ. Legendre: $P_1(\xi) = \xi$

Οι πρώτες κυματοσυναρτήσεις

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$R_{nl}(r) = f_{nl}(r)e^{-r/n}$$

$$R_{10}(r) = C_{10}e^{-r}$$

$$R_{20}(r) = C_{20}\left(1 - \frac{r}{2}\right)e^{-r/2}$$

$$R_{21}(r) = C_{21}re^{-r/2}$$

$$n \in [1, \infty)$$

$$l \in [0, n-1]$$

$$m = m_l \in [-l, l]$$

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = P_{lm}(\cos \theta)e^{im\phi}$$

$$P_{00}(\cos \theta) = 1$$

$$P_{10}(\cos \theta) = \cos \theta$$

$$P_{11}(\cos \theta) = P_{1-1}(\cos \theta) = \sqrt{1 - \cos^2 \theta} = \sin \theta$$

$$\Psi_{100} = R_{10}Y_{00} = C_{10}e^{-r}$$

$E, L, L_z ?$

$$\Psi_{200} = R_{20}Y_{00} = C_{20}\left(1 - \frac{r}{2}\right)e^{-r/2}$$

Οι πρώτες κυματοσυναρτήσεις

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = P_{lm}(\cos \theta)e^{im\phi}$$

$$n \in [1, \infty)$$

$$l \in [0, n-1]$$

$$m = m_l \in [-l, l]$$

$$\Psi_{100} = R_{10}Y_{00} = C_{10}e^{-r}$$

$$\Psi_{200} = R_{20}Y_{00} = C_{20}\left(1 - \frac{r}{2}\right)e^{-r/2}$$

$$\Psi_{210} = R_{21}Y_{10} = C_{21}re^{-r/2}\cos\theta$$

$$\Psi_{211} = R_{21}Y_{11} = C_{21}re^{-r/2}\sin\theta e^{i\phi}$$

$$\Psi_{21-1} = R_{21}Y_{1-1} = C_{21}re^{-r/2}\sin\theta e^{-i\phi}$$

	E	L	L_z
Ψ_{100}	E_1	0	0
Ψ_{210}	E_2	$\sqrt{2}\hbar$	0
Ψ_{211}	E_2	$\sqrt{2}\hbar$	\hbar
Ψ_{21-1}	E_2	$\sqrt{2}\hbar$	$-\hbar$

Πολλές καταστάσεις (κυματοσυναρτήσεις) με την ίδια ενέργεια: **Εκφυλισμός**

Σε κάθε n αντιστοιχούν n^2 κυματοσυναρτήσεις

Οι κανονικοποιημένες κυματοσυναρτήσεις

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$\Psi_{100} = R_{10}Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}$$

$$\Psi_{200} = R_{20}Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}}\left(1 - \frac{r}{2}\right)e^{-r/2}$$

$$\Psi_{210} = R_{21}Y_{10} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}re^{-r/2}\cos\theta$$

$$\Psi_{211} = R_{21}Y_{11} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}}re^{-r/2}\sin\theta e^{i\phi}$$

$$\Psi_{21-1} = R_{21}Y_{1-1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}}re^{-r/2}\sin\theta e^{-i\phi}$$

Φασματοσκοπικός συμβολισμός καταστάσεων

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$n \in [1, \infty)$$

$$l \in [0, n-1]$$

$$m = m_l \in [-l, l]$$

Καταστάσεις με ίδιο l : ίδιος υποφλοιός

Ανάλογη μορφή στο χώρο (ίδια γωνιακή εξάρτηση)

Οι υποφλοιοί συμβολίζονται με τα γράμματα $s, p, d, f \dots$

$$l = 0 \leftrightarrow s$$

$$l = 1 \leftrightarrow p$$

$$l = 2 \leftrightarrow d$$

$$l = 3 \leftrightarrow f$$

.....

$$\Psi_{100} = 1s$$

Κύριος κβ. Αριθμός (n)

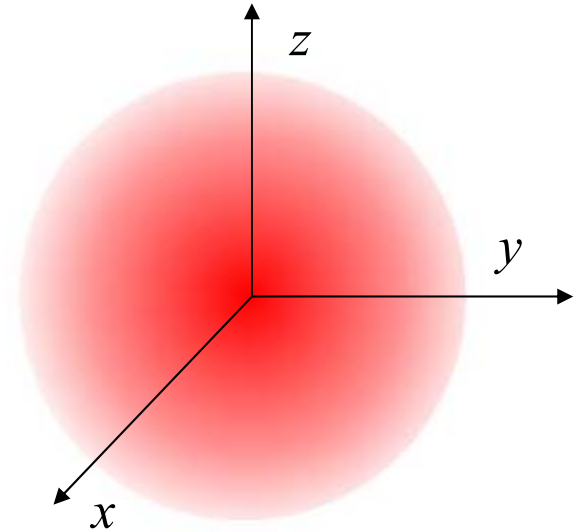
$$\Psi_{200} = 2s$$

$$\Psi_{210}, \Psi_{21-1}, \Psi_{211} = 2p$$

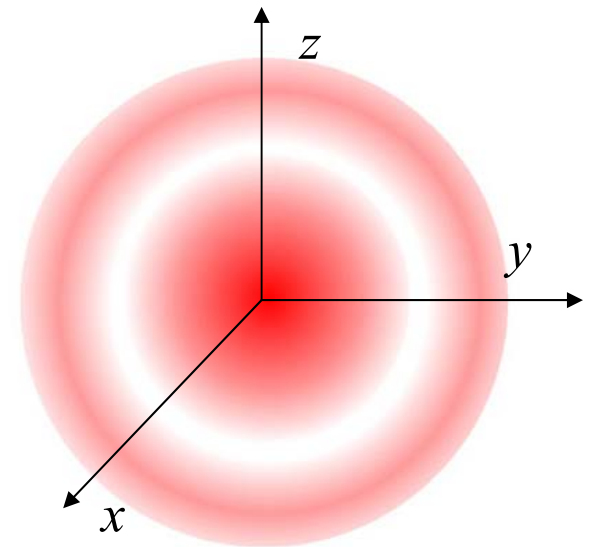
.....

Οι πρώτες κυματοσυναρτήσεις - Σχεδίαση

$$\Psi_{100} = 1s = C_{10} e^{-r}$$



$$\Psi_{200} = 2s = C_{20} \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r/2}$$

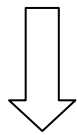


Οι πρώτες κυματοσυναρτήσεις - Σχεδίαση

$$\Psi_{210} = 2p = C_{21} r e^{-r/2} \cos \theta = C_{21} e^{-r/2} z = 2p_z$$

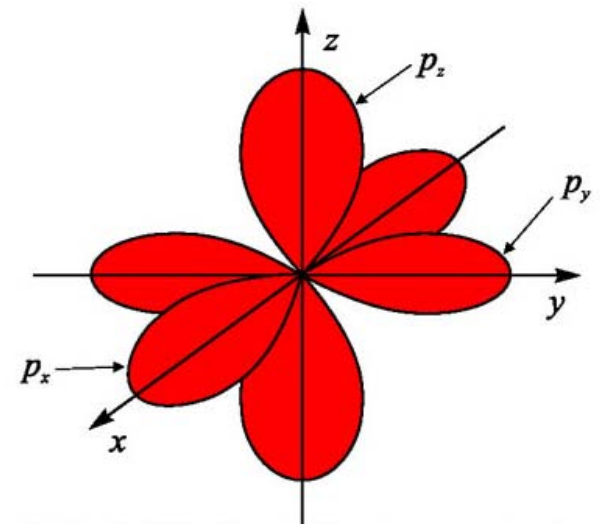
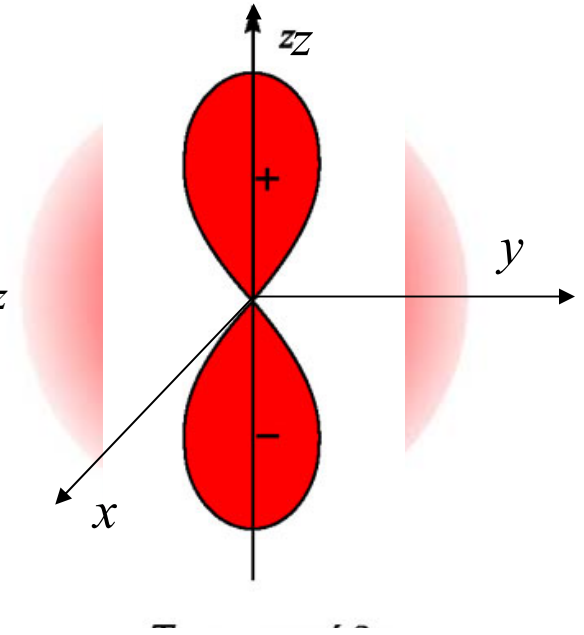
$$\Psi_{211} = C r e^{-r/2} \sin \theta e^{i\phi}$$

$$\Psi_{21-1} = C r e^{-r/2} \sin \theta e^{-i\phi}$$

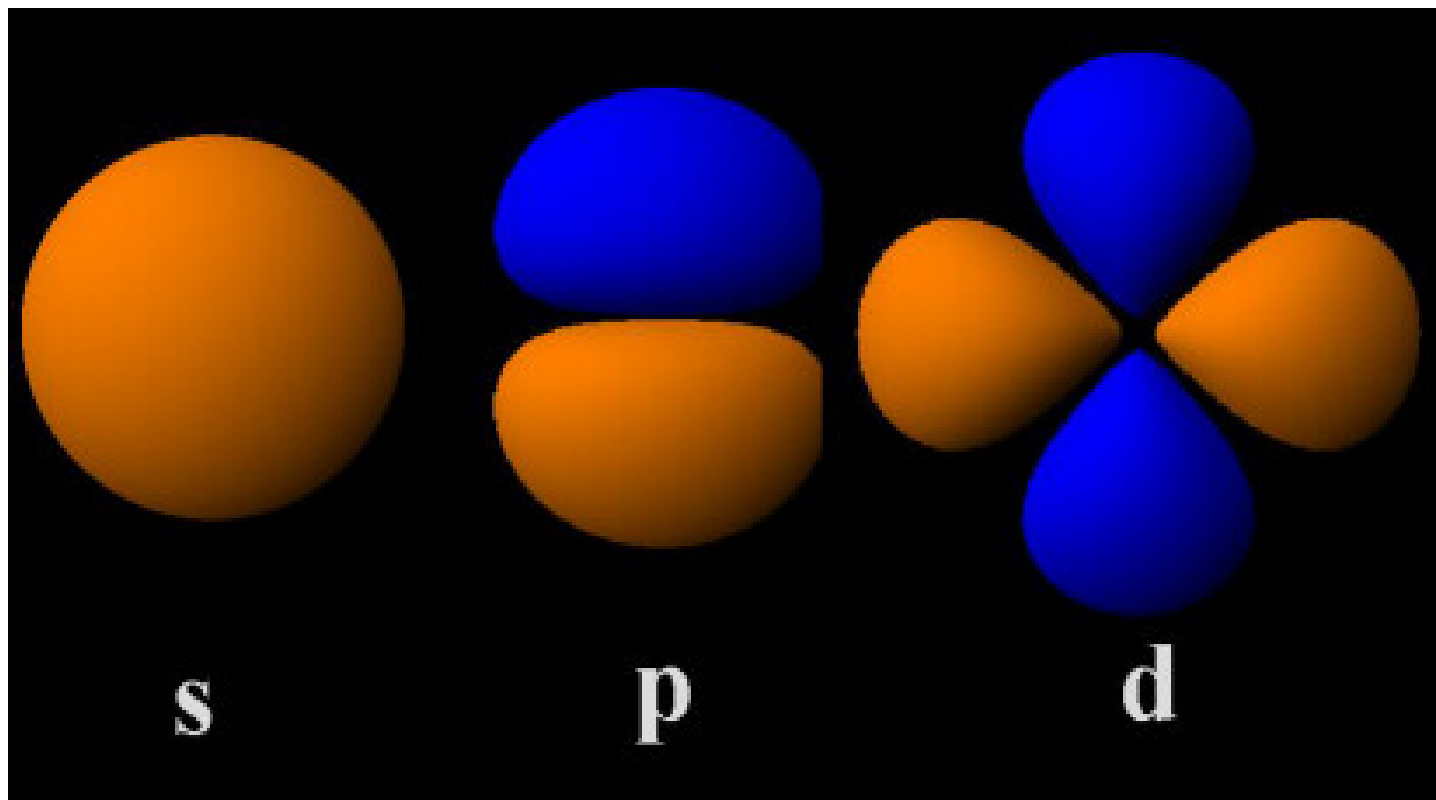


$$\frac{1}{2} (\Psi_{211} + \Psi_{21-1}) = C e^{-r/2} x = 2p_x$$

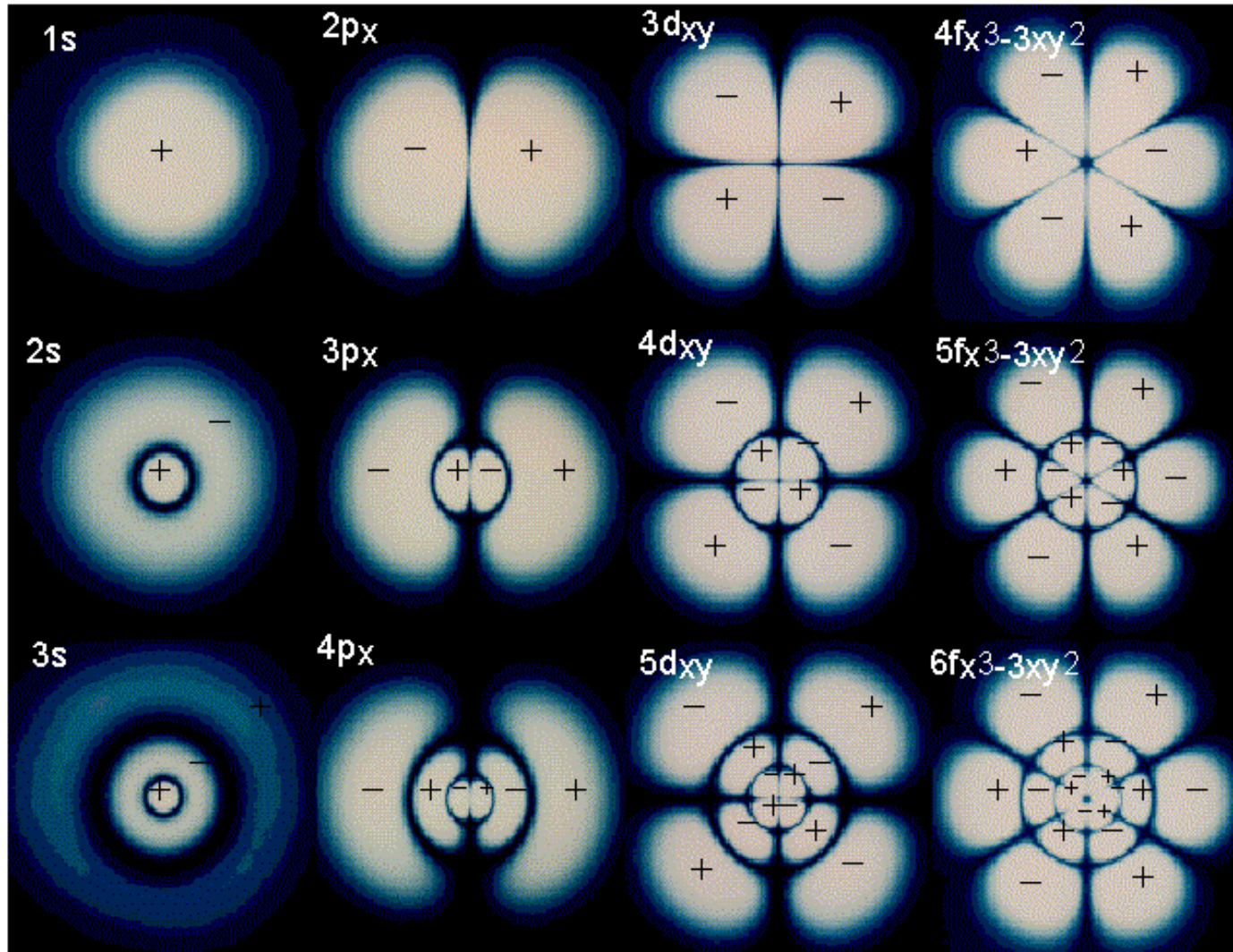
$$\frac{1}{2i} (\Psi_{211} - \Psi_{21-1}) = C e^{-r/2} y = 2p_y$$



Κυματοσυναρτήσεις (τροχιακά) τύπου s, p και d



Οι πρώτες κυματοσυναρτήσεις - Σχεδίαση



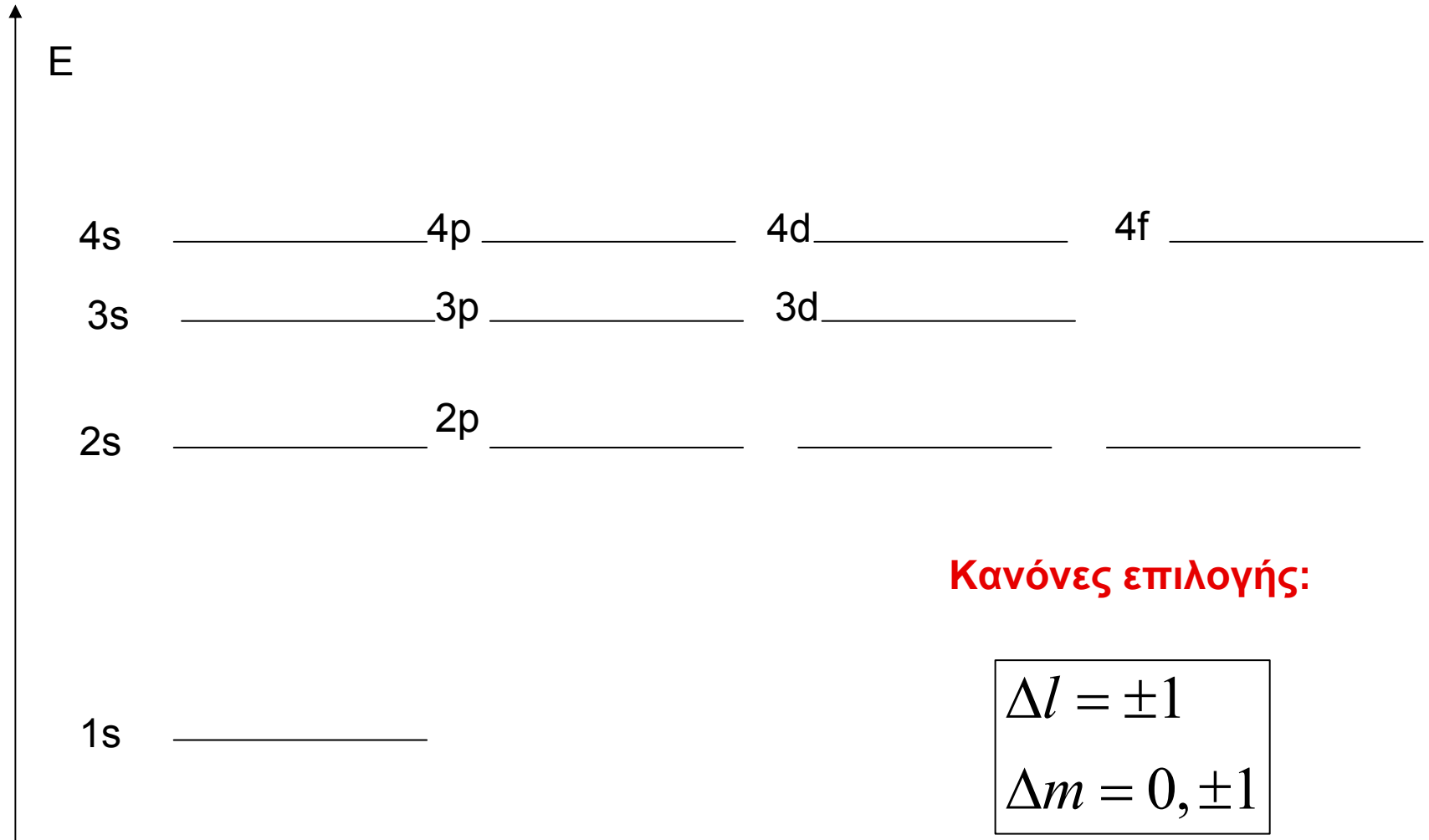
Μέση απόσταση ηλεκτρονίου-πυρήνα

$$\langle r \rangle = \iiint r |\psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2 dV$$

Κυματοσυναρτήσεις με **μεγαλύτερο n** \leftrightarrow **μεγαλύτερη μέση απόσταση από τον πυρήνα**

Από καταστάσεις με το ίδιο n : **μεγαλύτερο l** \leftrightarrow **μεγαλύτερη μέση απόσταση από τον πυρήνα**

Οι ενεργειακές καταστάσεις στο Υδρογόνο

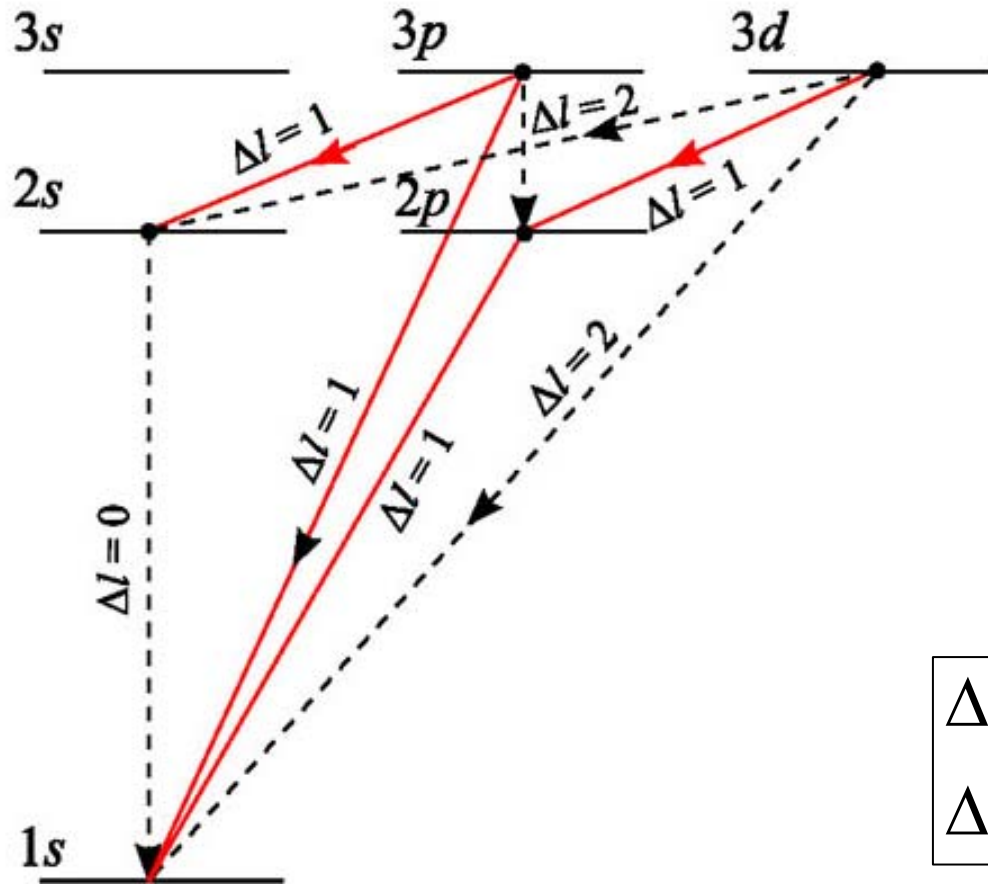


Κανόνες επιλογής:

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta m = 0, \pm 1$$

Επιτρεπτές και μη μεταβάσεις

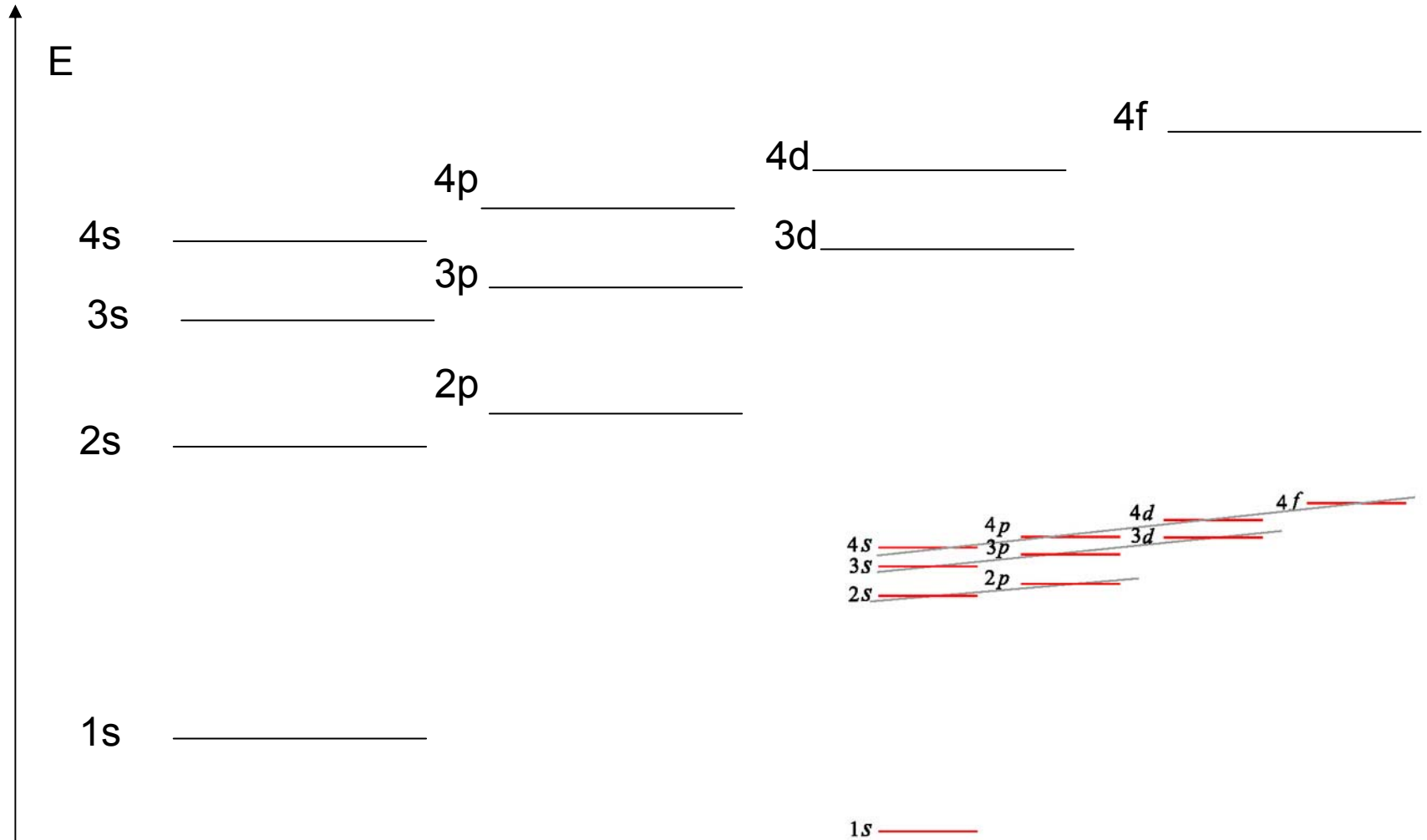


$\Delta l = \pm 1$
$\Delta m = 0, \pm 1$

Πολυηλεκτρονικά άτομα

Περιοδικό σύστημα

Οι ενεργειακές καταστάσεις σε πολυηλεκτρονικά άτομα



Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

Κατάταξη ανάλογα με τις χημικές ιδιότητες

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

Έγινε εμπειρικά από τον Mendelejev το 1860

Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

Κατάταξη ανάλογα με τις χημικές ιδιότητες

Χημικές ιδιότητες? είδος και ιδιότητες των ενώσεων που φτιάχνουν, ευκολία στο σχηματισμό χημικών ενώσεων, κοκ.

Η χημική συμπεριφορά των στοιχείων καθορίζεται από τα **ηλεκτρόνια της εξωτερικής στοιβάδας** (ηλεκτρόνια σθένους) - αυτά συμμετέχουν σε χημικούς δεσμούς

Βασικοί παράγοντες που καθορίζουν τις χημικές ιδιότητες των στοιχείων:

Σθένος

Μορφή τροχιακών σθένους

Έργο ιονισμού

Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

Βασικοί παράγοντες που καθορίζουν τις χημικές ιδιότητες των στοιχείων:

Σθένος: αριθμός ηλεκτρονίων εξωτερικής στοιβάδας για λιγότερο από ημικατειλημμένες στοιβάδες και αριθμός κενών θέσεων για περισσότερο από ημικατειλημμένες

Καθορίζει με πόσα άτομα μπορεί να συνενωθεί το στοιχείο φτιάχνοντας χημική ένωση, και τι ποικιλία ενώσεων μπορεί να φτιάξει

Μορφή τροχιακών σθένους: Καθορίζει τη γεωμετρική μορφή των μορίων που φτιάχνει το στοιχείο, άρα και πολλές από τις ιδιότητές τους.

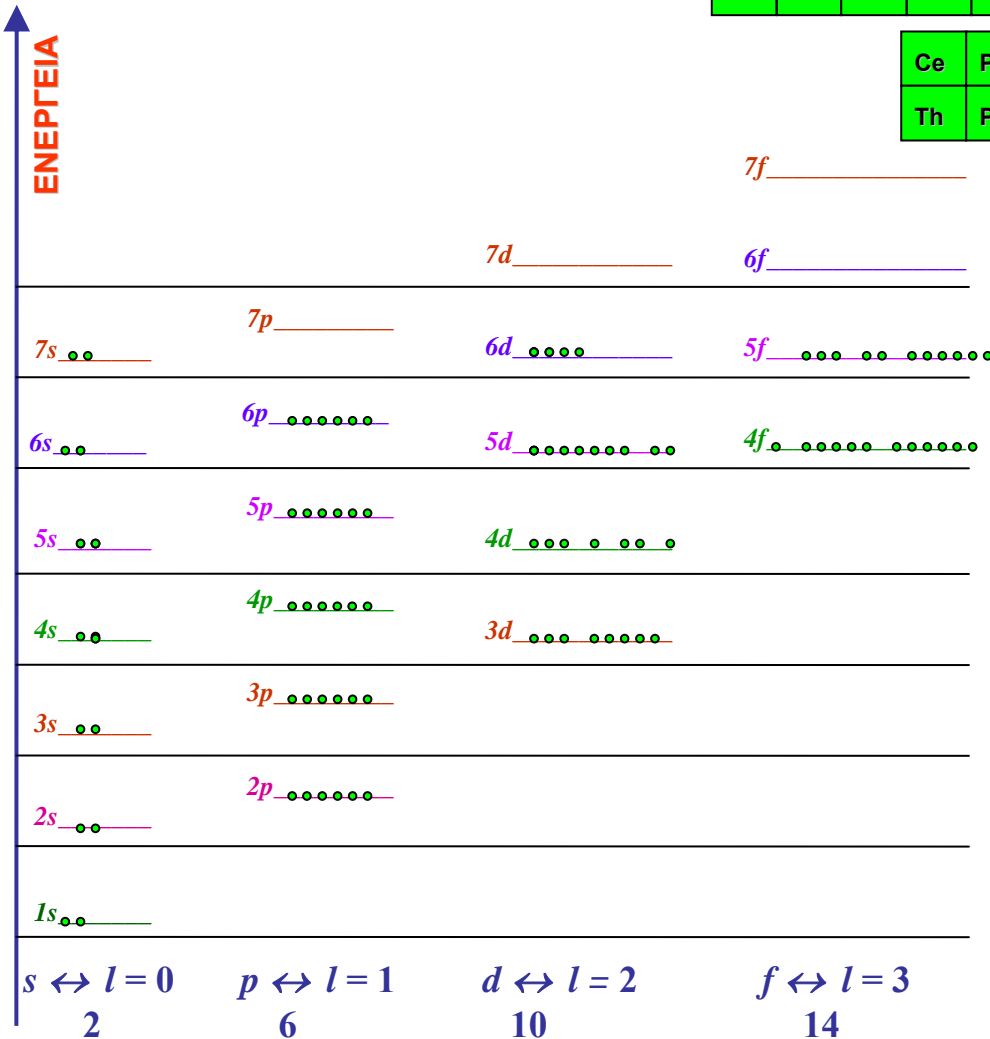
Έργο ιονισμού: Μετράει την ευκολία με την οποία μπορούν να αποσπαστούν άτομα από το στοιχείο → ευκολία για χημικές ενώσεις, ετεροπολικότητα των ενώσεων αυτών

Εποικισμός στοιβάδων και περιοδικός πίνακας

Slide by
E. N. Economou

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Unq	Unp	Unh												

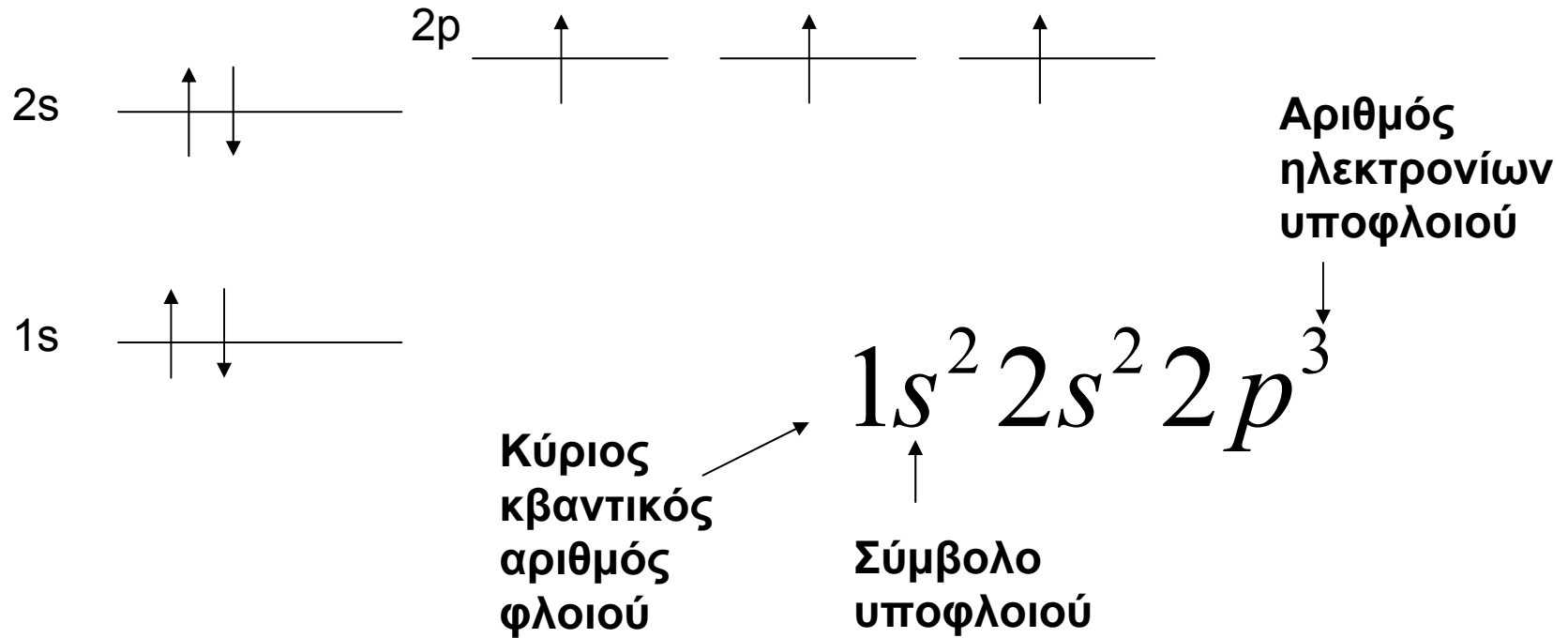
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr



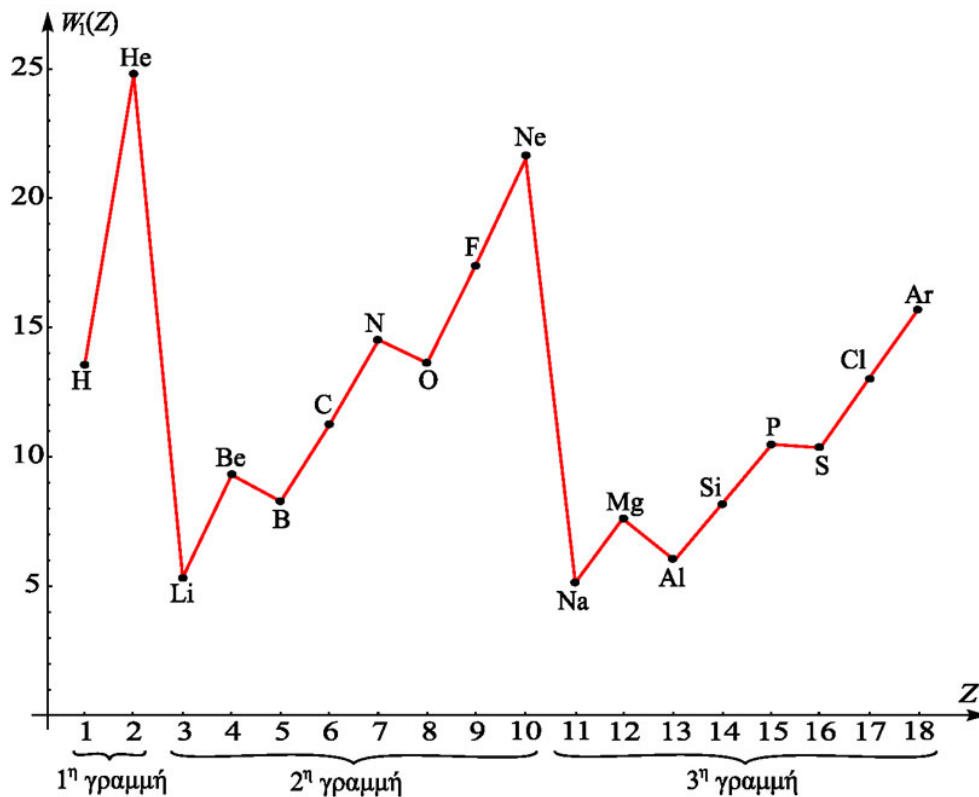
Ηλεκτρονική διάταξη

Δείχνει ποιες στάθμες είναι κατειλημμένες και πώς

Άζωτο, $Z=7$



Έργο εξαγωγής ή ιοντισμού



ΣΧΗΜΑ 11.9: Το έργο ιοντισμού συναρτήσει του ατομικού αριθμού, για τα στοιχεία του μικρού Περιοδικού Πίνακα.

periodic table

	I A	II A											III A	IV A	V A	VI A	VII A	VIII A
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	III B	IV B	V B	VIB	VII B	VIII B	VIII B	IB	IIB	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	Ls	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Ac															
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

Έργο εξαγωγής

$$W = \frac{13,6 \text{ eV}}{n} Z_{\text{eff}}^2$$

Ενεργός αριθμός πρωτονίων

n

Κύριος κβαντικός αριθμός τελευταίας κατειλημμένης στάθμης

Εξηγήστε με βάση τα προηγούμενα

- **Γιατί τα αλκάλια φτιάχνουν ετεροπολικές ενώσεις?**
- **Γιατί τα στοιχεία που ανήκουν στην ίδια στήλη του περιοδικού πίνακα έχουν παρόμοια χημική συμπεριφορά?**
- **Γιατί έχουν παρόμοιες μαγνητικές ιδιότητες?**
- **Πως εξηγούνται οι συστηματικές μεταβολές του έργου ιονισμού (W) πάνω στον περιοδικό πίνακα (το W αυξάνεται πηγαίνοντας από αριστερά προς δεξιά και μειώνεται πηγαίνοντας από πάνω προς τα κάτω) και πώς οι αποκλίσεις από αυτές?**

