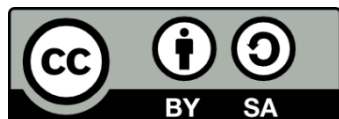




ΓΕΝΙΚΗ ΚΑΙ ΑΝΟΡΓΑΝΗ ΧΗΜΕΙΑ

Ενότητα # (2): Άτομο
Ακρίβος Περικλής
Τμήμα Φαρμακευτικής



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



Χρηματοδότηση

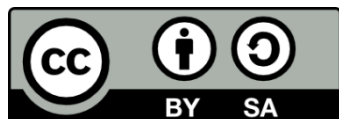
- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.





Άτομο

Κβαντικό Μοντέλο, Ατομικά Τροχιακά



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Περιεχόμενα ενότητας

1. Άτομο
2. Κβαντικό Μοντέλο
3. Ατομικά Τροχιακά



Σκοποί ενότητας

- Εισαγωγή στο άτομο
- Πως τοποθετούνται τα ηλεκτρόνια στο Άτομο





ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

Ενεργειακές Καταστάσεις

Άτομο

ΦΥΓΟΚΕΝΤΡΗ ΔΥΝΑΜΗ

- Θεωρώντας ακόμη ότι η ηλεκτροστατική έλξη από τον πυρήνα εξισορροπεί τη φυγόκεντρη δύναμη από την κυκλική κίνηση του ηλεκτρονίου μπόρεσε να προσδιορίσει την ακτίνα της πρώτης κυκλικής τροχιάς του ατόμου του υδρογόνου που συμβολίζεται ως a_0 .
- Το εντυπωσιακό είναι πως αν τα μεγέθη μετρηθούν με μονάδα μηκους αυτή την ποσότητα, μονάδα ενέργειας την ενέργεια της συγκεκριμένης τροχιάς και φορτίου το φορτίο του ηλεκτρονίου, δημιουργείται ένα «σύστημα μονάδων» όπου οι γνωστές σχέσεις του ηλεκτρισμού και του μαγνητισμού δεν έχουν ανάγκη εισαγωγής κάποιων σταθερών αναλογίας, k .

$$F = \frac{q_1 q_2}{r_{1,2}^2}$$



ΠΡΟΤΥΠΟ ΤΟΥ ΒΟΗΡ

- Με κύριο στόχο την ερμηνεία του φάσματος εκπομπής του υδρογόνου προτάθηκε από τον Bohr το γνωστό ατομικό πρότυπο που έχει ως βάση το ηλιακό σύστημα. Το μοντέλο είναι απλοποιημένο με την έννοια ότι δέχεται την ύπαρξη μόνο κυκλικών τροχιών που διαγράφει το ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου γύρω από τον πυρήνα του.
- Κατανοώντας ότι κάθε γραμμή στο φάσμα εκπομπής αντιστοιχεί στη μετάβαση του ηλεκτρονίου από μια ενεργειακή κατάσταση σε μια άλλη (δηλαδή από μια κυκλική τροχιά σε μια άλλη), ο Bohr κατανόησε την ύπαρξη ορισμένων συγκεκριμένων ενεργειακών καταστάσεων για το ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου.
- Θεωρώντας ότι σε καθεμιά κυκλική τροχιά (όπου τύχει να βρεθεί) έχει σταθερότητα, αποδέχθηκε σταθερή στροφορμή, δηλαδή

$$mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

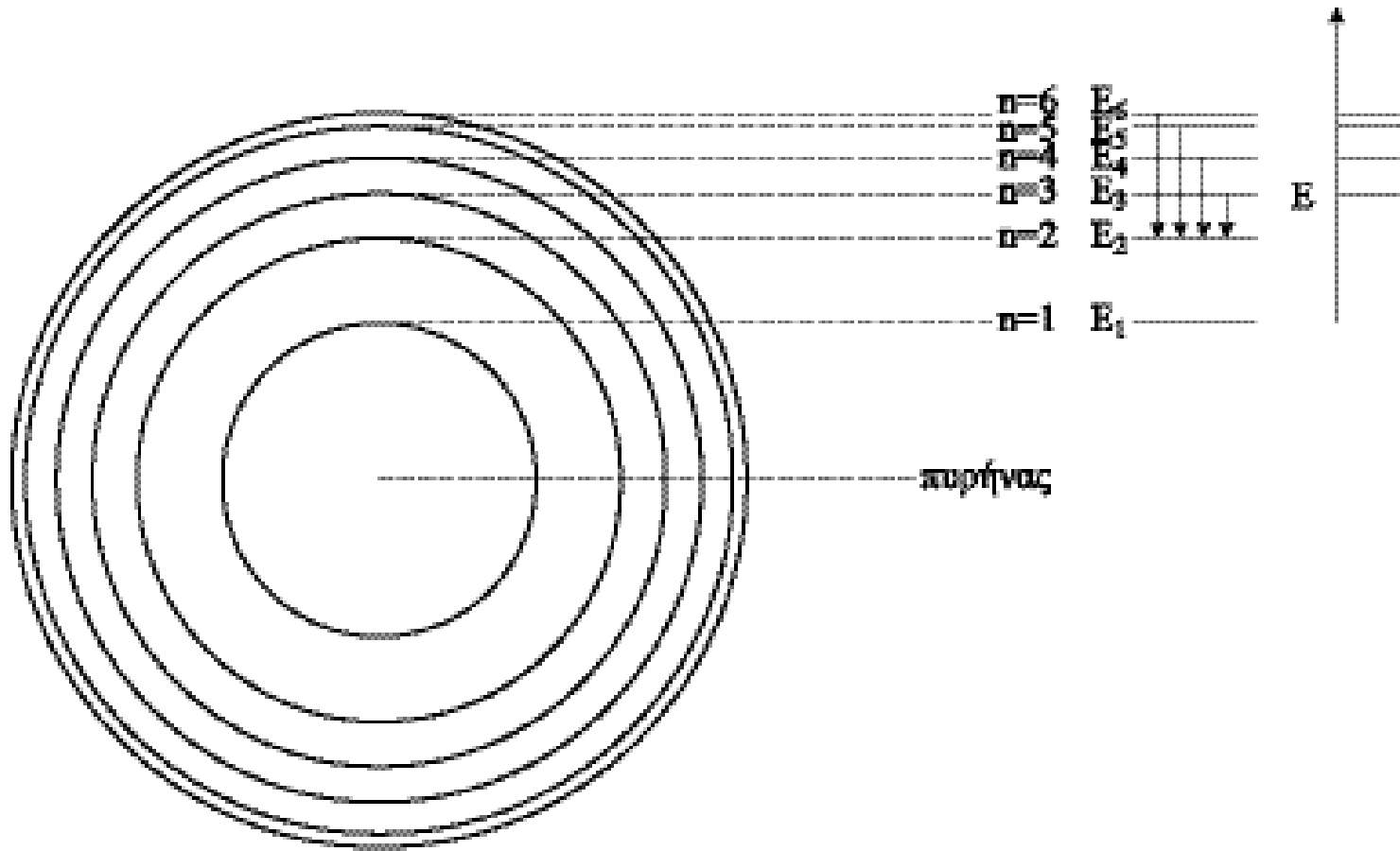


ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ

- Παράσταση των ενεργειακών καταστάσεων του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου σύμφωνα με το ατομικό πρότυπο του Bohr. Στο σχήμα παρουσιάζεται σχηματικά και η αντιστοίχιση ορισμένων από τις φασματικές γραμμές του ορατού φάσματος του ατόμου του υδρογόνου στις αποδιεγέρσεις των ηλεκτρονίων. Μεταπήδηση του ηλεκτρονίου από τις ανώτερες τροχιές στην τροχιά με $n=1$ και $n=3$ οδηγεί αντίστοιχα στην καταγραφή ενεργειών που σχηματίζουν τις σειρές φασματικών γραμμών που απαντούν στο υπεριώδες και το υπέρυθρο αντίστοιχα και ήταν γνωστές ως φασματικές σειρές του Lyman και του Paschen αντίστοιχα.
- Φυσικά, η πρώτη σειρά φασματικών γραμμών που παρατηρήθηκε ήταν αυτή που εντοπίζεται στο ορατό (σχετίζεται με την 2η τροχιά) και η περιγραφή της με εξίσωση αποδίδεται στον Balmer.



ΑΤΟΜΟ



ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ

- Παράσταση των ενεργειακών καταστάσεων του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου σύμφωνα με το ατομικό πρότυπο του Bohr. Στο σχήμα παρουσιάζεται σχηματικά και η αντιστοίχιση ορισμένων από τις φασματικές γραμμές του ορατού φάσματος του ατόμου του υδρογόνου στις αποδιεγέρσεις των ηλεκτρονίων. Μεταπήδηση του ηλεκτρονίου από τις ανώτερες τροχιές στην τροχιά με $n=1$ και $n=3$ οδηγεί αντίστοιχα στην καταγραφή ενεργειών που σχηματίζουν τις σειρές φασματικών γραμμών που απαντούν στο υπεριώδες και το υπέρυθρο αντίστοιχα και ήταν γνωστές ως φασματικές σειρές του Lyman και του Paschen αντίστοιχα.
- Φυσικά, η πρώτη σειρά φασματικών γραμμών που παρατηρήθηκε ήταν αυτή που εντοπίζεται στο ορατό (σχετίζεται με την 2η τροχιά) και η περιγραφή της με εξίσωση αποδίδεται στον Balmer.





ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

Υπότιτλος Ενότητας

ΚΒΑΝΤΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ

SCHRÖDINGER

- Το κβαντικό μοντέλο του ατόμου βασίστηκε στην εξίσωση του **Schrödinger** η λύση της οποίας έδινε τις ενέργειες των ενεργειακών καταστάσεων στο άτομο με τη χρήση όμως κάποιων συναρτήσεων που το περιέγραφαν, των λεγόμενων κυματικών συναρτήσεων.

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V$$



BOHR

- Αυτό σημαίνει ότι για κάθε ηλεκτρόνιο ενός ατόμου, το οποίο περιγράφεται με μια ορισμένη κυματοσυνάρτηση, το τετράγωνό της (ορθότερα το $\Psi\Psi^*$) δίνει ένα αποτέλεσμα σ' όλο το χώρο.
- Καταγραφή του χώρου αυτού που περικλείει το 90% της πιθανότητας εύρεσης του ηλεκτρονίου ονομάζεται τροχιακό και περιγράφει το συγκεκριμένο ηλεκτρόνιο. Τα είδη των ατομικών τροχιακών χαρακτηρίζονται από τους κβαντικούς αριθμούς. Οι πιθανές τιμές των κβαντικών αριθμών είναι γνωστές και υπόκεινται σε ορισμένους περιορισμούς, οι οποίοι είναι οι εξής.
- Για κάθε τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού n , οι αντίστοιχες επιτρεπτές τιμές του δευτερεύοντος κβαντικού αριθμού l , οι αντίστοιχες επιτρεπτές τιμές του μαγνητικού κβαντικού αριθμού m_l είναι $-l \dots 0 \dots +l$
- Τέλος, σε κάθε περίπτωση, η τιμή του μαγνητικού κβαντικού αριθμού του σπιν m_s , παίρνει δύο τιμές, $+1/2$ και $-1/2$ αντίστοιχα.



ΚΥΜΑΤΙΚΕΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ

- Αποδείχθηκε ότι οι καλύτερες κυματικές συναρτήσεις για την προσέγγιση των ενεργειακών καταστάσεων στα άτομα ήταν μιγαδικές, είχαν δηλαδή φανταστικό μέρος! Όμως, όπως και σε κάθε άλλη περίπτωση, το τετράγωνο της συνάρτησης περιγράφει την πιθανότητα να συμβεί το γεγονός που περιγράφει η συνάρτηση, στη συγκεκριμένη περίπτωση το γινόμενο της κυματικής συνάρτησης επί τη συζυγή μιγαδική μορφή της περιγράφει την πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου.
- Μια κυματική συνάρτηση εκτείνεται θεωρητικά σ' όλο το χώρο. Για να έχει κάποιο νόημα η «παρακολούθηση» της κατανομής του ηλεκτρονίου στο χώρο (δηλαδή της πιθανότητας να βρεθεί σε κάποιο σημείο) προτάθηκε και χρησιμοποιείται ως μοντέλο η γραφική παράσταση του χώρου στον οποίο το ηλεκτρόνιο εμφανίζει πιθανότητα 90% να υπάρξει.





ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

Υπότιτλος

ΑΤΟΜΙΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

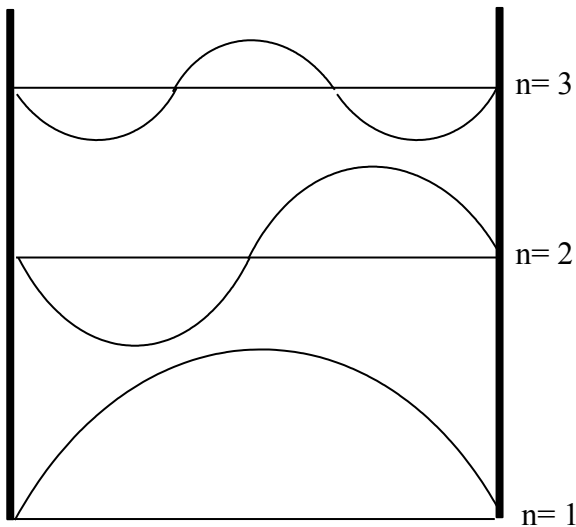
ΤΡΟΧΙΑΚΑ

- Τα τροχιακά είναι μοντέλο που μας δείχνουν ότι αν ένα ηλεκτρόνιο περιγράφεται από την συνάρτηση Ψ μπορούμε να βρούμε που είναι
- Προηγείται ένας αριθμός που είναι ίσος με τον κύριο κβαντικό αριθμό της ισοδύναμης τροχιάς του Bohr που περιγράφει το ηλεκτρόνιο.
- Ακολουθεί ένα γράμμα που αντιστοιχίζεται με το δευτερεύοντα κβαντικό αριθμό, με τον ακόλουθο τρόπο: $0 \rightarrow s$ $1 \rightarrow p$ $2 \rightarrow d$ $3 \rightarrow f$ $4 \rightarrow g$



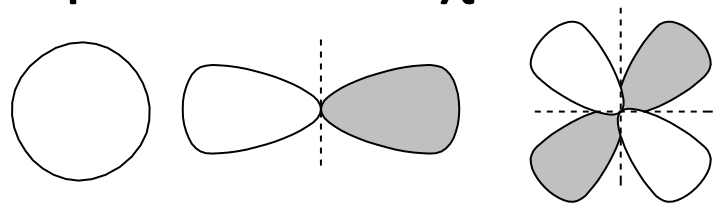
ΣΤΑΣΙΜΑ ΚΥΜΑΤΑ

- Τα ατομικά τροχιακά έχουν μια διαβάθμιση της ενέργειάς τους ανάλογα προς τα στάσιμα κύματα.



ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΤΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ

- Τροχιακό s ομοιόμορφα κατανεμημένο γύρω από τον πυρήνα. Τροχιακό p με ένα δεσμικό επίπεδο και τροχιακό d με δύο δεσμικά επίπεδα.
- Υπάρχουν προφανώς όλα τα σχετικά τροχιακά, από 1s, 2p, 3d και πάνω και είναι ένα, τρία και πέντε σε αριθμό αντίστοιχα.



s

p

d

$l=0$

$l=1$

$l=2$

$m_l=0$

$m_l=-1\ 0\ +1$

$m_l=-2\ -1\ 0\ +1\ +2$

Γενική και Ανόργανη Χημεία

Τμήμα Φαρμακευτικής

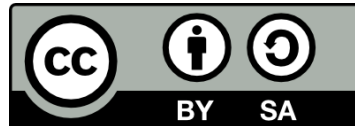
Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Περικλής Ακρίβος.
«Γενική και Ανόργανη Χημεία, Άτομο». Έκδοση: 1.0. Θεσσαλονίκη 2014.
Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:
<http://eclass.auth.gr/courses/OCRS364/>



Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά - Παρόμοια Διανομή [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.

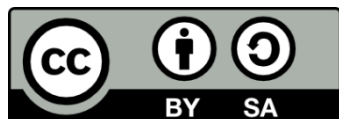
[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>





Τέλος ενότητας

Επεξεργασία: <Άννα Μάντη>
Θεσσαλονίκη, <Δεκέμβριος 2014>



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

Σημειώματα

Σημείωμα Ιστορικού Εκδόσεων Έργου

Το παρόν έργο αποτελεί την έκδοση **X.YZ**.

Έχουν προηγηθεί οι κάτωθι εκδόσεις:

- Έκδοση **X1.Y1Z1** διαθέσιμη εδώ. (Συνδέστε στο «εδώ» τον υπερσύνδεσμο).
- Έκδοση **X2.Y2Z2** διαθέσιμη εδώ. (Συνδέστε στο «εδώ» τον υπερσύνδεσμο).
- Έκδοση **X3.Y3Z3** διαθέσιμη εδώ. (Συνδέστε στο «εδώ» τον υπερσύνδεσμο).



Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
- το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.

