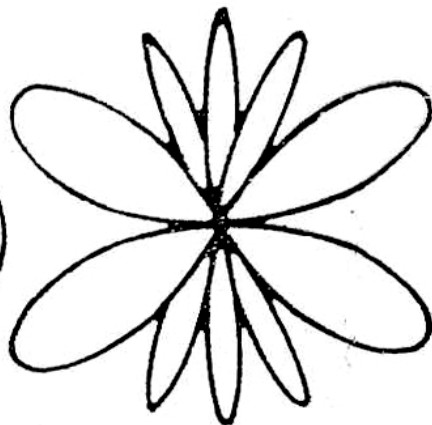
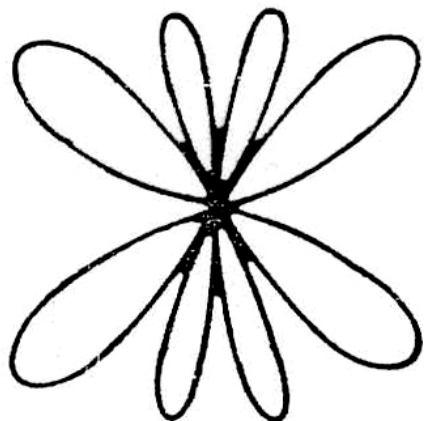


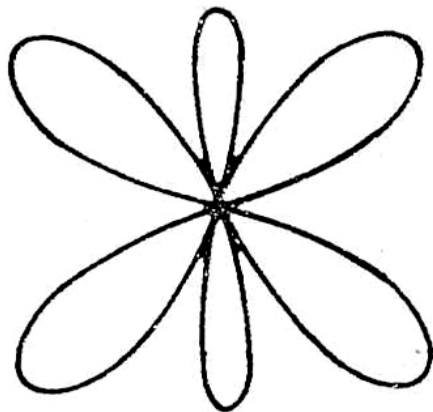
$$m_l = 0$$



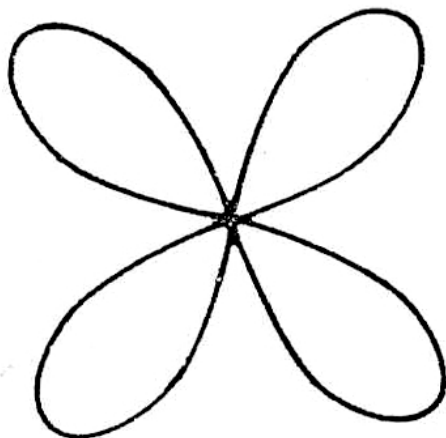
$$m_l = \pm 1$$



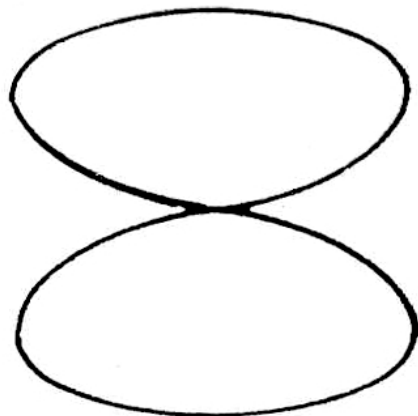
$$m_l = \pm 2$$



$$m_l = \pm 3$$



$$m_l = \pm 4$$



$$m_l = \pm 5$$

Απεικόνιση η τροχιακῶν κατά τις δύο διαστάσεις.

Σε κάθε τιμή της ενέργειας E_n αντιστοιχεί ένα σύνολο κυματοσυναρτήσεων Ψ_n . Όλες οι τιμές $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$ που ικανοποιούν την εξίσωση Schrödinger ονομάζονται **ιδιοσυναρτήσεις** και όλες της ενέργειας E_1, E_2, E_3, \dots **ιδιοτιμές**.

Οι κυματοσυναρτήσεις Ψ_n ονομάζονται **ατομικά τροχιακά** (atomic orbitals), προς τιμή του Bohr που εισήγαγε τον όρο τροχιά, χωρίς όμως αυτό να σημαίνει ότι έχει καμία σχέση ο όρος τροχιά με τον όρο τροχιακό.

Το τροχιακό Ψ , δεν έχει φυσική σημασία και μπορεί να λάβει θετικές, αρνητικές, μηδέν, φανταστικές ή μιγαδικές τιμές. Ωστόσο, μπορούμε να πούμε ότι εκφράζει την παρουσία (όταν $\Psi \neq 0$) ή την απουσία του ηλεκτρονίου (όταν $\Psi = 0$) σε μια ορισμένη περιοχή του χώρου γύρω από τον πυρήνα.

Το τετράγωνο της κυματοσυνάρτησης $|\Psi|^2$ ισούται με $\Psi\Psi^*$ και συσχετίζεται με την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε κάποιο σημείο του χώρου γύρω από τον πυρήνα (με συντεταγμένες x, y, z), σε δεδομένη χρονική στιγμή. Η συνάρτηση $|\Psi|^2$ ονομάζεται **συνάρτηση κατανομής πιθανότητας ή πυκνότητα πιθανότητας (probability density)** και εκφράζει την πιθανότητα ανά μονάδα όγκου και έχει μονάδες vol^{-1} .

Το γινόμενο $|\Psi|^2 \cdot dV$ καθορίζει τον **αριθμό κατοχής (occupation number)**, του ηλεκτρονίου στο στοιχειώδη όγκο dV γύρω από τον πυρήνα. Δηλαδή, η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σ' ένα μικρό στοιχείο του χώρου dV , είναι ανάλογη με το $|\Psi|^2 dV$. Να παρατηρήσουμε ότι, ο αριθμός κατοχής είναι κλάσμα της μονάδας, ενώ ο αριθμός κατοχής σε ολόκληρο το χώρο που περιβάλλει τον πυρήνα ισούται με τη μονάδα.

Το ηλεκτρόνιο, καθώς κινείται με μεγάλη ταχύτητα γύρω από τον πυρήνα, δημιουργεί ένα **ηλεκτρονιακό νέφος**, μια τρισδιάστατη «κηλίδα ηλεκτρονίων», που έχει διαφορετική πυκνότητα σε κάθε σημείο του χώρου γύρω από τον πυρήνα. Η συνάρτηση $-e|\Psi|^2$ εκφράζει την **πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους** σε κάποιο σημείο γύρω από τον πυρήνα και σε δεδομένο χρόνο, όπου $-e$ το φορτίο του ηλεκτρονίου.

$\Psi \Rightarrow$ "πλάτος" του υλικού-κύματος

① Αν το ηλεκτρόνιο συμπεριφέρεται σαν "κύμα,

$\Rightarrow \Psi^2$ μάς δίνει την ηλεκτρονική πυκνότητα στις διάφορες περιοχές του εξεταζόμενου χώρου

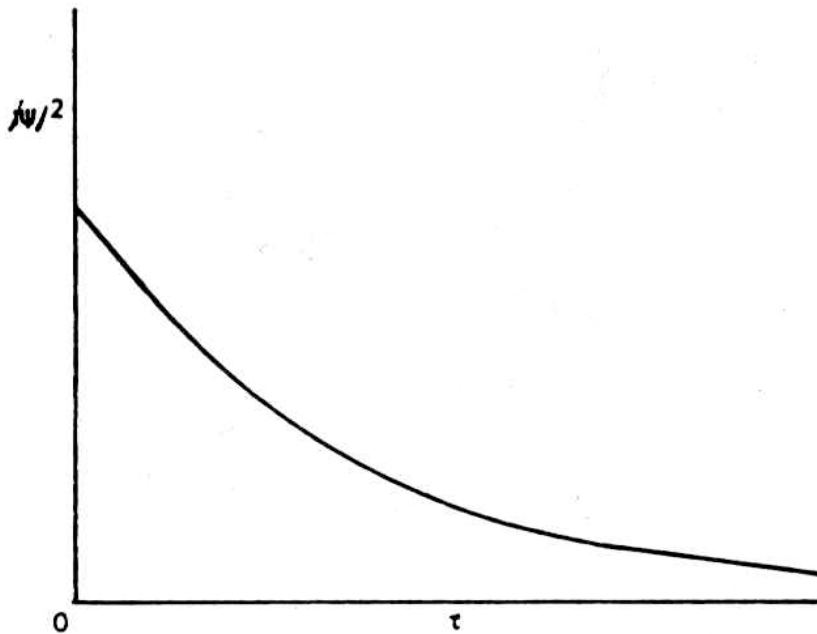
② Αν το ηλεκτρόνιο συμπεριφέρεται σαν "σωματίδιο,

$\Rightarrow \Psi^2$ μάς δίνει τη πιθανότητα να βρούμε το ηλεκτρόνιο στις διάφορες περιοχές του εξεταζόμενου χώρου.

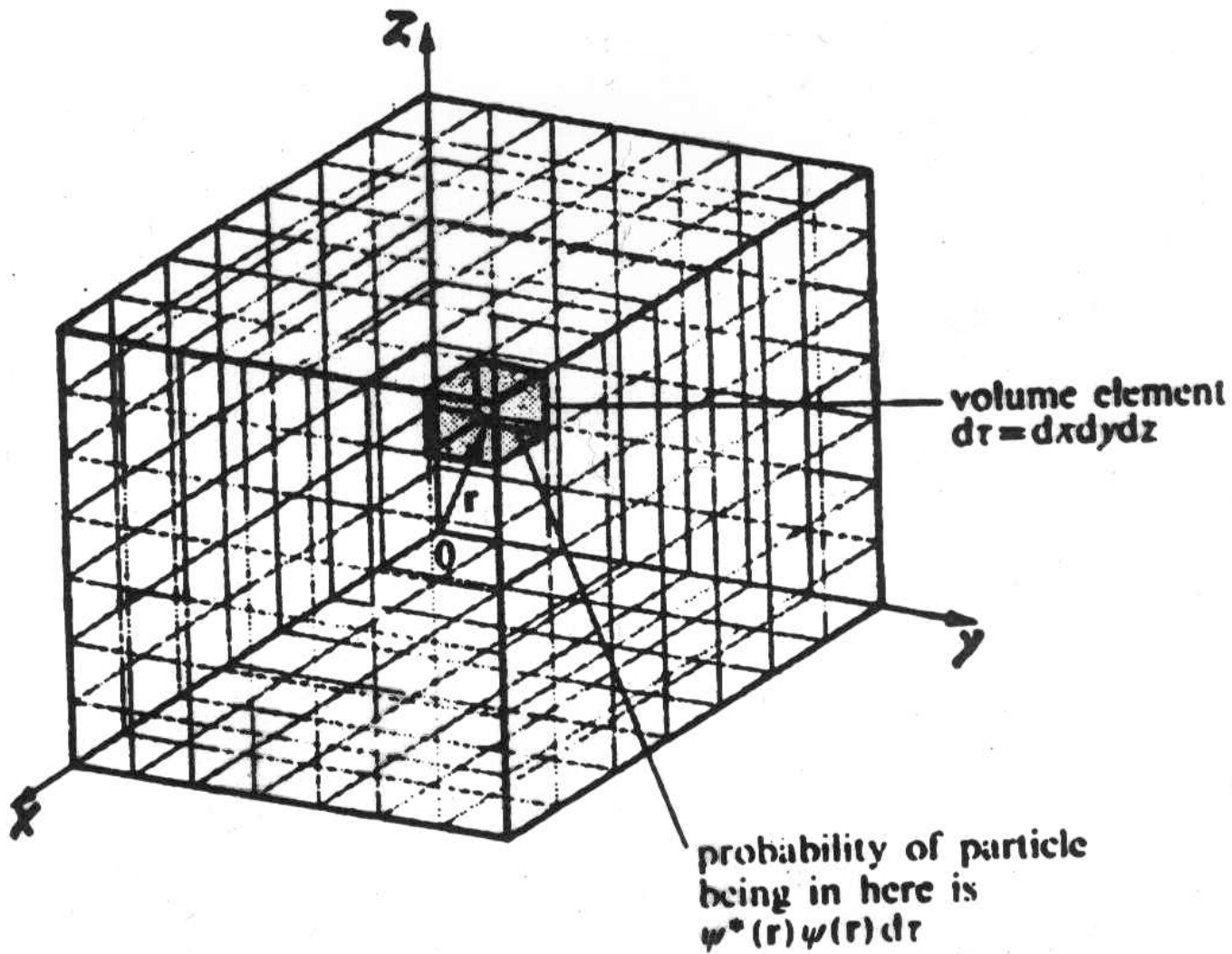
$$J = \frac{\Delta E}{\Delta S \cdot \Delta t}$$

← "ένταση κύματος"
 → "ένταση κύματος"
 → "χρόνος."
 ↪ "επιφάνεια"

$$E \sim \psi^2 \sim J$$



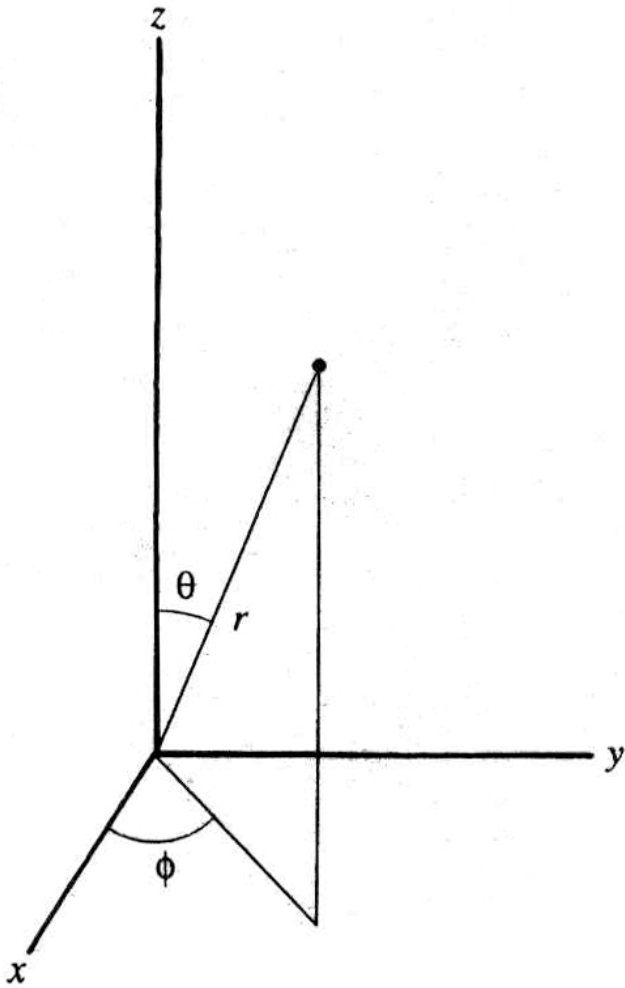
Πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου (στη θεμελιώδη κατάσταση) σε απόσταση r από τον πυρήνα. **αν το ηλεκτρόνιο θεωρηθεί σαν σωματίδιο.**
"ή την "ηλεκτρονική πυκνότητα" αν το ηλεκτρόνιο θεωρηθεί σαν κύμα.



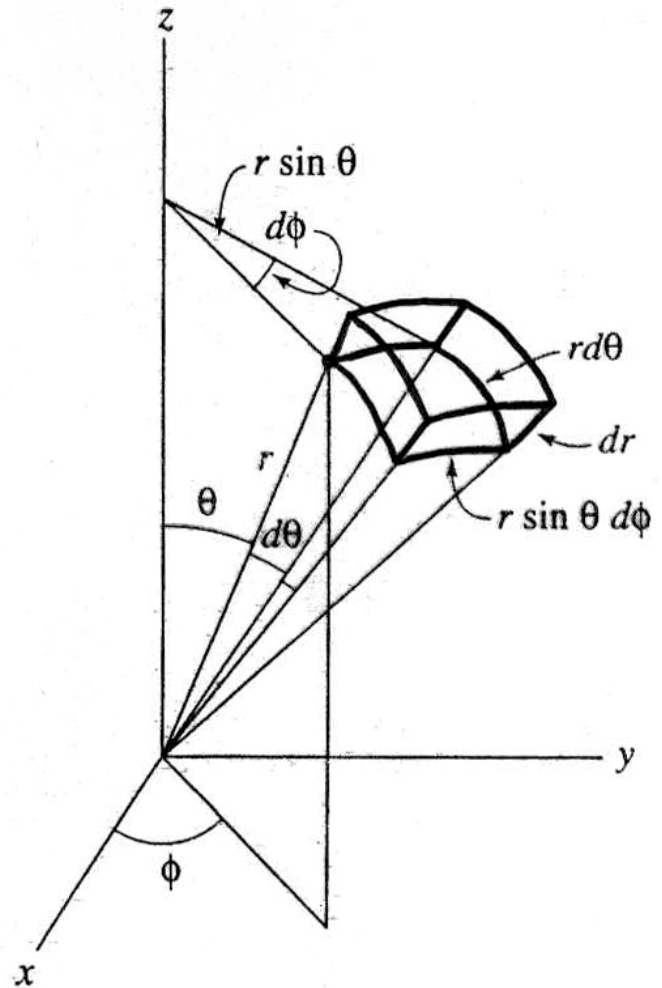
$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$



Spherical Coordinates

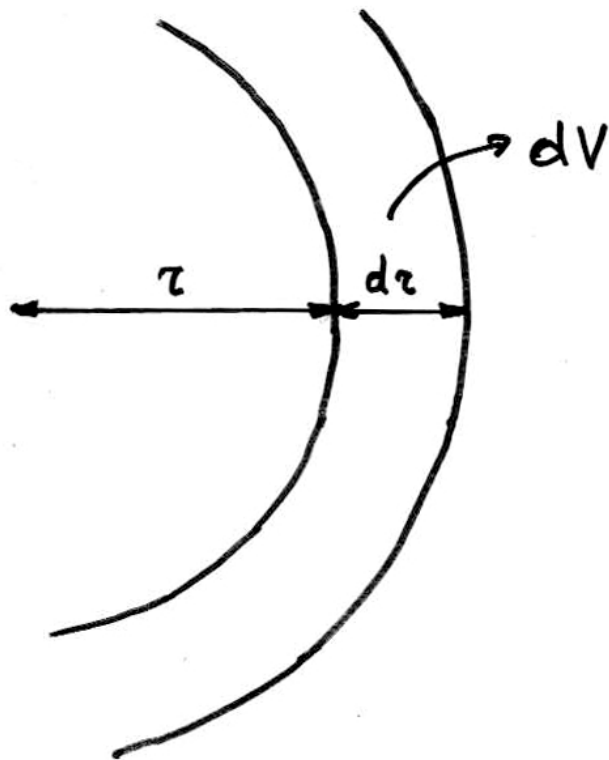


Volume Element

ΔΙΕΡΕΥΝΙΣΗ ΑΚΤΙΝΙΚΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ

$$\underline{R(r)}$$

- Θεωρούμε ότι το άτομο αποτελείται από φλοιούς.
- Ξεχωρίζουμε τη ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑ ΕΥΡΕΘΕΩΣ του ηλεκτρονίου στον "στοιχειώδη όγκο", - φλοιό που δημιουργείται όταν μεγαλώνουμε την ακτίνα από r σε $r + dr$



Όγκος "στοιχειώδη φλοιού", dV

$$\begin{aligned}dV &= \frac{4}{3} \pi (r + dr)^3 - \frac{4}{3} \pi r^3 = \\ &= \frac{4}{3} \pi r^3 + 4\pi r^2 dr + 4\pi r (dr)^2 + \frac{4}{3} \pi (dr)^3 - \\ &\quad - \frac{4}{3} \pi r^3 = 4\pi r^2 dr + 4\pi r (dr)^2 + \frac{4}{3} \pi (dr)^3\end{aligned}$$

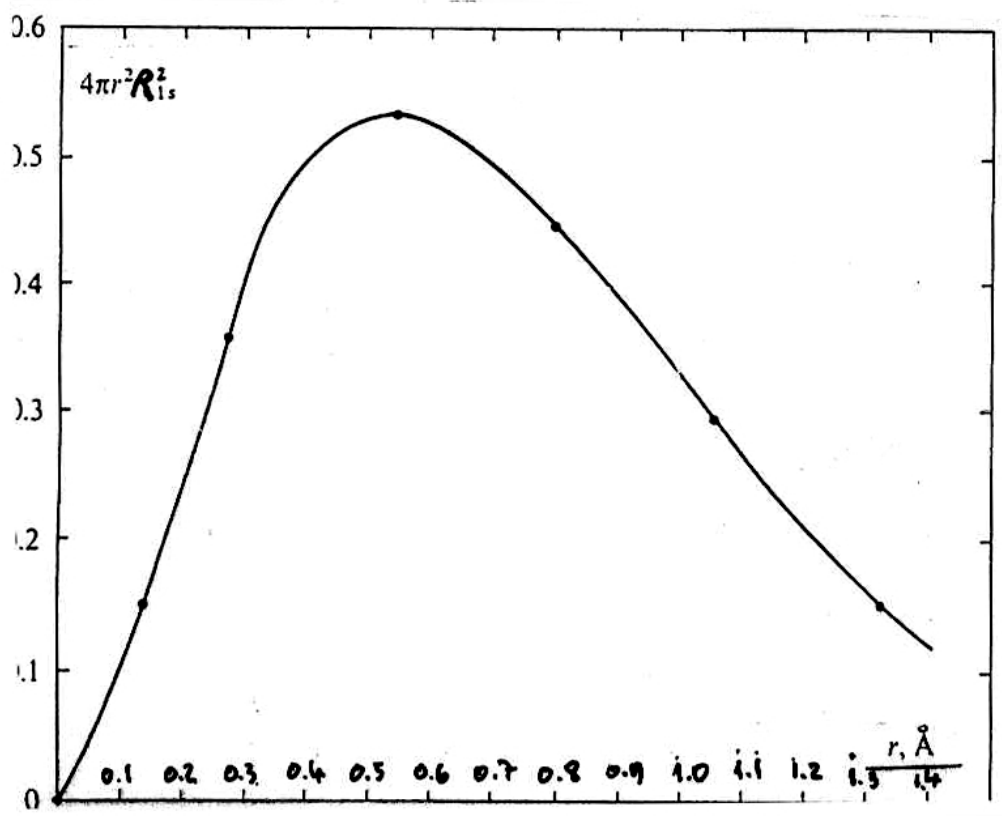
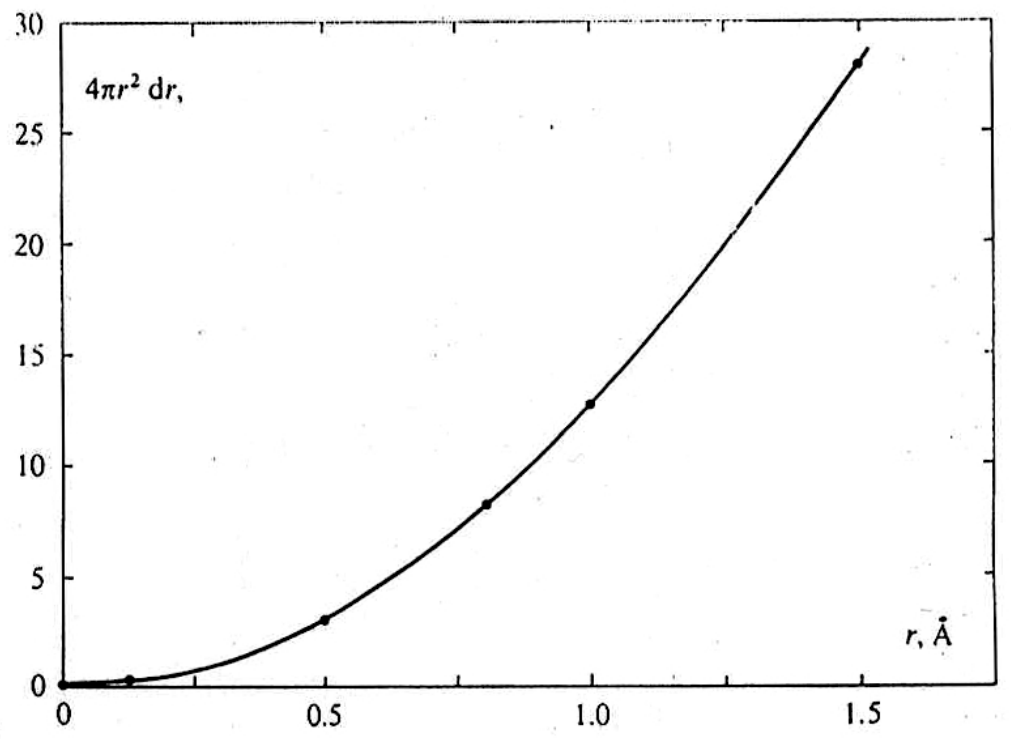
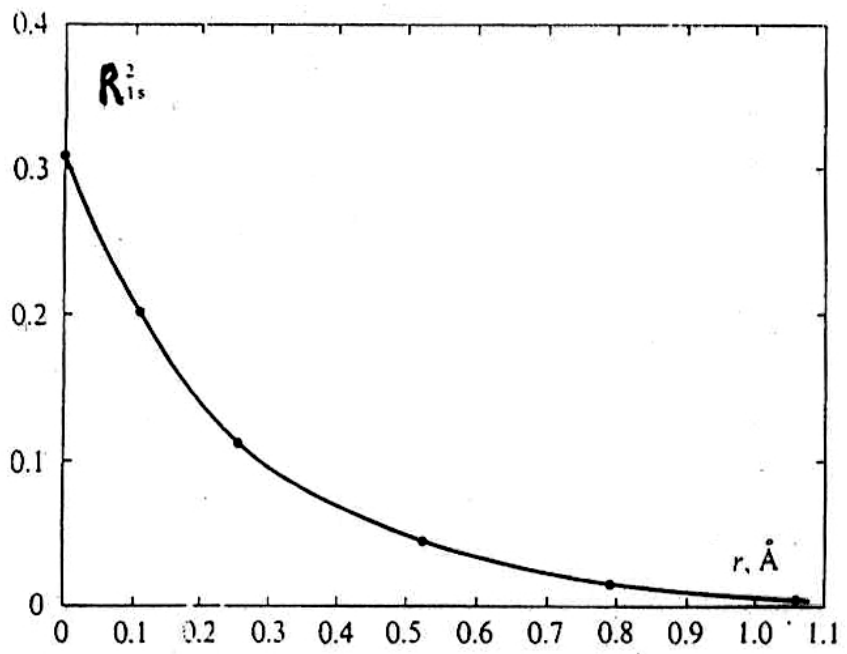
Εφόσον οι όροι $(dr)^2$, $(dr)^3$ παραληφθούν -
-ώς πολύ μικροί, $\Rightarrow dV = 4\pi r^2 dr$

Η σχέση $dV = 4\pi r^2 dr$ μπορεί να γραφεί και ως:

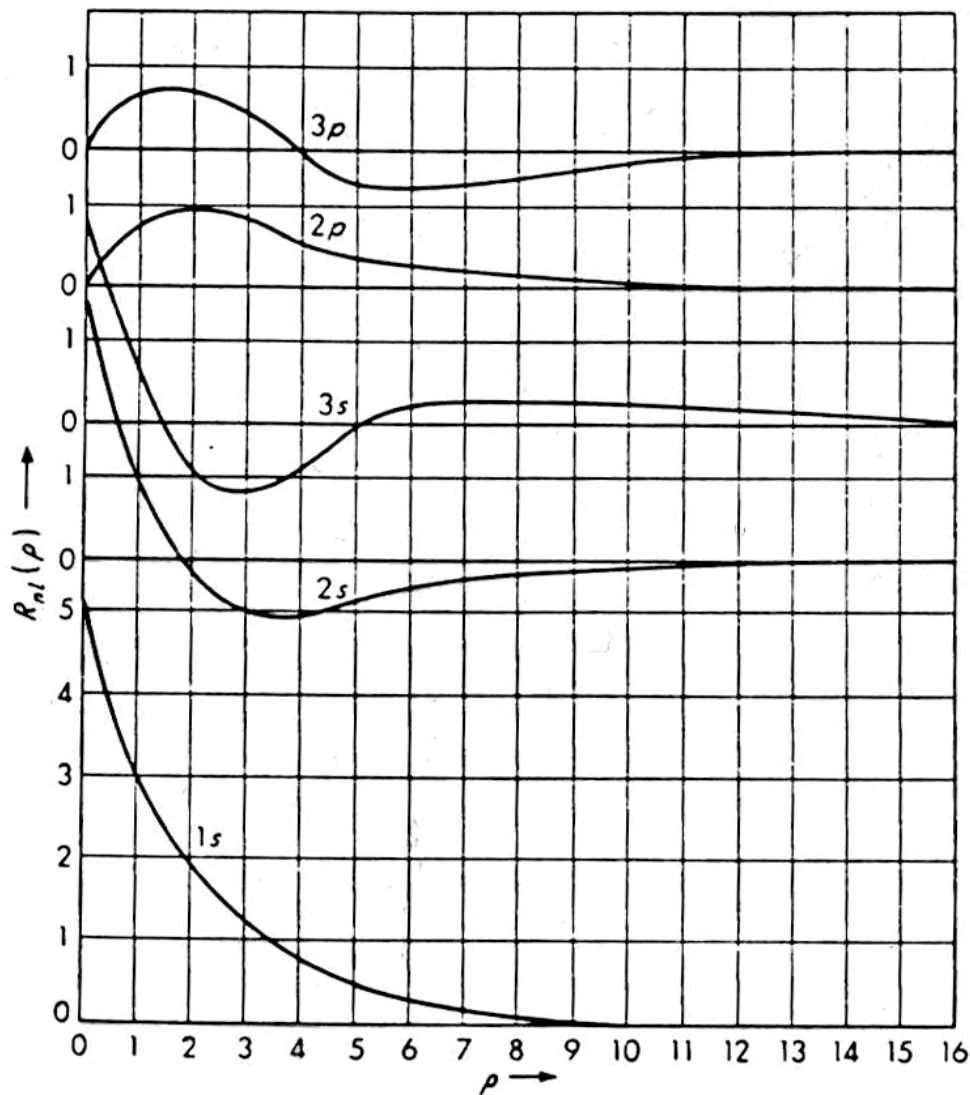
$$R^2 dV = 4\pi r^2 R^2 dr$$

←
"Εκφραση: "Τη ζητούμενη ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑ ΕΥΡΕΒΑΣ
του ηλεκτρονίου στο σφαιρικό φλοιό ακτίνας r
και πάχους dr ."

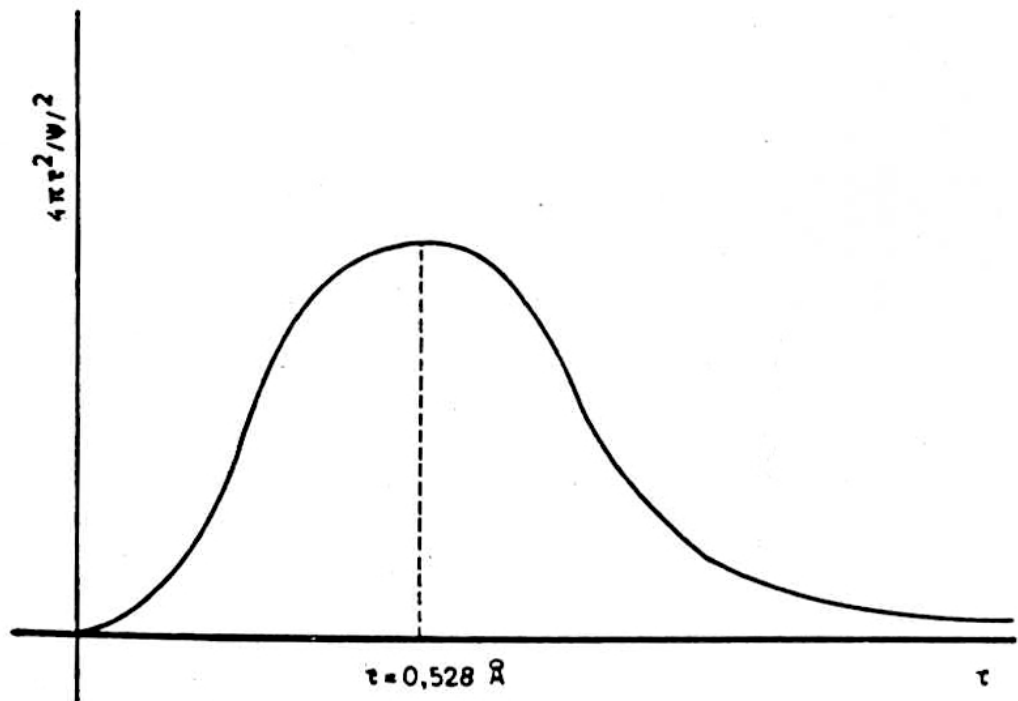
→ Συνάρτηση ακτινικής ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑΣ
(Radial dependence probability distribution)



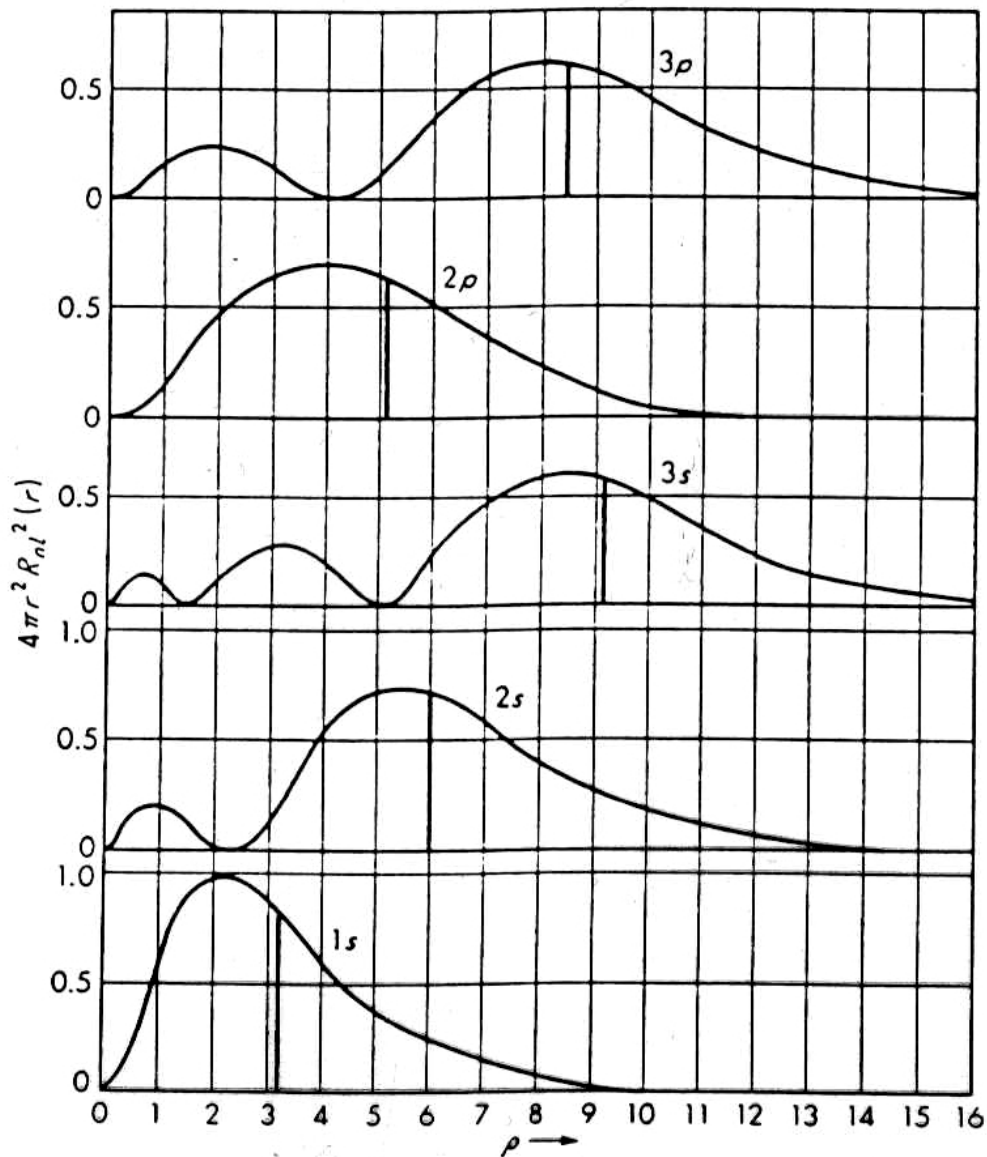
$4\pi r^2 R_{1s}^2 \Rightarrow$ συνάρτηση ακτινικής πιθανότητας
 \Rightarrow πιθανότητα εύρεσης ηλεκτρονίου
 σε σφαιρικό φλοιό ακτίνας r
 και πάχους dr .



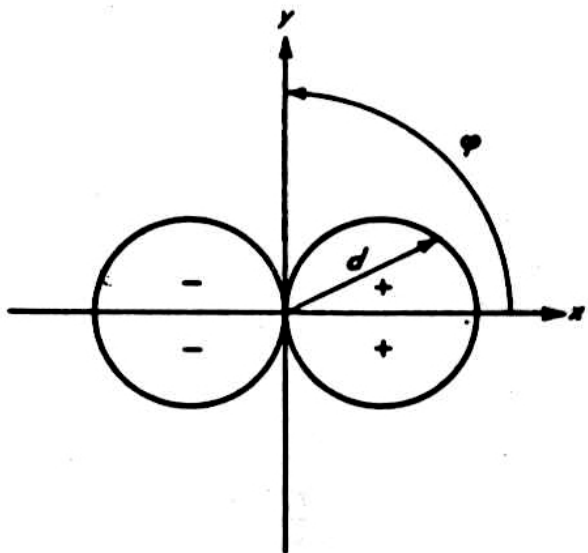
Hydrogen-atom radial wave functions for $1s$, $2s$, $2p$, $3s$, and $3p$ orbitals shown as functions of the variable $\rho = 2r/n$ (r in units of a_0).



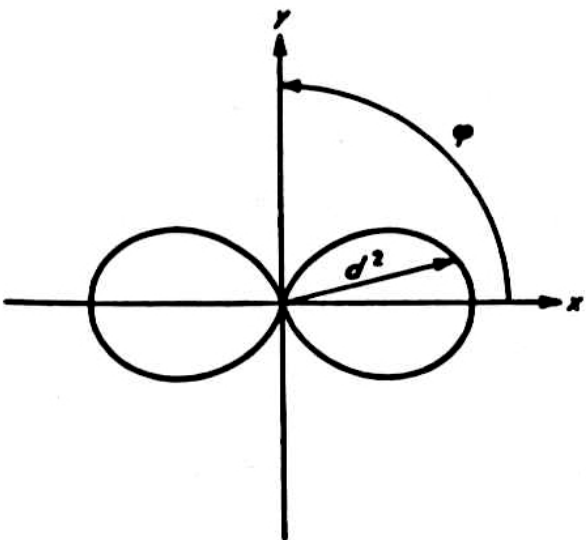
Πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου σε σφαιρική επιφάνεια ακτίνας r .



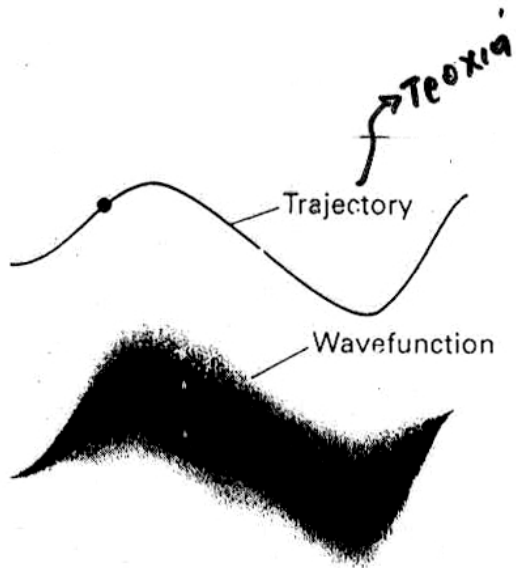
Hydrogen-atom radial distribution functions for 1s, 2s, 2p, 3s, and 3p orbitals shown as functions of the variable $\rho = 2r/n$ (r in units of a_0).



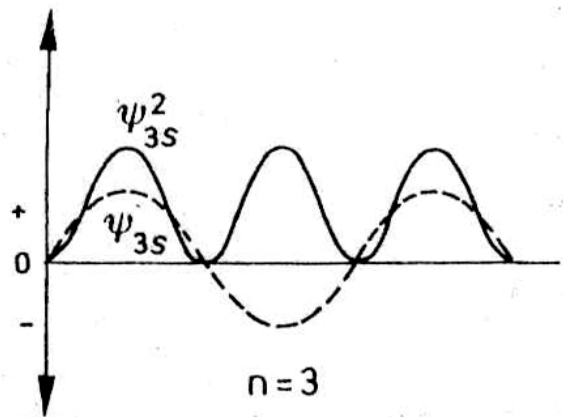
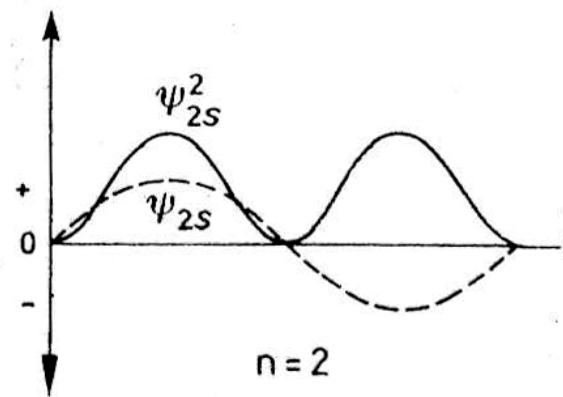
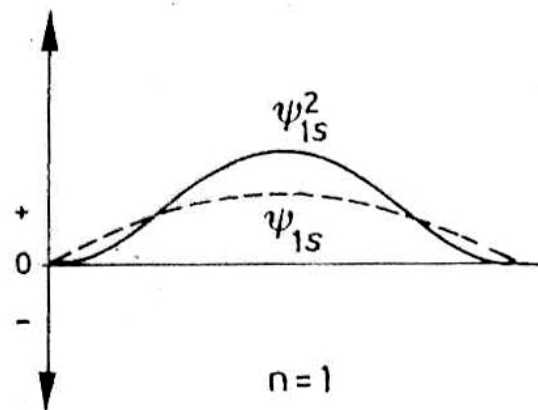
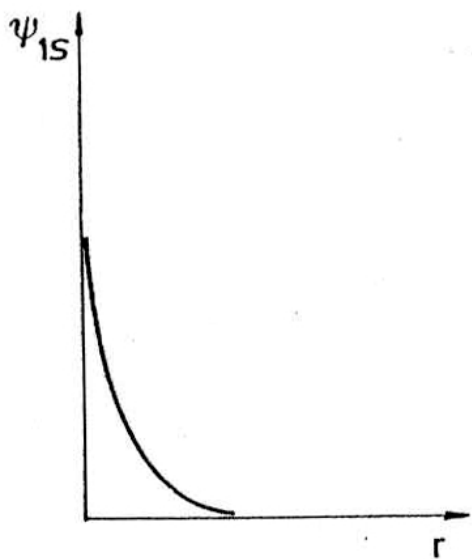
Polar plot of the absolute value of the 2p_x orbital

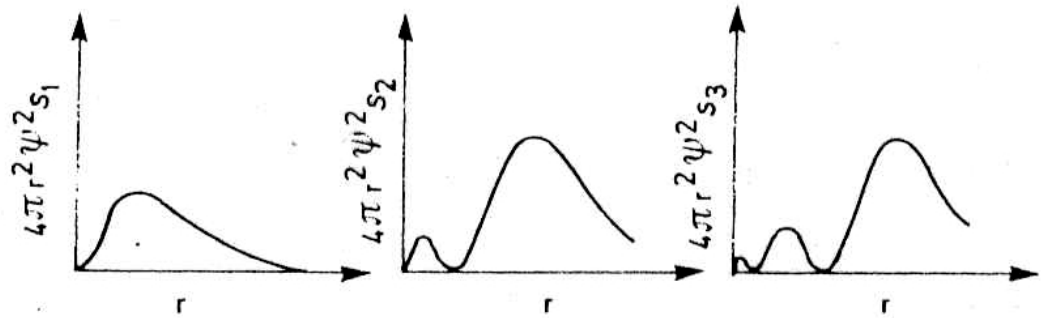
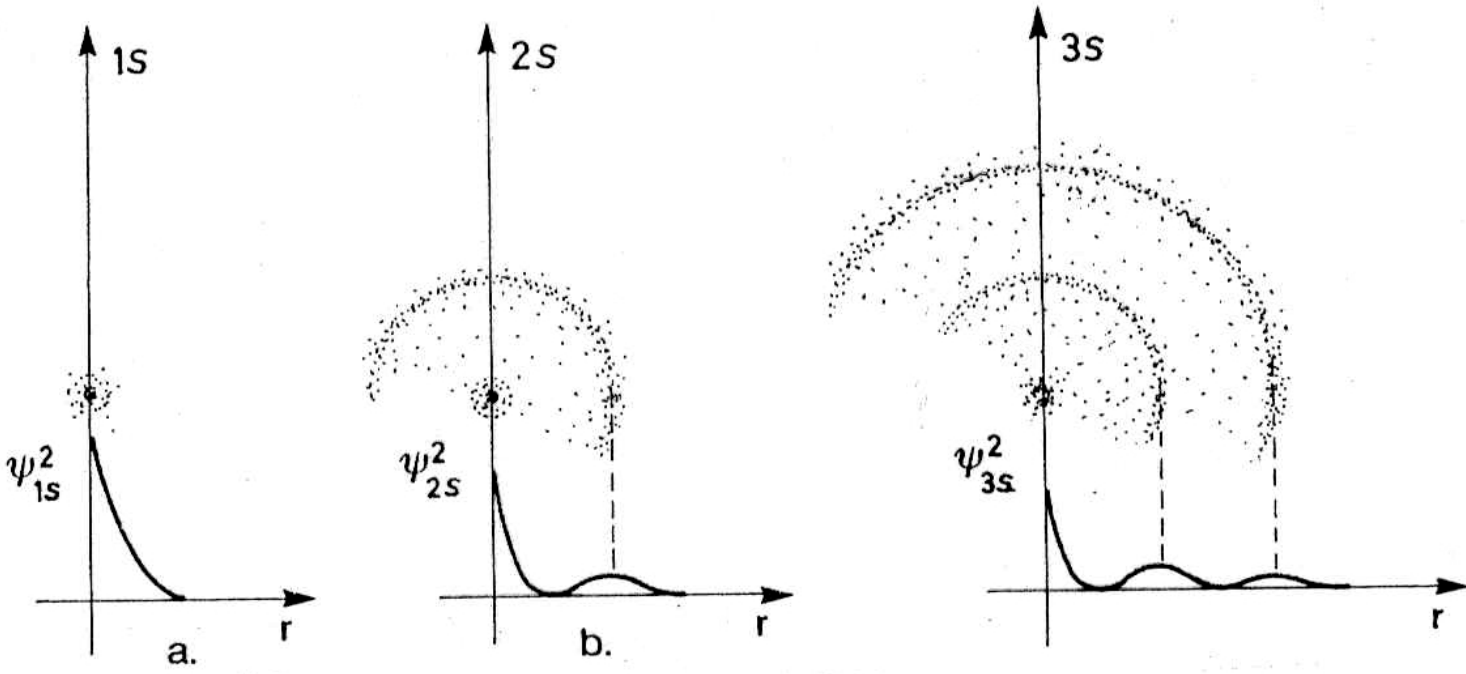


Polar plot of the square of the 2p_x orbital

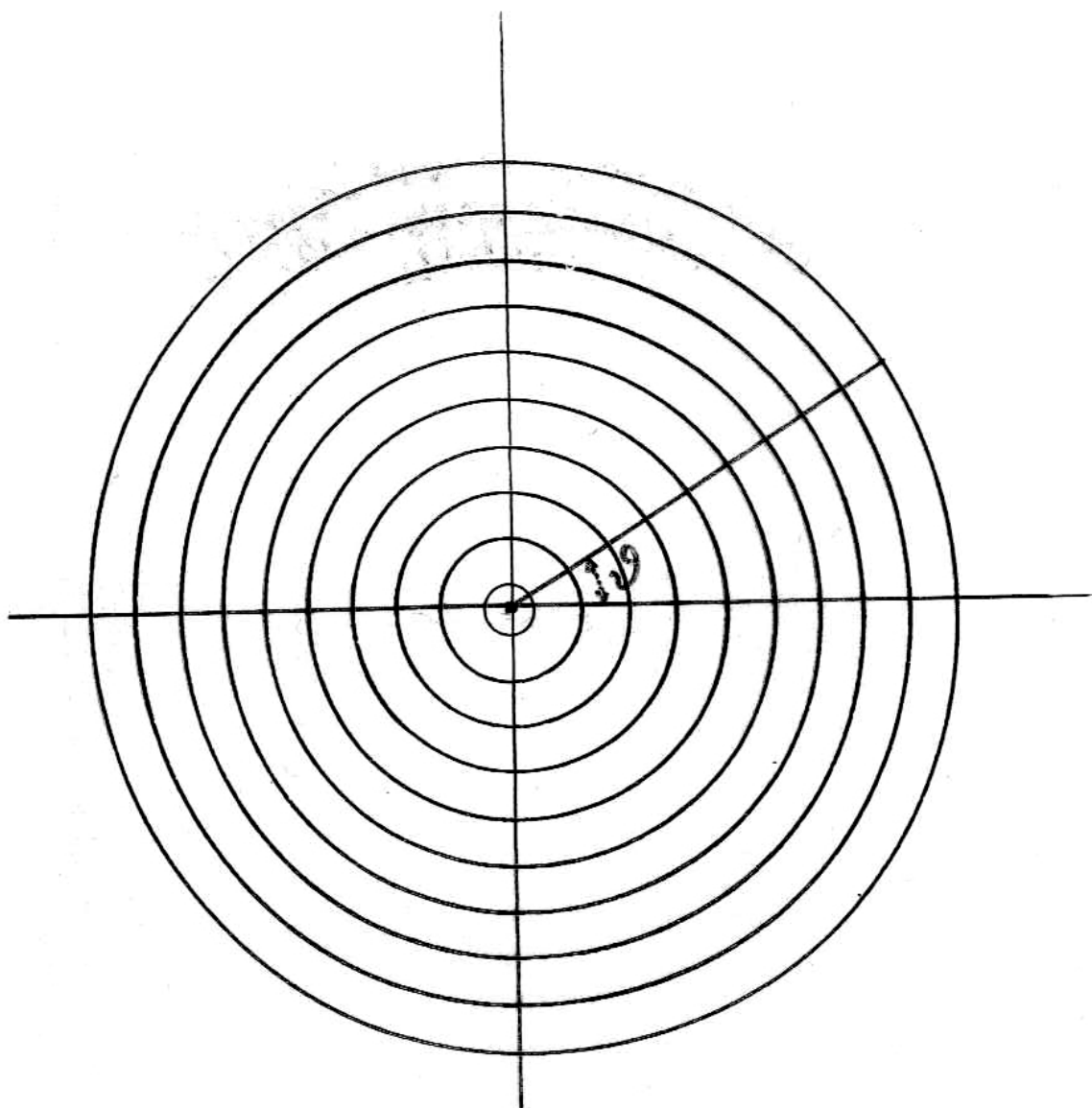


According to classical mechanics, a particle may have a well defined trajectory, with a precisely specified position and momentum at each instant (as represented by the precise path in the diagram). According to quantum mechanics, a particle cannot have a precise trajectory; instead, there is only a probability that it may be found at a specific location at any instant. The wavefunction that determines its probability distribution is a kind of blurred version of the trajectory. Here, the wavefunction is represented by areas of shading: the darker the area, the greater the probability of finding the particle there.

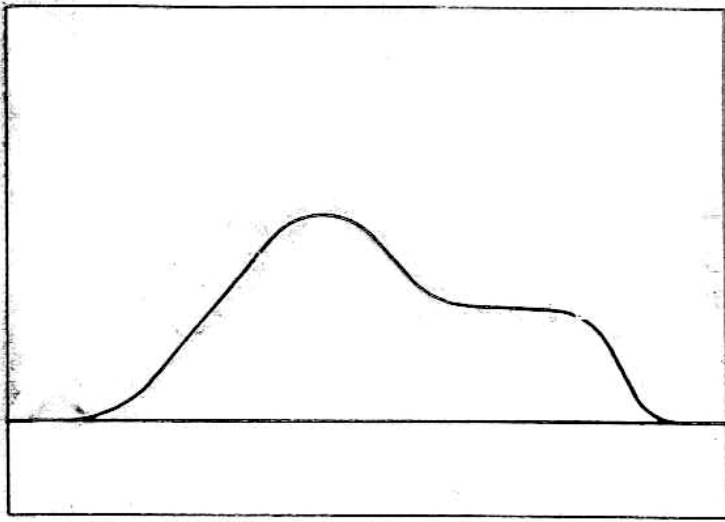




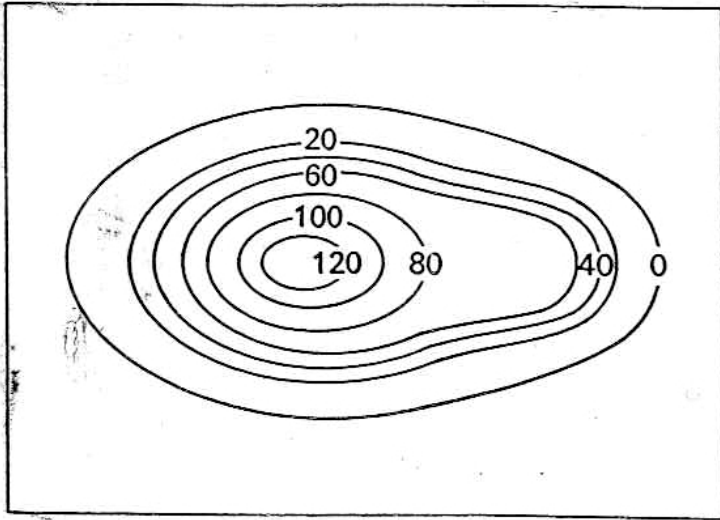
Τι είναι λοιπόν τελικά το ηλεκτρόνιο; Σωματίδιο ή κύμα;
Η απάντηση είναι: ούτε σωματίδιο, ούτε κύμα, αλλά μια σύνθεση που εμπεριέχει ταυτόχρονα και τις σωματιδιακές και τις κυματικές ιδιότητες. Η απάντηση αυτή είναι βέβαια πολύ αόριστη για να διελευκάνει το μυστήριο. Θυμίζει τη φράση Γάλλου πεζογράφου «όταν σου αποκρίνεται ένας φιλόσοφος, δεν καταλαβαίνεις πια καθόλου τι τον έχεις ρωτήσει».



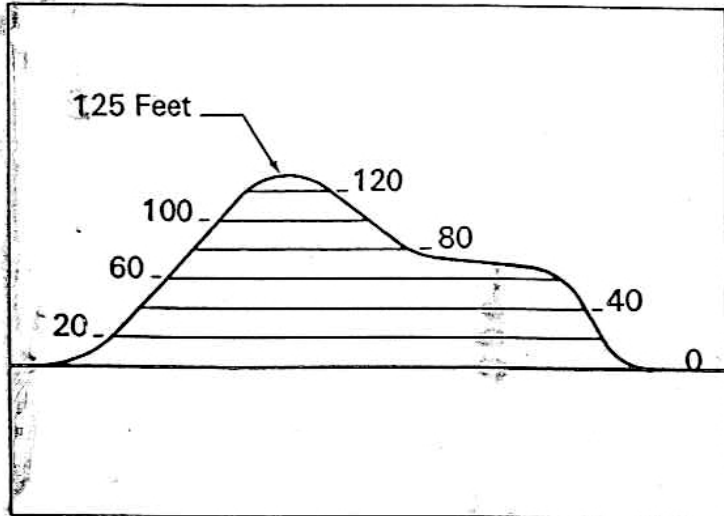
A set of contour lines showing the electron density in the 1s orbital. Each line represents a density equal to half that of the next one in.



(a)

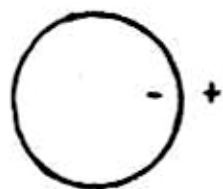


(b)

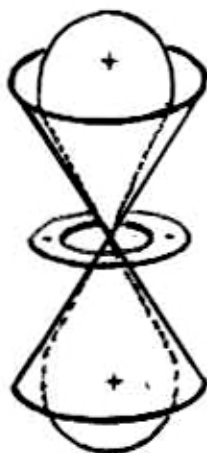


(c)

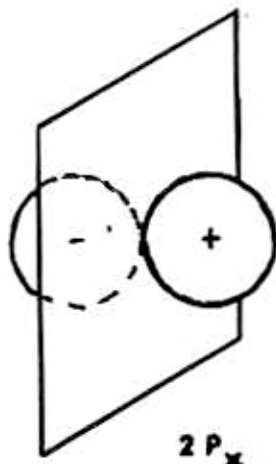
A hill can be represented on a map by contour lines. A profile of a hill is shown in (a), and its contour-line representation in (b). These contour lines "slice" the hill into horizontal slabs, as shown in (c).



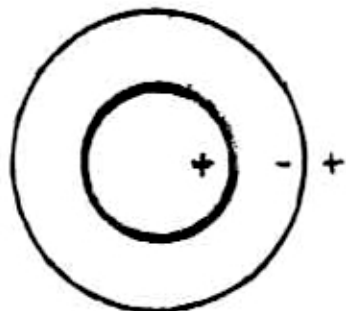
2s



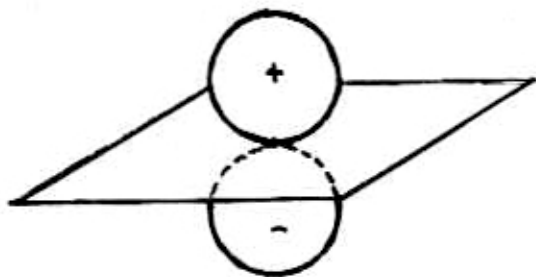
3d_z²



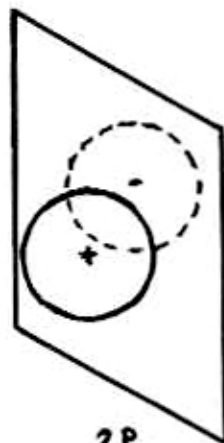
2p_x



3s



2p_z



2p_y

Παραδείγματα κομβικών επιφανειών. Σ' όλες τις περιπτώσεις υπάρχει η σφαιρική κομβική επιφάνεια στο άπειρο, όπου το ψ μηδενίζεται, που όμως στο σχήμα δεν σχεδιάζεται. Στο τροχιακό 2s υπάρχει, εκτός από την επιφάνεια στο άπειρο, άλλη μία σφαιρική κομβική επιφάνεια στο τροχιακό 3s άλλες δύο κ.α.κ. Στο τροχιακό 3d_z² σχεδιάζονται οι δύο κωνικές επιφάνειες, στο 2p_z το επίπεδο xy και στα τροχιακά 2p_x και 2p_y τα «κατακόρυφα» επίπεδα yz και xz αντίστοιχα.