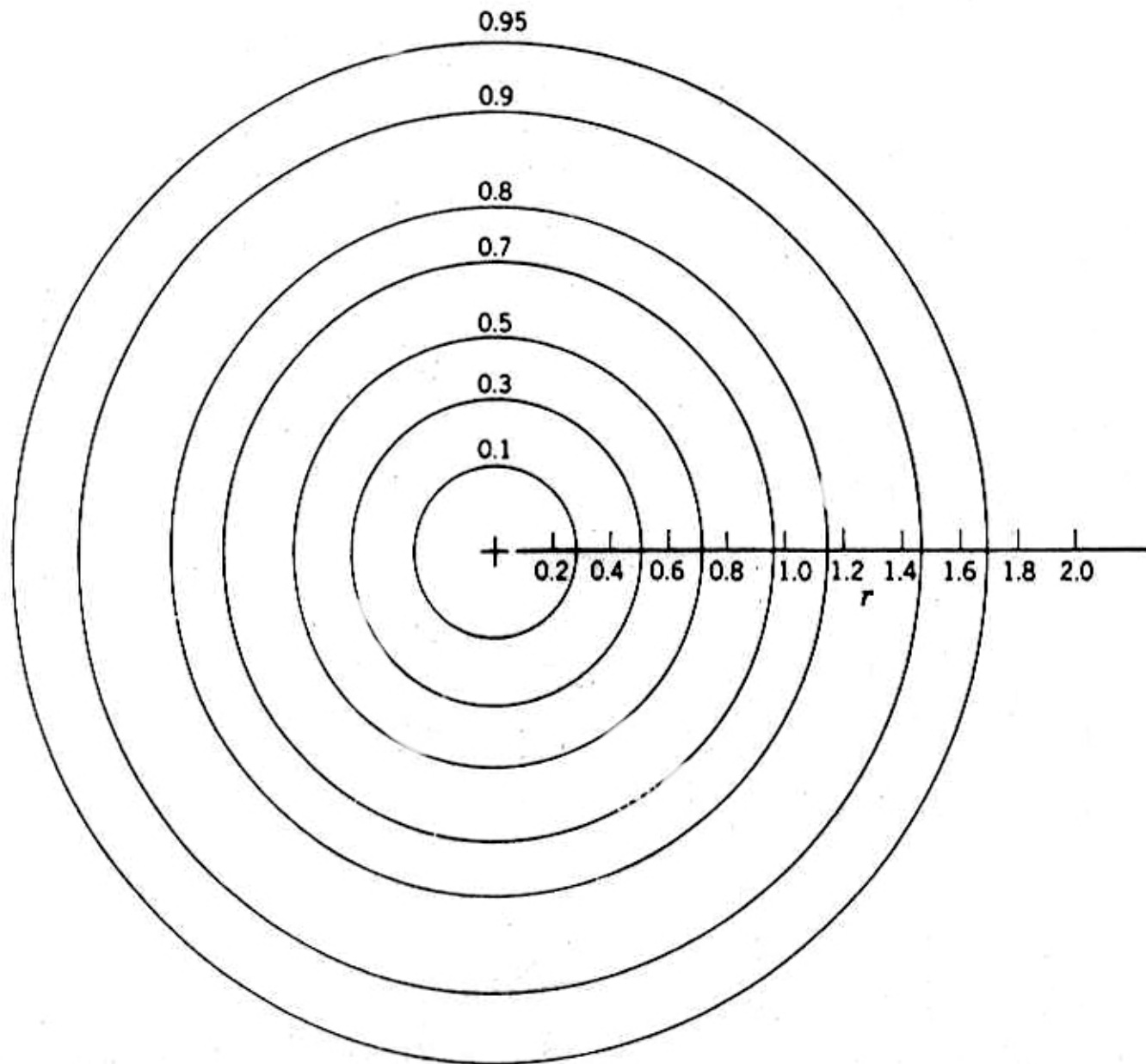


ΑΡΙΘΜΟΣ ΚΟΜΒΙΚΩΝ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ

Ο ιντολικός αριθμός κομβικών επιφανειών σε κάθε τροχιακό είναι γου με η.

Τροχιακό	Σφαιρικών	Κωνικών ή επίπεδο xy	Κατακορίφων, επιπέδων.
1s	1	∅	∅
2s	2	∅	∅
2p _x	1	∅	1
2p _y	1	∅	1
2p _z	1	1	∅
3s	3	∅	∅
3p _x	2	∅	1
3p _y	2	∅	1
3p _z	2	1	∅
3d _{z²}	1	2	∅
3d _{x²-y²}	1	1	1
3d _{xy}	1	1	1
3d _{xz}	1	∅	2
3d _{yz}	1	∅	2

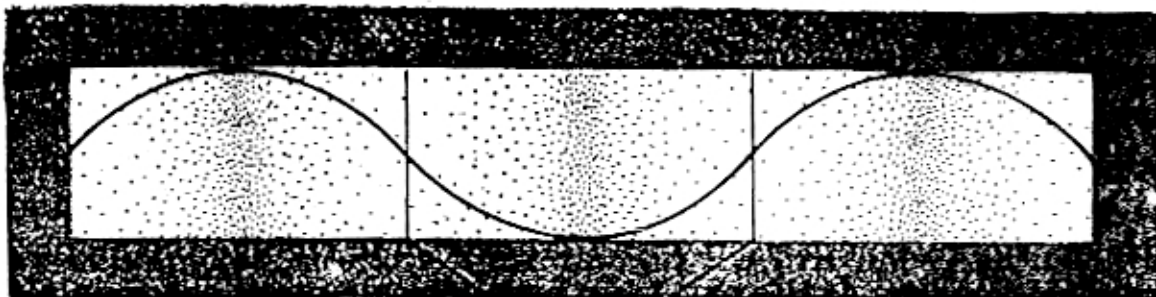
Στην αναρίθμηση προμετρικά και η σφαιρική επιφάνεια στο άπειρο.



The charge distribution in the normal hydrogen atom; Contours of equal Probability in the 1s orbital. From G. W. Wheland, *Resonance in Organic Chemistry*, John Wiley and Sons, Inc., 1955, by permission.

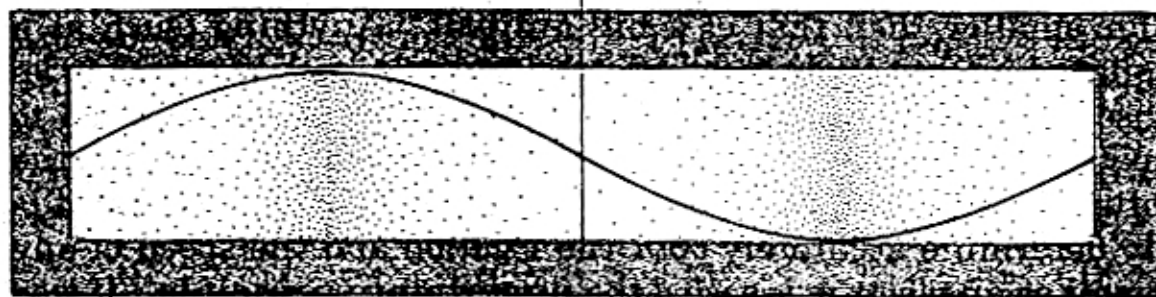


Σχηματική παράσταση ατόμου υδρογόνου στη θεμελιώδη κατάσταση. Ο πυρήνας βρίσκεται στο κέντρο. Το σχήμα είναι δύο διαστάσεων. Τα πραγματικά μη διεγερμένα άτομα είναι σφαιρικά.

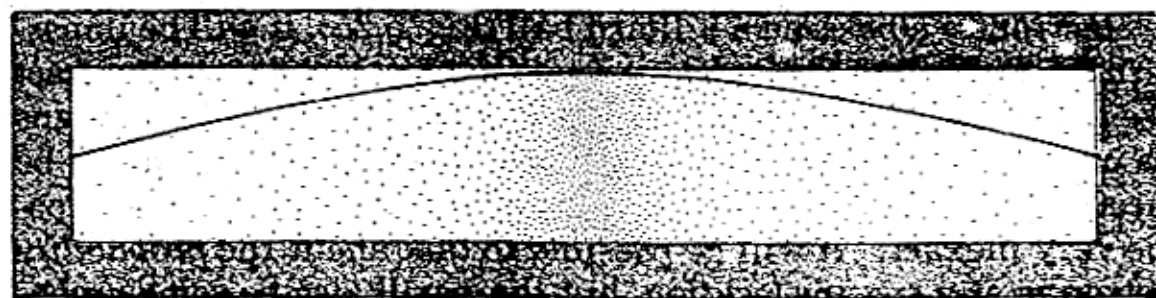


$n = 3$

Nodes



$n = 2$

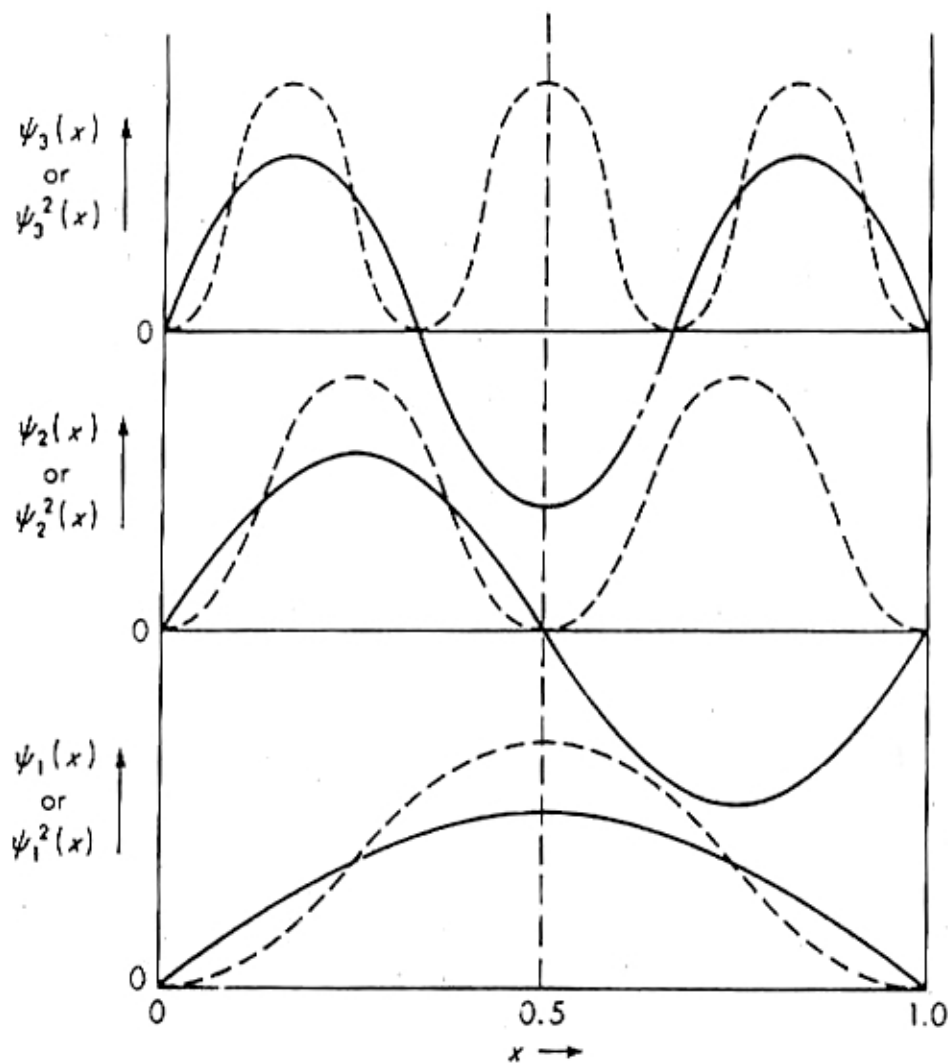


$n = 1$

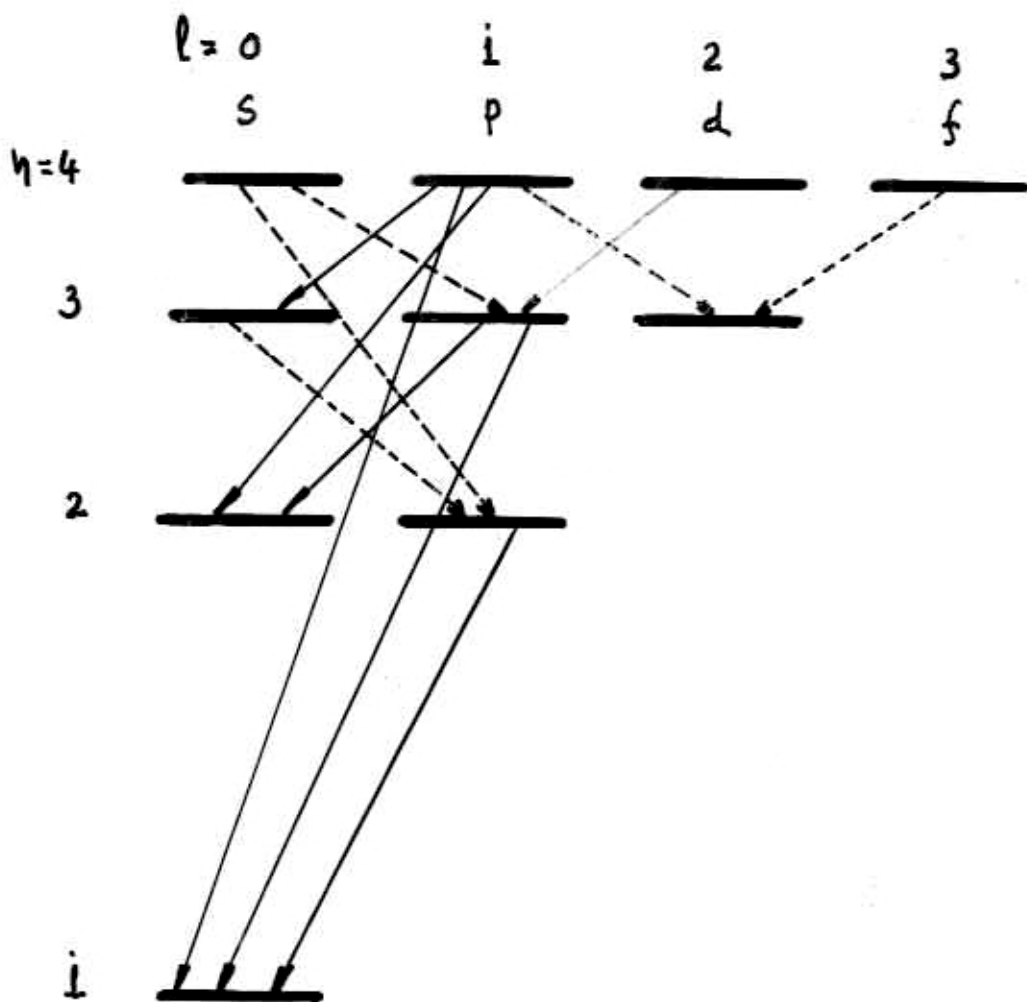
Indicating electron density or electron probability by the density of dots for the electron in a box. Nodes, where the probability of finding the electron is zero, are indicated. In the guitar-string analogy a node corresponds to a point on the string which is not vibrating up and down.

The probability of finding the particle at any point between x and $x + dx$ is given by :

$$\psi_n^2 dx$$

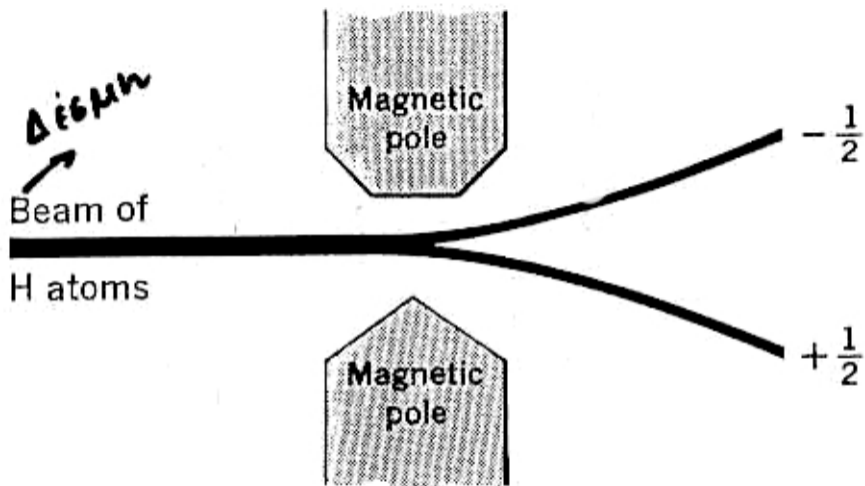


The first three wave functions of the particle in a box and their corresponding probability distribution functions. The wave functions are shown in solid lines; their squares are shown in dashed lines. For simplicity L is set equal to unity.

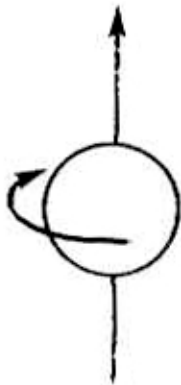


Κανόνες επιλογής

$$\begin{aligned} \Delta n &= n_1 - n_2 && \text{οιαδήποτε} \\ \Delta l &= l_1 - l_2 && \pm 1 \\ \Delta m &= m_1 - m_2 && 0, \pm 1 \end{aligned}$$



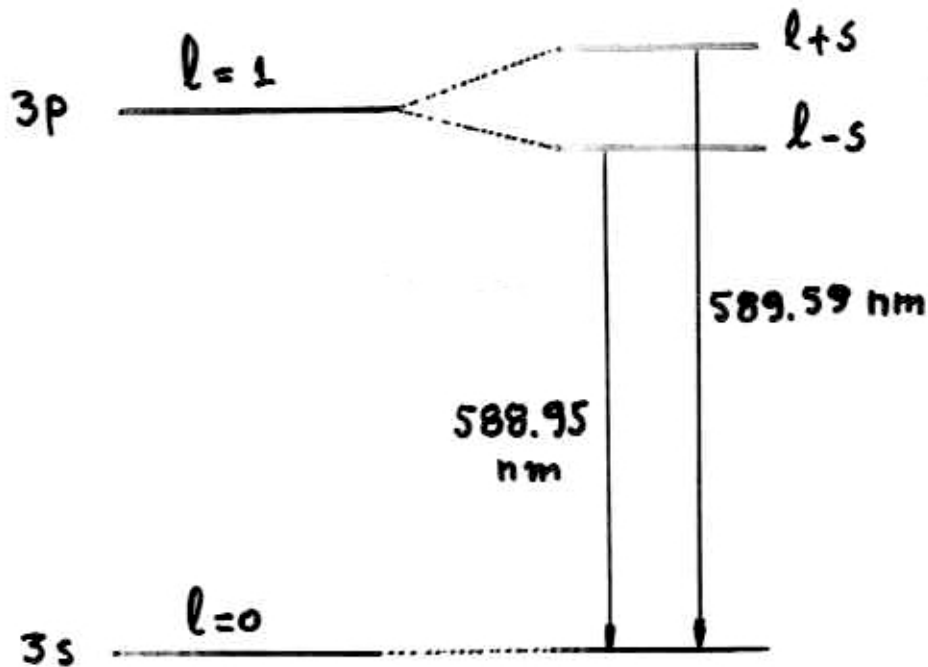
Electron spin revealed in an uneven magnetic field produced by pole faces of different shapes.



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



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



Ατμοί Νατρίου ($\text{Na}_{(g)}$)

TABLE 2-1

Quantum numbers and their properties

<i>Symbol</i>	<i>Name</i>	<i>Values</i>	<i>Role</i>
n	Principal	1, 2, 3, ...	Determines the major part of the energy
l	Angular momentum	0, 1, 2, ..., $n-1$	Describes angular dependence and contributes to the energy
m_l	Magnetic	0, ± 1 , ± 2 , ..., $\pm l$	Describes orientation in space
m_s	Spin	$\pm \frac{1}{2}$	Describes orientation of the electron spin in space

Orbitals with different l values are known by the following labels, derived from early terms for different families of spectroscopic lines:

$l =$	0	1	2	3	4	5, ...
Label	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	continuing alphabetically

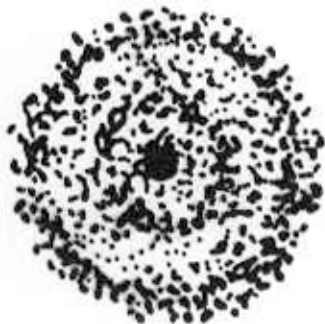
• Στα πολυηλεκτρονιακά άτομα τα ηλεκτρονιακά νέφη αναμιγνύονται. Υπάρχει δηλαδή ένα συνεχές ηλεκτρονιακό νέφος με αυξομειούμενη πυκνότητα, χωρίς να μπορεί να γίνει διάκριση που ακριβώς τελειώνει το ηλεκτρονιακό νέφος του ενός ηλεκτρονίου και που αρχίζει του άλλου.



Ήλιο



Νέο



Αργό



Ξένο

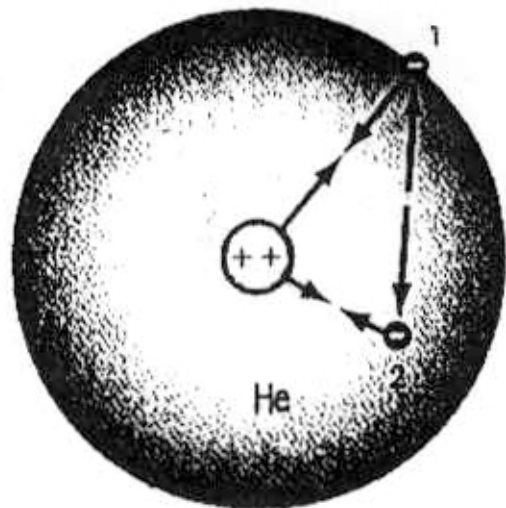
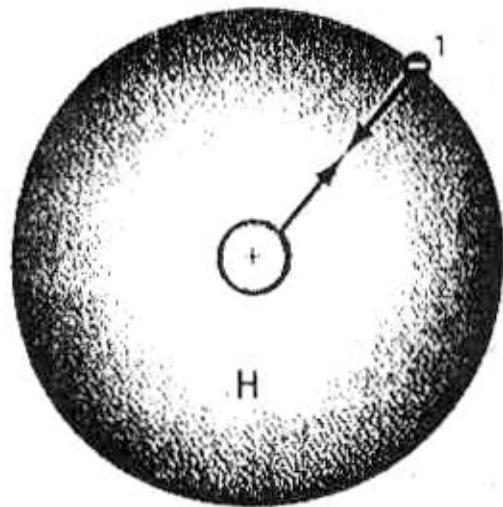


Κρυπτό

Σχηματική παράσταση των ατόμων των ευγενών αερίων.

Οι δυνάμεις μεταξύ πυρήνα και ηλεκτρονίου είναι ελκτικές και συμβάλλουν στη μείωση της ενέργειας του ηλεκτρονίου. Οι δυνάμεις αυτές συσχετίζονται με την τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού n . Οπότε, όσο η τιμή του n αυξάνεται, τόσο η ενέργεια του ηλεκτρονίου αυξάνεται.

Αντίθετα, οι δυνάμεις ηλεκτρονίου – ηλεκτρονίου είναι απωστικές και συμβάλλουν στην αύξηση της ενέργειας του ηλεκτρονίου. Οι διηλεκτρονιακές απώσεις συσχετίζονται με τον αζιμουθιακό κβαντικό αριθμό l . Όσο η τιμή του l αυξάνεται, τόσο η ενέργεια του ηλεκτρονίου μειώνεται.



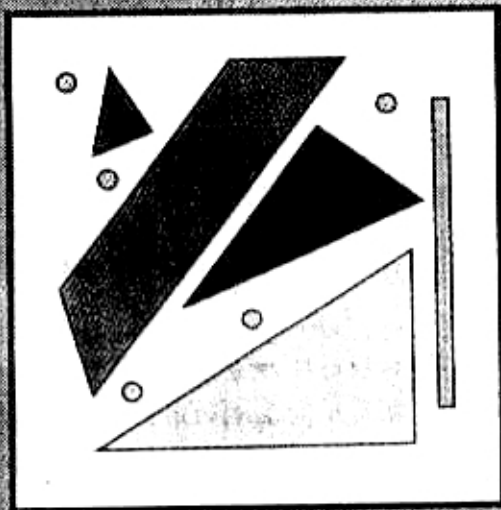
Σχηματική παρουσίαση των δυνάμεων που αναπτύσσονται στο μονοηλεκτρονικό άτομο H (αριστερά) και στο πολυηλεκτρονικό άτομο He (δεξιά).

Εξίσωση Schrödinger για το άτομο Ηλίου

$$Z_{\text{He}} = 2.$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_2^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \psi$$

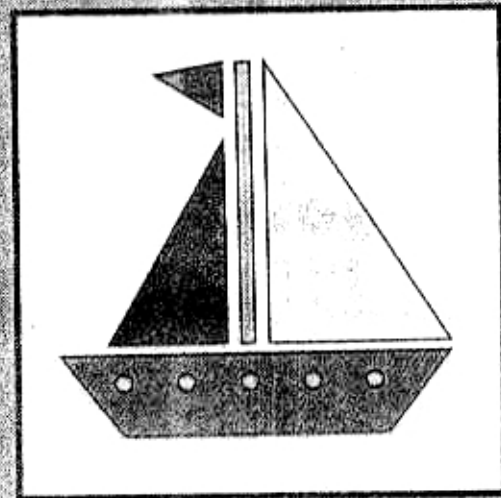
$$* \left(E + \frac{2e^2}{r_1} + \frac{2e^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi = 0$$



Όταν ο εγκέφαλος βλέπει κάτι, ψάχνει για κάποιο γνωστό πρότυπο ή νόημα. Όμως, αυτή η εικόνα είναι ένα σύμπλεγμα σχημάτων χωρίς νόημα.

Τώρα τι λέτε;

Σίγουρα, μπορείτε να απομνημονεύσετε και να ζωγραφίσετε από μνήμης αυτή την εικόνα με μεγαλύτερη επιτυχία. Αποτελείται από τα ίδια σχήματα όπως και η εικόνα πάνω. Όμως, τώρα η διάταξή τους έχει νόημα – ένα καραβάκι.

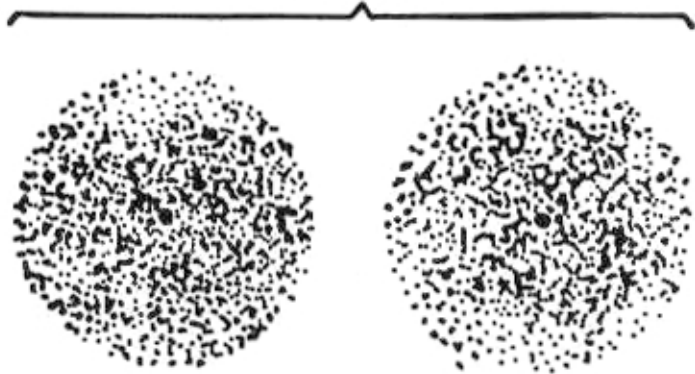


www.shef.ac.uk/chemistry/orbitron/

$$\Psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + c_3 \psi_3 + \dots$$

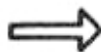
Γραμμικός Συνδυασμός Ατομικών Τροχιακών
(LCAO)

επικάλυψη



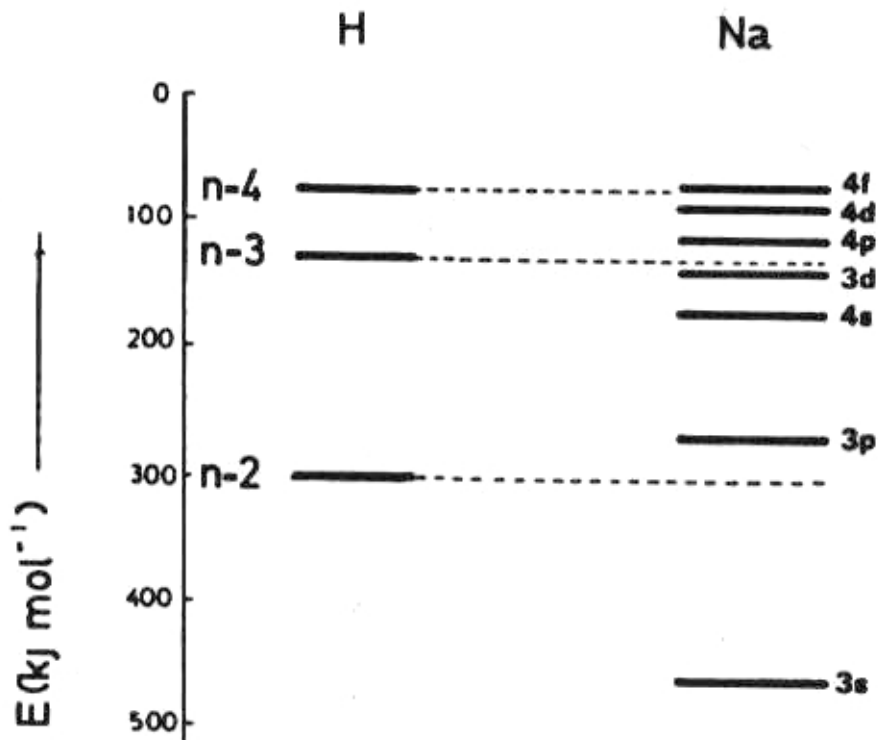
1s ηλεκτρόνιο

1s ηλεκτρόνιο

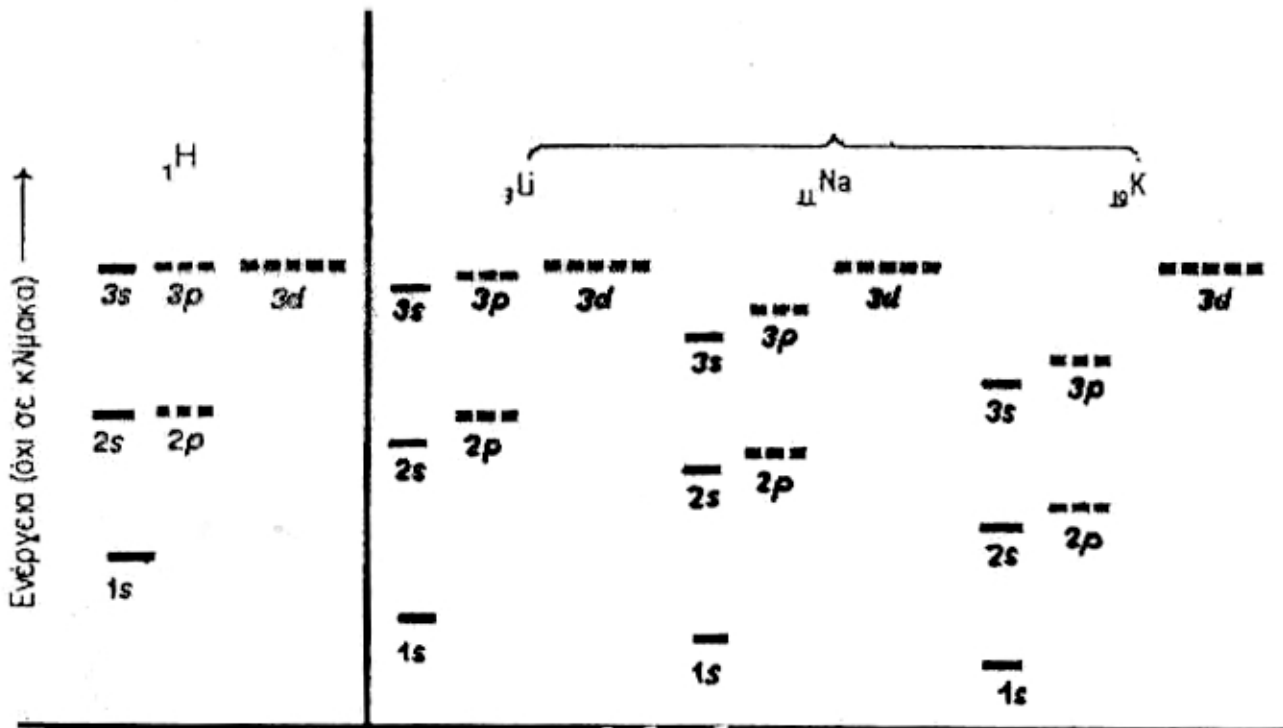


Δύο 1s ηλεκτρόνια ηλίου

Παραστατική εικόνα επικάλυψης δύο 1s ηλεκτρονικών νεφών υδρογόνου, για να ερμηνευτεί το αποτελούμενο από δύο ηλεκτρόνια ηλεκτρονικό νέφος του ατόμου του ηλίου.

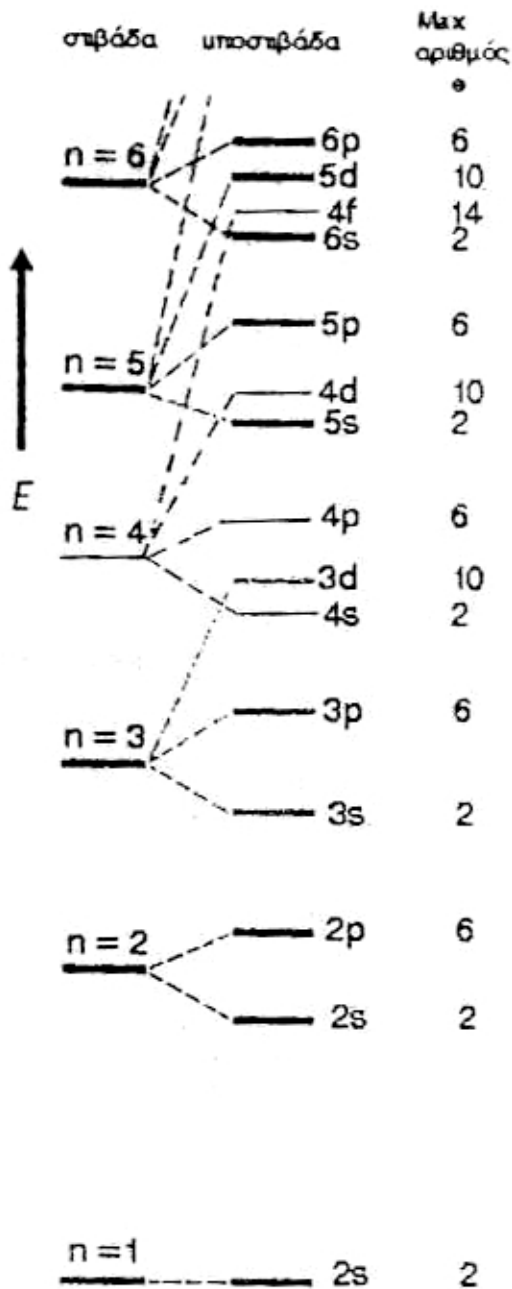


Σύγκριση σταθμών ενεργείας των ατόμων υδρογόνου και νατρίου.

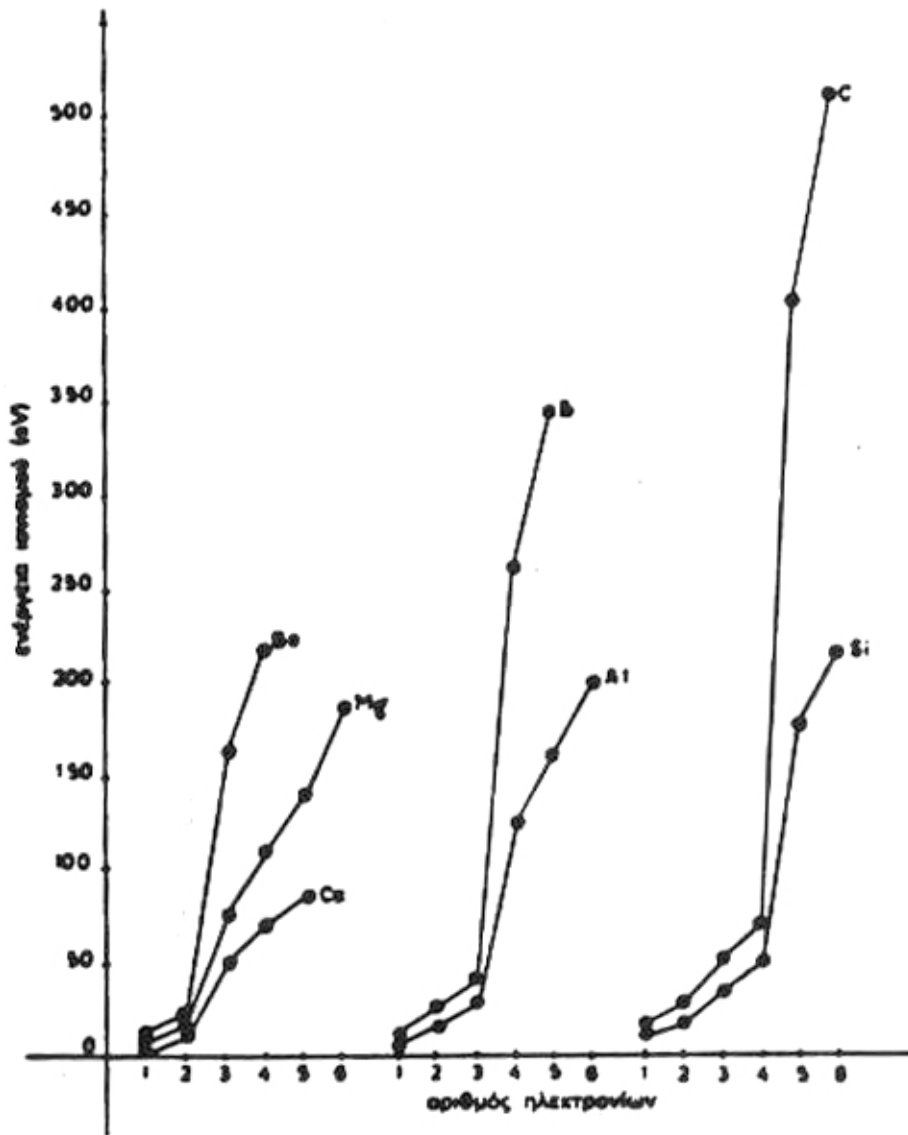


ΣΧΗΜΑ 4.3 Ενεργειακές στάθμες των τροχιακών του H (αριστερά) και των πολυηλεκτρονιακών ατόμων Li, Na, K (δεξιά).

- Στο υδρογόνο (και τα υδρογονοειδή) η ενέργεια των ατομικών τροχιακών εξαρτάται αποκλειστικά και μόνο από τη μέση απόσταση του ηλεκτρονιακού νέφους από τον πυρήνα (κύριος κβαντικός αριθμός). Αντίθετα, στα πολυηλεκτρονιακά άτομα η ενέργεια των ατομικών τροχιακών εξαρτάται τόσο από το μέγεθος (κύριος κβαντικός αριθμός n), όσο και το σχήμα του ηλεκτρονιακού νέφους (αξιμοθιακός κβαντικός αριθμός l).



Ενεργειακές στάθμες των υποστιβάδων πολυηλεκτρονιακών ατόμων και ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων ανά υποστιβάδα.



Απαιτούμενη ενέργεια για τη διαδοχική απόσπαση ηλεκτρονίων από διάφορα άτομα.