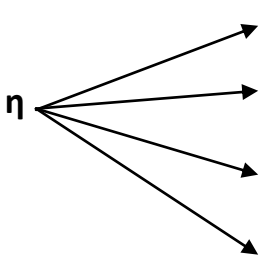
Κβαντικοί αριθμοί

Η θεωρία του Bohr χρειάζεται **μόνο** τον κύριο κβαντικό αριθμό **η**, για να καθορίσει ενέργεια για το άτομο του υδρογόνου $E_η$=-2,18 .$10^{-18}/η^2$ και επιτρεπτή κυκλική τροχιά.

Στην κβαντομηχανική είναι απαραίτητοι τρεις (3) κβαντικοί αριθμοί για την δόμηση του τροχιακού.

- Κύριος κβαντικός αριθμός η. (*προσδιορίζει φλοιό*)
- Δευτερεύον κβαντικός αριθμός ℓ . (*προσδιορίζει υποφλοιό*)
- Μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_ℓ . (*προσδιορίζει τροχιακό*)

Ο τέταρτος κβαντικός αριθμός με όνομα κβαντικός αριθμός του Spin (m_s) -δεν καθορίζει τροχιακό, αλλά αναφέρεται στην αυτοπεριστροφή του ηλεκτρονίου.



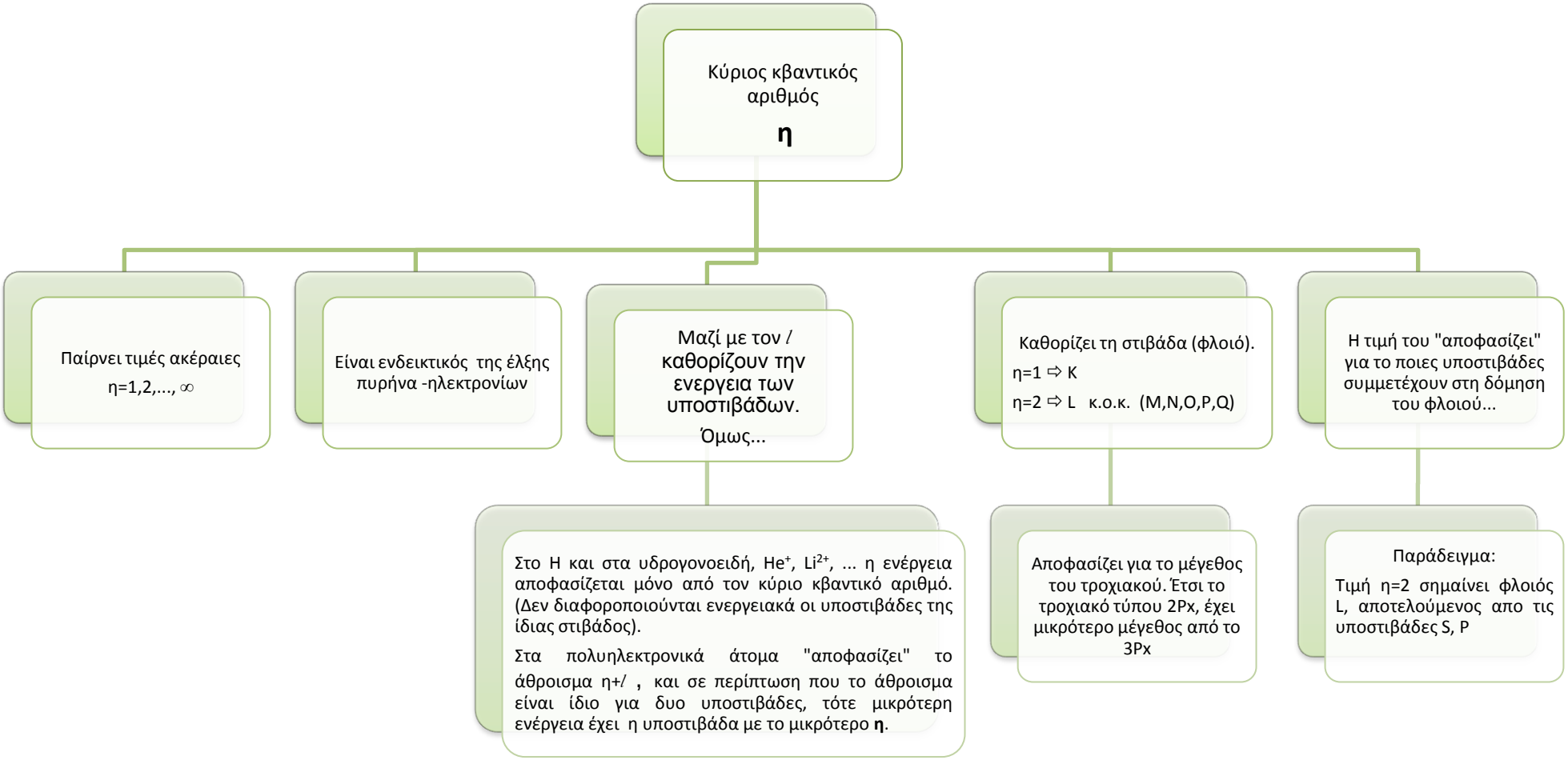
ℓ =0	υποφλοιός S	σφαίρα	⇨	m_ℓ =0	⇨	ένα τροχιακό με σφαιρική συμμετρία
ℓ =1	υποφλοιοί P	Τρία ζεύγη λοβών	⇨	m_ℓ =+1,-1,0	⇨	Τρία τροχιακά Px , Pψ, Pz
ℓ =2	υποφλοιός d	Πέντε περιοχές	⇨	m_ℓ =-2,-1,0,+1,+2	⇨	Πέντε τροχιακά*(πολύπλοκη σχεδίαση)*
ℓ =3	υποφλοιός f	Επτά περιοχές	⇨	m_ℓ =-3, -2, -1, 0, +1, +2 ,+3	⇨	Επτά τροχιακά …

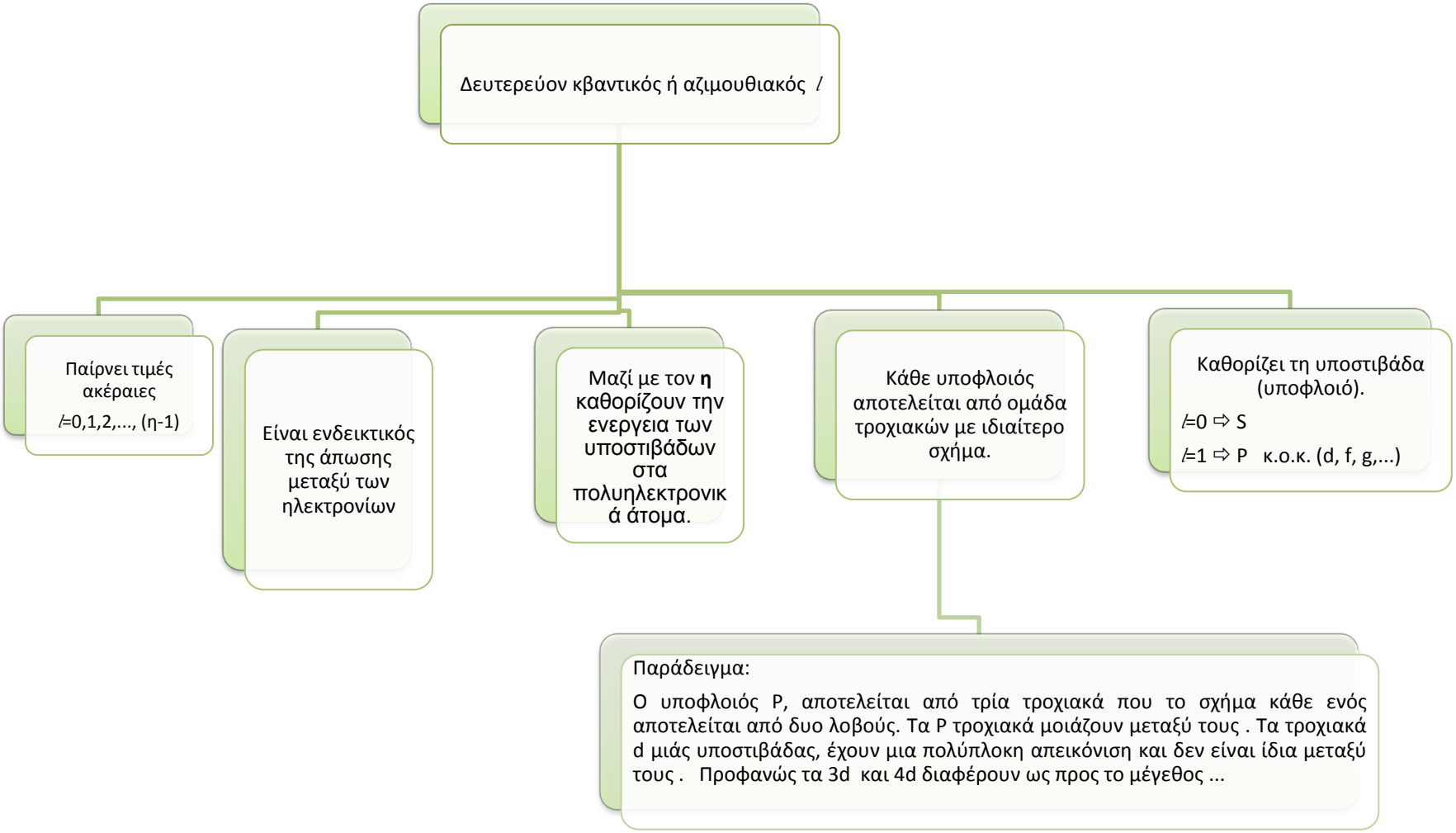
…

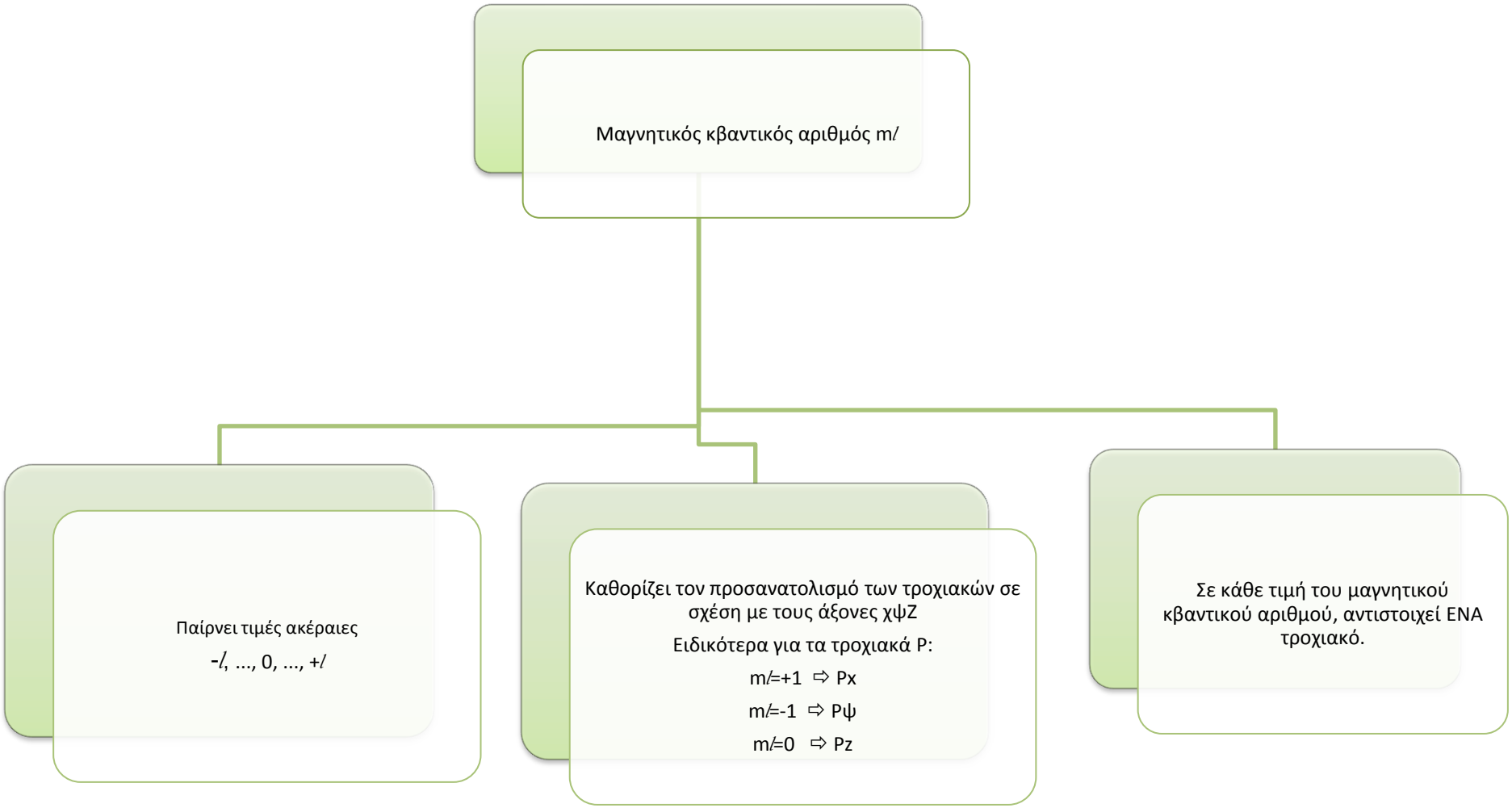
Όταν η=1 τότε υπάρχει μόνο η γραμμή ℓ =0

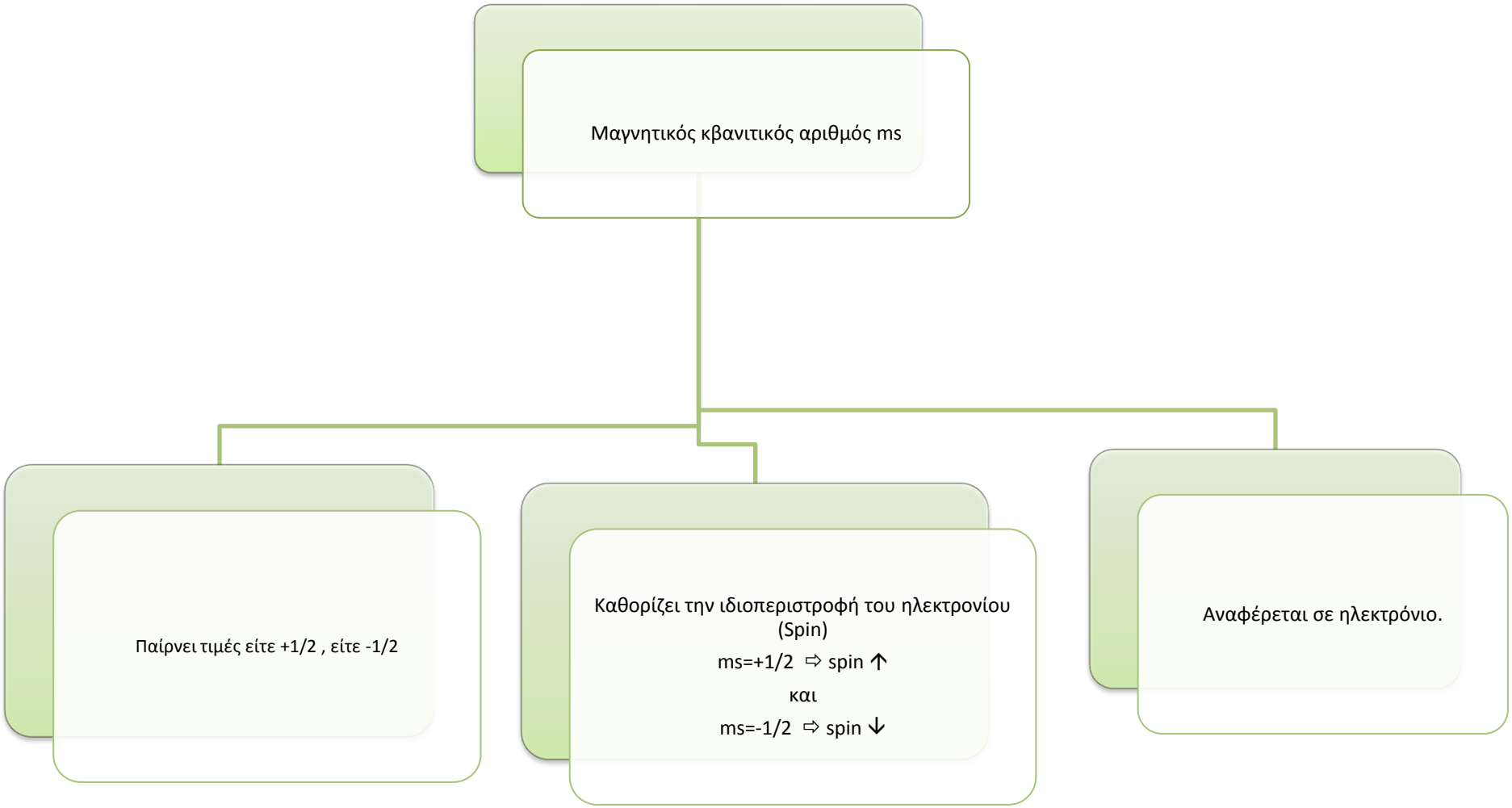
Όταν η=2 τότε υπάρχουν οι γραμμές ℓ =0 & ℓ =1

Όταν η=3 τότε υπάρχουν οι γραμμές ℓ =0 & ℓ =1 & ℓ =2 κ.ο.κ.


Κύριος κβαντικός αριθμός
η
Παίρνει τιμές ακέραιες
η=1,2,..., ∞
Είναι ενδεικτικός της έλξης πυρήνα -ηλεκτρονίων
Μαζί με τον / καθορίζουν την ενεργεια των υποστιβάδων.
Όμως...
Στο Η και στα υδρογονοειδή, He^{+}, Li^{2+}, ... η ενέργεια αποφασίζεται μόνο από τον κύριο κβαντικό αριθμό. (Δεν διαφοροποιούνται ενεργειακά οι υποστιβάδες της ίδιας στιβάδος).
Στα πολυηλεκτρονικά άτομα "αποφασίζει" το άθροισμα η+/ , και σε περίπτωση που το άθροισμα είναι ίδιο για δυο υποστιβάδες, τότε μικρότερη ενέργεια έχει η υποστιβάδα με το μικρότερο η.
Καθορίζει τη στιβάδα (φλοιό).
η=1 ⇨ K
η=2 ⇨ L κ.ο.κ. (M,N,O,P,Q)
Αποφασίζει για το μέγεθος του τροχιακού. Έτσι το τροχιακό τύπου 2Px, έχει μικρότερο μέγεθος από το 3Px
Η τιμή του "αποφασίζει" για το ποιες υποστιβάδες συμμετέχουν στη δόμηση του φλοιού...
Παράδειγμα:
Τιμή η=2 σημαίνει φλοιός L, αποτελούμενος απο τις υποστιβάδες S, P


Δευτερεύον κβαντικός ή αζιμουθιακός /
Παίρνει τιμές ακέραιες
/=0,1,2,..., (η-1)
Είναι ενδεικτικός της άπωσης μεταξύ των ηλεκτρονίων
Μαζί με τον η καθορίζουν την ενεργεια των υποστιβάδων στα πολυηλεκτρονικά άτομα.
Κάθε υποφλοιός αποτελείται από ομάδα τροχιακών με ιδιαίτερο σχήμα.
Καθορίζει τη υποστιβάδα (υποφλοιό).
/=0 ⇨ S
/=1 ⇨ P κ.ο.κ. (d, f, g,...)
Παράδειγμα:
Ο υποφλοιός P, αποτελείται από τρία τροχιακά που το σχήμα κάθε ενός αποτελείται από δυο λοβούς. Τα P τροχιακά μοιάζουν μεταξύ τους . Τα τροχιακά d μιάς υποστιβάδας, έχουν μια πολύπλοκη απεικόνιση και δεν είναι ίδια μεταξύ τους . Προφανώς τα 3d και 4d διαφέρουν ως προς το μέγεθος ...


Μαγνητικός κβαντικός αριθμός m/
Παίρνει τιμές ακέραιες
-/, ..., 0, ..., +/
Καθορίζει τον προσανατολισμό των τροχιακών σε σχέση με τους άξονες χψZ
Ειδικότερα για τα τροχιακά P:
m/=+1 ⇨ Px
m/=-1 ⇨ Pψ
m/=0 ⇨ Pz
Σε κάθε τιμή του μαγνητικού κβαντικού αριθμού, αντιστοιχεί ΕΝΑ τροχιακό.


Μαγνητικός κβανιτικός αριθμός ms
Παίρνει τιμές είτε +1/2 , είτε -1/2
Καθορίζει την ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου (Spin)
ms=+1/2 ⇨ spin ↑
και
ms=-1/2 ⇨ spin ↓
Αναφέρεται σε ηλεκτρόνιο.

Σωστές προτάσεις

- Τα τροχιακά μιας στιβάδας έχουν ίδιους κβαντικούς αριθμούς η και ℓ
- Η στιβάδα Ν, έχει 4 υποστιβάδες και 16 τροχιακά.
- Στις υποστιβάδες nS, ο κβαντικός αριθμός $m\ell$ έχει υποχρεωτική τιμή 0
- Η στιβάδα Μ έχει 9 τροχιακά
- Η υποστιβάδα ℓ=3 έχει επτά τροχιακά
- Όταν $m\ell$=3 τότε πρέπει η≥4
- Όταν ένα τροχιακό έχει η=3, τότε οι άλλοι κβαντικοί αριθμοί παίρνουν τιμές ℓ =0,1,2 και $m\ell$ =-2, -1, 0, +1, +2 και ms = ± ½
- Το άτομο του υδρογόνου έχει τροχιακό 3Ρ
- Είναι αδύνατο να υπάρχει τροχιακό 3f
- Κάθε στιβάδα διαθέτει S τροχιακά (τουλάχιστον ένα!)
- Η τετράδα κβαντικών αριθμών (4,0,1, +1/2), που χαρακτηρίζει ηλεκτρόνια είναι λανθασμένη
- Η δυάδα κbαντικών αριθμών (n,ℓ) = (3,1) αναφέρεται στην υποστιβάδα 3Ρ, όπου υπάρχουν τα τρία τροχιακά Px, Pψ, Pz
- Η ενέργεια του ηλεκτρονίου εξαρτάται μόνο από τον **η** στην περίπτωση του Η. Στα πολυηλεκτρονικά άτομα εξαρτάται από **η** και **ℓ**
- Η εξίσωση Schrödinger συνδυάζει θεωρία De Broglie και θεωρία Heisenberg. Περιγράφει σωματιδιακή και κυματική συμπεριφορά του ηλεκτρονίου. Προσδιορίζει **ενέργεια** Εη (*ίδια με αυτή του πρότυπου Bohr*) και επίσης προσδιορίζει την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε ορισμένη περιοχή του χώρου περί τον πυρήνα (*τροχιακά*). Δίνει ακριβείς λύσεις για το Η και τα υδρογονοειδή (*στα πολυηλεκτρονικά άτομα οι λύσεις είναι με προσέγγιση*)
- Η τριάδα (η, ℓ, m_ℓ) = (3,2,3) δεν αντιστοιχεί σε τροχιακό
- Η τριάδα (η, ℓ, m_ℓ) = (3,1,0) αντιστοιχεί στο τροχιακό 3Pz