Κεφάλαιο 39
Κβαντική Μηχανική Ατόμων

Περιεχόμενα Κεφαλαίου 39

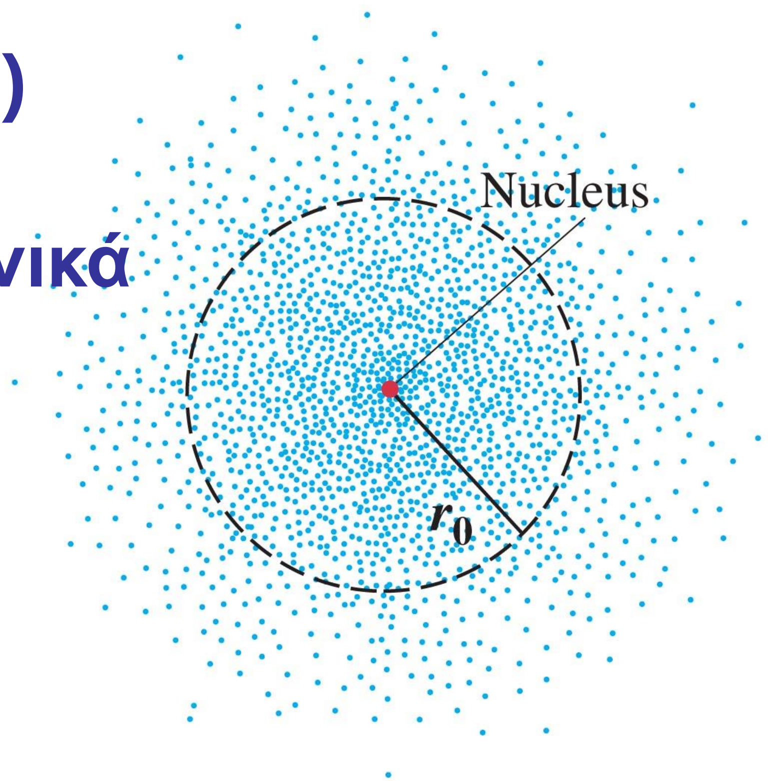
- Τα άτομα από την σκοπιά της κβαντικής μηχανικής
- Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι κβαντικοί αριθμοί
- ΟΙ κυματοσυναρτήσεις του ατόμου του Υδρογόνου.
- Πολύπλοκα άτομα και το Exclusion Principle
- Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων
- Ατομικοί αριθμοί και φάσματα ακτινών Χ
- Μαγνητικά δίπολα και συνολική Στροφορμή

39.1 Τα άτομα από την σκοπιά της κβαντικής μηχανικής

Αφού ο ακριβής προσδιορισμός της θέσης του ηλεκτρονίου δεν είναι δυνατός, το μοντέλο του Bohr για το άτομο που προβλέπει «καθορισμένες τροχιές» πρέπει να απορριφτεί.

Η κατανομή (πιθανολογική) της θέσης του ηλεκτρονίου περιγράφεται κβαντομηχανικά :

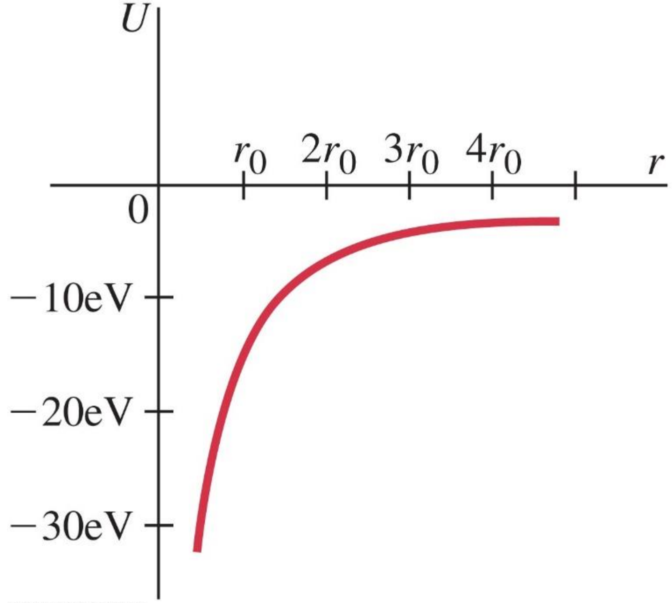
$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_0^3}} e^{-\frac{r}{r_0}}$$



39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

Η δυναμική ενέργεια (ηλεκτρική) ατόμου του Υδρογόνου:

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r}$$



39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

http://www.nat.vu.nl/~wimu/EDUC/MNW-lect-2.pdf

https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen_atom

Η **χρονικώς ανεξάρτητη** εξίσωση του Schrödinger σε τρεις διαστάσεις είναι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)-\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r}\psi = E\psi,$$

όπου

$$E_n = -\frac{13.6\,\mathrm{eV}}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

http://www.nat.vu.nl/~wimu/EDUC/MNW-lect-2.pdf

https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen_atom

Υπάρχουν τέσσερεις (4) κβαντικοί αριθμοί που απαιτούνται για την περιγραφή της κατάστασης ενός ηλεκτρονίου σε ένα άτομο.

1. **Ο κύριος κβαντικός αριθμός n που περιγράφει την συνολική ενέργεια.**

2. **Ο κβαντικός αριθμός της Τροχιακής Στροφορμής (|L|) ℓ . Λαμβάνει ακέραιες τιμές από 0 μέχρι n - 1.**

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\,\hbar$$

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

https://en.wikipedia.org/wiki/Angular_momentum_operator

https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_number

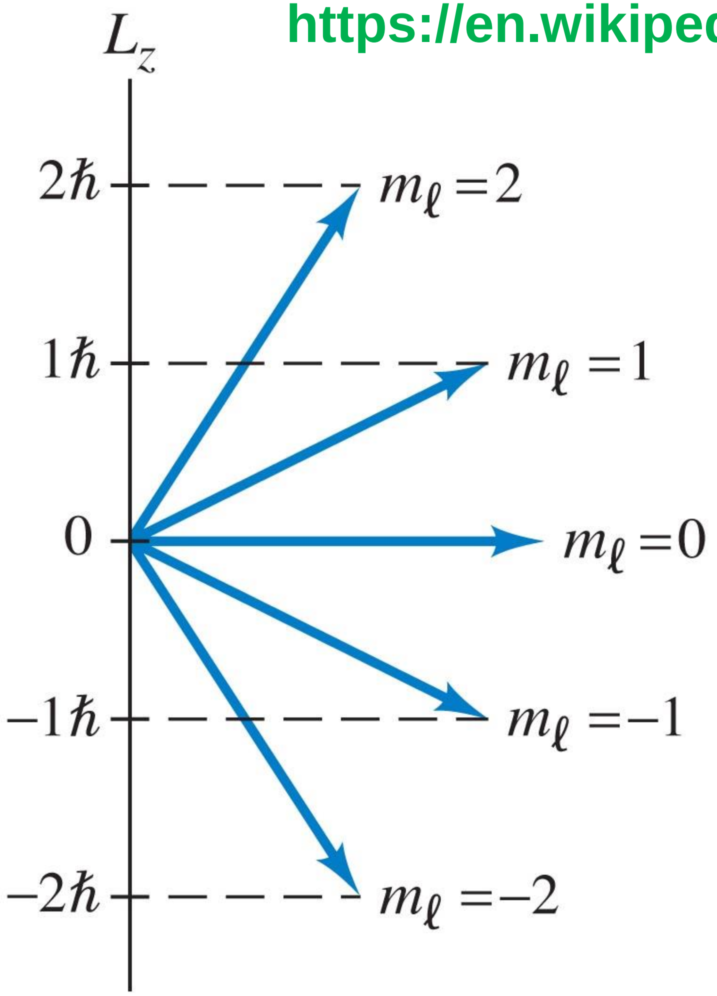
3. Ο Μαγνητικός (αζιμουθιακός) κβαντικός αριθμός, m_ℓ, που λαμβάνει ακέραιες τιμές από $+\ell$ μέχρι $-\ell$.

Εκφράζει την προβολή της στροφορμής πάνω στον άξονα Ζ, L_Z :

$$L_z = m_\ell \hbar$$

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_number



Η γραφική παράσταση δείχνει την κβάντωση της τροχιακής στροφορμής για $\ell = 2$.

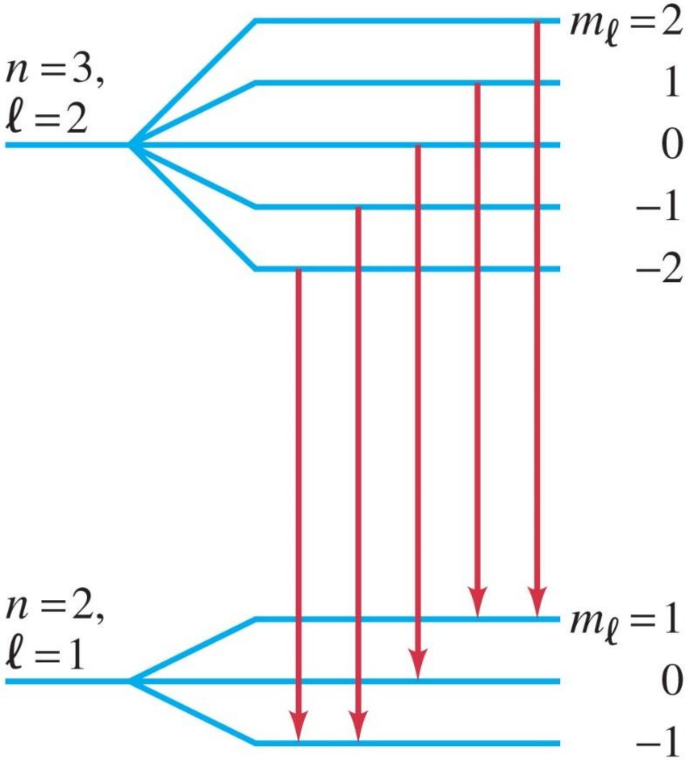
Η συνιστώσες της στροφορμής L_X και L_Y δεν έχουν τέτοια κβάντωση.

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_number

Απουσία ηλεκτρικών ή μαγνητικών πεδίων, οι ενέργειες των συνιστωσών m_ℓ είναι ίδιες (εκφυλισμένες).

Παρουσία όμως μαγνητικού πεδίου, οι ενέργειές τους διαχωρίζονται.

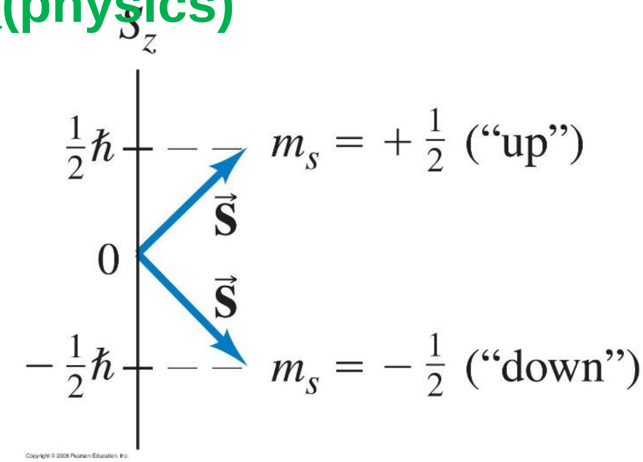


Η κίνηση ενός ηλεκτρικού φορτίου (ηλεκτρόνιο) παράγει μαγνητικό πεδίο, το οποίο αλληλοεπιδρά με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

https://en.wikipedia.org/wiki/Spin_(physics)

4. Ο κβαντικός αριθμός, m_s, Spin, που για το ηλεκτρόνιο λαμβάνει τις τιμές +½ ή -½.



Η ανάγκη «ορισμού» αυτού του αριθμού προέκυψε πειραματικά.

Το Spin είναι μία εγγενής ιδιότητα των σωματιδίων, που από μαθηματικής πλευράς έχει χαρακτηριστικά στροφορμής. *Με άλλα λόγια δεν προκύπτει ο κβαντικός αυτός αριθμός από την ιδιοστροφορμή του ηλεκτρονίου!*

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

Ο πίνακας κάνει μια σύνοψη των κύριων κβαντικών αριθμών.

TABLE 39–1 Quantum Numbers for an Electron

Name	Symbol	Possible Values
Principal	n	$1, 2, 3, \cdots, \infty$.
Orbital	ℓ	For a given n: ℓ can be $0, 1, 2, \cdots, n-1$.
Magnetic	m_ℓ	For given n and ℓ: m_ℓ can be $\ell, \ell-1, \cdots, 0, \cdots, -\ell$.
Spin	m_s	For each set of n, ℓ, and m_ℓ: m_s can be $+\frac{1}{2}$ or $-\frac{1}{2}$.

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

CONCEPTUAL EXAMPLE 39–1 **Possible states for $n = 3$.** How many different states are possible for an electron whose principal quantum number is $n = 3$?

RESPONSE For $n = 3$, ℓ can have the values $\ell = 2, 1, 0$. For $\ell = 2$, m_ℓ can be 2, 1, 0, −1, −2, which is five different possibilities. For each of these, m_s can be either up or down ($+\frac{1}{2}$ or $-\frac{1}{2}$); so for $\ell = 2$, there are $2 \times 5 = 10$ states. For $\ell = 1$, m_ℓ can be 1, 0, −1, and since m_s can be $+\frac{1}{2}$ or $-\frac{1}{2}$ for each of these, we have 6 more possible states. Finally, for $\ell = 0$, m_ℓ can only be 0, and there are only 2 states corresponding to $m_s = +\frac{1}{2}$ and $-\frac{1}{2}$. The total number of states is $10 + 6 + 2 = 18$, as detailed in the following Table:

n	ℓ	m_ℓ	m_s	n	ℓ	m_ℓ	m_s
3	2	2	$\frac{1}{2}$	3	1	1	$\frac{1}{2}$
3	2	2	$-\frac{1}{2}$	3	1	1	$-\frac{1}{2}$
3	2	1	$\frac{1}{2}$	3	1	0	$\frac{1}{2}$
3	2	1	$-\frac{1}{2}$	3	1	0	$-\frac{1}{2}$
3	2	0	$\frac{1}{2}$	3	1	−1	$\frac{1}{2}$
3	2	0	$-\frac{1}{2}$	3	1	−1	$-\frac{1}{2}$
3	2	−1	$\frac{1}{2}$	3	0	0	$\frac{1}{2}$
3	2	−1	$-\frac{1}{2}$	3	0	0	$-\frac{1}{2}$
3	2	−2	$\frac{1}{2}$				
3	2	−2	$-\frac{1}{2}$				

EXAMPLE 39–2 ***E* and *L* for *n* = 3.** Determine (*a*) the energy and (*b*) the orbital angular momentum for an electron in each of the hydrogen atom states of Example 39–1.

APPROACH The energy of a state depends only on n, except for the very small corrections mentioned above, which we will ignore. Energy is calculated as in the Bohr theory, $E_n = -13.6\,\text{eV}/n^2$. For angular momentum we use Eq. 39–3.

SOLUTION (*a*) Since $n = 3$ for all these states, they all have the same energy,

$$E_3 = -\frac{13.6\,\text{eV}}{(3)^2} = -1.51\,\text{eV}.$$

(*b*) For $\ell = 0$, Eq. 39–3 gives

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\,\hbar = 0.$$

For $\ell = 1$,

$$L = \sqrt{1(1 + 1)}\,\hbar = \sqrt{2}\,\hbar = 1.49 \times 10^{-34}\,\text{J}\cdot\text{s}.$$

For $\ell = 2$, $L = \sqrt{2(2 + 1)}\,\hbar = \sqrt{6}\,\hbar$.

NOTE Atomic angular momenta are generally given as a multiple of $\hbar$ ($\sqrt{2}\,\hbar$ or $\sqrt{6}\,\hbar$ in this case), rather than in SI units.

39.2 Το άτομο του Υδρογόνου: Η εξίσωση του Schrödinger και οι Κβαντικοί αριθμοί

Οι μόνες «επιτρεπτές» μεταπτώσεις μεταξύ ενεργειακών επιπέδων, μετά την απορρόφηση ή εκπομπή ενός φωτονίου, είναι αυτές για τις οποίες ισχύει (Δες ΚΑΝΟΝΕΣ ΕΠΙΛΟΓΗΣ):

https://en.wikipedia.org/wiki/Selection_rule

$$\Delta \ell = \pm 1$$

Η πιθανότητα μιας «απαγορευμένης» μετάπτωσης είναι πολύ μικρή, και απαιτεί «διατάραξη» του συστήματος.

39.3 Οι κυματοσυναρτήσεις του ατομικού Υδρογόνου

http://www.nat.vu.nl/~wimu/EDUC/MNW-lect-2.pdf

https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen_atom

Η κυματοσυνάρτηση της βασικής κατάστασης το ατομικού υδρογόνου, είναι:

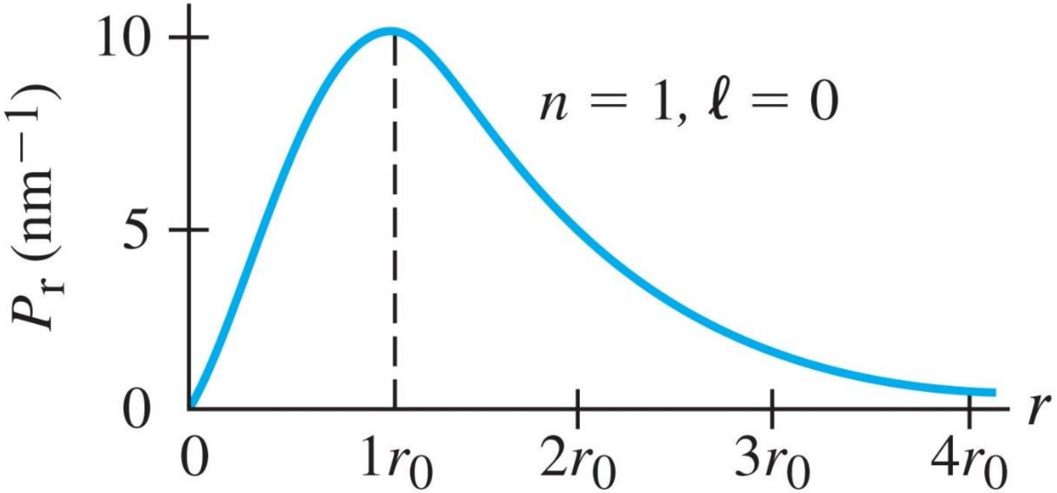
$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi r_0^3}} e^{-\frac{r}{r_0}}$$

Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε ένα στοιχειώδες στοιχείο όγκου dV πέριξ κάποιου σημείου είναι $|\psi|^2\, dV$.

39.3 Οι κυματοσυναρτήσεις του ατομικού Υδρογόνου

Η βασική κατάσταση έχει σφαιρική συμμετρία. Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε απόσταση *r* και *r* + *dr* από το πυρήνα είναι:

$$P_r = 4\frac{r^2}{r_0^3}e^{-\frac{2r}{r_0}}.$$



EXAMPLE 39–3 **Most probable electron radius in hydrogen.** Determine the most probable distance r from the nucleus at which to find the electron in the ground state of hydrogen.

APPROACH The peak of the curve in Fig. 39–7 corresponds to the most probable value of r. At this point the curve has zero slope, so we take the derivative of Eq. 39–7, set it equal to zero, and solve for r.

SOLUTION We find

$$\frac{d}{dr}\left(4\frac{r^2}{r_0^3}e^{-\frac{2r}{r_0}}\right) = 0$$

$$\left(8\frac{r}{r_0^3} - \frac{8r^2}{r_0^4}\right)e^{-\frac{2r}{r_0}} = 0.$$

Since $e^{-\frac{2r}{r_0}}$ goes to zero only at $r = \infty$, it is the term in parentheses that must be zero:

$$8\frac{r}{r_0^3} - 8\frac{r^2}{r_0^4} = 0.$$

Therefore,

$$\frac{r}{r_0^3} = \frac{r^2}{r_0^4}$$

or

$$r = r_0.$$

The most probable radial distance of the electron from the nucleus according to quantum mechanics is at the Bohr radius, an interesting coincidence.

EXAMPLE 39–4 **Calculating probability.** Determine the probability of finding the electron in the ground state of hydrogen within two Bohr radii of the nucleus.

APPROACH We need to integrate P_r from $r = 0$ out to $r = 2r_0$.

SOLUTION We want to find

$$P = \int_{r=0}^{2r_0} |\psi|^2 \, dV = \int_0^{2r_0} 4 \frac{r^2}{r_0^3} e^{-\frac{2r}{r_0}} \, dr.$$

We first make the substitution

$$x = 2\frac{r}{r_0}$$

and then integrate by parts $\left(\int u \, dv = uv - \int v \, du\right)$ letting $u = x^2$ and $dv = e^{-x} \, dx$ (and note that $dx = 2 \, dr/r_0$, and the upper limit is $x = 2(2r_0)/r_0 = 4$):

$$P = \tfrac{1}{2} \int_{x=0}^{4} x^2 e^{-x} \, dx = \tfrac{1}{2}\left[-x^2 e^{-x} + \int 2xe^{-x} \, dx\right]\Bigg|_0^4 .$$

The second term we also integrate by parts with $u = 2x$ and $dv = e^{-x} \, dx$:

$$P = \tfrac{1}{2}\left[-x^2 e^{-x} - 2xe^{-x} + 2\int e^{-x} \, dx\right]\Bigg|_0^4$$

$$= \left(-\tfrac{1}{2}x^2 - x - 1\right)e^{-x}\Bigg|_0^4 .$$

We evaluate this at $x = 0$ and at $x = 4$:

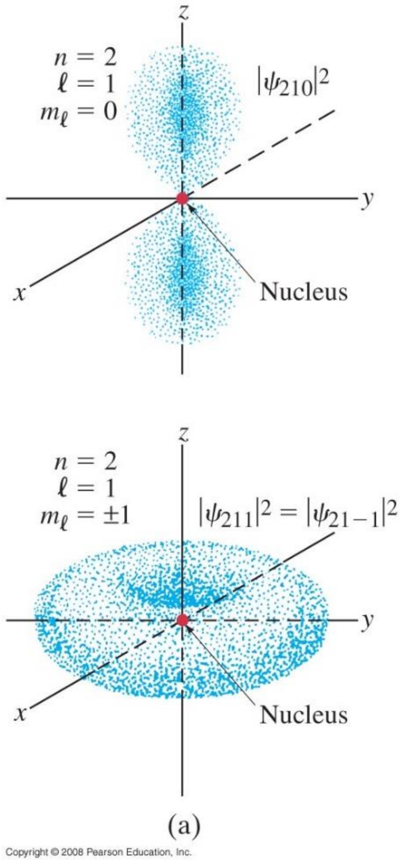
$$P = (-8 - 4 - 1)e^{-4} + e^0 = 0.76$$

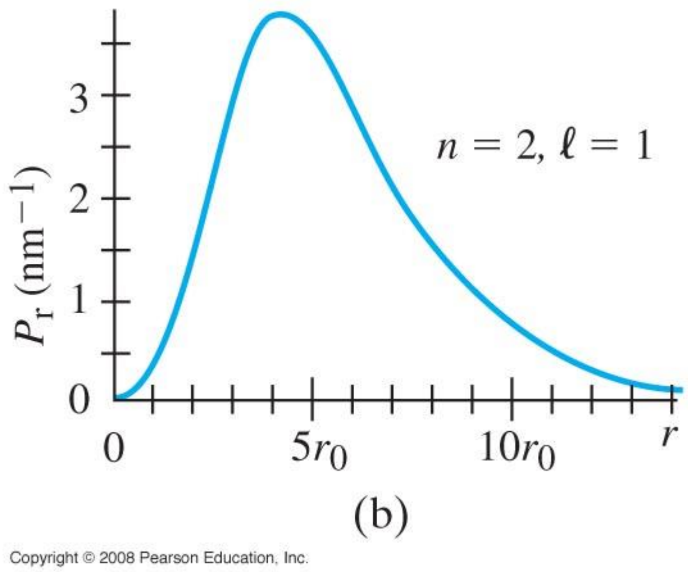
NOTE This result depends on our wave function being properly normalized, which it is, as is readily shown by letting $r \rightarrow \infty$ and integrating over all space: $\int_0^\infty |\psi|^2 \, dV = 1$; that is, let the upper limit in the equation above be ∞.

39.3 Οι κυματοσυναρτήσεις του ατομικού Υδρογόνου

https://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_orbital

Τρεις «γωνιακές» κατανομές, και η κατανομή κατά μήκος της ακτίνας.





39.4 Σύνθετα άτομα, η αρχή του Pauli

https://en.wikipedia.org/wiki/Pauli_exclusion_principle

Σε άτομα πέραν του υδρογόνου, οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων πρέπει να ληφθούν υπόψη στον προσδιορισμό των ενεργειακών επιπέδων. Αυτό σημαίνει ότι η συνολική ενέργεια εξαρτάται τόσο από το n όσο και το ℓ.

Ένα ουδέτερο άτομο με Z ηλεκτρόνια, θα έχει και Z πρωτόνια. Ο Z ονομάζεται ατομικός αριθμός.

39.4 Σύνθετα άτομα, η αρχή του Pauli

https://en.wikipedia.org/wiki/Pauli_exclusion_principle

Η αρχή του Pauli ορίζει ότι:

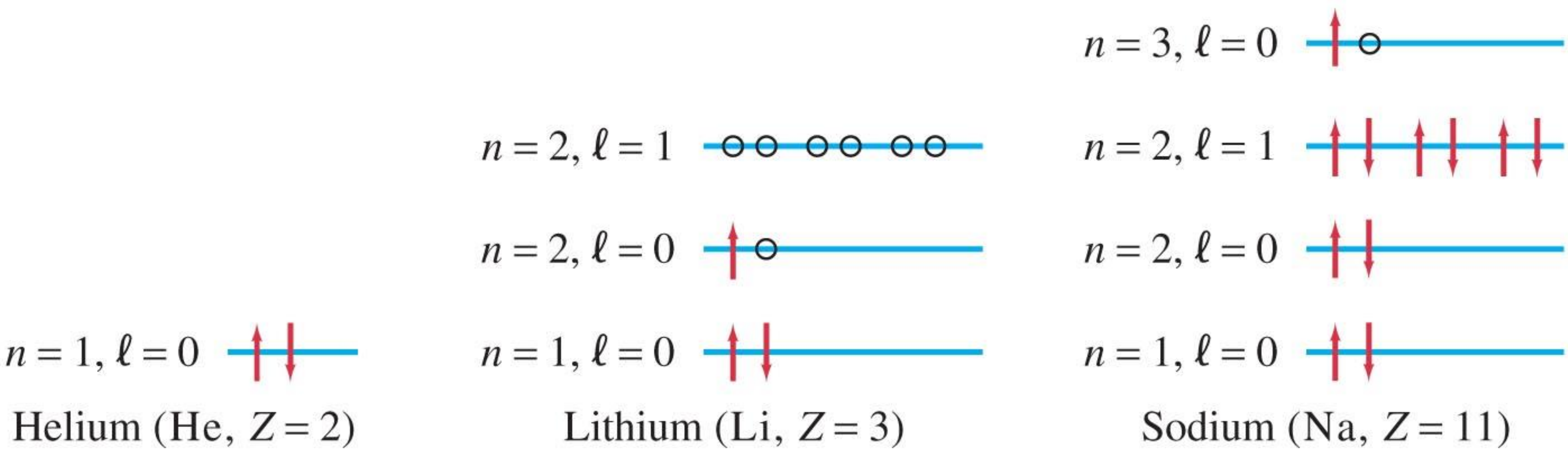
Δύο ηλεκτρόνια στο ίδιο άτομο δεν μπορούν να καταλαμβάνουν την ΙΔΙΑ κβαντική κατάσταση

Επειδή η κβαντική κατάσταση περιγράφεται από τους τέσσερεις κύριους κβαντικούς αριθμούς, κανένα ζεύγος ηλεκτρονίων στο ίδιο άτομο δεν μπορεί να ταυτίζει το σύνολο των κύριων κβαντικών αριθμών.

39.4 Σύνθετα άτομα, η αρχή του Pauli

https://en.wikipedia.org/wiki/Pauli_exclusion_principle

Παραδείγματα για τα άτομα He, Li, και Na.



39.5 Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

https://en.wikipedia.org/wiki/Periodic_table

Είμαστε τώρα σε θέση να ερμηνεύσουμε την οργάνωση του περιοδικού πίνακα των στοιχείων.

Ηλεκτρόνια με τον ίδιο κύριο κβαντικό αριθμό n «ανήκουν» στον ίδιο «φλοιό». Ηλεκτρόνια με τούς ίδιους n και ℓ ανήκουν στους ίδιους «υποφλοιούς».

Η αρχή του Pauli περιορίζει το μέγιστο αριθμό ηλεκτρονίων σε κάθε υποφλοιό σε $2\ell(\ell+1)$.

39.5 Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

TABLE 39–2 Ground-State Quantum Numbers

Helium, $Z = 2$			
n	ℓ	m_ℓ	m_s
1	0	0	$\frac{1}{2}$
1	0	0	$-\frac{1}{2}$

Lithium, $Z = 3$			
n	ℓ	m_ℓ	m_s
1	0	0	$\frac{1}{2}$
1	0	0	$-\frac{1}{2}$
2	0	0	$\frac{1}{2}$

Sodium, $Z = 11$			
n	ℓ	m_ℓ	m_s
1	0	0	$\frac{1}{2}$
1	0	0	$-\frac{1}{2}$
2	0	0	$\frac{1}{2}$
2	0	0	$-\frac{1}{2}$
2	1	1	$\frac{1}{2}$
2	1	1	$-\frac{1}{2}$
2	1	0	$\frac{1}{2}$
2	1	0	$-\frac{1}{2}$
2	1	−1	$\frac{1}{2}$
2	1	−1	$-\frac{1}{2}$
3	0	0	$\frac{1}{2}$

Για κάθε τιμή του ℓ δίδουμε ένα «όνομα» στο υποφλοιό.

s : sharp
p : principal
d : diffuse
f : fundamental

Οι ονομασίες προέκυψαν από την εμφάνιση των χαρακτηριστικών φασματοσκοπικών γραμμών

39.5 Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

https://en.wikipedia.org/wiki/Periodic_table

Η ηλεκτρονική διαμόρφωση δίδεται με την αναγραφή του n, ακολουθούμενο από το «όνομα» του υποφλοιού με εκθέτη τον αριθμό των ηλεκτρονίων του.

Για παράδειγμα η ηλεκτρονική διαμόρφωση της βασικής κατάστασης του του Νατρίου είναι:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$$

39.5 Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

Ο πίνακας εμφανίζει τη διαμόρφωση των εξωτερικών ηλεκτρονίων.

TABLE 39–3 Value of ℓ

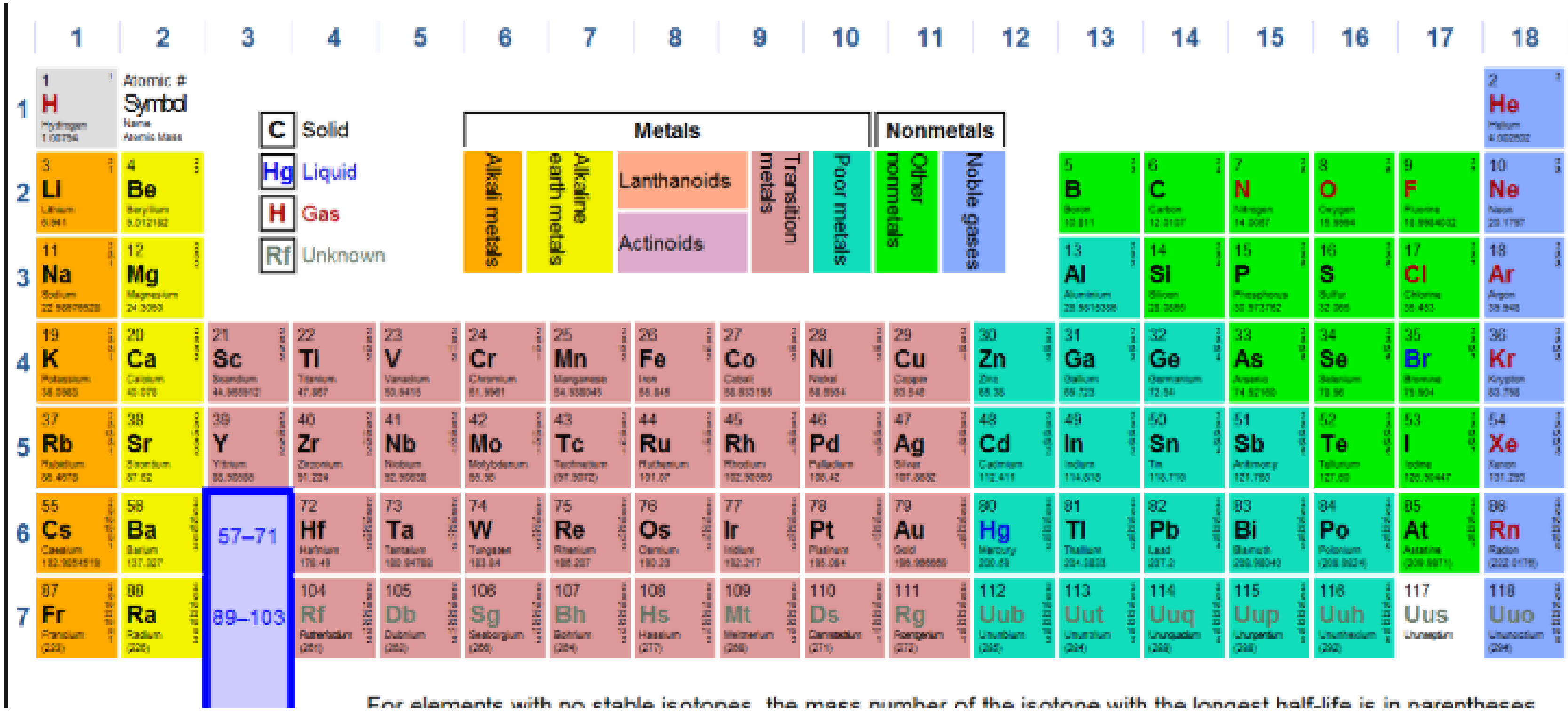
Value of ℓ	Letter Symbol	Maximum Number of Electrons in Subshell
0	*s*	2
1	*p*	6
2	*d*	10
3	*f*	14
4	*g*	18
5	*h*	22
⋮	⋮	⋮

CONCEPTUAL EXAMPLE 39–5 **Electron configurations.** Which of the following electron configurations are possible, and which are not: (*a*) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^3$; (*b*) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 4s^2$; (*c*) $1s^2 2s^2 2p^6 2d^1$?

RESPONSE (*a*) This is not allowed, because too many electrons (three) are shown in the s subshell of the M ($n = 3$) shell. The s subshell has $m_\ell = 0$, with two slots only, for "spin up" and "spin down" electrons. (*b*) This is allowed, but it is an excited state. One of the electrons from the $3p$ subshell has jumped up to the $4s$ subshell. Since there are 19 electrons, the element is potassium. (*c*) This is not allowed, because there is no d ($\ell = 2$) subshell in the $n = 2$ shell (Table 39–1). The outermost electron will have to be (at least) in the $n = 3$ shell.

39.5 Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

Τα άτομα που φέρουν τον ίδιο αριθμό ηλεκτρονίων στην εξωτερική τους στοιβάδα (φλοιό), παρουσιάζουν «παρόμοια χημική συμπεριφορά», και καταλαμβάνουν την ίδια στήλη στον περιοδικό πίνακα.



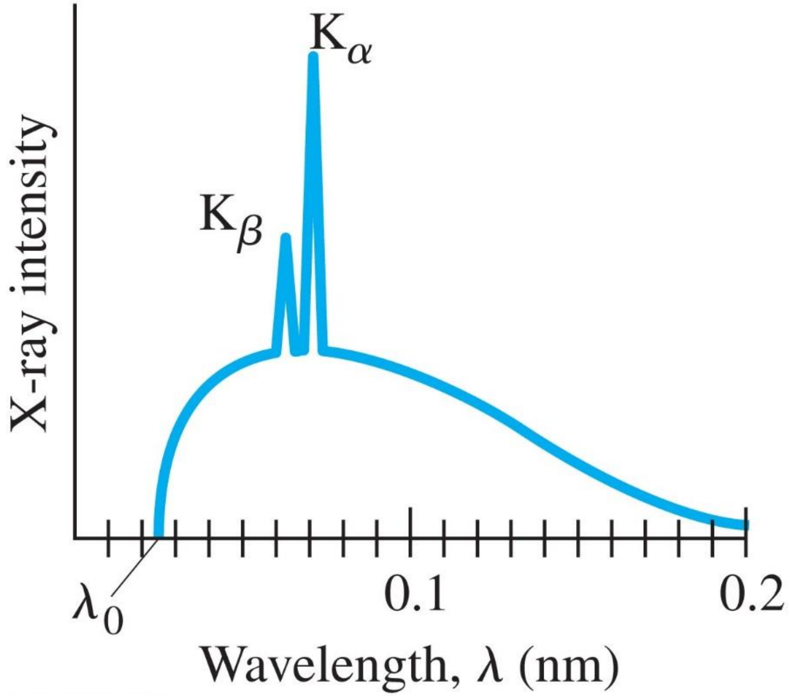
39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών Χ

Το ουσιαστικό φορτίο που «βλέπει» ένα ηλεκτρόνιο στον πυρήνα είναι «μικρότερο» από το πραγματικό λόγω θωράκισης από τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια. Μόνο τα ηλεκτρόνια της πρώτης στοιβάδας «βλέπουν» το πραγματικό φορτίο του πυρήνα.

Η ενέργεια ενός επιπέδου είναι ανάλογο του Z^2, και συνεπώς τα μήκη κύματος που απαιτούν μεταπτώσεις από την $n = 1$ κατάσταση για άτομα με μεγάλο Z, αντιστοιχούν σε ακτίνες Χ.

39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών Χ

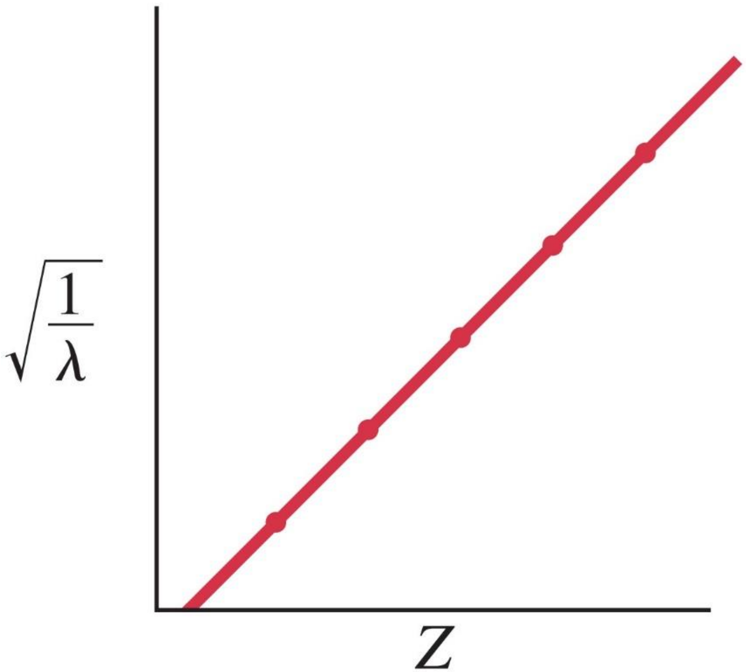
Ηλεκτρόνια εσωτερικών στοιβάδων μπορεί να εξαχθούν από δέσμες ηλεκτρονίων με πολύ υψηλή ενέργεια. Παράγεται με αυτό το τρόπο ένα χαρακτηριστικό φάσμα για κάθε άτομο.



Το φάσμα αυτό είναι για το Μολυβδαίνιο.

39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών X

Μετρώντας αυτά τα χαρακτηριστικά φάσματα επιτρέπει τόσο τον προσδιορισμό της ενέργειας των εσωτερικών στοιβάδων όσο και το Z, επειδή τα μήκη των κυμάτων των βραχυτέρων ακτινών X είναι αντιστρόφως ανάλογες Z^2.



39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών Χ

EXAMPLE 39–6 **X-ray wavelength.** Estimate the wavelength for an $n = 2$ to $n = 1$ transition in molybdenum ($Z = 42$). What is the energy of such a photon?

APPROACH We use the Bohr formula, Eq. 37–15 for $1/\lambda$, with Z^2 replaced by $(Z-1)^2 = (41)^2$.

SOLUTION Equation 37–15 gives

$$\frac{1}{\lambda} = \left(\frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 h^3 c}\right)(Z-1)^2\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

where $n = 2$ and $n' = 1$. We substitute in values:

$$\frac{1}{\lambda} = \left(1.097 \times 10^7\,\mathrm{m}^{-1}\right)(41)^2\left(\frac{1}{1} - \frac{1}{4}\right) = 1.38 \times 10^{10}\,\mathrm{m}^{-1}.$$

So

$$\lambda = \frac{1}{1.38 \times 10^{10}\,\mathrm{m}^{-1}} = 0.072\,\mathrm{nm}.$$

This is close to the measured value (Fig. 39–11) of 0.071 nm. Each of these photons would have energy (in eV) of:

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda} = \frac{\left(6.63 \times 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}\right)\left(3.00 \times 10^8\,\mathrm{m/s}\right)}{\left(7.2 \times 10^{-11}\,\mathrm{m}\right)\left(1.60 \times 10^{-19}\,\mathrm{J/eV}\right)} = 17\,\mathrm{keV}.$$

The denominator includes the conversion factor from joules to eV.

39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών X

EXAMPLE 39–7 **Determining atomic number.** High-energy electrons are used to bombard an unknown material. The strongest peak is found for X-rays emitted with an energy of 66.3 keV. Guess what the material is.

APPROACH The highest intensity X-rays are generally for the K_α line (see Fig. 39–11) which occurs when high-energy external electrons knock out K shell electrons (the innermost orbit, $n = 1$) and their place is taken by electrons from the L shell $(n = 2)$. We use the Bohr model, and assume the electrons "see" a nuclear charge of $Z - 1$ (screened by one electron).

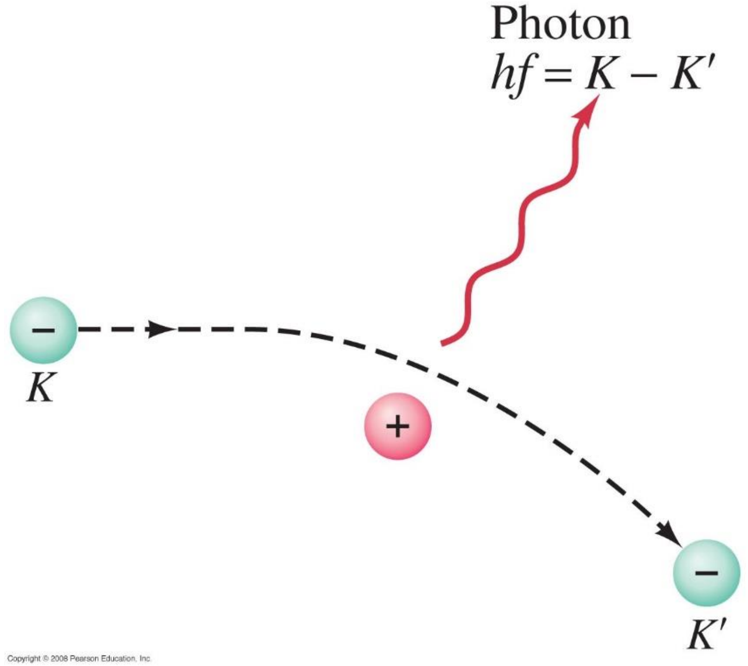
SOLUTION The hydrogen transition $n = 2$ to $n = 1$ would yield about 10.2 eV (see Fig. 37–26 or Example 37–13). Energy E is proportional to Z^2 (Eq. 37–14), or rather $(Z - 1)^2$ because the nucleus is shielded by the one electron in a 1s state (see above), so we can use ratios:

$$\frac{(Z - 1)^2}{1^2} = \frac{66.3 \times 10^3\,\text{eV}}{10.2\,\text{eV}} = 6.50 \times 10^3,$$

so $Z - 1 = \sqrt{6500} = 81$, and $Z = 82$, which makes it lead.

39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών Χ

Το συνεχές κομμάτι του φάσματος των ακτινών Χ προέρχεται από ηλεκτρόνια που «επιβραδύνονται» λόγω αλληλεπιδράσεων μέσα στο υλικό και επομένως εκπέμπουν ακτινοβολία. Η ακτινοβολία ονομάζεται *bremsstrahlung* (das Bremse=το φρένο, die Strahlung=ακτινοβολία radiation”).



39.6 Ατομικός Αριθμός και φάσματα ακτινών X

EXAMPLE 39–8 **Cutoff wavelength.** What is the shortest-wavelength X-ray photon emitted in an X-ray tube subjected to 50 kV?

APPROACH The electrons striking the target will have a kinetic energy of 50 keV. The shortest-wavelength photons are due to collisions in which all of the electron's kinetic energy is given to the photon so $K = eV = hf_0$.

SOLUTION From Eq. 39–10,

$$\lambda_0 = \frac{hc}{eV} = \frac{(6.63 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s})(3.0 \times 10^{8}\,\mathrm{m/s})}{(1.6 \times 10^{-19}\,\mathrm{C})(5.0 \times 10^{4}\,\mathrm{V})} = 2.5 \times 10^{-11}\,\mathrm{m},$$

or 0.025 nm.

NOTE This result agrees well with experiment, Fig. 39–11.

39.7 Μαγνητική Διπολική Ροπή. Συνολική Στροφορμή

https://en.wikipedia.org/wiki/Electron_magnetic_moment

Εάν θεωρήσουμε ότι το ηλεκτρόνιο κινείται σε κυκλική τροχιά με ακτίνα r και ταχύτητα v γύρω από τον πυρήνα, τότε η μαγνητική του ροπή δίδεται από τη σχέση:

$$\vec{\boldsymbol{\mu}} = -\frac{1}{2}\frac{e}{m}\vec{\mathbf{L}}$$

Όπου το μέτρο της στροφορμής είναι $L = mvr$.

Η εξίσωση αυτή, αν και απορρέει από την κλασική μηχανική/ηλεκτρομαγνητισμό ισχύει και στην κβαντική μηχανική, απλά η στροφορμή είναι κβαντισμένη.

39.7 Μαγνητική Διπολική Ροπή. Συνολική Στροφορμή

Η συνιστώσα της μαγνητικής διπολικής ροπής στο άξονα z, δηλ. τη διεύθυνση ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, δίδεται από τη σχέση:

$$\mu_z = -\frac{e\hbar}{2m} m_\ell .$$

Ορίζουμε τη μαγνητόνη του Bohr ως: $$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} .$$

Και επομένως: $$\mu_z = -\mu_B m_\ell .$$

Επομένως, ένα άτομο που βρίσκεται μέσα σε μαγνητικό πεδίο, θα μετατοπίσει τα ενεργειακά του επίπεδα αναλόγως με την τιμή του m_l. Αυτό είναι το φαινόμενο του Zeeman.

39.7 Μαγνητική Διπολική Ροπή. Συνολική Στροφορμή

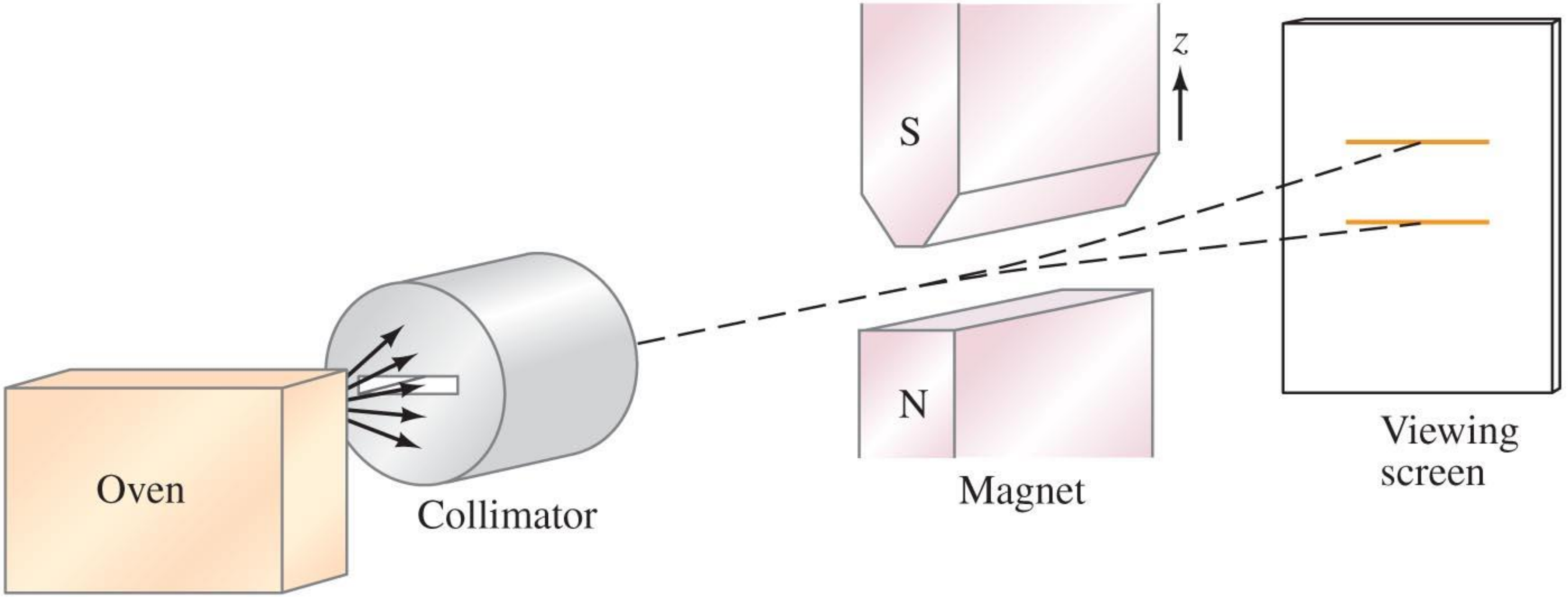
Στο πείραμα των Stern-Gerlach μια δέσμη ατόμων διέρχεται από ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο. Το πεδίο, προκαλεί απόκλιση στη διεύθυνση της δέσμης ανάλογη με τη μαγνητική διπολική ροπή των ατόμων.

Ο κλασικός ηλεκτρομαγνητισμός προβλέπει μια συνεχή κατανομή στις γωνίες απόκλισης της μοριακής δέσμης.

39.7 Μαγνητική Διπολική Ροπή. Συνολική Στροφορμή

https://en.wikipedia.org/wiki/Stern–Gerlach_experiment

Αντίθετα, οι Stern-Gerlach παρατήρησαν «διακριτές γωνίες απόκλισης» που ερμηνεύτηκαν ως κβάντωση της μαγνητικής διπολικής ροπής.



39.7 Μαγνητική Διπολική Ροπή. Συνολική Στροφορμή

Η **συνολική στροφορμή** (**διανυσματικό άθροισμα τροχιακής στροφορμής και spin angular momenta**) είναι επίσης κβαντισμένη:

$$J = \sqrt{j(j+1)}\,\hbar.$$

Η κατάσταση ενός ηλεκτρονίου συμβολίζεται ως nL_j, όπως π.χ. $2P_{3/2}$ ($n = 2$, $\ell = 1$, $j = 3/2$) and $1S_{1/2}$ (θεμελιώδης κατάσταση του Υδρογόνου). Ο συμβολισμός αυτός ονομάζεται **φασματοσκοπικός όρος**.