

## ΤΟ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΟΥ ΑΤΟΜΟΥ

**Παπαχρήστου Βασίλειος**  
Χημικός, MSc στη διδακτική της Χημείας  
vasipa@in.gr

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το παρόν CD-Rom αποτελείται από τέσσερις ενότητες: Η πρώτη ενότητα αναφέρεται στην βιογραφία (συνοδεύεται με πληθώρα φωτογραφιών) των επιστημόνων που με τον ένα ή τον άλλο τρόπο συνετέλεσαν στην εμφάνιση και ολοκλήρωση της κβαντικής θεωρίας. Η δεύτερη ενότητα αναφέρεται στην ηλεκτρονική δόμηση των ατόμων. Παρουσιάζεται με την μορφή σχημάτων το πως τοποθετούνται τα ηλεκτρόνια σε κάθε ατομικό τροχιακό εκάστου στοιχείου του περιοδικού πίνακα σύμφωνα με τις αρχές δόμησης. Η τρίτη ενότητα αναφέρεται στις αρχές δόμησης (Απαγορευτική αρχή του Pauli, κανόνας του Hund, αρχή ελάχιστης ενέργειας) δοσμένες με κατάλληλα σχήματα. Η τέταρτη ενότητα δείχνει με μηχανικά ανάλογα την αρχή της απροσδιοριστίας, την κυματική μορφή των ηλεκτρονίων, την ύπαρξη δεξιόστροφου και αριστερόστροφου spin μέσω του πειράματος Stern-Gerlach, την πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους. Απεικονίζονται τα ατομικά τροχιακά  $s$  και  $p$  με την μορφή καμπύλων, στιγμών, πυκνότητας και κύματος. Μέσω των μηχανικών αναλόγων και των πολλών σχημάτων προσδοκώ να ατενίσουν οι μαθητές το μάθημα της χημείας ως κάτι το διαφορετικό σε σχέση με αυτό που έχουν αποκομίσει.

**ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ:** βιογραφίες (κείμενο φωτογραφίες), ατομικοί αριθμοί, υλοκυματική θεωρία, ηλεκτρονιακό νέφος, πυκνότητα ηλεκτρονιακού νέφους αρχή της απροσδιοριστίας, εξίσωση Schrodinger, απαγορευτική αρχή του Pauli, κανόνας του Hund, αρχή ελάχιστης ενέργειας, spin, πείραμα Stern-Gerlach, περιοδικός πίνακας, δόμηση στοιχείων με βάση τις αρχές δόμησης αυτών.

Το παρόν CD Rom αναφέρεται σε ένα μέρος της ύλης του πρώτου κεφαλαίου της Γ λυκείου θετικής κατεύθυνσεως. Δηλαδή στο κβαντομηχανικό μοντέλο του ατόμου.

Για την εκκίνηση του CD πρέπει να τοποθετηθεί στο drive του CD ή του DVD και να περιμένουμε να ξεκινήσει διότι είναι auto run. Αν δεν ξεκινήσει, πρέπει να βρούμε στο CD το αρχείο qm και να το διπλοπατήσουμε.

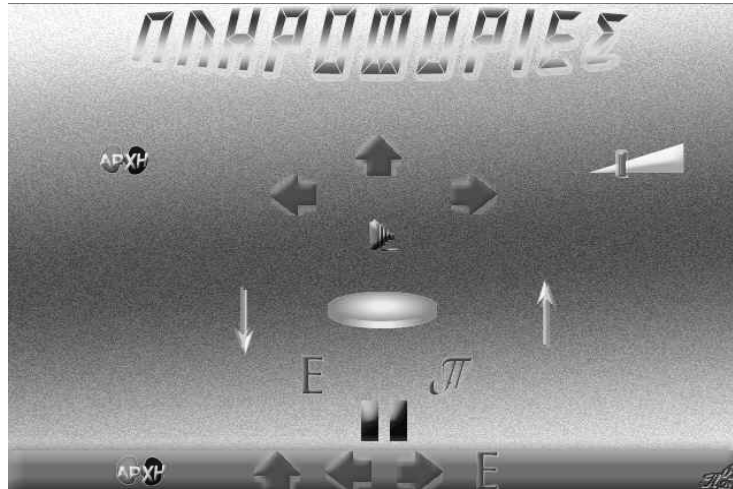
Καλή πλοήγηση.

Σε κάθε οθόνη υπάρχει το menu πλοήγησης:



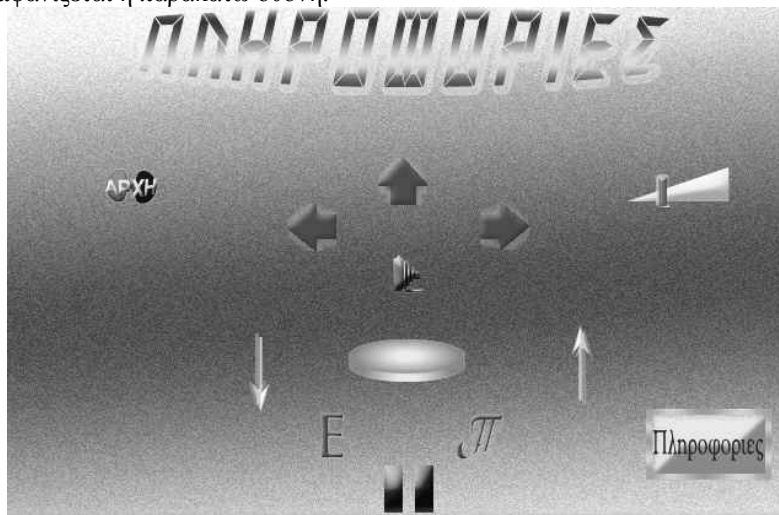
*Σχήμα 1: menu πλοήγησης*

Πληροφορίες για το τι σημαίνει το κάθε κουμπί στο menu πλοήγησης δίδονται στο μονίε που προκύπτει όταν μετακινούμαστε μέσω του κουμπιού Π.



**Σχήμα 2:** οθόνη πληροφοριών

Καθώς μετακινούμαστε με το ποντίκι πάνω από κάθε αντικείμενο της συγκεκριμένης οθόνης, εμφανίζεται ένα πλαίσιο που μας αναφέρει τι ακριβώς συμβολίζει. Για παράδειγμα, όταν με το ποντίκι βρισκόμαστε πάνω από το γράμμα Π τότε εμφανίζεται η παρακάτω οθόνη.



**Σχήμα 3:** οθόνη πληροφοριών κατά την είσοδο του mouse πάνω από το σχήμα Π.

Η αρχή του CD μας οδηγεί στην παρακάτω οθόνη και μας δείχνει τα περιεχόμενά του. Αποτελείται από τέσσερις ενότητες.



*Σχήμα 4: οθόνη με τις τέσσερις ενότητες.*

Η ενότητα των βιογραφιών μας οδηγεί σε ένα σύνολο στοιχείων (βιογραφίες, φωτογραφίες από τις προσωπικές στιγμές) ιστορικών προσώπων που με τον ένα ή τον άλλο τρόπο συνέβαλαν στην διαμόρφωση της σημερινής δομής του ατόμου.

Για κάθε ιστορικό πρόσωπο μπορούμε να βρούμε την βιογραφία του και ένα σύνολο φωτογραφιών γι' αυτό.

Στην ενότητα αυτή μπορούμε να βρούμε τις βιογραφίες και τις φωτογραφίες των εξής προσώπων:

του Einstein, του Planck, του de Broglie, του Heisenberg, του Rutherford, του Sommerfeld, του Bohr, του Pauli, του Hund, του Schrodinger.

Η ενότητα κβαντομηχανικό μοντέλο του ατόμου μας οδηγεί σε μία νέα υποενότητα που περιέχει τις τρεις βασικές θεωρίες για την κβαντική θεώρηση του ατόμου. Είναι η υλοκυματική θεωρία του de Broglie, η αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg καθώς και η υλοκυματική εξίσωση του Schrodinger.

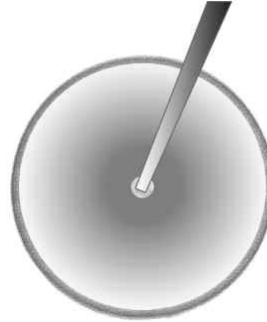
Μετακινούμενοι μέσω των συνδέσμων σε κάθε μία από τις διαφορετικές ανωτέρω ενότητες, υπάρχει η αντίστοιχη φωτογραφία του ερευνητού που μας παρέχει την δυνατότητα να βρεθούμε στην βιογραφία του συγκεκριμένου προσώπου.

Αναπτύσσεται εν συντομία η θεωρία του, όπου χρειάζεται αναφέρονται οι αντίστοιχοι μαθηματικοί τύποι που ερμηνεύουν την συγκεκριμένη θεωρία, και προσπαθούμε να βρούμε και να παρουσιάσουμε μηχανικά ανάλογα που βοηθούν στην καλύτερη κατανόηση των θεωριών που διαπραγματεύονται.

Ως τέτοια αναφέρουμε την περιστροφή μιας ρόδας ποδηλάτου που έχει κατά μήκος μιας ακτίνας της μια ταινία που ανακλά το φως. Όταν η ρόδα είναι ακίνητη, μπορούμε να διακρίνουμε σαφώς την ταινία. Όταν όμως γυρίζει, ολόκληρη η ρόδα φαίνεται σαν μια φωτεινή επιφάνεια και δεν μπορούμε να διακρίνουμε την ταινία. Μάλιστα, σε ορισμένες αποστάσεις από τον άξονα της ρόδας, η ένταση του φωτός είναι μεγαλύτερη και σε άλλες είναι μικρότερη. Με το συγκεκριμένο μηχανικό ανάλογο δίδουμε στον χρήστη την έννοια της αβεβαιότητας, δηλαδή την αδυναμία του ταυτόχρονου προσδιορισμού της θέσεως και της ορμής του ηλεκτρονίου.

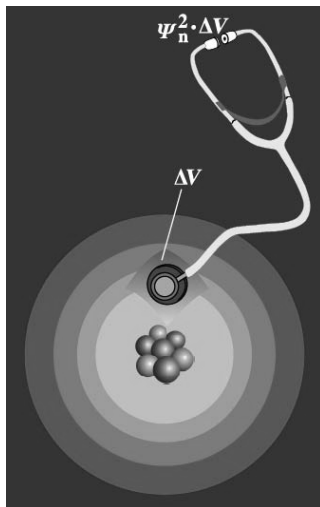


Σχήμα 5: ακίνητη ρόδα



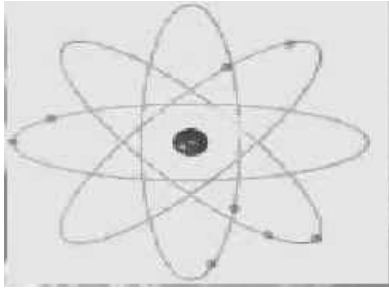
Σχήμα 6: κινούμενη ρόδα

Ένα φανταστικό πείραμα για την μέτρηση της ηλεκτρονικής πυκνότητας σε χώρο  $\Delta V$ , γύρω από τον πυρήνα ενός ατόμου, με την βοήθεια ενός μικροσκοπικού ακουστικού μεγέθους  $\Delta V$ . Κάθε φορά που περνά το ηλεκτρόνιο από τον όγκο  $\Delta V$  ακούγεται ένας αριθμός κτύπων στην μονάδα του χρόνου όπως ακριβώς μετράμε τους κτύπους της καρδιάς. Ο αριθμός αυτός των κτύπων αποτελεί μέτρο της ηλεκτρονικής πυκνότητας για τον χώρο που εξετάζουμε.

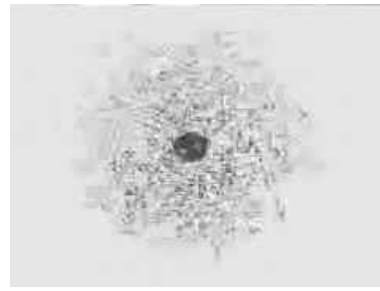


Σχήμα 7: Ένα φανταστικό πείραμα μέτρησης του αριθμού κατοχής και της ηλεκτρονικής πυκνότητας σε χώρο  $\Delta V$  του ηλεκτρονικού περιβλήματος ενός ατόμου με την βοήθεια ενός μικροσκοπικού ακουστικού μεγέθους  $\Delta V$ .

Τον τρόπο δημιουργίας του ηλεκτρονικού νέφους λαμβάνοντας υπ'όψιν τη θεωρία του Bohr και καταλήγοντας στην κβαντομηχανική θεώρηση του ατόμου.



*Σχήμα 7: Κυκλικές τροχιές γύρω από τον πυρήνα.*



*Σχήμα 8: Ηλεκτρονικό νέφος*

Στην ενότητα της εξίσωσης του Schrodinger αναφέρονται και οι κβαντικοί αριθμοί **n**, **l**, **m<sub>l</sub>**, αφού προκύπτουν σαν συνέπεια των απαιτήσεων που πρέπει να ικανοποιεί κάθε παραδεκτή λύση της εξίσωσης Schrodinger για το άτομο του υδρογόνου. Για κάθε κβαντικό αριθμό αναφέρουμε τον ορισμό, τον συμβολισμό του, το τι καθορίζει και τέλος τις πιθανόν αντιστοιχίες με στοιβάδες, υποστοιβάδες και ατομικά τροχιακά.

**ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΣ ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ  $m_l$**

Ο τρίτος κβαντικός αριθμός ονομάζεται μαγνητικός κβαντικός αριθμός και συμβολίζεται με το γράμμα  $m_l$ . Οι τιμές του  $m_l$  καθορίζονται από τις τιμές του  $l$  και είναι  $-l, \dots, 0, \dots, +l$  δηλαδή  $2l+1$  τιμές.

Αντιστοιχία τιμών  $l$ ,  $m_l$ , συμβολισμός υποστοιβαδων Ατομικων Τροχιακων

$l=0$     $l=1$     $l=2$

**Καθορίζει**

- 1 Τον προσανατολισμό των τροχιακών στο χώρο.
- 2 Τον αριθμό των τροχιακών στην κάθε υποστοιβάδα που είναι ίσος με  $2l+1$ .
- 3 Ένα ατομικό τροχιακό.

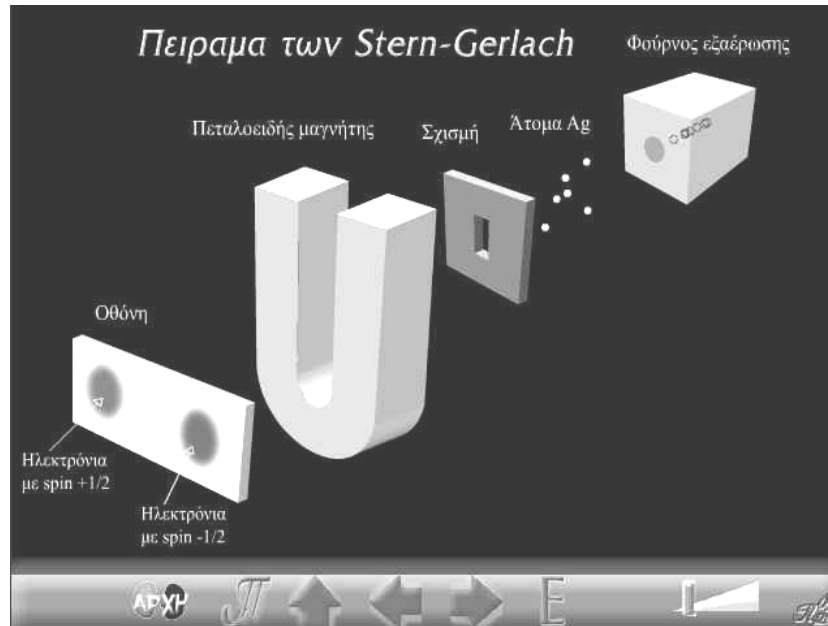
ΑΡΧΗ Π Π Ε

*Σχήμα 10: Κάτωθι παραθέτουμε την οθόνη που συναντά ο χρήστης κατά την είσοδό του στον μαγνητικό κβαντικό αριθμό  $m_l$ .*

Κινούμενος ο χρήστης με το ποντίκι πάνω από το  $l=0$ ,  $l=1$ ,  $l=2$  μπορεί να βρεθεί σε νέες οθόνες που παρουσιάζουν σε μορφή πινάκων την αντιστοιχία των υποστοιβάδων και των ατομικών τροχιακών.

Στον τέταρτο κβαντικό αριθμό του spin παρουσιάζεται με κίνηση τόσο η δεξιόστροφη όσο και η αριστερόστροφη περιστροφή του ηλεκτρονίου.

Επίσης υπάρχει και το πείραμα των Stern-Gerlach με το οποίο αποδεικνύεται η ύπαρξη spin των ηλεκτρονίων.



**Σχήμα 11:** Οθόνη που μας δείχνει το πείραμα των Stern-Gerlach

Στην ενότητα της εξίσωσης του Schrodinger αναφέρονται και τα ατομικά τροχιακά αφού είναι οι επιτρεπτές λύσεις της εξίσωσης Schrodinger (για το άτομο του υδρογόνου). Γι' αυτά υποδεικνύουμε την περιγραφή, τον συμβολισμό, το σχήμα, και σε τι αντιστοιχεί το κάθε ατομικό τροχιακό.

Τα ατομικά τροχιακά ως κυματοσυναρτήσεις μπορούν να αποδοθούν γραφικά τόσο στο επίπεδο όσο και στο χώρο. Αυτά τα σχήματα εμφανίζονται για τα  $1s$ ,  $2s$  και  $3s$  Α.Ο. καθώς και για τα  $2p$ ,  $3p$  Α.Ο.

Για κάθε ατομικό τροχιακό, ο τρόπος απεικόνισης είναι με οριακές καμπύλες, με στιγμές, διδιάστατη καθώς και με το διάγραμμα της πυκνότητας.

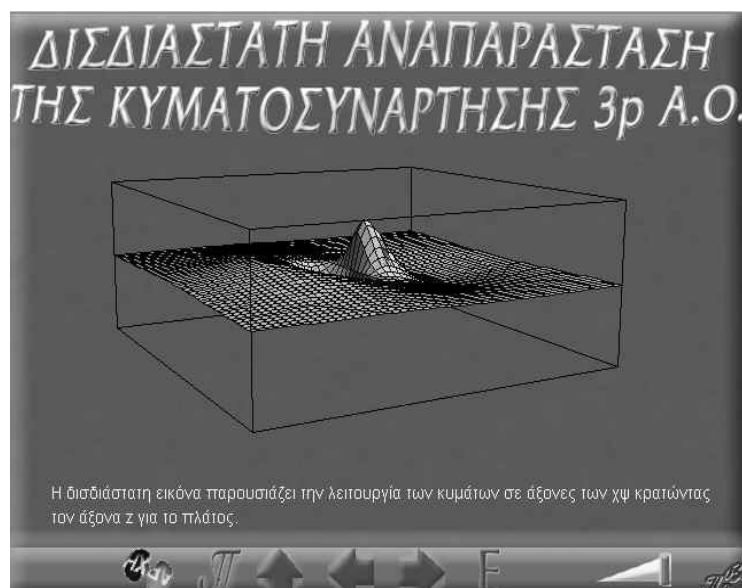
Παρακάτω δίδεται ως παράδειγμα ο τρόπος απεικόνισης του  $3p$  Α.Ο. με όλους τους ανωτέρω τρόπους.



**Σχήμα 12:** Γραφική παράσταση του 3p ατομικού τροχιακού με οριακές καμπύλες.



**Σχήμα 13:** Γραφική παράσταση του 3p ατομικού τροχιακού με στιγμές.



Σχήμα 14: Γραφική παράσταση του  $3p$  ατομικού τροχιακού με την μορφή κομάτων.



Σχήμα 15: Γραφική παράσταση του  $3p$  ατομικού τροχιακού με την μορφή διαγράμματος πυκνότητας.



Αναφέρονται τα συμπεράσματα από την εξίσωση του Schrodinger όπου ο χρήστης έχει την δυνατότητα να τα επιλέξει με όποια σειρά επιθυμεί.

Αναφέρουμε τέλος, για την υλοκυματική εξίσωση και τις διαφορές μεταξύ της θεωρίας του Bohr και του κβαντομηχανικού μοντέλου.

Στο αρχικό μενού υπάρχει η δυνατότητα επιλογής των αρχών δόμησης, δηλαδή της απαγορευτικής αρχής του Pauli, της αρχής της ελάχιστης ενέργειας και τέλος του κανόνα του Hund.

Για κάθε μία από τις ανωτέρω αρχές αναφέρουμε τον ορισμό, και ένα παράδειγμα για την καλύτερη κατανόηση της.

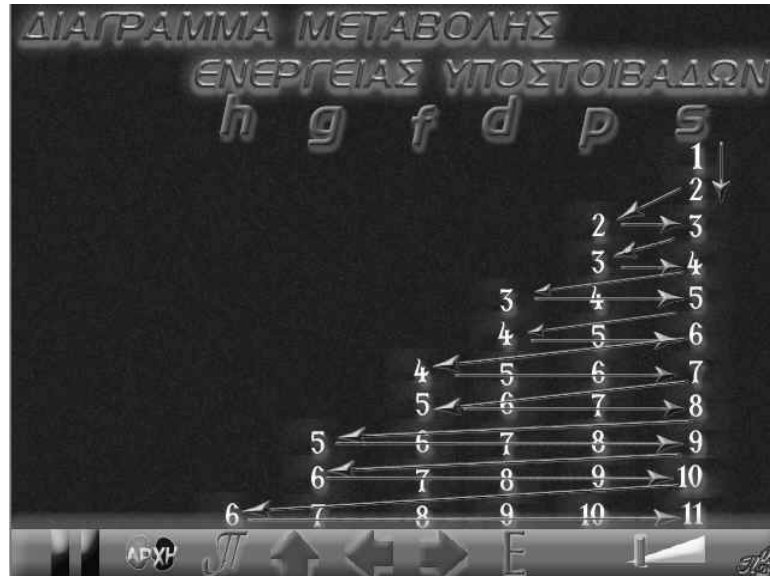
Στην ενότητα της αρχής του Pauli υπάρχουν υποενότητες που μας προσδιορίζουν τον αριθμό των ηλεκτρονίων για τις στοιβάδες, τις υποστοιβάδες και τέλος τα ατομικά τροχιακά.

max e υποστοιβάδος

αζιμουθιακός αριθμός $l$	υποστοιβάδα	$2(2l+1)$ max e
$l=0$	s	2
$l=1$	p	6
$l=2$	d	10
$l=3$	f	14
$l=4$	g	18

**Σχήμα 16:** Οθόνη που παρουσιάζει τον αριθμό των ηλεκτρονίων σε κάθε υποστοιβάδα.

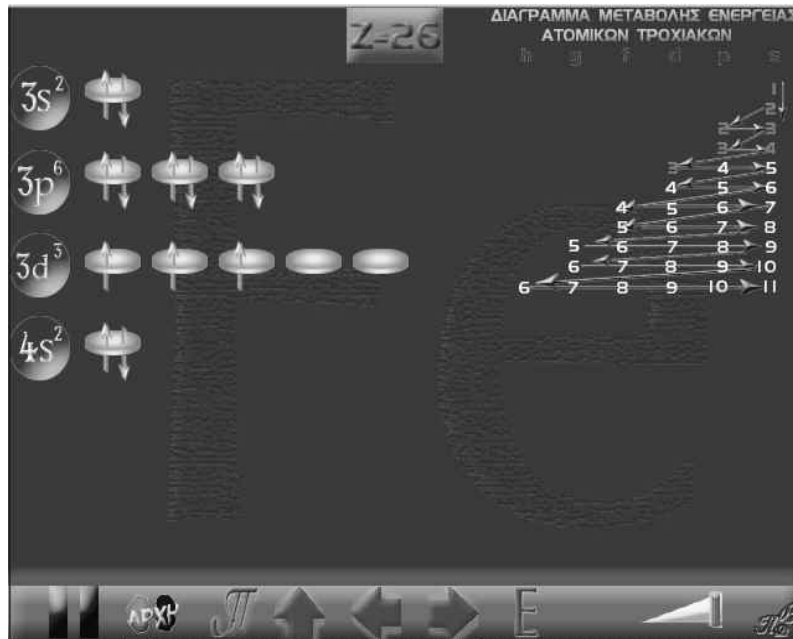
Στην ενότητα της αρχής ελάχιστης ενέργειας αναφέρουμε και το εμπειρικό διάγραμμα με το οποίο μπορούμε να προσδιορίσουμε τον τρόπο μεταβολής της ενέργειας των υποστοιβάδων.



*Σχήμα 17: Οθόνη του εμπειρικού διαγράμματος μεταβολής της ενέργειας υποστοιβάδων.*

Τέλος, αναφέρουμε την δυνατότητα που παρέχει το συγκεκριμένο CD-rom για την απεικόνιση της ηλεκτρονικής δόμησης του συνόλου των στοιχείων του περιοδικού πίνακα. Η δόμηση γίνεται σύμφωνα με τις αρχές αυτής, και παριστάνονται τα ατομικά τροχιακά με βάσεις ενώ τα ηλεκτρόνια με βέλη.

Ως background, υπάρχει το σύμβολο του κάθε στοιχείου. Δεξιά επάνω υπάρχει το εμπειρικό διάγραμμα μεταβολής της ενέργειας. Η συμπλήρωση κάθε υποστοιβάδας συνοδεύεται με χρωματισμό του αντιστοίχου αριθμού στο εμπειρικό διάγραμμα ενέργειας. Στο κέντρο του μονιέ υπάρχει ο ατομικός αριθμός του κάθε στοιχείου. Γνωρίζουμε ότι σε ένα ουδέτερο άτομο ο αριθμός των πρωτονίων ταυτίζεται με τον αριθμό των ηλεκτρονίων. Για τον λόγο αυτό έχουμε και την δόμηση των ατόμων (δηλαδή των ηλεκτρονίων) βασισμένοι στον ατομικό αριθμό. Στο menu πλοήγησης παρατηρούμε ότι υπάρχει το κουμπί pause που μπορεί να μας παγώσει την εικόνα για να δούμε καλύτερα την δόμηση σύμφωνα με τις ανωτέρω αρχές.



*Σχήμα 18: Οθόνη της ηλεκτρονιακής δομής του ατόμου του σιδήρου με την βοήθεια σχηματικής παραστάσεως των ατομικών τροχιακών και των ηλεκτρονίων.*