

Εικόνα 1. Συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας $|\chi|^2$ για τις χαμηλότερες ενεργειακές καταστάσεις του ατόμου του υδρογόνου στο επίπεδο $x = 0$. Προσέξτε ότι όταν το άτομο έχει στροφορμή ($l \neq 0$) η $|\chi|^2$ δεν έχει σφαιρική συμμετρία· το άθροισμα όμως των υποκαταστάσεων (διαφορετικά m_l) για δεδομένο l έχει.

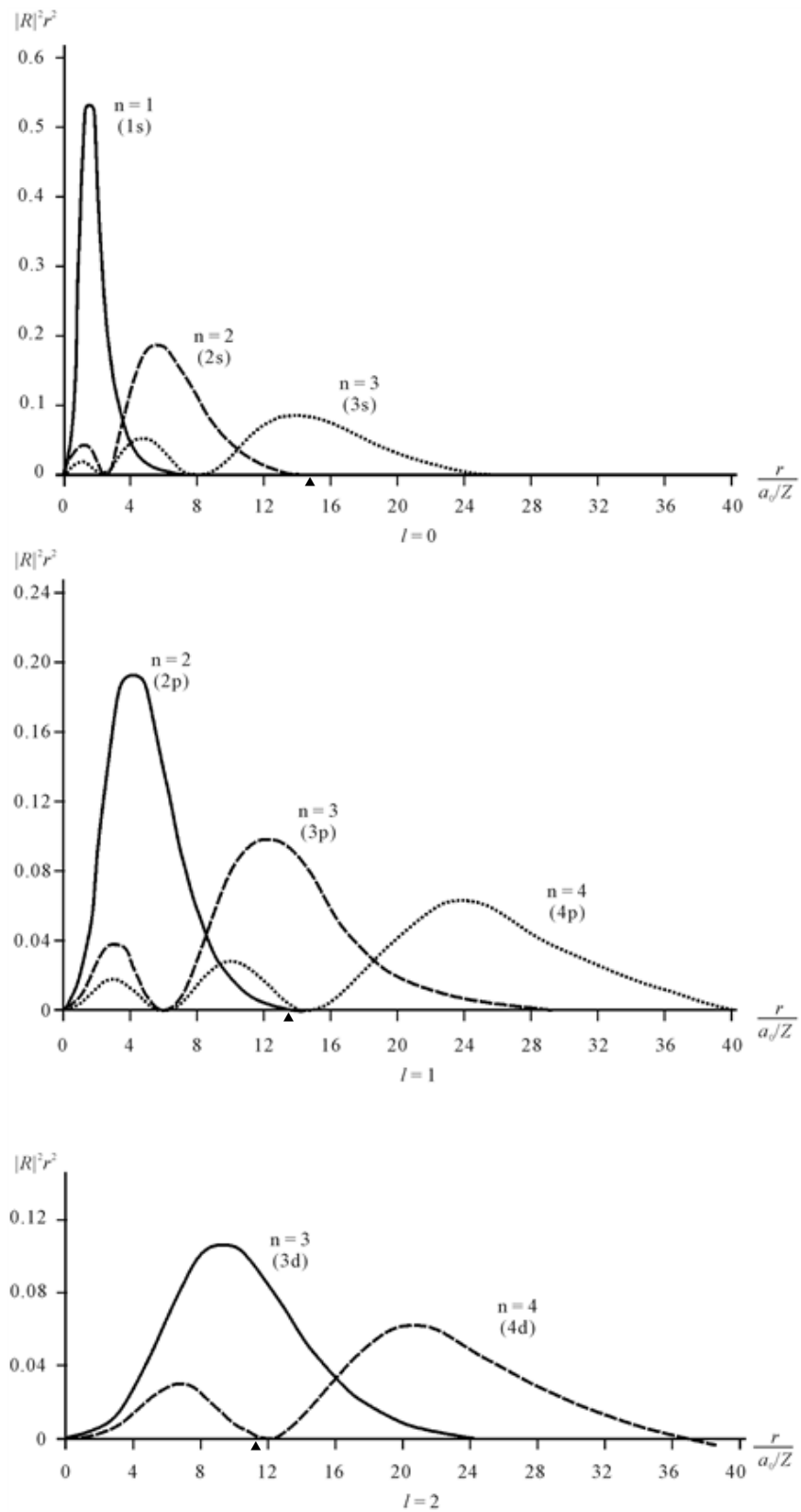
Συμμετρία

Η πιθανότητα να βρίσκεται το ηλεκτρόνιο στον χώρο γύρω από το πρωτόνιο στο άτομο του υδρογόνου δίνεται από την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας, $|\chi|^2$. Στην εικόνα 1 βλέπουμε αυτήν την κατανομή ως χρωματική βαθμίδα από το μωβ (λιγότερο πιθανό) στο άσπρο (περισσότερο πιθανό). Είναι φανερό ότι η $|\chi|^2$ δεν έχει σφαιρική συμμετρία παρά μόνο όταν το άτομο έχει μηδενική στροφορμή ($l = 0$). Παρόλα αυτά, αν υπολογίσουμε το άθροισμα

$$\sum_{m_l} \chi^*_{nlm_l} \chi_{nlm_l}$$

διαπιστώνουμε ότι είναι ανεξάρτητο από τις γωνίες προσανατολισμού θ και φ . Αυτό μπορεί κάποιος να το φανταστεί από τα σχήματα στην εικόνα 1. Αυτή η σφαιρική συμμετρία του αθροίσματος των υποκαταστάσεων με τα ίδια n και l προκύπτει και στα πολλατομικά άτομα. Αυτό σημαίνει ότι αν υπάρχει ένα ηλεκτρόνιο σε κάθε μία από τις m_l καταστάσεις ενός δεδομένου l η κατανομή φορτίου θα έχει σφαιρική συμμετρία. Αυτό το αποτέλεσμα είναι σημαντικό γιατί εξηγεί εν μέρει γιατί τα ιδανικά αέρια ήλιο (He), νέο

(Ne), αργό (Ar) είναι αδρανή. Επίσης εξηγεί γιατί τα αλκάλια λίθιο (Li), νάτριο (Na), κάλιο (K) μοιάζουν με το υδρογόνο. Θα ακολουθήσει πιο αναλυτική περιγραφή στην επόμενη ενότητα.



Εικόνα 2. Ακτινική εξάρτηση της πυκνότητας πιθανότητας για τις χαμηλότερες ενεργειακές καταστάσεις του υδρογόνου. Ενδεικτικά σημειώνεται με τριγωνάκι η μέση απόσταση για τις καταστάσεις $n = 3$. Προσέξτε ότι η μέση απόσταση μετατοπίζεται εγγύτερα στον πυρήνα για τις μεγαλύτερες τιμές του l .

Που βρίσκονται τα ηλεκτρόνια;

Όπως έχουμε ήδη συζητήσει απάντηση σε αυτό το ερώτημα δεν μπορεί να δοθεί γιατί παραβιάζει την αρχή της απροσδιοριστίας του Heisenberg. Μπορούμε όμως να μιλήσουμε για μια μέση απόσταση δεδομένης την ενεργειακής κατάστασης του ηλεκτρονίου. Στην εικόνα 2 φαίνεται η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας, $P(r)$, όπου $P(r)dr$ η πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να είναι μεταξύ r και $r + dr$ (έχοντας ολοκληρώσει για όλους τους προσανατολισμούς). Η $P(r)$ εμφανίζει μέγιστο σε κάποια απόσταση από τον πυρήνα, r , που εξαρτάται από την συγκεκριμένη κυματοσυνάρτηση. Η τετμημένη είναι σε μονάδες ακτίνας του Bohr, a , για το υδρογόνου ($Z = 1$). Προσέξτε ότι ένα ηλεκτρόνιο στην κβαντική κατάσταση $n = 1$ έχει μέση απόσταση περίπου a . Ένα ηλεκτρόνιο σε κατάσταση $n = 2$, περίπου $4a$, κ.ο.κ. Αλλιώς, ένα ηλεκτρόνιο σε κατάσταση $n = 2$ είναι πιθανότερο να βρεθεί εκτός της περιοχής που θα καταλάμβανε ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση $n = 1$. Ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση $n = 3$ είναι πιθανότερο να βρεθεί έξω από την περιοχή που θα καταλάμβανε ένα ηλεκτρόνιο στις καταστάσεις $n = 1$ και $n = 2$, κ.ο.κ. Όμως, ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση $n = 2$ και $l = 0$ έχει μικρή αλλά πεπερασμένη πιθανότητα να βρεθεί στην περιοχή που θα καταλάμβανε ηλεκτρόνιο στην κατάσταση $n = 1$, δηλ., πολύ κοντά στον πυρήνα. Αυτή η τάση είναι μικρότερη για ηλεκτρόνιο στην κατάσταση $n = 2$ και $l = 1$. Την ίδια παρατήρηση μπορούμε να κάνουμε και για τις καταστάσεις $n = 3$ και $n = 4$. Για την $n = 3$ που εμφανίζεται και στα τρία διαγράμματα μπορούμε επιπλέον να δούμε ότι για $l = 0$ ένα ηλεκτρόνιο έχει μικρή μικρή πιθανότητα να βρεθεί στην περιοχή του ηλεκτρονίου με $n = 2$ και επίσης μια μικρή πιθανότητα να βρεθεί κοντά στον πυρήνα, στην περιοχή που καταλαμβάνει ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση $n = 1$. Ηλεκτρόνιο με $n = 3$ και $l = 1$ δείχνει την ίδια τάση για την περιοχή που καταλαμβάνει ηλεκτρόνιο με $n = 2$ αλλά όχι με $n = 1$. Τέλος, ηλεκτρόνιο με $n = 3$ και $l = 2$ δεν παρουσιάζει καμία από τις δύο τάσεις. Μπορούμε να συνοψίσουμε αυτήν την παρατήρηση ως εξής: *Για δεδομένη κατάσταση n , τα ηλεκτρόνια σε καταστάσεις με μικρότερη στροφορμή είναι πιθανότερο να βρεθούν κοντά στον πυρήνα από εκείνα σε καταστάσεις με μεγαλύτερη στροφορμή.* Στην περίπτωση του υδρογόνου αυτή η τάση δεν έχει κάποια επίπτωση· οι καταστάσεις με ίδιο n και διαφορετικό l είναι εκφυλισμένες κι επομένως έχουν την ίδια ενέργεια. Στην περίπτωση πολυηλεκτρονικών ατόμων αυτή η επίδραση είναι σημαντική γιατί εξηγεί γιατί καταστάσεις με ίδιο n και διαφορετικό l έχουν διαφορετική ενέργεια.

Η κυματοσυνάρτηση που προκύπτει από την λύση της εξίσωσης του Schrodinger ορίζει την πυκνότητα πιθανότητας της θέσης των ηλεκτρονίων γύρω από τον πυρήνα.