

2. Διάταξη των ηλεκτρονίων στα άτομα

ΣΚΟΠΟΣ

Σκοπός αυτού του κεφαλαίου είναι να γνωρίσουμε τις ηλεκτρονικές δομές των στοιχείων, δηλαδή τον τρόπο κατανομής των ηλεκτρονίων στα άτομα και πώς αυτές σχετίζονται με τον Περιοδικό Πίνακα.

2. Διάταξη των ηλεκτρονίων στα άτομα

Προσδοκώμενα αποτελέσματα

Όταν θα έχετε μελετήσει αυτό το κεφάλαιο, θα μπορείτε να:

- ❖ Εξηγείτε τη φύση του φωτός και να περιγράφετε τα βασικά χαρακτηριστικά του.
- ❖ Εντοπίζετε, με βάση τη συχνότητα ή το μήκος κύματος, τα διάφορα είδη ακτινοβολίας, τα οποία στο ηλεκτρομαγνητικό φάσμα εκτείνονται δεξιά και αριστερά της ορατής περιοχής.
- ❖ Περιγράφετε με αδρές γραμμές τον τρόπο παραγωγής και την εικόνα του ατομικού φάσματος του υδρογόνου.
- ❖ Εξηγείτε έννοιες όπως, κβάντο, φωτόνιο, κβάντωση ενέργειας, σταθερά του Planck και να δίνετε δύο παραδείγματα κβαντισμένων καταστάσεων.
- ❖ Περιγράφετε και να ερμηνεύετε το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο.

2. Διάταξη των ηλεκτρονίων στα άτομα

- ❖ Σκιαγραφείτε το ατομικό πρότυπο του Bohr για το άτομο του υδρογόνου.
- ❖ Ερμηνεύετε όλες τις γραμμές του ατομικού φάσματος του υδρογόνου, υπολογίζοντας θεωρητικά τα αντίστοιχα μήκη κύματος των γραμμών.
- ❖ Σχολιάζετε τη δυαδική φύση του ηλεκτρονίου και να εξηγείτε γιατί υπολογισμοί που σχετίζονται με υποατομικά σωματίδια είναι περιορισμένης ακρίβειας.
- ❖ Ορίζετε το στάσιμο κύμα και να απεικονίζετε το ηλεκτρόνιο ως στάσιμο υλικό κύμα.
- ❖ Δίνετε τους τρεις τρόπους παρουσίασης του τετραγώνου της κυματοσυνάρτησης Ψ^2 για το απλούστερο τροχιακό $1s$ και να σχολιάζετε το νόημα κάθε περίπτωσης.
- ❖ Χαρακτηρίζετε τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς, να υπογραμμίσετε τη σημασία τους και να τους χρησιμοποιείτε στην περιγραφή των ατομικών τροχιακών.

2. Διάταξη των ηλεκτρονίων στα άτομα

- ❖ Χρησιμοποιείτε σωστά τους όρους: φλοιός ή στιβάδα, υποφλοιός ή υποστιβάδα, τροχιακό, ηλεκτρόνια σθένους, συζευγμένα και μονήρη ηλεκτρόνια, θεμελιώδης και διεγερμένη κατάσταση, διαγράμματα τροχιακών, δραστικό πυρηνικό φορτίο.
- ❖ Σχεδιάζετε με οριακές καμπύλες τροχιακά των τύπων s , p και d .
- ❖ Αιτιολογείτε τις διαφορές στις ενέργειες των ατομικών τροχιακών του υδρογόνου και ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου.
- ❖ Συμβολίζετε την ηλεκτρονική διάταξη ενός στοιχείου γνωστού ατομικού αριθμού, χρησιμοποιώντας την αρχή της δομήσεως.
- ❖ Διακρίνετε τη στενή σχέση ηλεκτρονικής δομής των στοιχείων - Περιοδικού Πίνακα και εκμεταλλευόμενοι τη σχέση αυτή να βρίσκετε τις ηλεκτρονικές δομές των στοιχείων.

2. Διάταξη των ηλεκτρονίων στα άτομα

Έννοιες κλειδιά

- ❖ Απαγορευτική αρχή του Pauli
- ❖ Αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg
- ❖ Αρχή της δομήσεως
- ❖ Ασύζευκτα ή μονήρη ηλεκτρόνια
- ❖ Ατομικά ή γραμμικά φάσματα
- ❖ Ατομικά τροχιακά
- ❖ Διάγραμμα ενεργειακών επιπέδων
- ❖ Διάγραμμα τροχιακών
- ❖ Διεγερμένη κατάσταση
- ❖ Δραστικό πυρηνικό φορτίο
- ❖ Ενεργειακό επίπεδο
- ❖ Εξίσωση του de Broglie
- ❖ Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία

2. Διάταξη των ηλεκτρονίων στα άτομα

Έννοιες κλειδιά

- ❖ Ηλεκτρόνια σθένους
- ❖ Ηλεκτρονική διάταξη ή δομή
- ❖ Θεμελιώδης κατάσταση
- ❖ Κβαντικοί αριθμοί
- ❖ Κανόνας του Hund
- ❖ Κβάντο
- ❖ Κυματική συνάρτηση
- ❖ Μήκος κύματος
- ❖ Spin ηλεκτρονίου
- ❖ Σταθερά του Planck
- ❖ Στάσιμο κύμα

2. Διάταξη των ηλεκτρονίων στα άτομα

Έννοιες κλειδιά

- ❖ Συζευγμένα ηλεκτρόνια
- ❖ Συχνότητα
- ❖ Τομείς (blocks) s , p , d , f
- ❖ Υδρογονοειδή άτομα
- ❖ Υλικό κύμα
- ❖ Υποφλοιός ή υποστιβάδα
- ❖ Φαινόμενο θωράκισης ή προάσπισης
- ❖ Φλοιός ή στιβάδα
- ❖ Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο
- ❖ Φωτόνιο

2. Διάταξη των ηλεκτρονίων στα άτομα

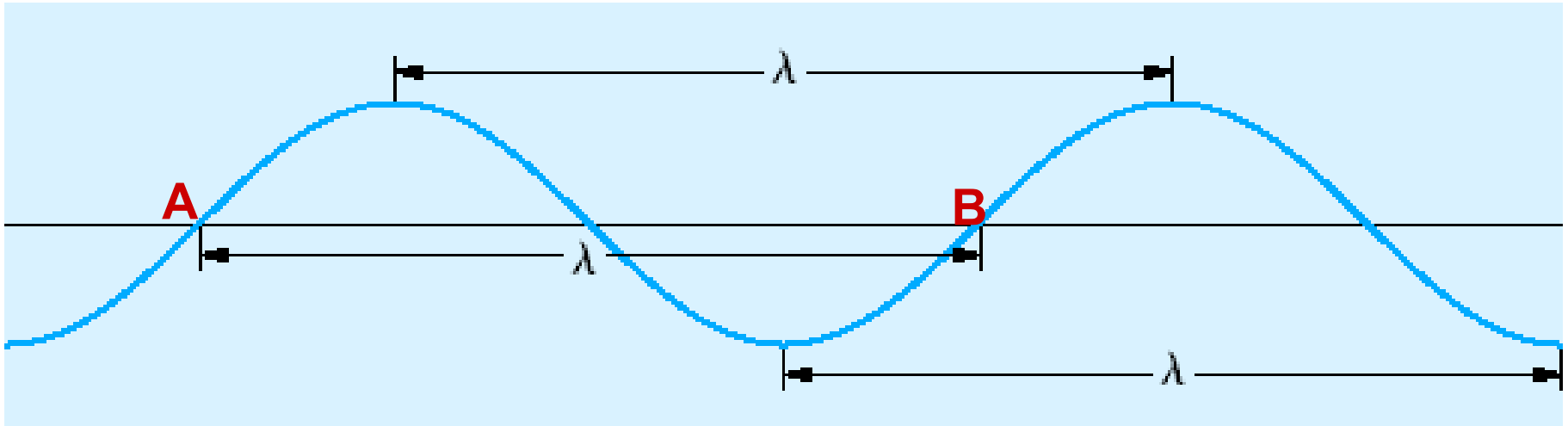
Ebbing: Κεφάλαια 7 – 8

- 2.1 Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία
- 2.2 Ατομικά φάσματα
- 2.3 Εισαγωγή στην κβαντική θεωρία
- 2.4 Το ατομικό πρότυπο του Bohr
- 2.5 Δυϊσμός κύματος – σωματιδίου,
Αρχή της αβεβαιότητας
- 2.6 Εισαγωγή στην κυματομηχανική
- 2.7 Κβαντικοί αριθμοί και ατομικά τροχιακά
- 2.8 Πολυηλεκτρονικά άτομα
- 2.9 Ηλεκτρονικές διατάξεις
- 2.10 Ηλεκτρονικές διατάξεις και περιοδικό σύστημα

Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία

Η κυματική φύση του φωτός

Κύμα: μια συνεχώς επαναλαμβανόμενη μεταβολή ή ταλάντωση μέσα σε ύλη ή σε ένα φυσικό πεδίο.

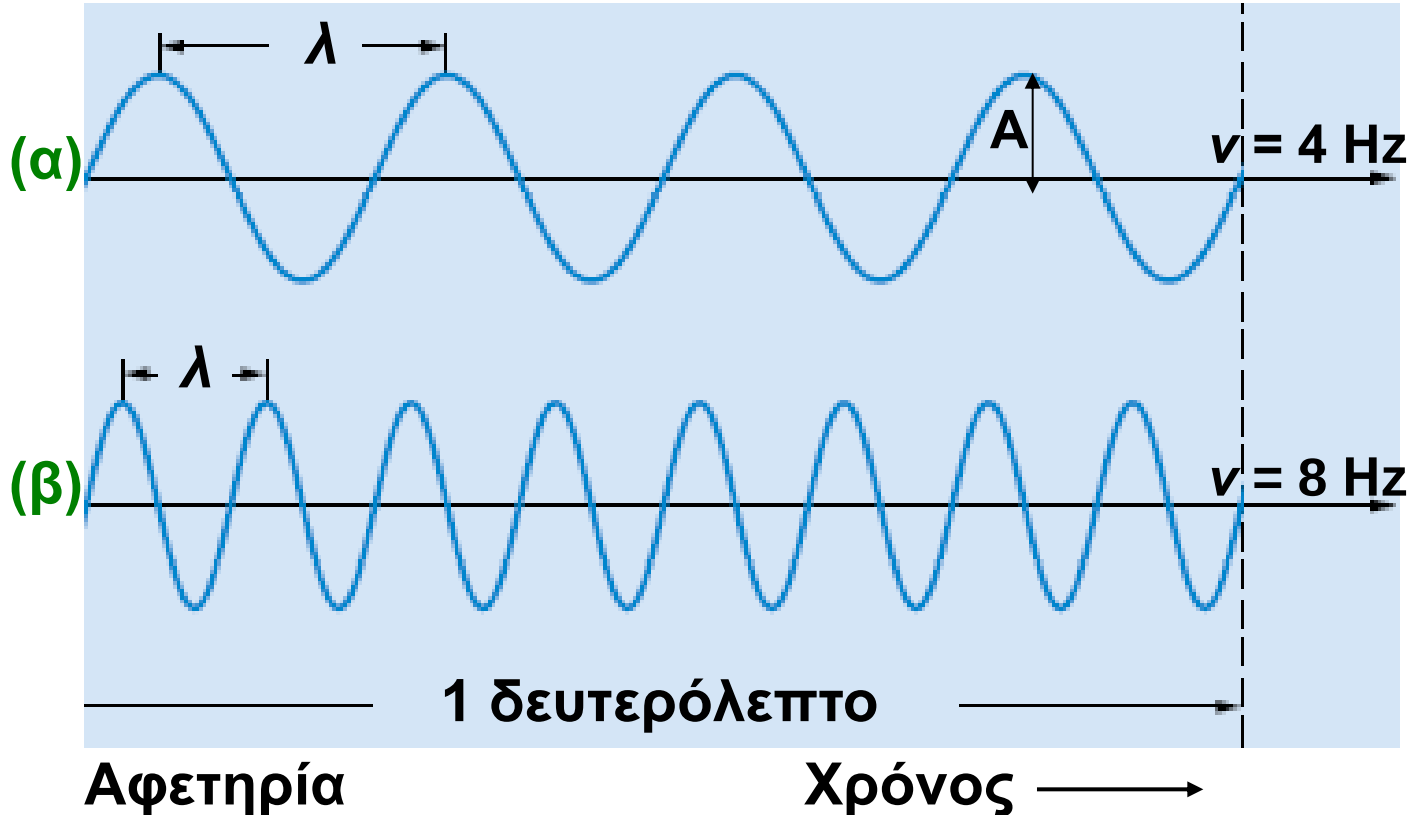


Μήκος κύματος (λ): η απόσταση ανάμεσα σε δύο οποιαδήποτε διαδοχικά πανομοιότυπα σημεία ενός κύματος.

$$1 \text{ nm} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}$$

Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία

Συχνότητα (ν): ο αριθμός των μηκών κύματος που περνούν από ένα σταθερό σημείο σε ένα δευτερόλεπτο (σε $\text{s}^{-1} = \text{hertz, Hz}$)



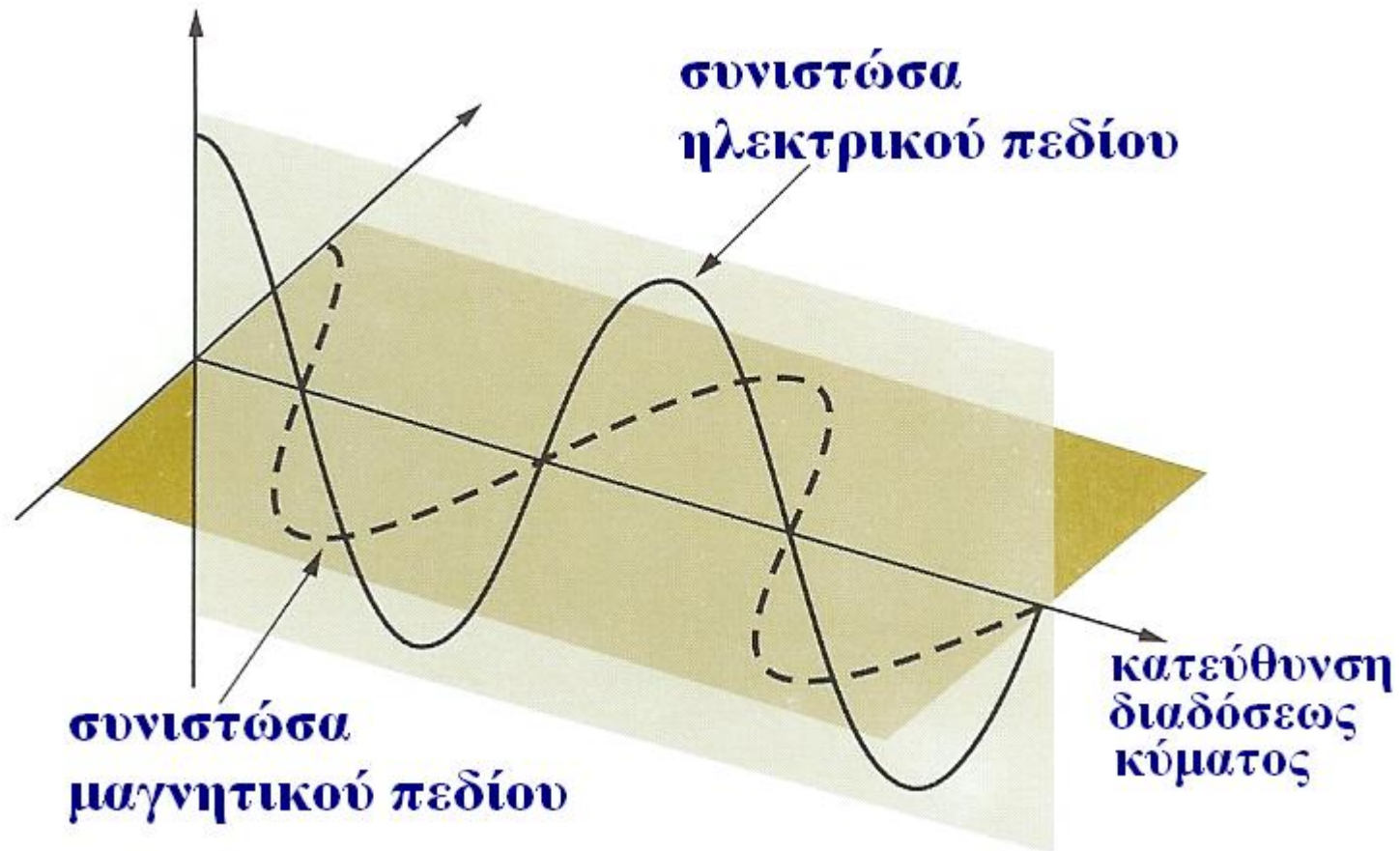
**A = πλάτος
του κύματος**

Σχέσεις

$$\begin{aligned}c_{\alpha} &= c_{\beta} \\ \lambda_{\alpha} &= 2\lambda_{\beta} \\ \nu_{\beta} &= 2\nu_{\alpha}\end{aligned}$$

Ταχύτητα κύματος (c): $c = \nu \lambda$ (στο κενό $c = 2,998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$)

Τι είναι το ηλεκτρομαγνητικό κύμα;



Άσκηση 2.1

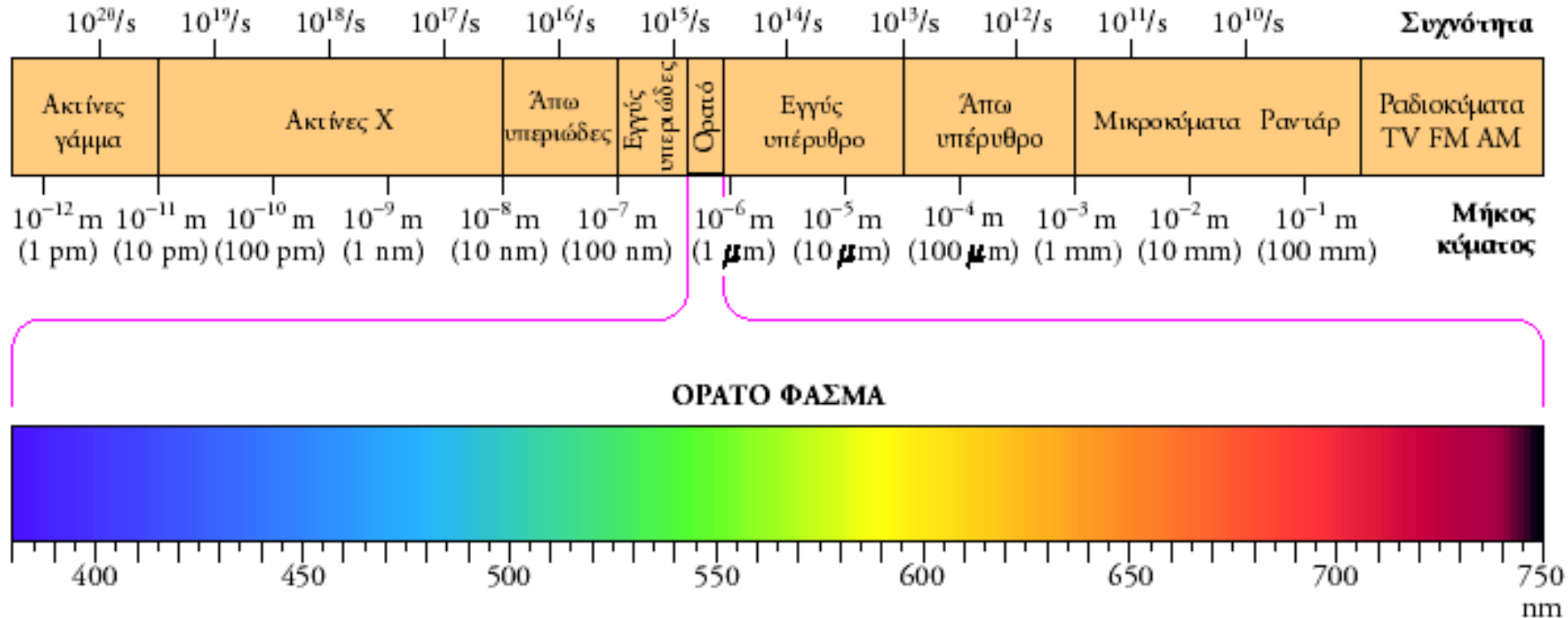
Υπολογισμός της συχνότητας φωτός από το μήκος κύματος

Το μήκος κύματος του πράσινου φωτός των φωτεινών σηματοδοτών της τροχαίας είναι 522 nm. Πόση είναι η συχνότητα αυτής της ακτινοβολίας;

Άσκηση 2.1

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{2,998 \times 10^8 \text{ m/s}}{522 \times 10^{-9} \text{ m}} = 5,74 \times 10^{14} \text{ s}^{-1} \quad (5,74 \times 10^{14} \text{ Hz})$$

Το ηλεκτρομαγνητικό φάσμα

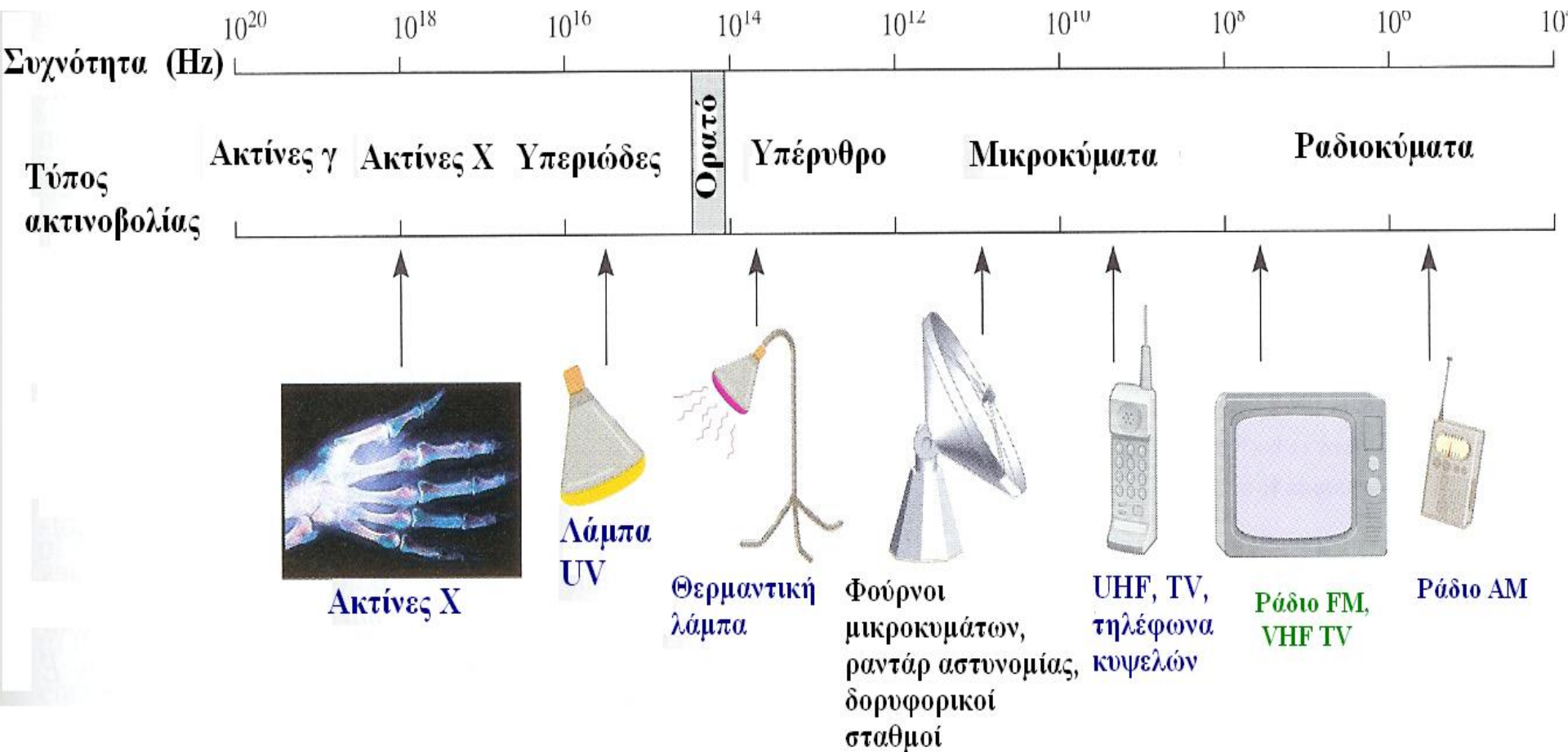


Το ορατό φως αποτελεί ένα ελάχιστο τμήμα του συνολικού ηλεκτρομαγνητικού φάσματος!

Ηλεκτρομαγνητικά κύματα υψηλών συχνοτήτων έχουν μικρά μήκη κύματος, και αντίστροφα.

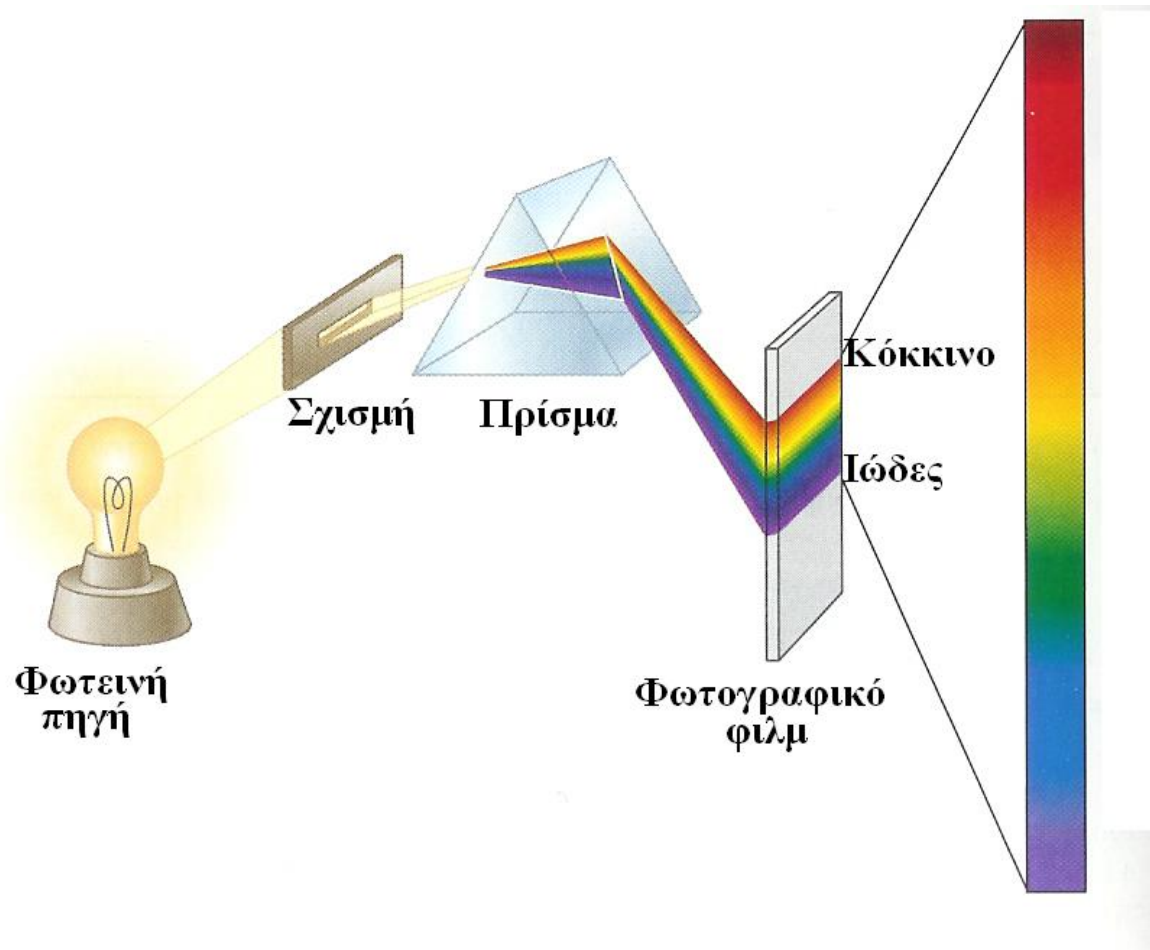
Τα όρια των διαφόρων περιοχών δεν καθορίζονται επακριβώς⁴

Εφαρμογές των διαφόρων τύπων ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας



Ατομικά φάσματα

Ποιο φάσμα χαρακτηρίζουμε ως **συνεχές**;

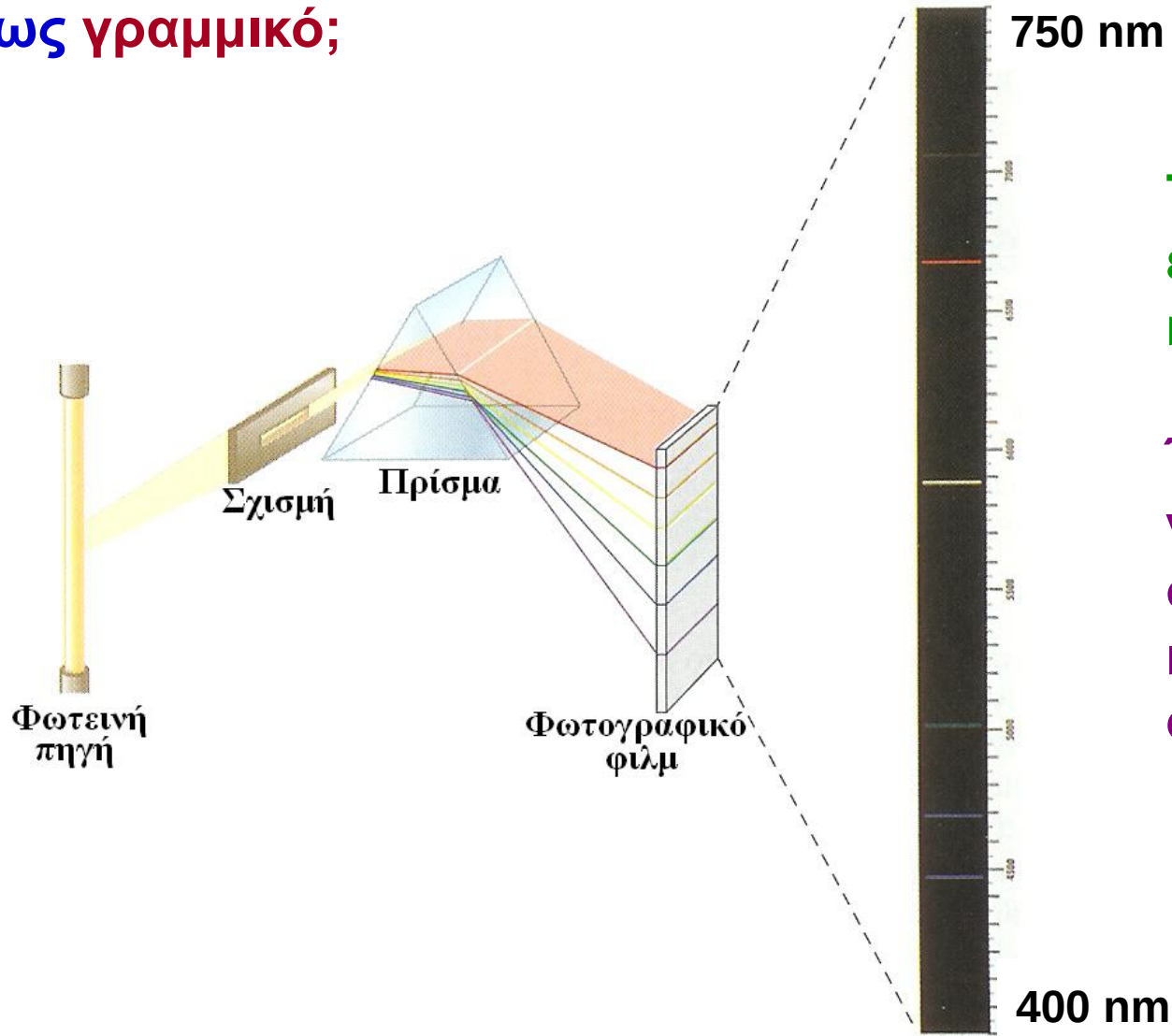


**Φάσμα ορατού
φωτός:**

**πού αρχίζει
και πού
τελειώνει το
πράσινο;**

Ατομικά φάσματα

Ποιο φάσμα χαρακτηρίζεται
ως γραμμικό;



Το φάσμα
εκπομπής του
ηλίου

Έξι έγχρωμες
γραμμές στην
ορατή περιοχή του
ηλεκτρομαγνητικού
φάσματος

Το συνολικό φάσμα του υδρογονατόμου

Πώς περιγράφεται το συνολικό φάσμα του υδρογονατόμου;



Εξίσωση Balmer και εξίσωση Rydberg

Σε ποια εξίσωση υπακούουν τα μήκη κύματος, λ , των γραμμών του ορατού φάσματος του ατόμου H;

$$\frac{1}{\lambda} = 1,097 \times 10^7 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{m}^{-1} \quad \text{Εξίσωση Balmer}$$

$n = \text{ακέραιος} > 2$

Ποια εξίσωση μετατρέπει τα μήκη κύματος σε συχνότητες;

$$\nu = cR_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) = 3,288 \times 10^{15} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{s}^{-1}$$

Εξίσωση Rydberg

$R_H = \text{σταθερά Rydberg} = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

Άσκηση 2.2

Επαλήθευση της εξίσωσης Balmer

Πόσο είναι το μήκος κύματος της μιας οριακής γραμμής του ορατού φάσματος του ατόμου H;

Άσκηση 2.2

$$\frac{1}{\lambda} = 1,097 \times 10^7 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{m}^{-1}$$

Οι γραμμές είναι τέσσερις για τις τιμές $n = 3, 4, 5, 6$ για $n = 3 \Rightarrow$

$$\frac{1}{\lambda} = 1,097 \times 10^7 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{m}^{-1} = 1,097 \times 10^7 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) \text{m}^{-1}$$

$\Rightarrow$

$$\frac{1}{\lambda} = 0,15236 \times 10^7 \text{m}^{-1} \Rightarrow \lambda = 6,563 \times 10^{-7} \text{m} = 656,3 \text{ nm}$$

Εισαγωγή στην κβαντική θεωρία

Κατά την κλασική Φυσική, η ύλη μπορεί να απορροφά ή να εκπέμπει **οποιαδήποτε** ποσότητα ηλεκτρομαγνητικής ενέργειας. **Ποια η άποψη του Planck πάνω σ' αυτό;**

Planck: η ηλεκτρομαγνητική ενέργεια εκπέμπεται ή απορροφάται από την ύλη σε **καθορισμένες** στοιχειώδεις ποσότητες, τα **κβάντα**.



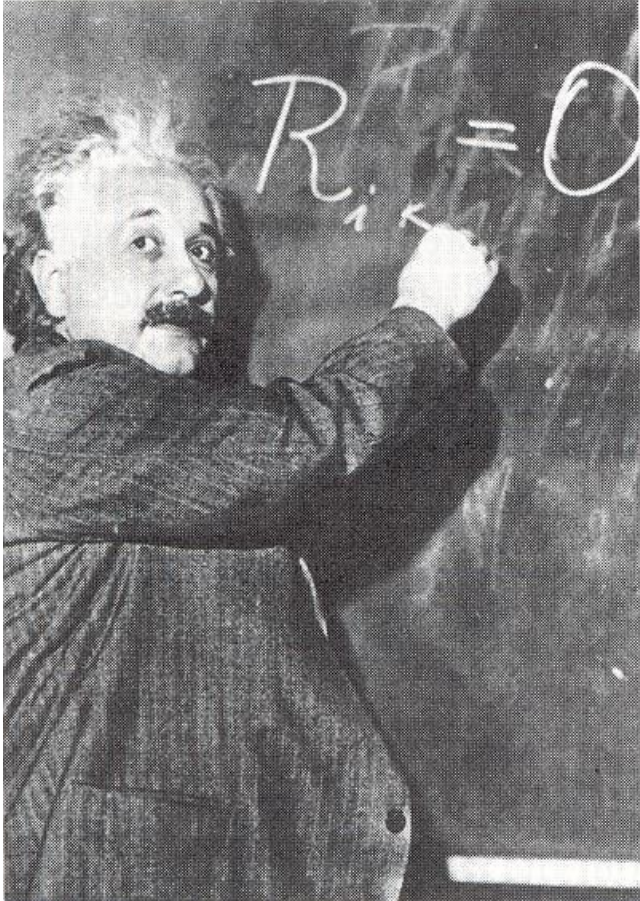
Πόση είναι η ενέργεια ενός κβάντου κατά τον Planck;

$$E = h \nu \quad h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J s (σταθερά του Planck)}$$

Η ενέργεια εκπέμπεται ή απορροφάται σε ακέραια πολλαπλάσια του $h \nu$ ($1h\nu, 2h\nu, 3h\nu$ κοκ) $\Rightarrow$ η ενέργεια είναι **κβαντισμένη** (έχει καθορισμένες τιμές).

Τι θα σήμαινε κβάντωση της ταχύτητας ενός αυτοκινήτου;

Η επέκταση της θεωρίας του Planck από τον Einstein



Albert Einstein (1879-1955)

Ο Einstein υποστήριξε ότι αν ένα δονούμενο άτομο μετέβαλε ενέργεια, ας πούμε από $3h\nu$ σε $2h\nu$, τότε η διαφορά ενέργειας $h\nu$ θα εκπεμπόταν ως ένα κομματάκι (ή κβάντο) φωτεινής ενέργειας.

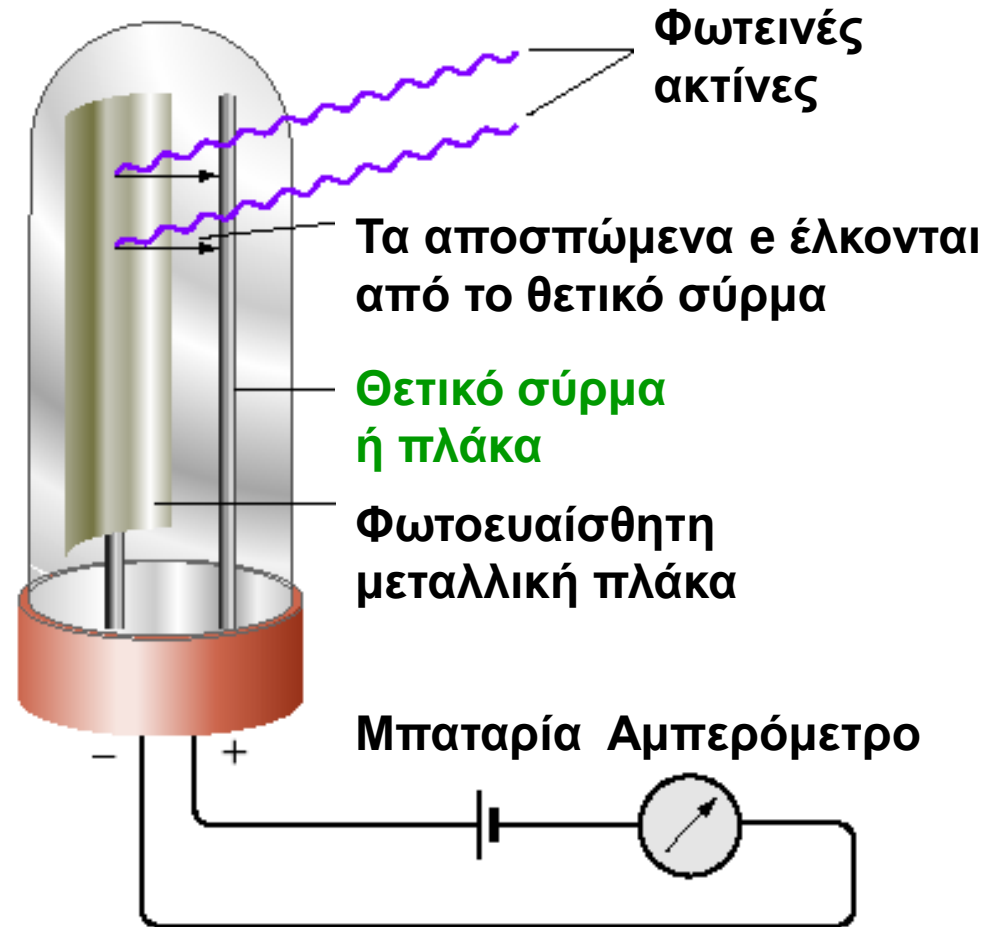
Το φως αποτελείται από κβάντα (ή **φωτόνια**), δηλαδή σωματίδια (particles of light), των οποίων η ενέργεια E είναι ανάλογη της συχνότητας του φωτός

$$E = h\nu$$

Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο:

η εκτίναξη ηλεκτρονίων από την επιφάνεια ενός μετάλλου ή από κάποιο άλλο υλικό, όταν πάνω σ' αυτό προσπίπτει φως.



Η ερμηνεία του φωτοηλεκτρικού φαινομένου από τον Einstein

Ένα ηλεκτρόνιο αποσπάται από το μέταλλο, όταν κτυπηθεί από ένα φωτόνιο $\Rightarrow$

το φωτόνιο αυτό πρέπει να έχει μια ελάχιστη ενέργεια, προκειμένου να αποσπάσει το ηλεκτρόνιο από τις ελκτικές δυνάμεις που το κρατούν δέσμιο στο μέταλλο.

Όταν το φωτόνιο κτυπά το μέταλλο, η ενέργειά του *hν* απορροφάται από το ηλεκτρόνιο. Τότε το φωτόνιο παύει να υπάρχει ως σωματίδιο και λέμε ότι έχει απορροφηθεί.

Η κυματική και η σωματιδιακή άποψη για το φως πρέπει να θεωρηθούν συμπληρωματικές εικόνες της ίδιας φυσικής ποσότητας. Αυτό ονομάζεται δυϊσμός κύματος-σωματιδίου του φωτός.

Άσκηση 2.3

Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο: Εφαρμογές

Για να αποσπασθεί ένα ηλεκτρόνιο από μια γυαλιστερή επιφάνεια ψευδαργύρου, θα πρέπει το προσπίπτον φωτόνιο να έχει ελάχιστη ενέργεια $E_{\min} = 6,94 \times 10^{-19} \text{ J}$.

(α) Μπορεί ένα φωτόνιο με μήκος κύματος 210 nm να προκαλέσει απόσπαση ηλεκτρονίου από ψευδάργυρο;

(β) Εάν ναι, πόση είναι η μέγιστη ενέργεια του αποσπώμενου ηλεκτρονίου;

Άσκηση 2.3

$$(α) \quad E = h\nu, \quad \nu = \frac{c}{\lambda} \Rightarrow E = \frac{hc}{\lambda}$$

$$= \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J s})(3,00 \times 10^8 \text{ m s}^{-1})}{210 \times 10^{-9} \text{ m}} = 9,47 \times 10^{-19} \text{ J} > E_{\min} \Rightarrow \text{ναι}$$

$$(β) \quad E_{\text{κιν (max)}} = E - E_{\min} = 9,47 \times 10^{-19} \text{ J} - 6,94 \times 10^{-19} \text{ J} = 2,53 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Το ατομικό πρότυπο του Rutherford

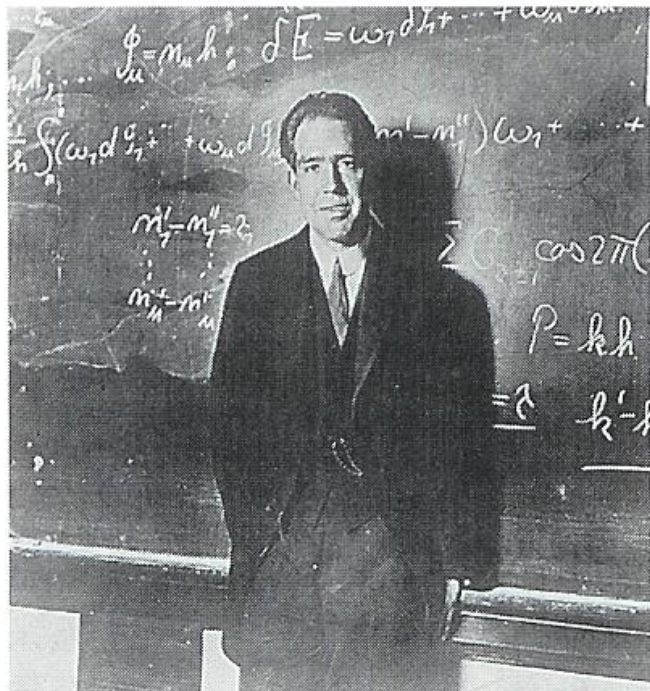
Σύμφωνα με το πυρηνικό πρότυπο του Rutherford, το άτομο αποτελείται από έναν πυρήνα ο οποίος συγκεντρώνει το μεγαλύτερο μέρος της μάζας και όλο το θετικό φορτίο, ενώ γύρω του κινούνται αρκετά ηλεκτρόνια, ώστε να κάνουν το άτομο ηλεκτρικά ουδέτερο.

Εφαρμόζοντας την κλασική θεωρία, ήταν εύκολο να αποδειχθεί ότι ένα ηλεκτρικά φορτισμένο σωματίδιο (όπως είναι το ηλεκτρόνιο) το οποίο περιφέρεται γύρω από ένα κέντρο, θα έχανε διαρκώς ενέργεια υπό μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.

Αυτό θα ανάγκαζε το ηλεκτρόνιο ενός ατόμου, να κινηθεί σπειροειδώς και να πέσει πάνω στον πυρήνα και μάλιστα σε χρόνο 10^{-10} s.

Με ένα τέτοιο λοιπόν ατομικό πρότυπο, η σταθερότητα του ατόμου δεν μπορούσε να εξηγηθεί.

Το ατομικό πρότυπο του Bohr



Niels Bohr (1885-1962)

Πού στήριξε τη θεωρία του ο Bohr;
Ποιες συνθήκες διατύπωσε;

1. Το ηλεκτρόνιο του ατόμου H κινείται σε κυκλικές τροχιές γύρω από τον πυρήνα
2. Συνθήκη για τα επίπεδα ενέργειας του ηλεκτρονίου στο άτομο H

$$E_n = -\frac{k}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \infty$$

k (σταθερά) = $2,179 \times 10^{-18} \text{ J}$

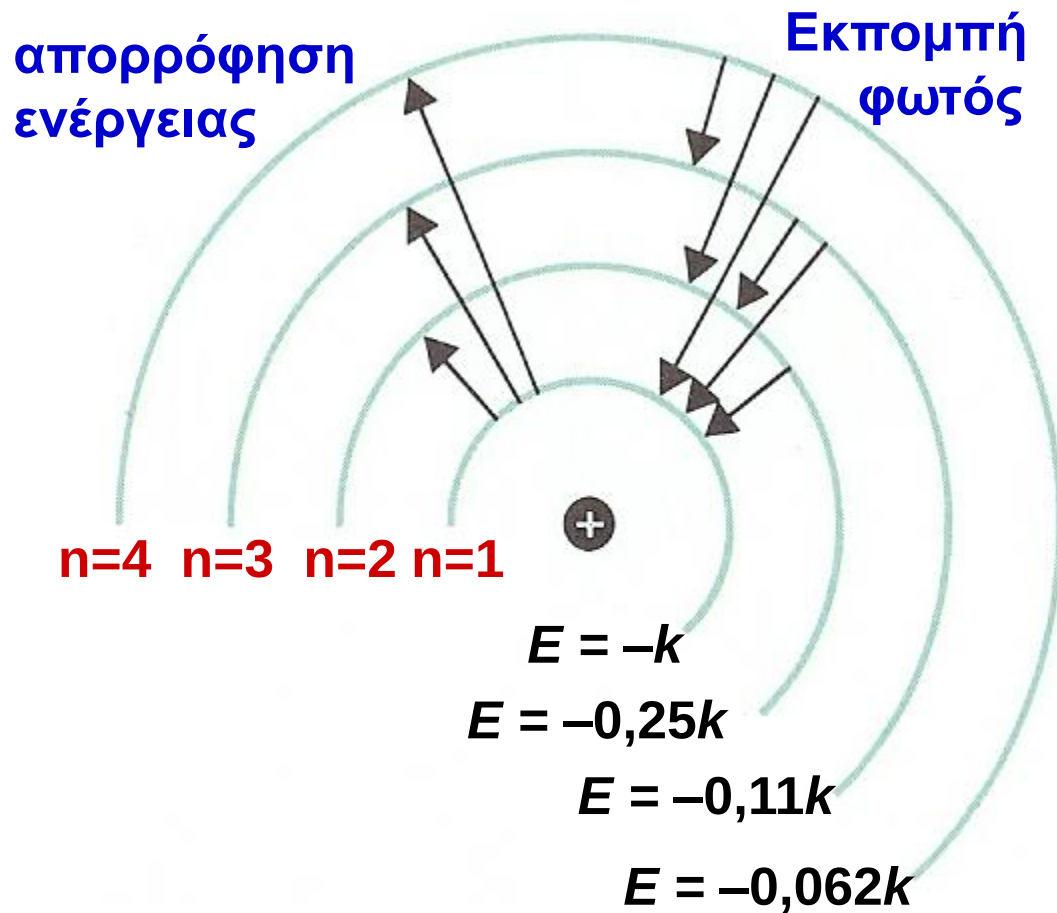
n = κύριος κβαντικός αριθμός

3. Μεταπτώσεις e μεταξύ των επιπέδων ενέργειας στο άτομο H:

Ενέργεια εκπεμπόμενου φωτονίου

$$\Delta E = E_i - E_f = h\nu$$

Το ατομικό πρότυπο του Bohr



Απορρόφηση ενέργειας
και εκπομπή φωτός από
το άτομο H.

Στην τροχιά με $n = 1 \Rightarrow$
θεμελιώδης κατάσταση,
ελάχιστη ενέργεια.

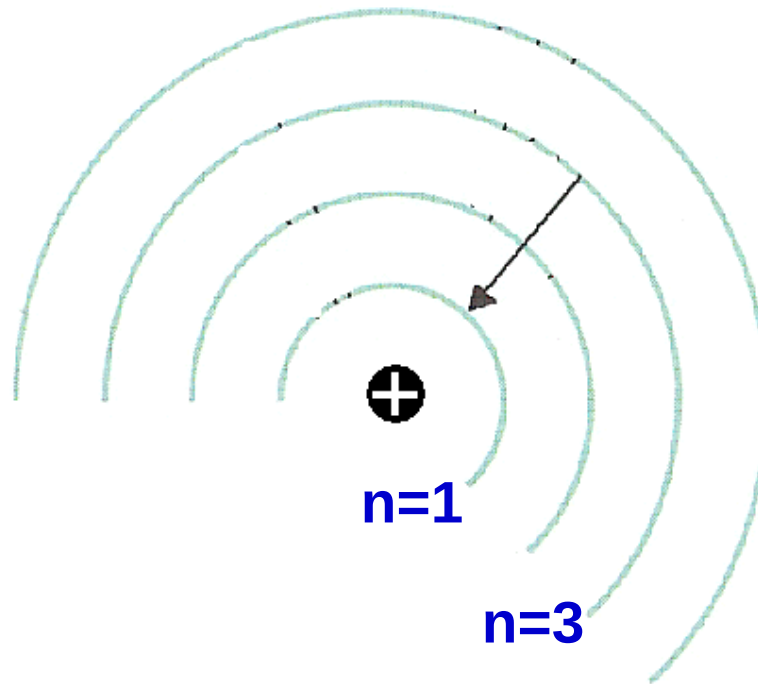
$\alpha_0 = 53 \text{ pm}$ (ακτίνα του
Bohr)

Επιτρεπόμενες τροχιές
(ή ενεργειακά επίπεδα):
ακτίνα τροχιάς: $r_n = n^2 \alpha_0$

Άσκηση 2.4

Υπολογισμός του μήκους κύματος των γραμμών στο φάσμα του ατόμου H

Υπολογίστε το μήκος κύματος του φωτός που εκπέμπεται από το υδρογόνοάτομο, όταν το ηλεκτρόνιο μεταπίπτει από το επίπεδο ενέργειας $n = 3$ στο επίπεδο $n = 1$.



Άσκηση 2.4

$$\Delta E = E_i - E_f = h\nu \quad E_i = -k \ln n_i^2 \quad \text{και} \quad E_f = -k \ln n_f^2$$

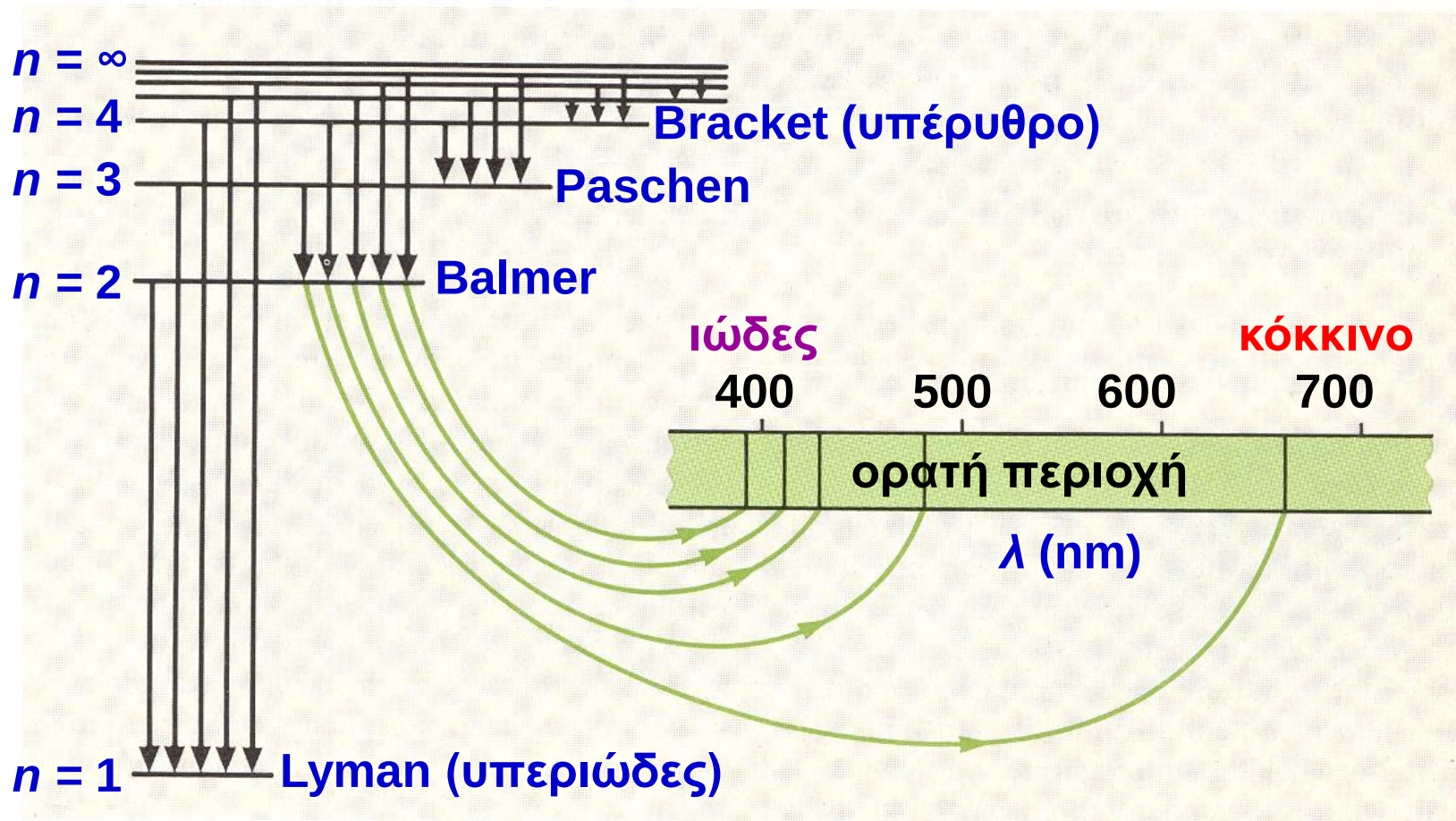
$$n_i = 3 \quad \text{και} \quad n_f = 1 \Rightarrow$$

$$h\nu = E_i - E_f = \left(-\frac{k}{n_i^2} \right) - \left(-\frac{k}{n_f^2} \right) = k \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = \frac{8k}{9} \Rightarrow$$

$$\nu = \frac{8k}{9h} = \frac{8}{9} \times \frac{2,179 \times 10^{-18} \text{ J}}{6,63 \times 10^{-34} \text{ J s}} = 2,92 \times 10^{15} / \text{s}$$

$$\lambda = c/\nu \Rightarrow \lambda = \frac{3,00 \times 10^8 \text{ m/s}}{2,92 \times 10^{15} / \text{s}} = 1,027 \times 10^{-7} \text{ m} \quad (103 \text{ nm})$$

Ερμηνεία του φάσματος του ατόμου H



$$E_n = -\frac{k}{n^2}$$

Για $n = \infty \Rightarrow$ πλήρης απομάκρυνση του e (ιοντισμός)

Άσκηση 2.5

Ερμηνεία του φάσματος του ατόμου H

Μια γραμμή της σειράς Lyman στο φάσμα του υδρογονατόμου έχει μήκος κύματος $9,50 \times 10^{-8} \text{ m}$ και οφείλεται σε μετάπτωση από ένα ανώτερο επίπεδο ενέργειας στο επίπεδο με $n = 1$.

Ποιος είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός του ανώτερου επιπέδου;

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3,00 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}}{9,50 \times 10^{-8} \text{ m}} = 3,16 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

$$\Delta E = h \nu = (6,626 \times 10^{-34} \text{ J s})(3,16 \times 10^{15} \text{ s}) = 2,09 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_f = \frac{-k}{1^2} = \frac{-k}{1} = -k \quad E_i = \frac{-k}{n_i^2}$$

$$\Delta E = E_i - E_f = -\frac{k}{n_i^2} - (-k) \Rightarrow k \left(1 - \frac{1}{n_i^2} \right) = 2,09 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$\Rightarrow 1 - \frac{1}{n_i^2} = \frac{2,09 \times 10^{-18} \text{ J}}{2,179 \times 10^{-18} \text{ J}} = 0,959$$

$$\Rightarrow \frac{1}{n_i^2} = 1 - 0,959 = 0,041 \Rightarrow n_i = \left(\frac{1}{0,041} \right)^{1/2} = 4,94 \simeq 5_{35}$$

Δυϊσμός κύματος-σωματιδίου

Αρχή της αβεβαιότητας

Ποια ήταν τα αναπάντητα ερωτήματα της θεωρίας του Bohr;

1. Φάσματα πολυηλεκτρονικών ατόμων
2. Κυκλικές τροχιές
3. Γιατί η ενέργεια του e είναι κβαντισμένη;



Louis de Broglie: Αν τα κύματα του φωτός μπορούν να συμπεριφέρονται ως υλικά σωματίδια, μήπως και κάποια υλικά σωματίδια, όπως τα ηλεκτρόνια, μπορούν να συμπεριφέρονται ως κύματα;

Εξίσωση de Broglie για το υλικό κύμα:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Άσκηση 2.6

Εφαρμογή της εξίσωσης του de Broglie

Με πόση ταχύτητα πρέπει να κινείται ένα ηλεκτρόνιο για να έχει μήκος κύματος 10,0 pm;

Δίνονται: $m_e = 9,11 \times 10^{-31}$ kg και $h = 6,626 \times 10^{-34}$ J s

Άσκηση 2.6

Εξίσωση de Broglie για το υλικό κύμα:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

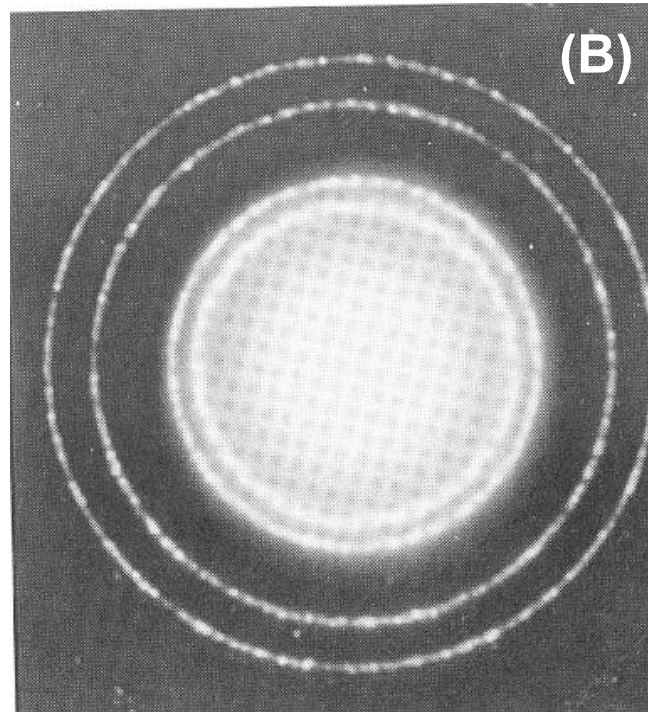
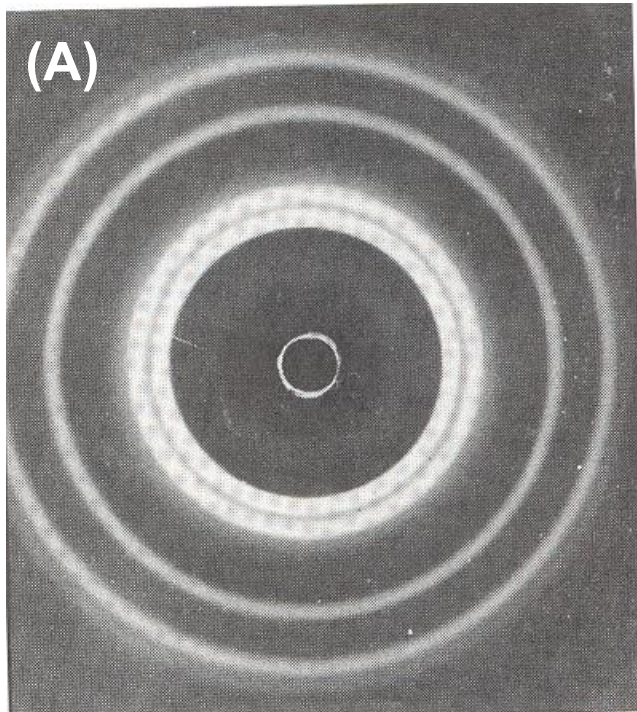
$$10,0 \text{ pm} = 1,00 \times 10^{-11} \text{ m}$$

$$\Rightarrow v = \frac{h}{m\lambda} = \frac{6,626 \times 10^{-34} \text{ kg m}^2/\text{s}}{(9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}) \times (1,00 \times 10^{-11} \text{ m})} = 7,27 \times 10^7 \text{ m/s}$$

Πώς αποδεικνύεται ότι το ηλεκτρόνιο έχει κυματικές ιδιότητες;

Πείραμα Davisson-Germer (περίθλαση e σε κρυστάλλους)

Κατευθύνοντας μια δέσμη ηλεκτρονίων (που είναι σωματίδια) προς έναν κρύσταλλο νικελίου παρατήρησαν στην οθόνη ένα σύνολο ομοκεντρικών δακτυλίων, όμοιο με αυτό που έδιναν οι ακτίνες X , οι οποίες είναι κύματα.



(A) Περίγραμμα
περίθλασης
ακτίνων X σε
φύλλο Al

(B) Περίγραμμα
περίθλασης
ηλεκτρονίων
σε φύλλο Al

Η αρχή της αβεβαιότητας

Πώς μπορεί να είναι ορισμένη η «θέση» ενός κύματος;
Μπορούμε να καθορίσουμε την ακριβή θέση ενός κύματος,
αφού ένα κύμα απλώνεται στο χώρο;



Werner Heisenberg
(1901-1976)

Τι λέει η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg:

Είναι αδύνατο να γνωρίζουμε ταυτόχρονα και με ακρίβεια τη θέση x και την ορμή p ($= mv$) ενός τόσο μικρού σωματιδίου, όπως είναι το ηλεκτρόνιο.

Πώς διατυπώνεται η αρχή της αβεβαιότητας μαθηματικά;

$$(\Delta x)(m\Delta v) \geq \frac{h}{4\pi}$$

$\Delta x, \Delta v$ = αβεβαιότητες ως προς τη θέση και την ταχύτητα, αντίστοιχα

Άσκηση 2.7

Εφαρμογή της αρχής της αβεβαιότητας

Ένα ηλεκτρόνιο κινούμενο στην περιοχή κάποιου ατομικού πυρήνα έχει ταχύτητα $6 \times 10^6 \pm 1\%$ m/s. Πόση είναι η αβεβαιότητα ως προς τη θέση του;

Άσκηση 2.7

$$\Delta v = (6 \times 10^6 \text{ m/s})(0,01) = 6 \times 10^4 \text{ m/s}$$

$$(\Delta x) \geq \frac{h}{4\pi m \Delta v} \geq \frac{6,626 \times 10^{-34} \text{ kg m}^2/\text{s}}{(4 \times 3,14)(9,11 \times 10^{-31} \text{ kg})(6 \times 10^4 \text{ m/s})} \geq 1 \times 10^{-9} \text{ m}$$

Δx ηλεκτρονίου ~ 10 φορές μεγαλύτερη (!!!) από τη διάμετρο του ατόμου (10^{-10} m) $\Rightarrow$ πώς μπορούμε να γνωρίζουμε πού ακριβώς βρίσκεται το e ;

Συγκρίνετε: Το Δx μπάλας του μπέιζ μπολ ($m = 0,146 \text{ kg}$) που κινείται με ταχύτητα $44,7 \pm 1,00\% \text{ m/s}$ είναι $8,08 \times 10^{-31} \text{ m} \Rightarrow$

Δx μηδαμινό (!!!): Ισχύει για όλα τα αντικείμενα του μακρόκοσμου



Εισαγωγή στην κυματομηχανική

Τι ονομάζουμε **Κυματομηχανική** ή **Κβαντομηχανική**;

Ποια εξίσωση ενσωματώνει τον σωματιδιακό και τον κυματικό χαρακτήρα του ηλεκτρονίου;

Η εξίσωση του Schrödinger, μια πολύπλοκη διαφορική εξίσωση η οποία εμπεριέχει τη **μάζα m** του ηλεκτρονίου (σωματιδιακός χαρακτήρας) και μια **κυματική συνάρτηση ψ** (κυματικός χαρακτήρας).

Το ηλεκτρόνιο ως κύμα δεν διαδίδεται στο χώρο (όπως π.χ. ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα) αλλά είναι **στάσιμο**, δηλαδή περιορισμένο στο άτομο.

Ο Schrödinger και η εξίσωσή του

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi$$

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi$$

∇ = τελεστής Laplace

Γνωστά μεγέθη: m και V
Άγνωστα μεγέθη που μπορούν
να προσδιορισθούν:

Ψ και E (ολική ενέργεια e)

Από τις άπειρες λύσεις Ψ ,
μερικές έχουν φυσική σημασία
και θεωρούνται παραδεκτές $\Rightarrow$
ορισμένες οι τιμές της E .

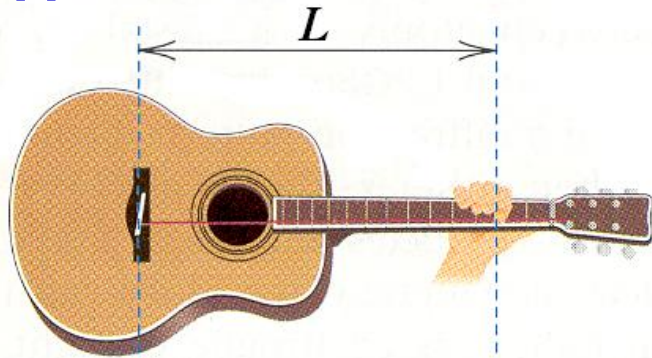


Erwin Schrödinger (1887-1961)

**Ακριβείς λύσεις μόνο για το H
και τα υδρογονοειδή άτομα !!!**

Στάσιμα κύματα

A



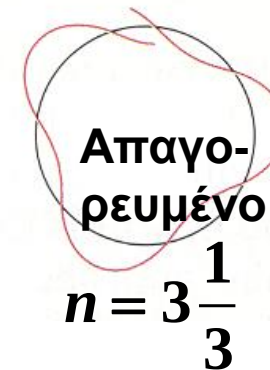
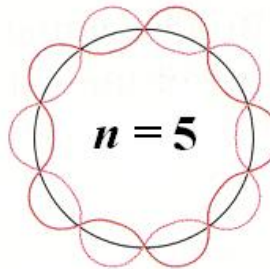
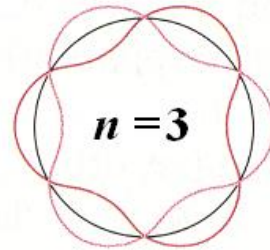
$n = 1$ $L = 1 \left(\frac{\lambda}{2} \right)$
1 μισό μήκος κύματος

$n = 2$ $L = 2 \left(\frac{\lambda}{2} \right)$
2 μισά μήκη κύματος

$n = 3$ $L = 3 \left(\frac{\lambda}{2} \right)$
3 μισά μήκη κύματος

$$L = n \left(\frac{\lambda}{2} \right)$$

B



Στάσιμο κύμα: όταν οι κορυφές και οι κόμβοι δεν αλλάζουν θέση

Κόμβος: σημείο με πλάτος = 0

(Α) Το 'κβάντο' στη δόνηση της χορδής της κιθάρας, είναι το $\lambda/2 \Rightarrow$ επιτρεπτές δονήσεις (στάσιμα κύματα) μόνο όταν το L είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του $\lambda/2$.

(Β) Για ένα ηλεκτρόνιο $\Rightarrow$ στάσιμα κύματα μόνο όταν $2\pi r = n\lambda$

Κυματικές συναρτήσεις

Κιθάρα (παλλόμενη χορδή): οι επιτρεπτές μορφές των στάσιμων κυμάτων περιγράφονται από τη μαθηματική εξίσωση $L = n(\lambda / 2)$.

Άτομο H (ηλεκτρόνιο): οι επιτρεπτές μορφές των στάσιμων ηλεκτρονικών κυμάτων περιγράφονται από την εξίσωση του Schrödinger.

Πώς ονομάζονται οι αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger;

Κυματικές συναρτήσεις ή ατομικά τροχιακά (Ψ).

Ποια σημασία έχει η κυματική συνάρτηση Ψ ;

Η κυματική συνάρτηση Ψ δεν έχει καμία φυσική σημασία!

Το τετράγωνο της κυματικής συνάρτησης, Ψ^2

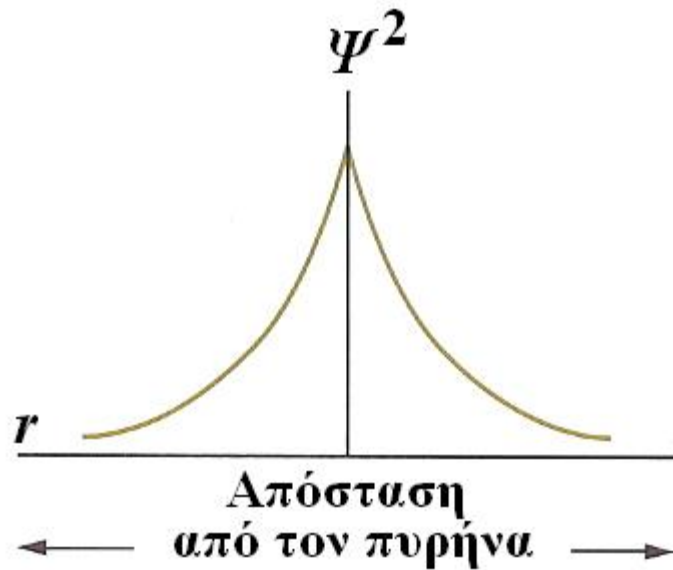
Κυματική θεωρία: Η ένταση του φωτός είναι ανάλογη προς το τετράγωνο του πλάτους του κύματος (Ψ^2).

Ποια φυσική σημασία αποκτά έτσι το Ψ^2 για το ηλεκτρόνιο;

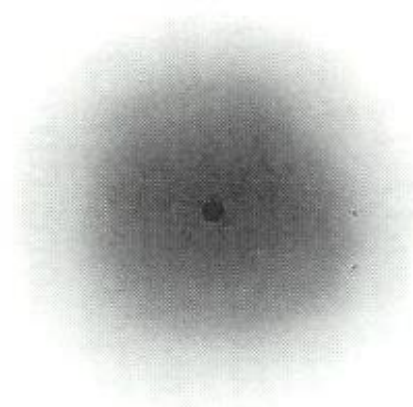
(α) Θεωρώντας το e ως κύμα: το Ψ^2 δίνει την ηλεκτρονική πυκνότητα στα διάφορα σημεία γύρω από τον πυρήνα του ατόμου.

(β) Θεωρώντας το e ως σωματίδιο: το Ψ^2 είναι ανάλογο της πιθανότητας εύρεσης του e σε κάποιο συγκεκριμένο σημείο του ατόμου.

Τρεις τρόποι παρουσίασης του Ψ^2 για το απλούστερο τροχιακό, γνωστό ως 1s



Η ηλεκτρονική πυκνότητα είναι μέγιστη σε σημεία πλησίον του πυρήνα.



Το ηλεκτρονικό νέφος είναι πολύ πυκνό κοντά στον πυρήνα και αραιό μακριά από αυτόν.

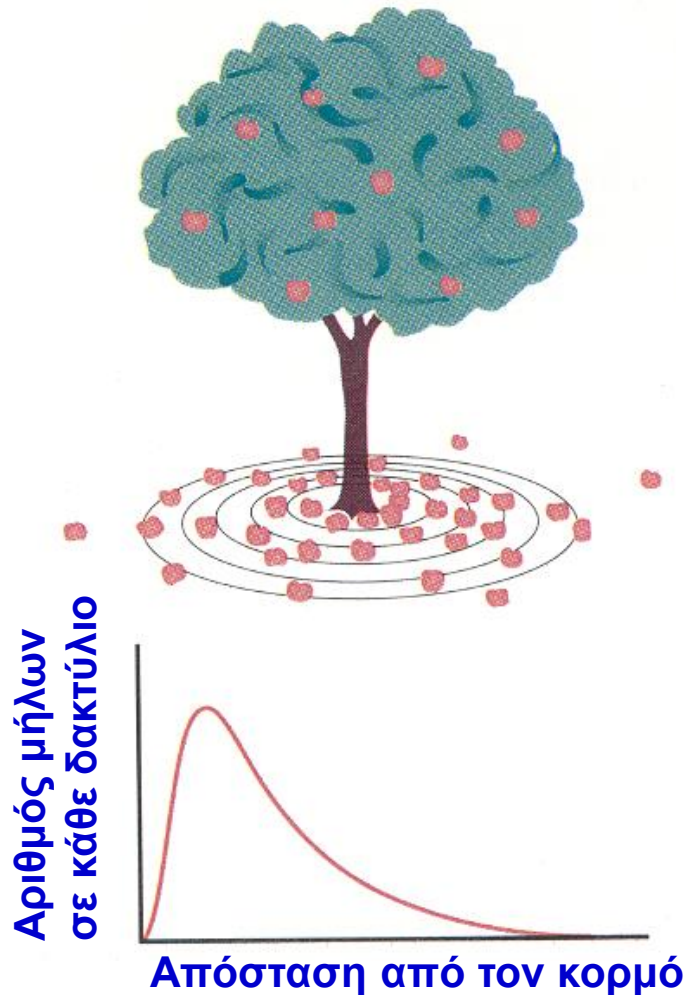


Στο χώρο που περικλείεται από μια οριακή επιφάνεια, η πιθανότητα εύρεσης του e είναι περίπου 90%.

Η ηλεκτρονική πυκνότητα για το 1s τροχιακό είναι μέγιστη στον πυρήνα.

.... Αυτό σημαίνει ότι πιθανόν το ηλεκτρόνιο βρίσκεται **πάνω** στον ίδιο τον πυρήνα;

Η πυκνότητα των μήλων είναι μεν μέγιστη στον πρώτο δακτύλιο, όμως το εμβαδόν του δεύτερου δακτυλίου είναι μεγαλύτερο και έτσι αυτός περιέχει **συνολικά περισσότερα** μήλα.



Σε αναλογία, το ηλεκτρονικό νέφος μπορεί να είναι πυκνότερο στον πυρήνα, όμως το **μεγαλύτερο μέρος** του νέφους βρίσκεται σε κάποια απόσταση από αυτόν.

Κβαντικοί αριθμοί και ατομικά τροχιακά

Οι τρεις από τους κβαντικούς αριθμούς προκύπτουν από τη μαθηματική επίλυση της εξίσωσης του Schrödinger.

Ένας τέταρτος κβαντικός αριθμός (ο m_s) αναφέρεται σε μια μαγνητική ιδιότητα των ηλεκτρονίων που λέγεται spin.

Πώς χαρακτηρίζονται οι τρεις πρώτοι κβαντικοί αριθμοί;

Κύριος κβαντικός αριθμός (n)

Δευτερεύων (ή αζιμουθιακός) κβαντικός αριθμός (ℓ)

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_ℓ

Ποια είναι η σημασία των κβαντικών αριθμών;

1. Κύριος κβαντικός αριθμός (n)

Επιτρεπτές τιμές: 1, 2, 3, ... – ∞

Καθορίζει την **ενέργεια** του e και το **μέγεθος** του τροχιακού.

Φλοιός ή στιβάδα: τροχιακά με τον ίδιο n .

2. Δευτερεύων (ή αζιμουθιακός) κβαντικός αριθμός (ℓ)

Επιτρεπτές τιμές: 0, 1, 2, ... – ($n - 1$)

Καθορίζει το **σχήμα** του τροχιακού.

Υποφλοιός (ή υποστιβάδα): τροχιακά με τον ίδιο ℓ .

Χαρακτηρισμός υποφλοιών:

τιμή του ℓ	0, 1, 2, 3, 4, 5, ...
-----------------	-----------------------

χαρακτηρισμός υποφλοιού	$s, p, d, f, g, h, \dots$
-------------------------	---------------------------

3. Μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_ℓ

Επιτρεπτές τιμές: από $-\ell$ έως $+\ell$

Καθορίζει τον **προσανατολισμό** του τροχιακού στο χώρο.

Επιτρεπτές τιμές κβαντικών αριθμών και ατομικά τροχιακά

n	ℓ	Υποφλοιός	m_ℓ	Αριθμός τροχιακών σε έναν υποφλοιό	Συνολικός αριθμός τροχιακών σε έναν φλοιό
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	
2	1	2p	-1, 0, +1	3	4
3	0	3s	0	1	
3	1	3p	-1, 0, +1	3	
3	2	3d	-2, -1, 0, +1, +2	5	9
4	0	4s	0	1	
4	1	4p	-1, 0, +1	3	
4	2	4d	-2, -1, 0, +1, +2	5	
4	3	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7	16

Άσκηση 2.8

Σχέση μεταξύ των τιμών των κβαντικών αριθμών

Εξακριβώστε ποιες από τις παρακάτω τριάδες κβαντικών αριθμών θα ήταν επιτρεπτές και ποιες όχι για ένα ηλεκτρόνιο ατόμου.

(α) $n = 0, \ell = 0, m_{\ell} = 0$

(β) $n = 1, \ell = 1, m_{\ell} = 0$

(γ) $n = 1, \ell = 0, m_{\ell} = 0$

(δ) $n = 2, \ell = 1, m_{\ell} = -1$

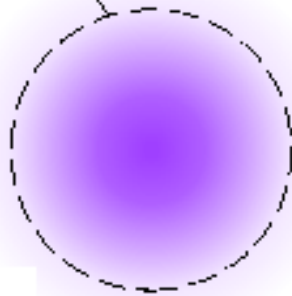
Άσκηση 2.8

- (α) Μη επιτρεπτή (ο n δεν παίρνει ποτέ την τιμή 0)
- (β) Μη επιτρεπτή (ο ℓ δεν γίνεται ποτέ ίσος με τον n)
- (γ) Επιτρεπτή
- (δ) Επιτρεπτή

Τα σχήματα των ατομικών τροχιακών

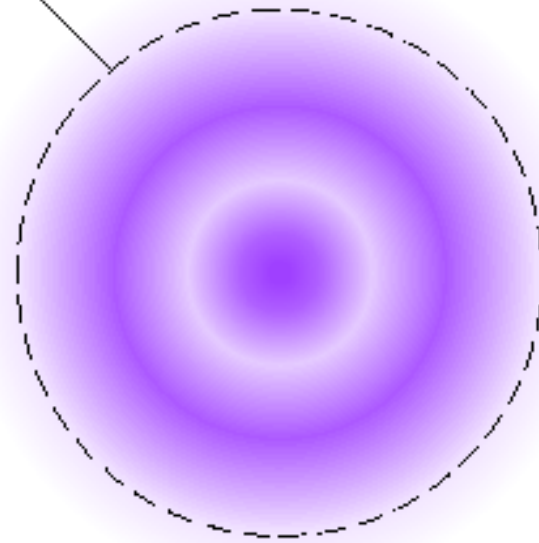
Διατομές της κατανομής ηλεκτρονικής πιθανότητας για s τροχιακά

Περίγραμμα 99%



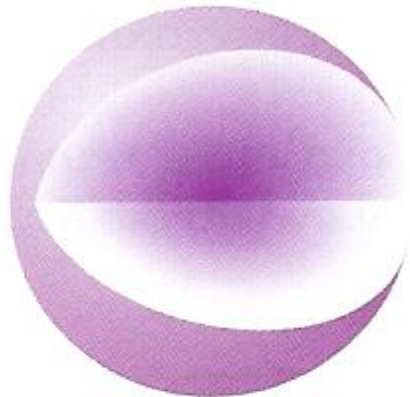
τροχιακό 1s

Περίγραμμα 99%

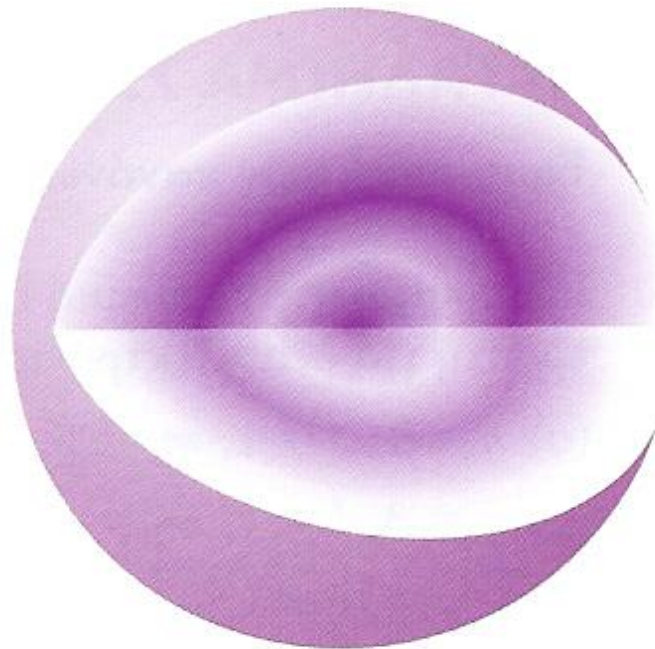


τροχιακό 2s

Διαγράμματα αποκοπής που δείχνουν το σφαιρικό σχήμα των τροχιακών s



τροχιακό $1s$

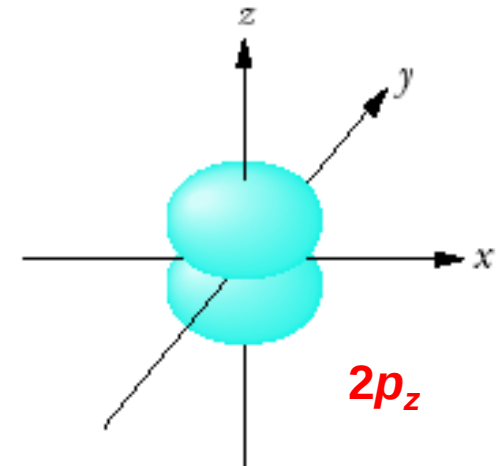
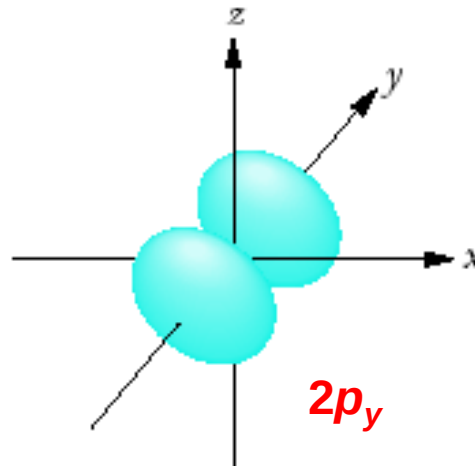
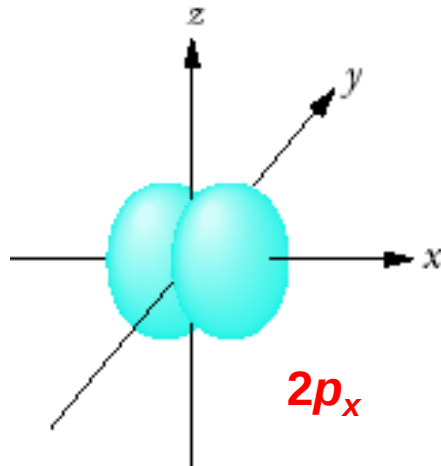
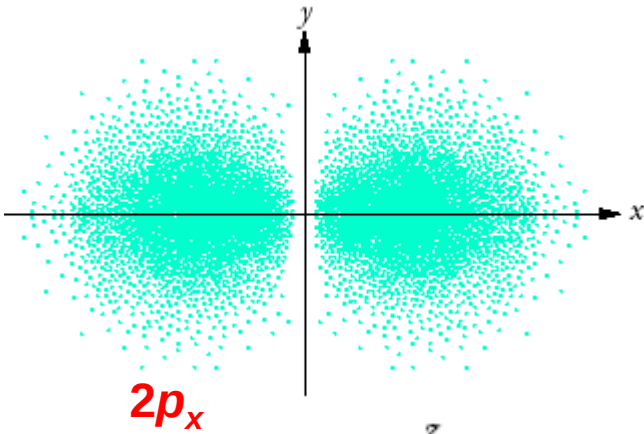


τροχιακό $2s$

Τα τροχιακά $2p$

(A) Ηλεκτρονική κατανομή στο τροχιακό $2p_x$

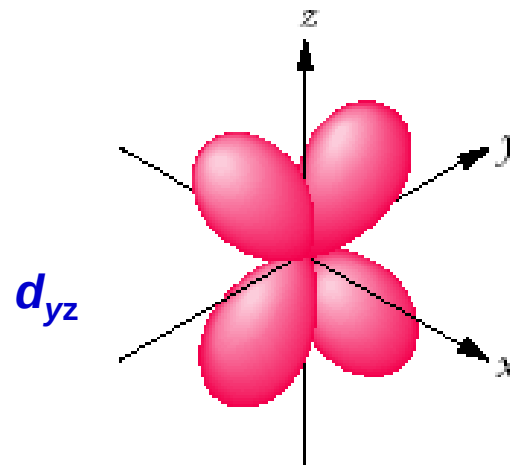
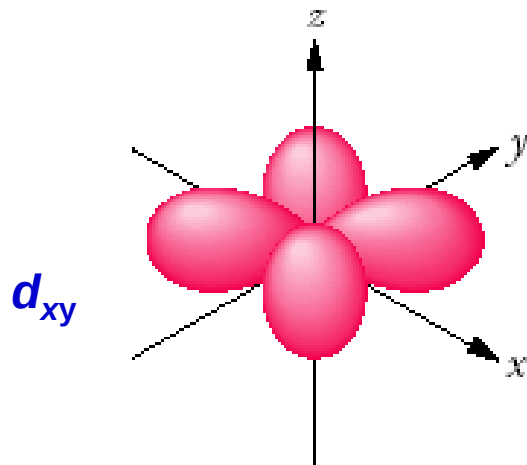
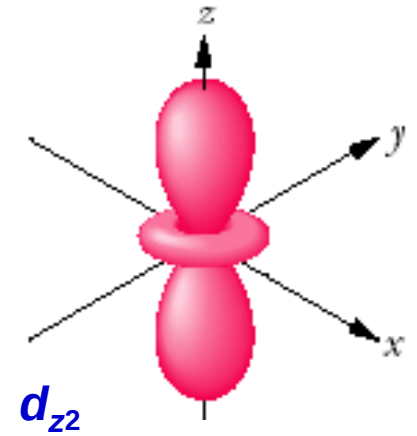
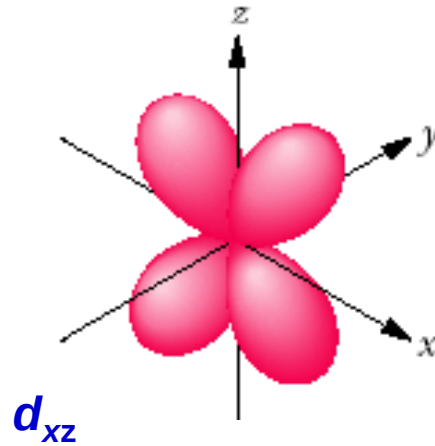
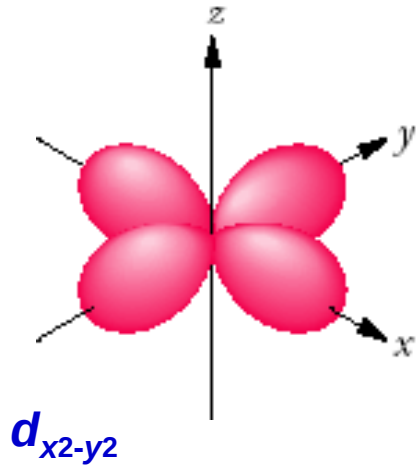
Η κατανομή αυτή αποτελείται από δύο λοβούς προσανατολισμένους κατά μήκος του άξονα x .



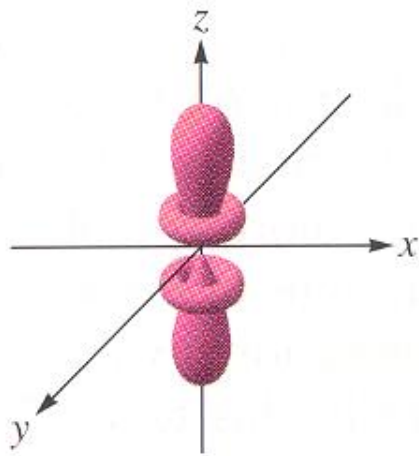
(B) Προσανατολισμοί των τριών τροχιακών $2p$

Τα σχήματα δίνουν τη γενική εικόνα και τον προσανατολισμό των τροχιακών, όχι όμως τη λεπτομερή ηλεκτρονική κατανομή που δίνει το (A).

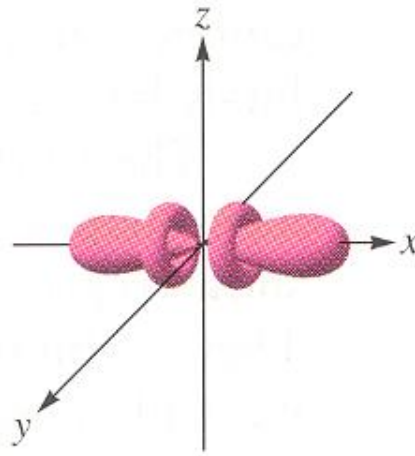
Τα πέντε τροχιακά 3d



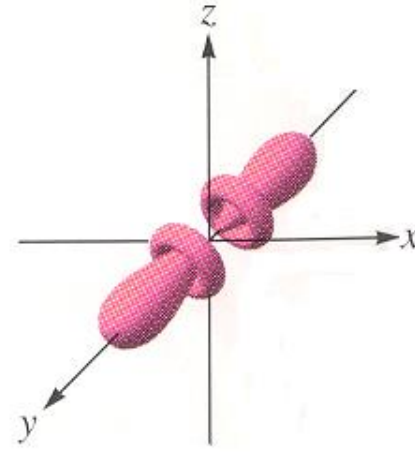
Τα επτά τροχιακά $4f$



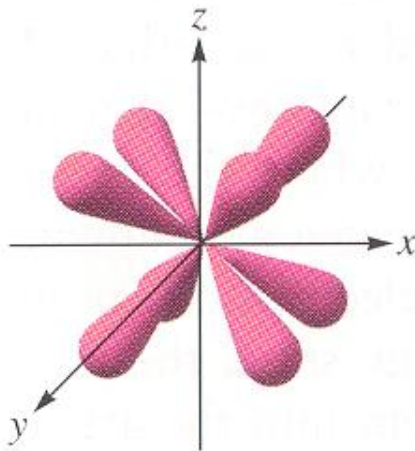
$$f_{z^3 - \frac{3}{5}zr^2}$$



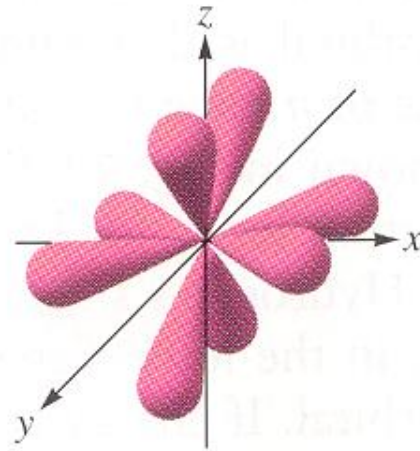
$$f_{x^3 - \frac{3}{5}xr^2}$$



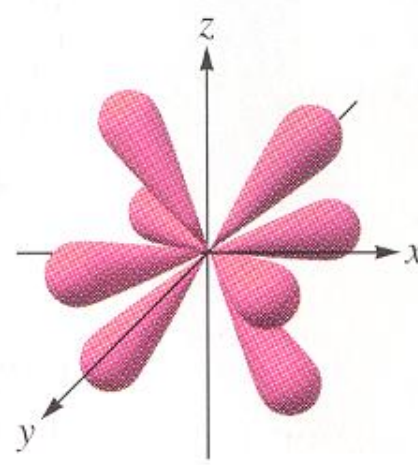
$$f_{y^3 - \frac{3}{5}yr^2}$$



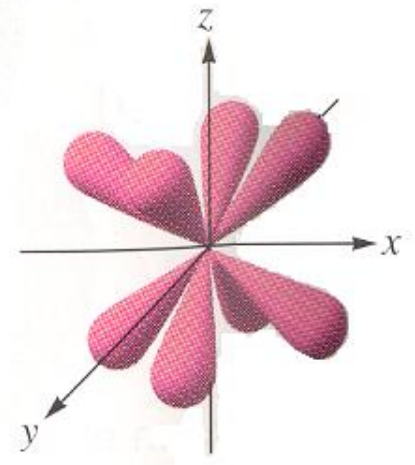
$$f_{xyz}$$



$$f_{y(x^2 - z^2)}$$



$$f_{x(z^2 - y^2)}$$



$$f_{z(x^2 - y^2)}$$

Ο τέταρτος κβαντικός αριθμός

Υπάρχει όμως και ένας τέταρτος κβαντικός αριθμός, ο m_s , ο κβαντικός αριθμός του spin του ηλεκτρονίου.

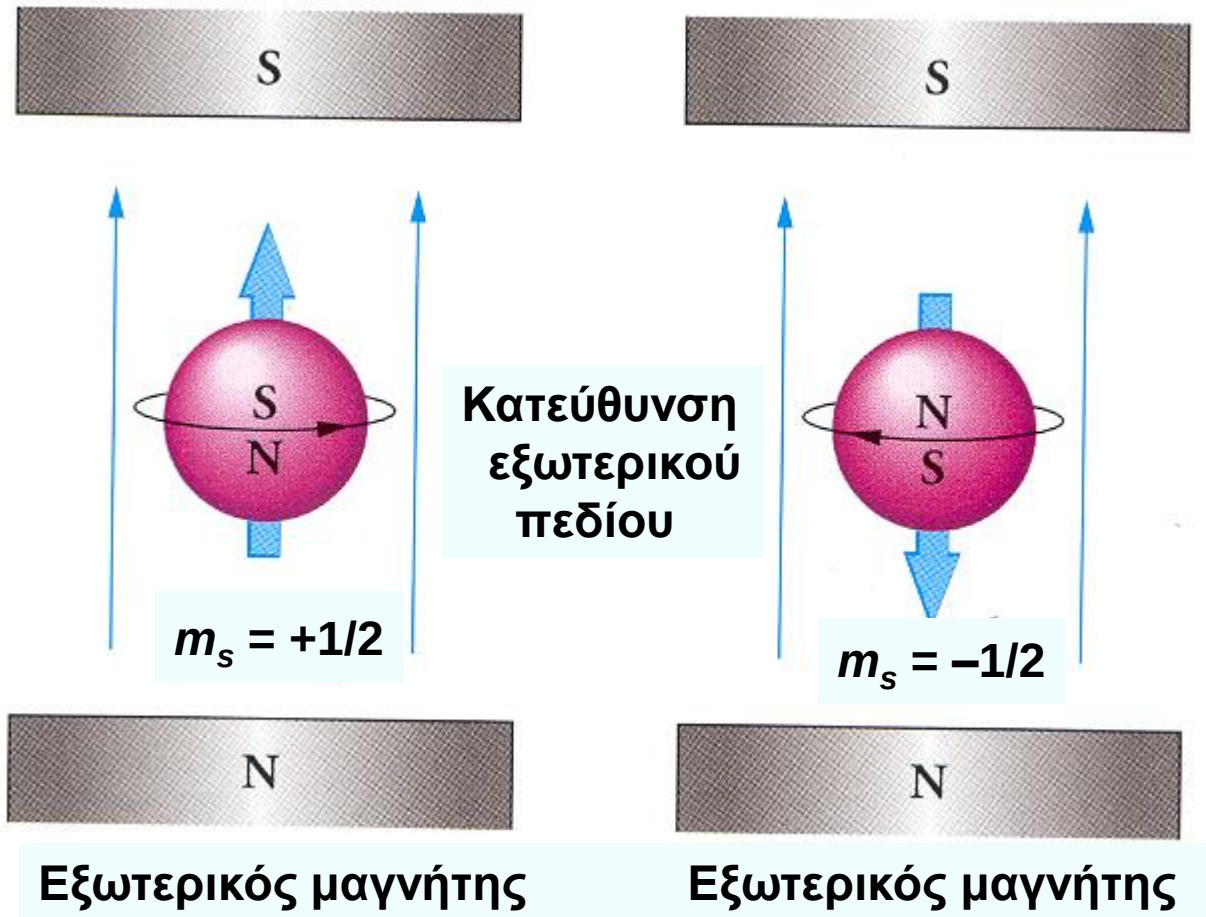
Πειράματα με τα φάσματα εκπομπής ατόμων υδρογόνου και νατρίου έδειξαν ότι οι γραμμές αυτών των φασμάτων μπορούσαν να υποστούν σχάση, δηλαδή μία γραμμή να χωριστεί σε δύο, με εφαρμογή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.

Εξήγηση: Το ηλεκτρόνιο, ως σωματίδιο, συμπεριφέρεται όπως μία φορτισμένη σφαίρα, η οποία περιστρέφεται γύρω από έναν άξονα που διέρχεται από το κέντρο της.

Λόγω αυτής της αυτοστροφής, η οποία ονομάζεται spin του ηλεκτρονίου, παράγεται ένα μαγνητικό πεδίο.

Έτσι το ηλεκτρόνιο συμπεριφέρεται ως ένας μικροσκοπικός μαγνήτης.

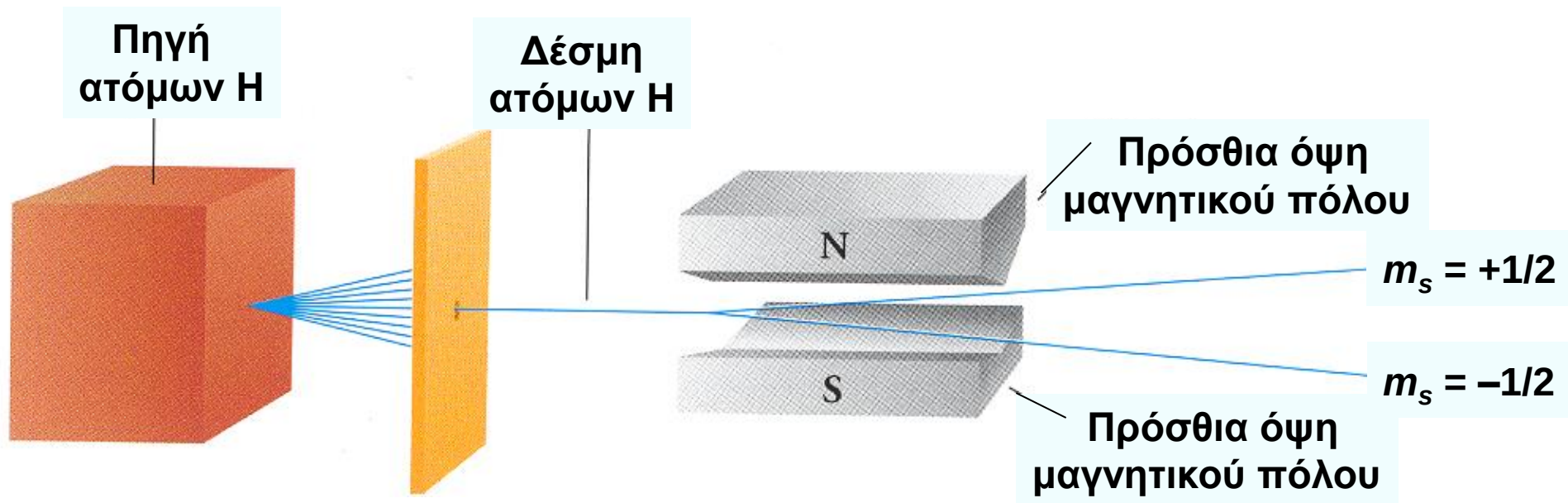
Πώς ερμηνεύεται το spin του ηλεκτρονίου



Λόγω αυτοστροφής (spin) του e παράγεται ένα μαγνητικό πεδίο, η κατεύθυνση του οποίου εξαρτάται από τη φορά του spin (δεξιόστροφο ή αριστερόστροφο).

Συμβατικά, το δεξιόστροφο spin χαρακτηρίζεται από τον **μαγνητικό κβαντικό αριθμό του spin $+1/2$** , ενώ το αριστερόστροφο spin από τον **μαγνητικό κβαντικό αριθμό του spin $-1/2$** .

Το πείραμα των Stern-Gerlach (Η ανακάλυψη του spin του ηλεκτρονίου)



Εδώ, για απλούστευση της θεωρητικής ερμηνείας, χρησιμοποιούνται άτομα υδρογόνου, αντί των ατόμων αργύρου με τα οποία πραγματοποιήθηκε το αρχικό πείραμα. Μια δέσμη ατόμων υδρογόνου σχάζεται σε δύο από ένα ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο.

Η μία δέσμη αποτελείται από άτομα, καθένα από τα οποία έχει ένα ηλεκτρόνιο με $m_s = +1/2$ και η άλλη δέσμη από άτομα, καθένα από τα οποία έχει ένα ηλεκτρόνιο με $m_s = -1/2$.

Άσκηση 2.9

Συσχέτιση χαρακτηρισμού τροχιακών με κβαντικούς αριθμούς

(α) Πώς χαρακτηρίζεται το τροχιακό με τους κβαντικούς αριθμούς $n = 4$, $\ell = 2$ και $m_\ell = 0$;

(β) Ποιοι είναι οι τρεις κβαντικοί αριθμοί που αντιστοιχούν σε ένα τροχιακό $5p$;

(γ) Πόσα τροχιακά έχουν τις τιμές $n = 5$ και $\ell = 2$;

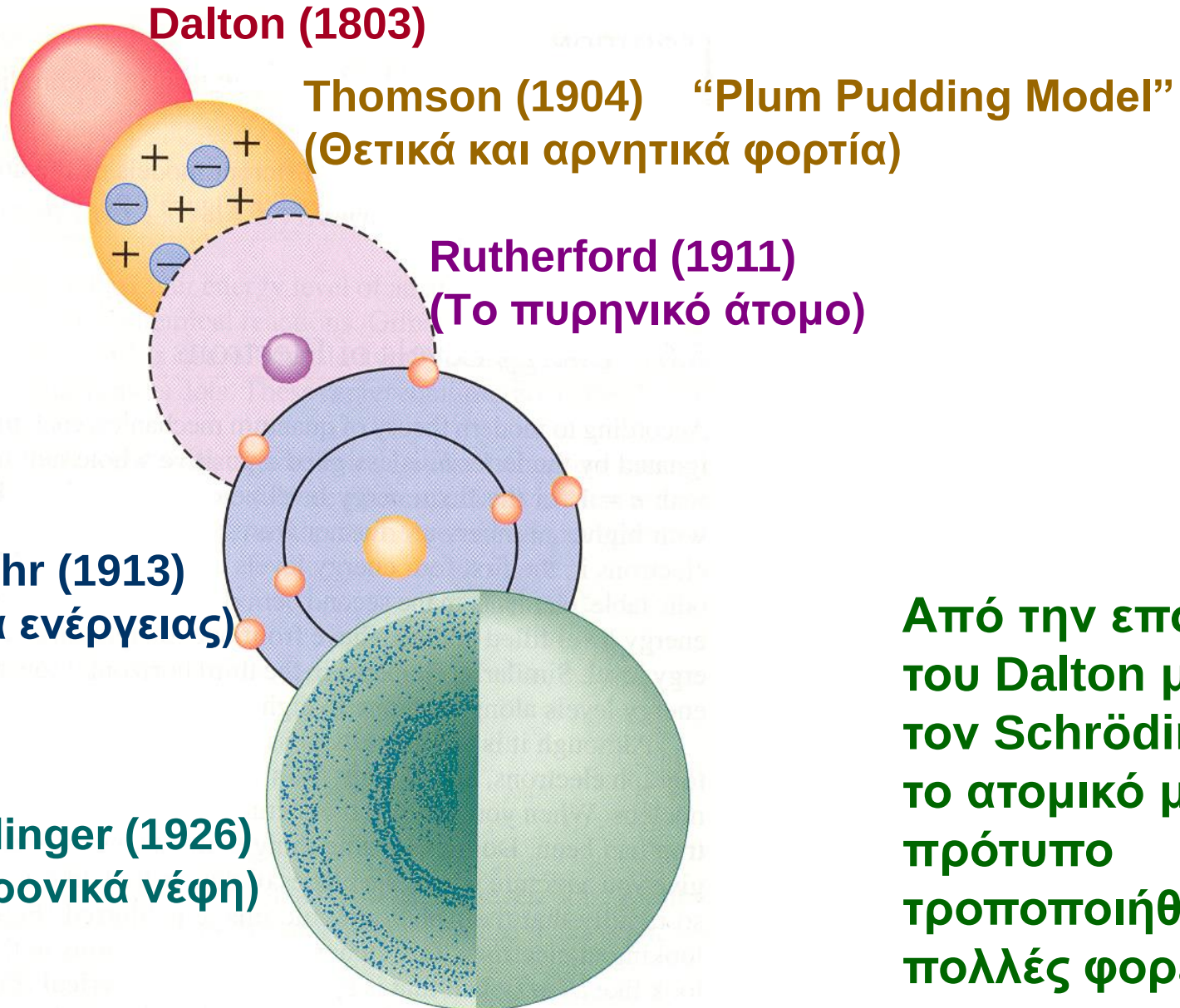
Άσκηση 2.9

(α) $\ell = 2 \Rightarrow d$ τροχιακό $n = 4 \Rightarrow 4d$ τροχιακό

(β) $5p \Rightarrow n = 5, p \Rightarrow \ell = 1 \Rightarrow m_\ell = +1 \text{ ή } 0 \text{ ή } -1$

(γ) Για $\ell = 2 \Rightarrow m_\ell = +2, +1, 0, -1, -2 \Rightarrow 5$ τροχιακά

...Η πορεία του ατομικού προτύπου



Από την εποχή του Dalton μέχρι τον Schrödinger, το ατομικό μας πρότυπο τροποποιήθηκε πολλές φορές.⁶⁵

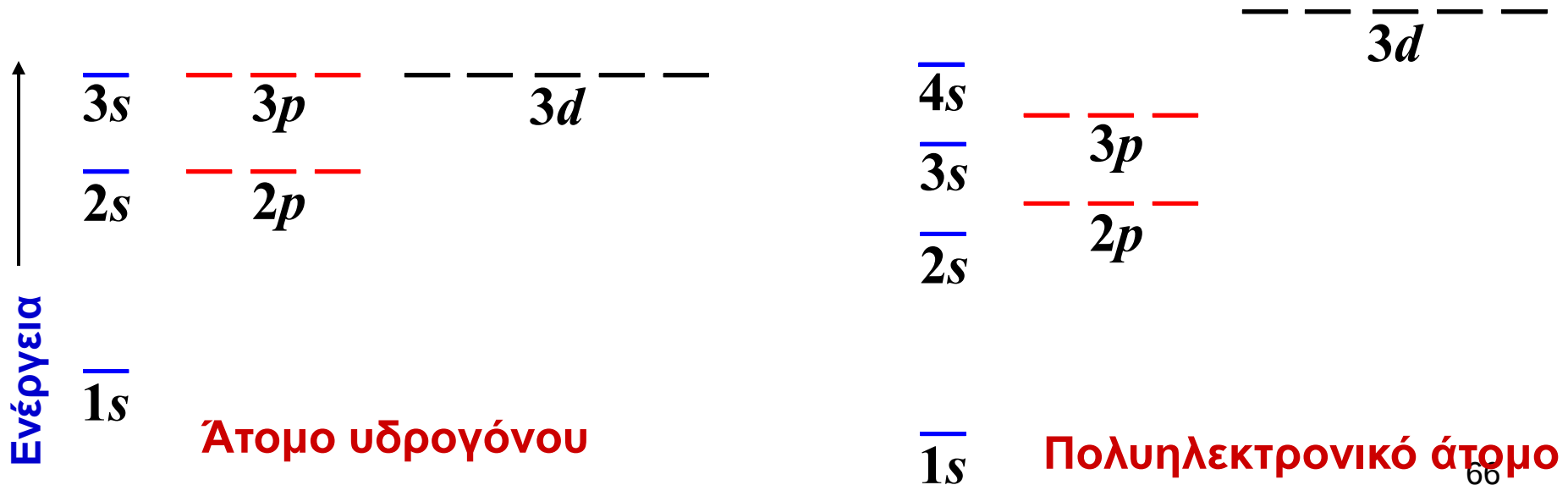
Πολυηλεκτρονικά άτομα

Πώς αυξάνονται οι ενέργειες των τροχιακών στο άτομο H;

Η ενέργεια του ηλεκτρονίου στο άτομο H εξαρτάται μόνο από τον $n \Rightarrow 1s < 2s = 2p < 3s = 3p = 3d$ (τροχιακά ενεργειακώς εκφυλισμένα)

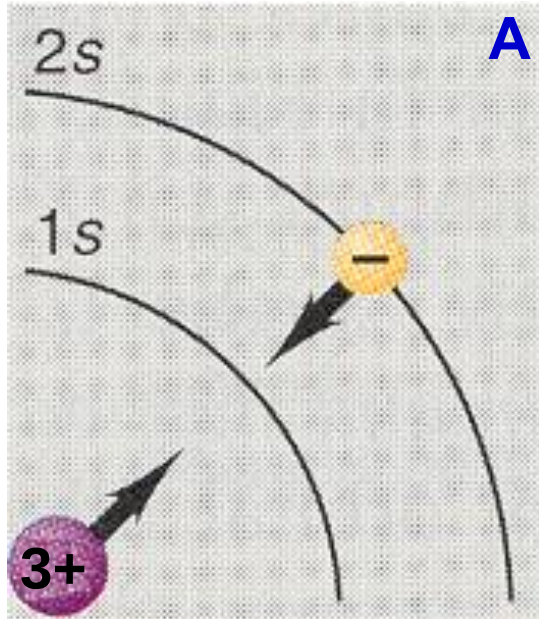
Τι ισχύει για τα πολυηλεκτρονικά άτομα;

Εδώ η ενέργεια ενός ηλεκτρονίου εξαρτάται όχι μόνο από τον n , αλλά και από τον $\ell \Rightarrow$ διαχωρισμός των επιπέδων ενέργειας των υποφλοιών καθενός φλοιού = άρση εκφυλισμού (π.χ. $3s < 3p < 3d$)

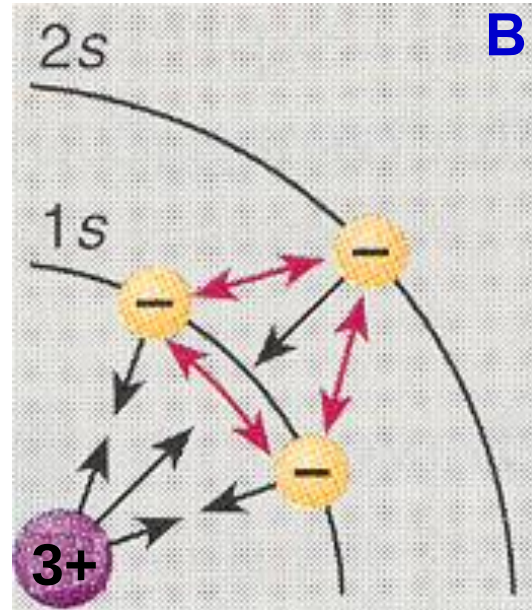


Δραστικό πυρηνικό φορτίο και ενέργειες τροχιακών

Τι ονομάζουμε φαινόμενο θωράκισης ή προάσπισης;



A. Το μοναδικό e του Li^{2+} «αισθάνεται» επάνω του **όλη** την έλξη του φορτίου +3 του πυρήνα.



B. Τα δύο e 1s που παρεμβάλλονται μεταξύ πυρήνα και e 2s στο άτομο Li μειώνουν αισθητά την ελκτική δράση του πυρηνικού φορτίου πάνω στο 2s e.

Το **καθαρό** πυρηνικό φορτίο που έλκει τελικά ένα

προστατευμένο ή θωρακισμένο e (όπως το 2s) ονομάζεται **δραστικό πυρηνικό φορτίο (Z_{eff})**.

Δραστικό πυρηνικό φορτίο και ενέργειες τροχιακών

Από πού εξαρτάται η αποτελεσματικότητα της θωράκισης ενός e ;

... Από τον τύπο του τροχιακού στο οποίο βρίσκεται το συγκεκριμένο e .

Πυκνότητα ηλεκτρονικού φορτίου πλησίον του πυρήνα:

$$2s > 2p, \quad 3s > 3p > 3d$$

⇒ ένα e $2s$ έλκεται από τον πυρήνα ισχυρότερα από ό,τι ένα e $2p$ (ή, επάνω στο $2s$ δρα ένα ισχυρότερο Z_{eff} από ό,τι στο $2p$)

Για ένα e τύπου s , είναι $\ell = 0$ και για ένα e τύπου p , είναι $\ell = 1 \Rightarrow$ σε ένα πολυηλεκτρονικό άτομο και για δεδομένο n , το Z_{eff} αυξάνεται καθώς η τιμή του ℓ ελαττώνεται.

Όταν το Z_{eff} αυξάνεται, η ενέργεια ενός τροχιακού ελαττώνεται (σταθεροποίηση) και αντιστρόφως $\Rightarrow$

Σε ένα πολυηλεκτρονικό άτομο και για δεδομένο n , η ενέργεια ενός τροχιακού αυξάνεται, καθώς η τιμή του ℓ αυξάνεται.

Ηλεκτρονικές διατάξεις

Ηλεκτρονική διάταξη (ή αλλιώς ηλεκτρονική δομή ή ηλεκτρονική διαμόρφωση): μια συγκεκριμένη κατανομή των e στους υποφλοιούς των ατόμων

Γιατί πρέπει να γνωρίζουμε τις ηλεκτρονικές διατάξεις των ατόμων;

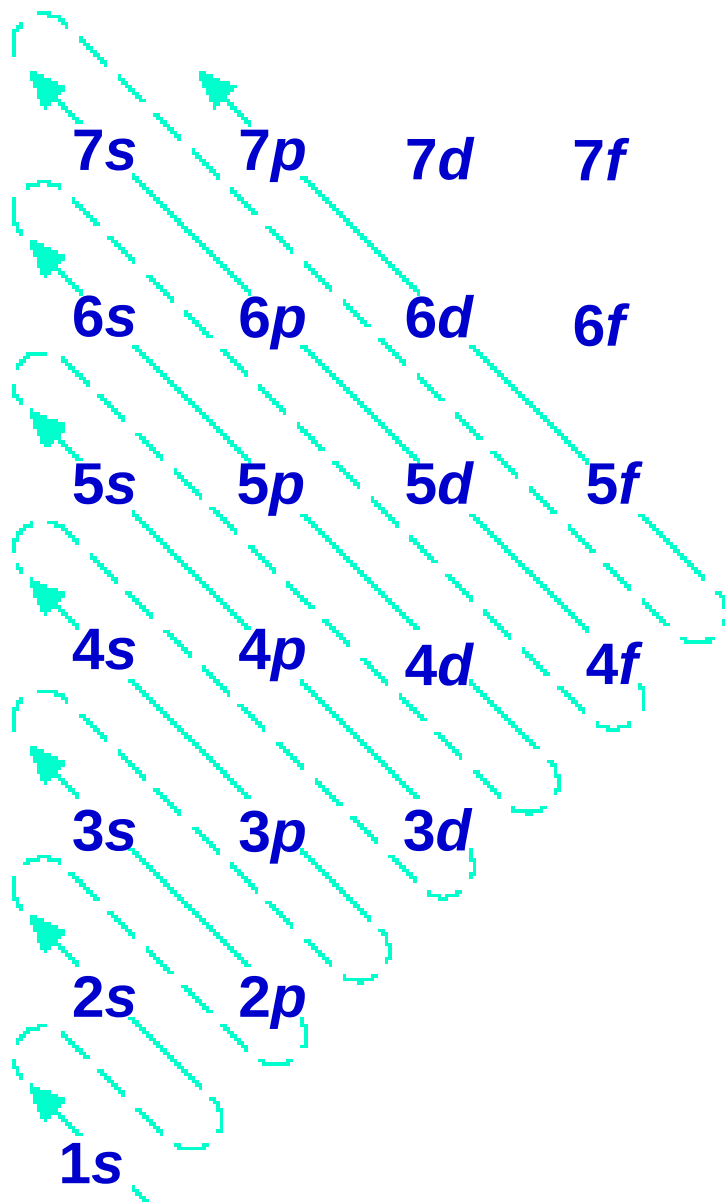
Ποιους κανόνες πρέπει να γνωρίζουμε για την αναγραφή της ηλεκτρονικής διάταξης ενός ατόμου;

Τι λέει η αρχή της ελάχιστης ενέργειας;

Η σειρά κατάληψης των τροχιακών βάσει φασματοσκοπικών και μαγνητικών ερευνών:

$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p$

Μνημονικό διάγραμμα για τη σειρά δόμησης



(α) Γράφουμε τους υποφλοιούς σε οριζόντιες σειρές, με κάθε σειρά να έχει υποφλοιούς του ίδιου n .

(β) Μέσα σε κάθε σειρά τοποθετούμε τους υποφλοιούς κατά αυξανόμενο ℓ .

(γ) Ξεκινώντας με τον υποφλοιό $1s$, κατασκευάζουμε μια σειρά διαγωνίων, όπως δείχνει το σχήμα.

(δ) Η σειρά δόμησης είναι η σειρά κατά την οποία αυτές οι διαγώνιες συναντούν τους υποφλοιούς.

Η απαγορευτική αρχή του Pauli

1. Ποια αρχή διατύπωσε ο Pauli, προκειμένου να εξηγήσει τα φάσματα εκπομπής πολυηλεκτρονικών ατόμων εντός μαγνητικού πεδίου;

Δύο ηλεκτρόνια σε ένα άτομο δεν μπορούν να έχουν και τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς ίδιους. (Απαγορευτική αρχή του Pauli)

2. Ποια είναι η σημαντικότερη συνέπεια της παραπάνω αρχής;

Επειδή οι δυνατές τιμές του m_s είναι δύο ($+1/2$ και $-1/2$), ένα τροχιακό μπορεί να χωρέσει το πολύ δύο ηλεκτρόνια, τα οποία όμως θα πρέπει να έχουν αντίθετα spin

Η απαγορευτική αρχή του Pauli

3. Ποιο συμπέρασμα συνάγεται, ως προς τη χωρητικότητα των υποφλοιών με ηλεκτρόνια, από μια τέτοια διατύπωση;

Ο μέγιστος αριθμός των e που μπορεί να χωρέσει ένας υποφλοιός είναι διπλάσιος από τον αριθμό των τροχιακών που διαθέτει $\Rightarrow$

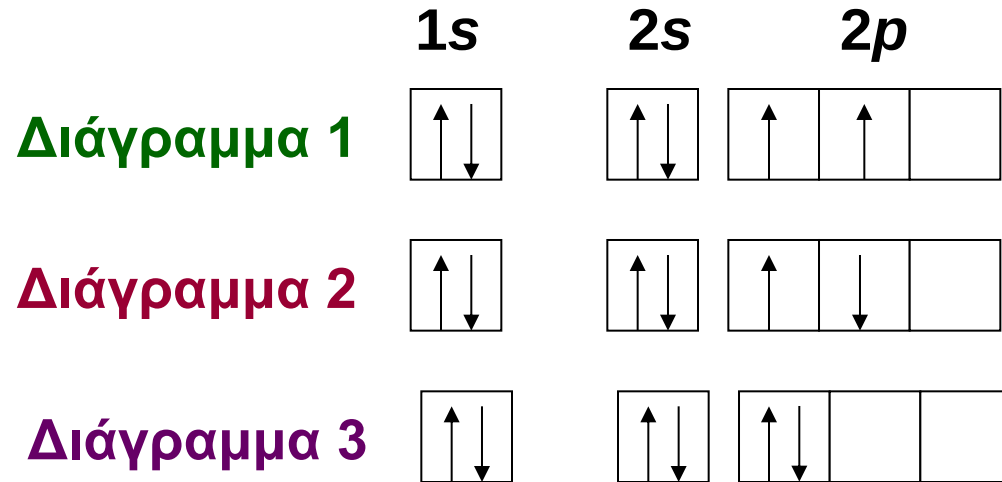
Υποφλοιός	Αριθμός τροχιακών	Μέγιστος αριθμός e
$s (\ell = 0)$	1	2
$p (\ell = 1)$	3	6
$d (\ell = 2)$	5	10
$f (\ell = 3)$	7	14

Ο κανόνας του Hund (ή της μέγιστης πολλαπλότητας του spin)

Ποιον εμπειρικό κανόνα διατύπωσε ο Hund (1927), βάσει του οποίου λαμβάνουμε την ενεργειακά χαμηλότερη διάταξη των ηλεκτρονίων ενός υποφλοιού;

Όταν ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας, σταθερότερη είναι εκείνη η ηλεκτρονική διάταξη που δίνει το μέγιστο συνολικό spin.

Για το άτομο C ($Z = 6$), με δομή θεμελιώδους κατάστασης $1s^2 2s^2 2p^2$, ποιο διάγραμμα εκφράζει τη σταθερότερη κατάσταση του ατόμου C;



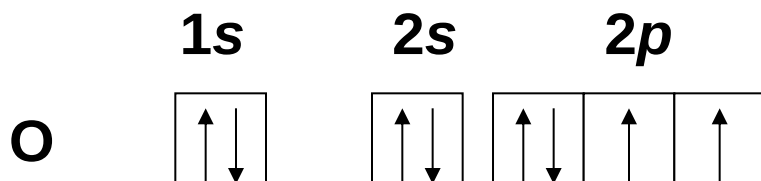
Συμβολισμοί ηλεκτρονικών διατάξεων

Με ποιους τρόπους μπορούμε να συμβολίσουμε την ηλεκτρονική διάταξη ενός ατόμου (π.χ. του Ο);

1. Συμβολισμός *spdf* συμπυκνωμένος: Ο $1s^2 2s^2 2p^4$

2. Συμβολισμός *spdf* εκτενής: Ο $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$

3. Συμβολισμός με διαγράμματα τροχιακών:



Ποια είναι τα «συν» και τα «πλην» του κάθε συμβολισμού;

Ποια ηλεκτρόνια ονομάζουμε συζευγμένα και ποια ασύζευκτα ή μονήρη;

Η αρχή της δομήσεως

Τι είναι η αρχή της δομήσεως;

Είναι μια υποθετική μέθοδος που μας βοηθά να τοποθετήσουμε σωστά τα ηλεκτρόνια ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου και να σχηματίσουμε έτσι την ηλεκτρονική δομή του ατόμου.

Η αρχή της δομήσεως αποτελεί συνδυασμό της αρχής της ελάχιστης ενέργειας, της απαγορευτικής αρχής του Pauli και του κανόνα του Hund.

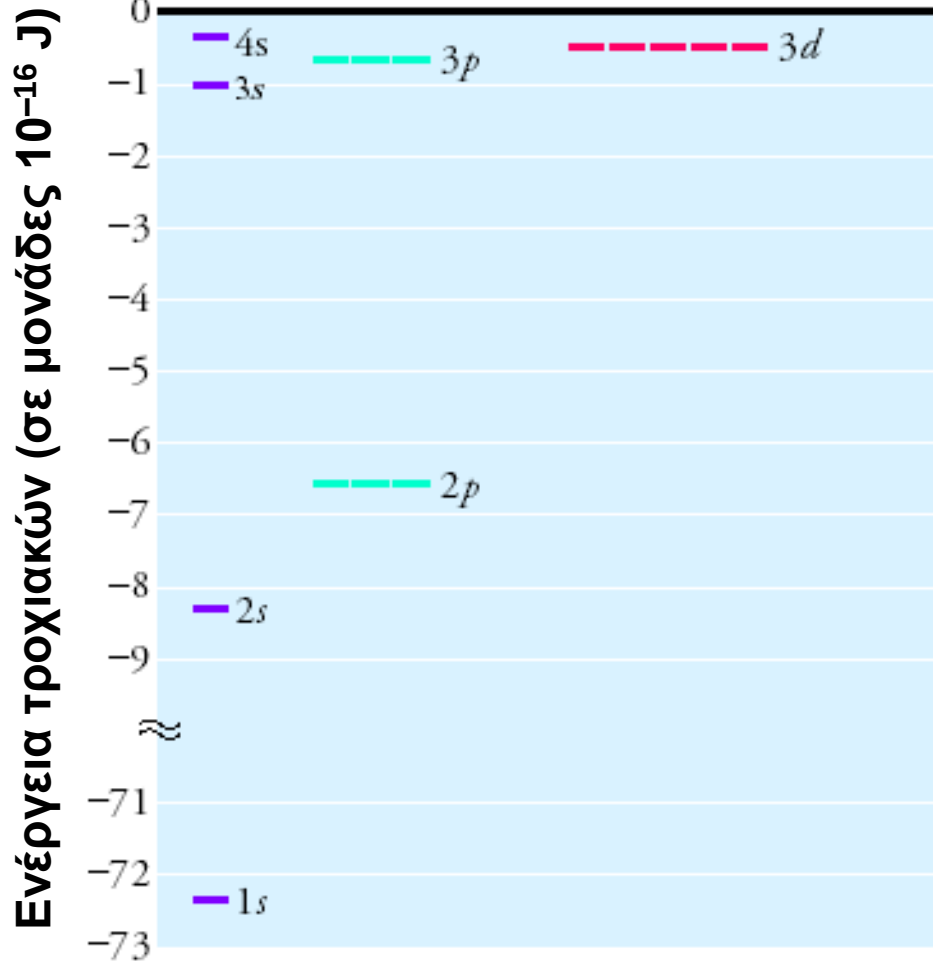
Γνωρίζοντας την αρχή της δομήσεως, πώς θα σχηματίσω την ηλεκτρονική δομή ενός στοιχείου;

Ενεργειακό διάγραμμα τροχιακών ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου

Αρχίζουμε με το H ($Z = 1$) και συνεχίζουμε με τα επόμενα στοιχεία συμπληρώνοντας σταδιακά τους υποφλοιούς με e^- .

π.χ. Li: $1s^2 2s^1$ ή $[\text{He}] 2s^1$
Be: $1s^2 2s^2$ ή $[\text{He}] 2s^2$

!!! Γενικά: Η ηλεκτρονική δομή ενός στοιχείου προκύπτει από τη δομή του προηγούμενου στοιχείου με την προσθήκη ενός ηλεκτρονίου στο αμέσως επόμενο διαθέσιμο τροχιακό.⁷⁶



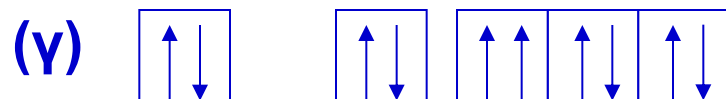
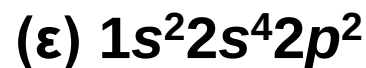
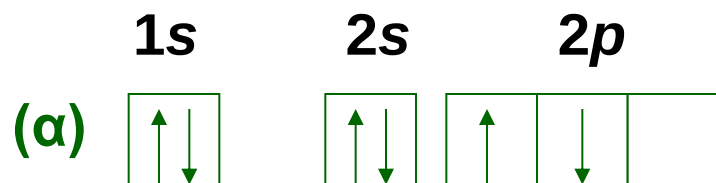
Ηλεκτρονικές δομές της θεμελιώδους κατάστασης των ατόμων με $Z = 1$ έως 36

Z	Στοιχείο	Δομή	Z	Στοιχείο	Δομή
1	H	$1s^1$	19	K	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
2	He	$1s^2$	20	Ca	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
3	Li	$1s^2 2s^1$	21	Sc	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$
4	Be	$1s^2 2s^2$	22	Ti	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$
5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	23	V	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$
6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	24	Cr	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$
7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	25	Mn	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$
8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	26	Fe	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$
9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	27	Co	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$
10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	28	Ni	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$
11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	29	Cu	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$
12	Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	30	Zn	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$
13	Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	31	Ga	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$
14	Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	32	Ge	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$
15	P	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	33	As	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$
16	S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	34	Se	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^4$
17	Cl	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	35	Br	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5$
18	Ar	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	36	Kr	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$

Άσκηση 2.10

Εφαρμογή της απαγορευτικής αρχής του Pauli

Κοιτάξτε τα παρακάτω διαγράμματα τροχιακών και τις ηλεκτρονικές δομές. Ποια από αυτά είναι επιτρεπτά και ποια όχι, σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli και τον κανόνα του Hund; Εξηγήστε.



Άσκηση 2.10

- (α) **Μη επιτρεπτό** διάγραμμα τροχιακών (αντίκειται στον κανόνα του Hund)
- (β) **Επιτρεπτό** διάγραμμα τροχιακών
- (γ) **Μη επιτρεπτό** διάγραμμα τροχιακών (σε ένα τροχιακό $2p$ υπάρχουν 2 ηλεκτρόνια με το ίδιο spin)
- (δ) **Επιτρεπτή** ηλεκτρονική δομή
- (ε) **Αδύνατη** ηλεκτρονική δομή (ένας s υποφλοιός μπορεί να χωρέσει το πολύ 2 ηλεκτρόνια)
- (στ) **Αδύνατη** ηλεκτρονική δομή (ένας p υποφλοιός μπορεί να χωρέσει το πολύ 6 ηλεκτρόνια)

Ηλεκτρονικές διατάξεις και περιοδικό σύστημα

Πώς σχετίζονται οι ηλεκτρονικές δομές των στοιχείων με τη θέση των στοιχείων στον περιοδικό πίνακα;

Βόριο	$1s^2 2s^2 2p^1$	ή	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$
Αργίλιο	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	ή	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^1$
Γάλλιο	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$	ή	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^1$

Κορμός ευγενούς αερίου: $[\text{He}]$, $[\text{Ne}]$, $[\text{Ar}]$, ...

Κορμός ψευδοευγενούς αερίου: $[\text{Ar}] 3d^{10}$

Ηλεκτρόνια σθένους: (όλα τα ηλεκτρόνια εκτός κορμών)

Δομές φλοιών σθένους: (οι δομές των ηλεκτρονίων σθένους)

Εξαιρέσεις της αρχής της δομήσεως ($\text{Cu}: [\text{Ar}] 3d^9 4s^2 \Rightarrow [\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$)

Αναγραφή ηλεκτρονικών δομών με χρησιμοποίηση του περιοδικού πίνακα

The diagram illustrates the arrangement of atomic orbitals for principal quantum numbers $n=1$ to $n=7$. The orbitals are organized into a grid-like structure, with colors indicating different types of orbitals:

- Purple (s-orbitals):** $1s, 2s, 3s, 4s, 5s, 6s, 7s$
- Blue (p-orbitals):** $2p, 3p, 4p, 5p, 6p$
- Red (d-orbitals):** $3d, 4d, 5d, 6d$
- Yellow (f-orbitals):** $4f, 5f$

The diagram shows the relative positions and sizes of these orbitals, highlighting the increasing complexity and size of the orbitals as the principal quantum number n increases.

Ένας περιοδικός πίνακας που διασαφηνίζει τη σειρά δόμησης των υποφλοιών

Οι έγχρωμες περιοχές στοιχείων δείχνουν τους διαφορετικούς υποφλοιούς που συμπληρώνονται για τα στοιχεία αυτά.

Στοιχεία κύριων ομάδων
συμπληρώνεται ο υποφλοιός s

Στοιχεία κύριων ομάδων
συμπληρώνεται ο υποφλοιός p

Περίοδος

	IA		1 H 1s¹ Ατομικός αριθμός Σύμβολο Δομή φλοιού σθένους																VIIIA
1	1 H 1s ¹	IIA											III A	IVA	VA	VIA	VIIA	2 He 1s ²	
2	3 Li 2s ¹	4 Be 2s ²	Μεταβατικά μέταλλα συμπληρώνεται ο υποφλοιός d										5 B 2s ² 2p ¹	6 C 2s ² 2p ²	7 N 2s ² 2p ³	8 O 2s ² 2p ⁴	9 F 2s ² 2p ⁵	10 Ne 2s ² 2p ⁶	
3	11 Na 3s ¹	12 Mg 3s ²	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIII B			IB	IIB	13 Al 3s ² 3p ¹	14 Si 3s ² 3p ²	15 P 3s ² 3p ³	16 S 3s ² 3p ⁴	17 Cl 3s ² 3p ⁵	18 Ar 3s ² 3p ⁶	
4	19 K 4s ¹	20 Ca 4s ²	21 Sc 3d ¹ 4s ²	22 Ti 3d ² 4s ²	23 V 3d ³ 4s ²	24 Cr 3d ⁵ 4s ¹	25 Mn 3d ⁵ 4s ²	26 Fe 3d ⁶ 4s ²	27 Co 3d ⁷ 4s ²	28 Ni 3d ⁸ 4s ²	29 Cu 3d ¹⁰ 4s ¹	30 Zn 3d ¹⁰ 4s ²	31 Ga 4s ² 4p ¹	32 Ge 4s ² 4p ²	33 As 4s ² 4p ³	34 Se 4s ² 4p ⁴	35 Br 4s ² 4p ⁵	36 Kr 4s ² 4p ⁶	
5	37 Rb 5s ¹	38 Sr 5s ²	39 Y 4d ¹ 5s ²	40 Zr 4d ² 5s ²	41 Nb 4d ⁴ 5s ¹	42 Mo 4d ⁵ 5s ¹	43 Tc 4d ⁵ 5s ²	44 Ru 4d ⁷ 5s ¹	45 Rh 4d ⁸ 5s ¹	46 Pd 4d ¹⁰	47 Ag 4d ¹⁰ 5s ¹	48 Cd 4d ¹⁰ 5s ²	49 In 5s ² 5p ¹	50 Sn 5s ² 5p ²	51 Sb 5s ² 5p ³	52 Te 5s ² 5p ⁴	53 I 5s ² 5p ⁵	54 Xe 5s ² 5p ⁶	
6	55 Cs 6s ¹	56 Ba 6s ²	57 La* 5d ¹ 6s ²	72 Hf 5d ² 6s ²	73 Ta 5d ³ 6s ²	74 W 5d ⁴ 6s ²	75 Re 5d ⁵ 6s ²	76 Os 5d ⁶ 6s ²	77 Ir 5d ⁷ 6s ²	78 Pt 5d ⁹ 6s ¹	79 Au 5d ¹⁰ 6s ¹	80 Hg 5d ¹⁰ 6s ²	81 Tl 6s ² 6p ¹	82 Pb 6s ² 6p ²	83 Bi 6s ² 6p ³	84 Po 6s ² 6p ⁴	85 At 6s ² 6p ⁵	86 Rn 6s ² 6p ⁶	
7	87 Fr 7s ¹	88 Ra 7s ²	89 Ac** 6d ¹ 7s ²	104 Rf 6d ² 7s ²	105 Db 6d ³ 7s ²	106 Sg 6d ⁴ 7s ²	107 Bh 6d ⁵ 7s ²	108 Hs 6d ⁶ 7s ²	109 Mt 6d ⁷ 7s ²	110 6d ⁸ 7s ²	111 6d ⁹ 7s ²	112 6d ¹⁰ 7s ²							

Εσωτερικά μεταβατικά μέταλλα
συμπληρώνεται ο υποφλοιός f

*Λανθανίδια

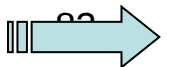
**Ακτινίδια

58 Ce 4f ¹ 5d ¹ 6s ²	59 Pr 4f ³ 6s ²	60 Nd 4f ⁴ 6s ²	61 Pm 4f ⁵ 6s ²	62 Sm 4f ⁶ 6s ²	63 Eu 4f ⁷ 6s ²	64 Gd 4f ⁷ 5d ¹ 6s ²	65 Tb 4f ⁹ 6s ²	66 Dy 4f ¹⁰ 6s ²	67 Ho 4f ¹¹ 6s ²	68 Er 4f ¹² 6s ²	69 Tm 4f ¹³ 6s ²	70 Yb 4f ¹⁴ 6s ²	71 Lu 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²
90 Th 6d ² 7s ²	91 Pa 5f ² 6d ¹ 7s ²	92 U 5f ³ 6d ¹ 7s ²	93 Np 5f ⁴ 6d ¹ 7s ²	94 Pu 5f ⁶ 7s ²	95 Am 5f ⁷ 7s ²	96 Cm 5f ⁷ 6d ¹ 7s ²	97 Bk 5f ⁹ 7s ²	98 Cf 5f ¹⁰ 7s ²	99 Es 5f ¹¹ 7s ²	100 Fm 5f ¹² 7s ²	101 Md 5f ¹³ 7s ²	102 No 5f ¹⁴ 7s ²	103 Lr 5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²

Άσκηση 2.11

Προσδιορισμός της ηλεκτρονικής δομής ενός ατόμου με εφαρμογή της αρχής δόμησης

Χρησιμοποιήστε την αρχή δόμησης για να βρείτε την ηλεκτρονική δομή για τη θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου του μαγγανίου ($Z = 25$).



Άσκηση 2.11

Σε έναν περιοδικό πίνακα διατρέχουμε τις περιόδους, ξεκινώντας με το υδρογόνο, και γράφοντας τους υποφλοιούς που συμπληρώνονται διαδοχικά, φθάνουμε στο άτομο του μαγγανίου ($Z = 25$).

Η σειρά δόμησης που λαμβάνουμε είναι

	$1s$	$2s2p$	$3s3p$	$4s3d4p$
Περίοδος:	πρώτη	δεύτερη	τρίτη	τέταρτη

Τώρα συμπληρώνουμε τους υποφλοιούς με ηλεκτρόνια, γνωρίζοντας ότι έχουμε για κατανομή συνολικά 25 ηλεκτρόνια. Η κατανομή αυτή δίνει τη δομή



Με αναδιάταξη των υποφλοιών κατά σειρά φλοιών, λαμβάνουμε την ηλεκτρονική δομή



Άσκηση 2.12

Προσδιορισμός της ηλεκτρονικής δομής ενός ατόμου από τον αριθμό της περιόδου και τον αριθμό της ομάδας του

Χρησιμοποιώντας τον περιοδικό πίνακα στην αρχή του βιβλίου, γράψτε τη δομή του φλοιού σθένους του αρσενικού (As).

Άσκηση 2.12

Το αρσενικό είναι στοιχείο κύριας ομάδας και ανήκει στην Περίοδο 4, Ομάδα 5A.

Τα πέντε εξώτερα ηλεκτρόνιά του πρέπει να καταλαμβάνουν τους υποφλοιούς $4s$ και $4p$.

Έτσι, η ηλεκτρονική δομή του φλοιού σθένους του αρσενικού είναι $4s^24p^3$.

Η πλήρης ηλεκτρονική δομή του αρσενικού είναι
 $[Ar]3d^{10}4s^24p^3$