

ΤΡΟΧΙΑΚΑ – ΘΕΩΡΙΑ ΔΙΕΓΕΡΣΗΣ

ΔΕΕ 11.1: Να εξηγούν ότι το ηλεκτρόνιο παρουσιάζει διττή φύση, σωματιδίου (κβάντα) και κύματος (ηλεκτρομαγνητικό φάσμα).

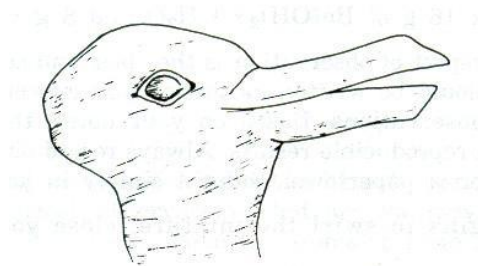
Το ηλεκτρόνιο είναι ένα σωματίδιο το οποίο συμπεριφέρεται και ως κύμα (διττή φύση). Ο κλάδος της Φυσικής ο οποίος περιγράφει μαθηματικά τις κυματικές ιδιότητες στοιχειωδών σωματιδίων, όπως το ηλεκτρόνιο, ονομάζεται κβαντομηχανική.

Οι πρώτες θεωρίες για το ηλεκτρόνιο είναι ανεπαρκείς αφού περιγράφουν το ηλεκτρόνιο με βάση τη σωματιδιακή του υπόσταση μόνο.

Το ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε μια συγκεκριμένη περιοχή του χώρου (τροχιακό) γύρω από τον πυρήνα σε καθορισμένο ενεργειακό επίπεδο.

Η κβαντομηχανική περιγράφει την πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου στον χώρο.

Η φύση του ηλεκτρονίου είναι μία, δεν αλλάζει συνεχώς, ανάλογα με τις πειραματικές συνθήκες όμως εκδηλώνεται ο σωματιδιακός ή ο κυματικός χαρακτήρας (διττή φύση).



Σχ. 1: Όπως στο σχήμα συνυπάρχουν ένας λαγός και ένα πουλί, έτσι και στο ηλεκτρόνιο συνυπάρχουν το σωματίδιο και το κύμα.

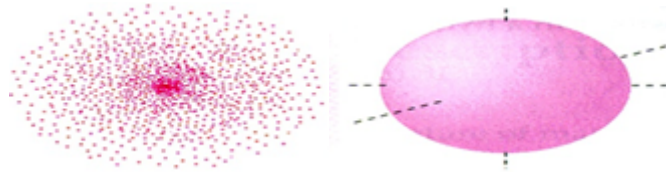
Στη Νευτώνεια Μηχανική είναι δυνατόν να προσδιορίσουμε με ακρίβεια τη θέση και την ταχύτητα ενός σώματος. Στην περίπτωση όμως μικρών σωματιδίων, όπως είναι τα ηλεκτρόνια, τα οποία έχουν σωματιδιακή και κυματική φύση, αυτό είναι αδύνατον.

Σύμφωνα με την αρχή του Heisenberg δεν μπορούμε να μιλάμε για ακριβή θέση του ηλεκτρονίου στο άτομο, αλλά για την πιθανότητα να βρίσκεται σε ορισμένο χώρο.

Σήμερα, δηλαδή, θεωρούμε πλέον ότι ένα ηλεκτρόνιο κινείται σε μια ορισμένη τροχιά γύρω από τον πυρήνα.

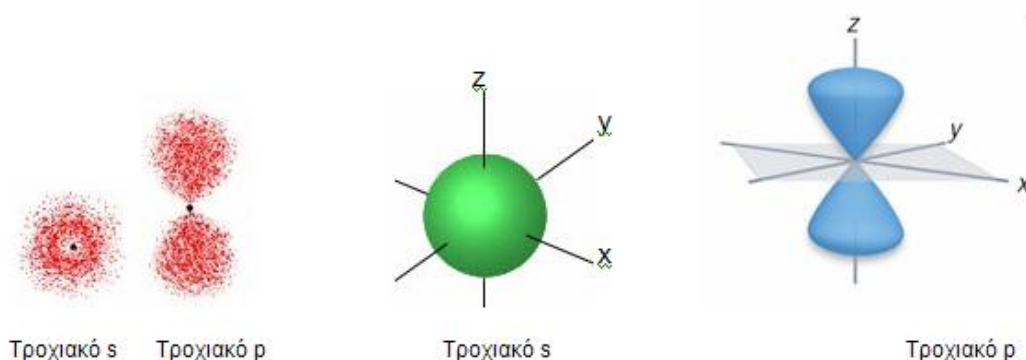
Το ηλεκτρονιακό νέφος είναι το σύνολο των σημείων του χώρου γύρω από τον πυρήνα στα οποία μπορεί να βρεθεί το ηλεκτρόνιο. Επομένως, το ηλεκτρονιακό νέφος υπάρχει μόνο εφόσον υπάρχει το ηλεκτρόνιο. Εάν ήταν δυνατό να φωτογραφίσουμε το ηλεκτρόνιο

καθώς κινείται γύρω από τον πυρήνα θα παίρναμε στην εικόνα που φαίνεται στο σχήμα 2, η οποία θυμίζει νέφος και ονομάζεται ηλεκτρονιακό νέφος. Το ηλεκτρονιακό νέφος παρουσιάζεται και με οριακές καμπύλες, που είναι και η πιο συνηθισμένη απεικόνιση της πυκνότητας του ηλεκτρονιακού νέφους, το περίγραμμα της καμπύλης περικλείει τη μέγιστη πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους, περίπου 90-99% αυτής.



Σχ. 2: Σχηματική απεικόνιση της πυκνότητας του ηλεκτρονιακού νέφους του ατόμου του υδρογόνου σε μη διεγερμένη κατάσταση: (α) με «στιγμές» (β) με «οριακές» καμπύλες.

Η περιγραφή του χώρου γύρω από τον πυρήνα, όπου υπάρχει μεγάλη πιθανότητα (90-99%), να βρίσκεται το ηλεκτρόνιο απεικονίζει ένα ατομικό τροχιακό, το οποίο έχει καθορισμένο σχήμα. Τα ατομικά τροχιακά περιγράφουν την ενεργειακή κατάσταση του ηλεκτρονίου και μπορεί να υπάρχουν και χωρίς ηλεκτρόνια (υπάρχουν δυνητικά).



Σχ. 3: Σχηματική αναπαράσταση δυο ατομικών τροχιακών, s και p με (α) στίγματα και (β) οριακές καμπύλες.

ΔΕΕ 11.2 Να αναφέρουν ότι το ηλεκτρόνιο περιγράφεται από την κβαντομηχανική με τέσσερις κβαντικούς αριθμούς.

Στο ατομικό πρότυπο του Bohr ο κύριος κβαντικός αριθμός (n), εισάγεται αυθαίρετα, για τον καθορισμό της ενεργειακής στάθμης και της τροχιάς του ηλεκτρονίου.

Στην κβαντομηχανική εισάγονται τρεις (3) κβαντικοί αριθμοί για τον καθορισμό της κατανομής του ηλεκτρονιακού νέφους (ατομικού τροχιακού).

Οι κβαντικοί αυτοί αριθμοί είναι:

1. ο κύριος κβαντικός αριθμός (n)
2. ο δευτερεύων κβαντικός αριθμός ή αζιμουθιακός (ℓ)
3. ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_ℓ).

Κάθε δυνατή τριάδα κβαντικών αριθμών (n , ℓ , m_ℓ) καθορίζει ένα συγκεκριμένο τροχιακό του ατόμου.

Τέλος, ορίστηκε ο τέταρτος κβαντικός αριθμός, ο κβαντικός αριθμός του spin (m_s), ο οποίος όμως δεν συμμετέχει στη διαμόρφωση της τιμής της ενέργειας του ηλεκτρονίου και κατά συνέπεια στο καθορισμό του ατομικού τροχιακού. Δίνει πληροφορίες για τον προσανατολισμό του spin (την ιδιοστροφορμή του ηλεκτρονίου).

ΔΕΕ 11.3: Να εξηγούν ότι ο χώρος όπου υπάρχει μεγάλη πιθανότητα να βρίσκεται ένα ηλεκτρόνιο ονομάζεται ηλεκτρονιακή στιβάδα και εκφράζεται με τον κύριο κβαντικό αριθμό, n .

Με βάση την κβαντομηχανική:

Ο κύριος κβαντικός αριθμός, n , καθορίζει την ενέργεια του ηλεκτρονίου και τον χώρο όπου υπάρχει μεγάλη πιθανότητα να βρίσκεται ένα ηλεκτρόνιο. Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή του n , τόσο πιο απομακρυσμένο από τον πυρήνα είναι, κατά μέσο όρο, το ηλεκτρονιακό νέφος.

Έχει καθοριστικό ρόλο στη διαμόρφωση της ενέργειας του ηλεκτρονίου. Όσο μικρότερη είναι η τιμή του n , τόσο χαμηλότερη είναι και η ενέργεια του ηλεκτρονίου.

ΔΕΕ 11.4: Να αναφέρουν τις τιμές, τις οποίες μπορεί να πάρει ο κύριος κβαντικός αριθμός, n .

Ο κύριος κβαντικός αριθμός, n , παίρνει μόνο θετικές ακέραιες τιμές: $n = 1, 2, 3, 4, \dots, 7$.

ΔΕΕ 11.5: Να αναφέρουν πώς σχετίζονται οι τιμές του κύριου κβαντικού αριθμού με την ενέργεια του ηλεκτρονίου και τον χώρο στον οποίο κινείται το ηλεκτρόνιο.

Η κάθε τιμή του n αντιστοιχεί σε καθορισμένη ενεργειακή στάθμη.

Γενικά, όσο πιο μεγάλη είναι η τιμή του n , τόσο πιο μεγάλη είναι η ενέργεια του ηλεκτρονίου και τόσο πιο μεγάλη είναι η περιοχή του χώρου όπου μπορεί να βρεθεί το ηλεκτρόνιο.

Κάθε κύρια στιβάδα, η οποία περιγράφεται με το n , διακρίνεται σε διάφορα ενεργειακά επίπεδα, τα οποία αποτελούν τις διάφορες υποστιβάδες.

Ο συμβολισμός των στιβάδων ή φλοιών γίνεται με γράμματα, όπως φαίνεται στον παρακάτω πίνακα:

κύριος κβαντικός αριθμός, n	1	2	3	4
στιβάδα ή φλοιός	K	L	M	N

ΔΕΕ 11.6: Να ορίζουν τον δευτερεύων ή αζιμουθιακό κβαντικό αριθμό, l .

Ο δευτερεύων ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός, l , καθορίζει το σχήμα του ηλεκτρονιακού νέφους (τροχιακό).

Ατομικά τροχιακά που έχουν τους ίδιους αριθμούς n και l αποτελούν υποστιβάδα.

Κάθε κύρια στιβάδα, η οποία περιγράφεται με τον κβαντικό αριθμό n , διακρίνεται σε διάφορα ενεργειακά επίπεδα, τις υποστιβάδες. Αυτές περιγράφονται με τον δευτερεύων κβαντικό αριθμό, l .

Ο δευτερεύων ή αζιμουθιακός αριθμός, l , καθορίζει τις υποστιβάδες, οι οποίες έχουν διαφορετικά σχήματα.

π.χ. η στιβάδα με $n=2$ έχει δύο (2) διαφορετικά είδη υποστιβάδων, των s και p .

ΔΕΕ 11.7: Να καθορίζουν τις τιμές τις οποίες μπορεί να πάρει ο δευτερεύων κβαντικός αριθμός, l , με βάση τον κύριο κβαντικό αριθμό, n .

Ο αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός l καθορίζει το σχήμα του ηλεκτρονιακού νέφους (τροχιακού).

Ο l παίρνει όλες τις ακέραιες τιμές από $0 - (n-1)$ [$l = 0, 1, \dots, (n-1)$]

Κάθε κύρια στιβάδα, που περιγράφεται με τον κβαντικό αριθμό n , διακρίνεται σε διάφορα ενεργειακά επίπεδα, τις υποστιβάδες.

Οι υποστιβάδες ή υποφλοιοί συμβολίζονται με γράμματα. Ο ίδιος συμβολισμός διατηρείται και στα αντίστοιχα ατομικά τροχιακά, όπως φαίνεται στον παρακάτω πίνακα:

Αξιμουθιακός κβαντικός αριθμός, ℓ	0	1	2	3
υποστιβάδα	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>D</i>	<i>f</i>	
ατομικό τροχιακό	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>D</i>	<i>f</i>

Υποστιβάδα ή υποφλοιός ονομάζεται το σύνολο των ατομικών τροχιακών ενός ατόμου που έχουν τις ίδιες τιμές κβαντικών αριθμών n και ℓ .

Ηλεκτρόνια που βρίσκονται στην ίδια στιβάδα (δηλ. έχουν ίδιο κβαντικό αριθμό n), αλλά σε διαφορετική υποστιβάδα (δηλ. έχουν διαφορετικό ℓ), έχουν διαφορετική ενέργεια.

ΔΕΕ 11.8: Να υπολογίζουν τον αριθμό των υποστιβάδων με βάση τον αριθμό της στιβάδας (κύριο κβαντικό αριθμό).

Ο κύριος κβαντικός αριθμός, n , καθορίζει τον μέγιστο αριθμό υποστιβάδων, οι οποίες μπορεί να υπάρχουν.

Παραδείγματα εμπέδωσης:

$$n=1 \Rightarrow \text{μέγιστος αριθμός υποστιβάδων } 1 (\ell = 0)$$

$$n=2 \Rightarrow \text{μέγιστος αριθμός υποστιβάδων } 2 (\ell = 0, \ell = 1)$$

$$n=3 \Rightarrow \text{μέγιστος αριθμός υποστιβάδων } 3 (\ell = 0, \ell = 1 \text{ και } \ell = 2)$$

ΔΕΕ 11.9: Να αναγνωρίζουν τα σύμβολα των υποστιβάδων με τους λατινικούς χαρακτήρες *s*, *p*, *d*, *f*.

Σύμβολο υποστιβάδας : *s*, *p*, *d*, *f*

ΔΕΕ 11.10: Να συσχετίζουν το σχήμα των τροχιακών της υποστιβάδας με τον δευτερεύων κβαντικό αριθμό έτσι που να αναγνωρίζουν από το σχήμα τον δευτερεύων κβαντικό αριθμό, ℓ και αντίστροφα.

Στο σχήμα 4 απεικονίζεται το τροχιακό της υποστιβάδας *s* και στο σχήμα 5 της *p*.

ΔΕΕ 11.11: Να συσχετίζουν τις τιμές του δευτερεύοντος κβαντικού αριθμού ℓ , με τα σύμβολα των υποστιβάδων.

Οι διαφορετικές υποστιβάδες μπορούν να χαρακτηριστούν με τον δευτερεύοντα κβαντικό αριθμό, ℓ .

Σύμβολο υποστιβάδας : s, p, d, f
Τιμή ℓ : 0, 1 2 3

Παράδειγμα εμπέδωσης:

Για την υποστιβάδα με κβαντικούς αριθμούς $n=1$ και $\ell = 0$ χρησιμοποιείται ο συμβολισμός $1s$, ο οποίος έχει σχήμα σφαιρικό.



Σχ. 4 Εικονική αναπαράσταση του τροχιακού της υποστιβάδας $1s$

ΔΕΕ 11.12: Να κατατάσσουν ενεργειακά τα ηλεκτρόνια όταν δίνονται οι τιμές των κβαντικών αριθμών n και ℓ των ηλεκτρονίων.

Ηλεκτρόνια τα οποία βρίσκονται στην ίδια στιβάδα, έχουν δηλαδή ίδιο αριθμό n , άλλα σε διαφορετική υποστιβάδα, έχουν διαφορετική ενέργεια.

Μεταξύ δύο υποστιβάδων χαμηλότερη ενέργεια έχει η υποστιβάδα, η οποία έχει το μικρότερο άθροισμα των δύο πρώτων κβαντικών αριθμών ($n + \ell$).

Αν το άθροισμα είναι το ίδιο, τότε χαμηλότερη ενέργεια έχει η υποστιβάδα με τον μικρότερο κύριο κβαντικό αριθμό n . Ισχύει $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d \dots$

ΔΕΕ 11.13: Να αναγνωρίζουν ότι ο τρίτος κβαντικός αριθμός, μαγνητικός αριθμός m_ℓ , καθορίζει τον προσανατολισμό των τροχιακών στον χώρο.

Το όνομα «μαγνητικός» προέρχεται από το γεγονός ότι το ηλεκτρόνιο, ως κινούμενο φορτίο, δημιουργεί μαγνητικό πεδίο καθορισμένης φοράς.

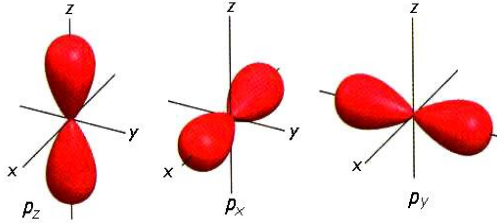
Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_ℓ καθορίζει τον προσανατολισμό των τροχιακών σε σχέση με τους άξονες x , y και z .

Ο m_ℓ παίρνει όλες τις ακέραιες τιμές από $-\ell$ έως $+\ell$ $m_\ell = -\ell, -(\ell - 1), \dots, 0, \dots, +(\ell - 1), +\ell$

Δηλαδή για $\ell = 1$ (p υποστιβάδα) το m_ℓ έχει τιμές $+1, 0, -1$ άρα έχει τρία τροχιακά με το ίδιο σχήμα αλλά με διαφορετικό προσανατολισμό στον χώρο.

Παράδειγμα εμπέδωσης:

Η υποστιβάδα $\ell = 1$ αποτελείται από τρία (3) τροχιακά, ένα (1) σε κάθε άξονα (τροχιακά p_x , p_y , p_z).



Σχ. 5 Εικονική αναπαράσταση των τροχιακών των υποστιβάδων p_x , p_y , p_z

ΔΕΕ 11.14: Να υπολογίζουν τις τιμές του τρίτου κβαντικού αριθμού, m_ℓ , για τροχιακά των s , p και d υποστιβάδων μόνο.

Υπολογισμός των τιμών του τρίτου κβαντικού αριθμού, m_ℓ , για τα τροχιακά των s , p και d υποστιβάδων μόνο.

Οι τιμές τις οποίες παίρνει το m_ℓ για δεδομένο ℓ είναι από $-\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$

Παραδείγματα εμπέδωσης:

- $\ell = 0$, $m_\ell = 0$ ή s σφαιρικό τροχιακό
- $\ell = 1$, $m_\ell = -1, 0, +1$ ή p υποστιβάδα με τρία (3) τροχιακά p_x , p_y , p_z
- $\ell = 2$, $m_\ell = -2, -1, 0, +1, +2$ ή d υποστιβάδα με πέντε (5) τροχιακά τα οποία έχουν διαφορετική διάταξη στον χώρο.

Το ατομικό τροχιακό καθορίζεται από μια τριάδα κβαντικών αριθμών: n , ℓ , m_ℓ

- τα τροχιακά μιας δεδομένης υποστιβάδας έχουν την ίδια ενέργεια πχ: $3p_x$, $3p_y$, $3p_z$.
- τα τροχιακά μιας δεδομένης υποστιβάδας έχουν διαφορετικό προσανατολισμό στον χώρο.

Υποστιβάδες και τροχιακά

Η στιβάδα $n=2$ έχει δυο υποστιβάδες ($\ell = 0, \ell = 1$) ή $2s, 2p$. Η κάθε στιβάδα περιέχει τροχιακά με διαφορετικό προσανατολισμό στον χώρο.

Υποστιβάδα	ℓ	m_ℓ	Πλήθος τροχιακών
s	0	0	1
p	1	-1, 0, +1	3
d	2	-2, -1, 0, +1, +2	5

Ο αριθμός των ατομικών τροχιακών που έχει μια στιβάδα κβαντικού αριθμού n είναι n^2 , όπου n ο κύριος κβαντικός αριθμός της στιβάδας.

Παράδειγμα εμπέδωσης:

$2^{\text{η}}$ στιβάδα έχει: $2^2 = 4$ τροχιακά: $2s (2, 0, 0)$, $2p_\psi (2, 1, -1)$, $2p_z (2, 1, 0)$, $2p_x (2, 1, 1)$

ΔΕΕ 11.15: Να διακρίνουν τις έννοιες της στιβάδας, της υποστιβάδας και του τροχιακού.

Παράδειγμα εμπέδωσης:

Η δεύτερη στιβάδα $n=2$, μπορεί να έχει μέχρι δύο (2) υποστιβάδες ($\ell=0, \ell=1$) ή $2s, 2p$

- Η υποστιβάδα $\ell = 0$ (s) με σχήμα σφαιρικό αποτελεί και τροχιακό, το τροχιακό s.
- Η υποστιβάδα $\ell = 1$ (p) αποτελείται από τρία τροχιακά, ένα σε κάθε άξονα, τροχιακά p_x, p_ψ, p_z (Σχ.5).

ΔΕΕ 11.16: Να αναφέρουν ότι ο τέταρτος κβαντικός αριθμός m_s , δίνει πληροφορίες για τον προσανατολισμό του spin και μπορεί να πάρει τιμές $+1/2$ ή $-1/2$.

Ο κβαντικός αριθμός του spin (m_s) αναφέρεται σε μια μαγνητική ιδιότητα των ηλεκτρονίων που ονομάζεται spin. Δεν δίνει πληροφορίες για την ενέργεια ενός ηλεκτρονίου και τον χώρο στον οποίο μπορεί να εντοπιστεί το ηλεκτρόνιο.

Ο κβαντικός αριθμός του spin (m_s) παίρνει τιμές $+1/2$ ή $-1/2$, είναι δηλαδή ανεξάρτητος από τις τιμές των άλλων κβαντικών αριθμών.

Για τιμή $m_s = +1/2$, λέμε ότι έχουμε παράλληλο spin ή spin προς τα πάνω (\uparrow), ενώ για τιμή $m_s = -1/2$, λέμε ότι έχουμε αντιπαράλληλο spin ή spin προς τα κάτω (\downarrow). Σε κάθε τροχιακό δεν μπορούμε να έχουμε περισσότερα από δύο ηλεκτρόνια.

Ο κβαντικός αριθμός του spin δεν συμμετέχει στη διαμόρφωση της τιμής της ενέργειας του ηλεκτρονίου, ούτε στον καθορισμό του τροχιακού.

Ένα τροχιακό δεν μπορεί να έχει δύο ηλεκτρόνια με τον ίδιο αριθμό m_s .

Συνοψίζοντας όλα τα πιο πάνω, οι τέσσερις (4) κβαντικοί αριθμοί (n , ℓ , m_ℓ , m_s) προσδιορίζουν αντίστοιχα:

n	τη στιβάδα - φλοιό
ℓ	Την υποστιβάδα - υποφλοιό
m_ℓ	το τροχιακό
m_s	το σπιν

ΔΕΕ 11.17: Να διατυπώνουν την Απαγορευτική Αρχή του Pauli.

Σύμφωνα με την Απαγορευτική Αρχή του Pauli είναι αδύνατο να υπάρχουν στο ίδιο άτομο δύο ηλεκτρόνια με ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών (n , ℓ , m_ℓ , m_s). Συνεπώς, δεν μπορεί ένα τροχιακό να χωρέσει πάνω από δύο ηλεκτρόνια.

ΔΕΕ 11.18: Να εξάγουν τον μέγιστο αριθμό ηλεκτρονίων τα οποία δέχεται ένα τροχιακό και μία υποστιβάδα.

Με βάση την Απαγορευτική Αρχή του Pauli προκύπτει ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων που έχει μια υποστιβάδα και μια στιβάδα, όπως φαίνεται στον Πίνακα 1.

Ένα ατομικό τροχιακό μπορεί να μην περιέχει ηλεκτρόνιο ή να έχει ένα (1) ηλεκτρόνιο ή να έχει δύο (2) ηλεκτρόνια με αντιπαράλληλα spin.

Πίνακας 1: Πλήρωση στιβάδων, στιβάδων, τροχιακών με ηλεκτρόνια.

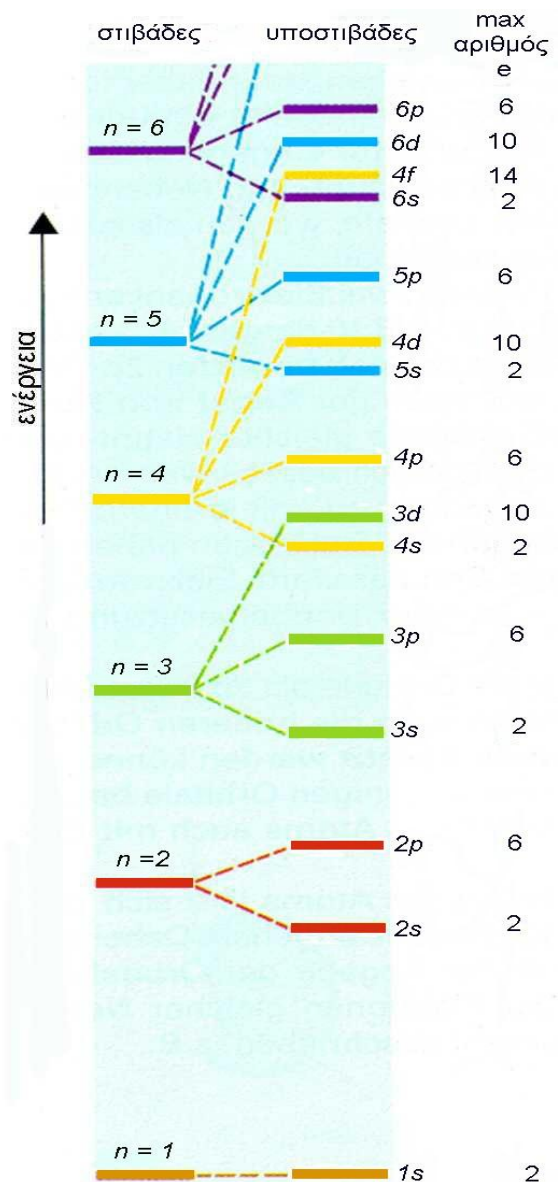
1	0	0	+1/2, -1/2	Η στιβάδα K ($n = 1$), έχει μία υποστιβάδα s ($\ell = 0$), στην οποία αντιστοιχεί ένα τροχιακό s, στο οποίο μπορούμε να έχουμε το πολύ δύο ηλεκτρόνια με κβαντικούς αριθμούς: (1, 0, 0, +1/2) (1, 0, 0, -1/2)
2	0	0	+1/2 -1/2	Η στιβάδα L ($n = 2$), έχει δύο υποστιβάδες ($\ell = 0, 1$) τις s και p αντίστοιχα. Στην s αντιστοιχεί ένα τροχιακό με δύο το πολύ ηλεκτρόνια, ενώ στην p τρία τροχιακά με $3 \times 2 = 6$ το πολύ ηλεκτρόνια.
	1	-1 0 +1	+1/2, -1/2 +1/2, -1/2 +1/2, -1/2	
3	0	0	+1/2 -1/2	
	1	-1	+1/2, -1/2	
		0	+1/2, -1/2	
		+1	+1/2, -1/2	
	2	-2 -1 0 +1 +2	+1/2, -1/2 +1/2, -1/2 +1/2, -1/2 +1/2, -1/2 +1/2, -1/2	Η στιβάδα M ($n = 3$), έχει τρεις υποστιβάδες ($\ell = 0, 1, 2$) τις s, p και d αντίστοιχα. Στην s αντιστοιχεί ένα τροχιακό με δύο το πολύ ηλεκτρόνια, στην p αντίστοιχα τρία τροχιακά με $3 \times 2 = 6$ ηλεκτρόνια (το μέγιστο) και στην d πέντε τροχιακά με $5 \times 2 = 10$ ηλεκτρόνια (το μέγιστο).

ΔΔΕ 11.19: Να διατυπώνουν την Αρχή της Ελάχιστης Ενέργειας.

Σύμφωνα με την Αρχή της Ελάχιστης Ενέργειας, κατά την ηλεκτρονιακή δόμηση ενός πολυηλεκτρονιακού ατόμου, τα ηλεκτρόνια οφείλουν να καταλάβουν τροχιακά με τη μικρότερη ενέργεια, ώστε να αποκτήσουν τη μέγιστη σταθερότητα στη θεμελιώδη κατάσταση.

Μεταξύ δύο υποστιβάδων χαμηλότερη ενέργεια έχει εκείνη η υποστοιβάδα που έχει το μικρότερο άθροισμα των δύο πρώτων κβαντικών αριθμών ($n + l$).

Αν το άθροισμα είναι το ίδιο, τότε χαμηλότερη ενέργεια έχει η υποστοιβάδα με τον μικρότερο κύριο κβαντικό αριθμό n : $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d$.

**ΔΔΕ 11.20: Να εφαρμόζουν την Αρχή της Ελάχιστης Ενέργειας**

Εφαρμογή της Αρχής της Ελάχιστης Ενέργειας κατά την ηλεκτρονιακή δόμηση

ΔΕΕ 11.21: Να διατυπώνουν τον Κανόνα του Hund.

Ηλεκτρόνια τα οποία καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας (της ίδιας υποστοιβάδας), έχουν κατά προτίμηση παράλληλα spin, ώστε να αποκτήσουν το μέγιστο άθροισμα των κβαντικών αριθμών spin.

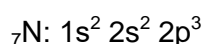
ΔΕΕ 11.22: Να εφαρμόζουν τον Κανόνα του Hund.

Όταν τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας (της ίδιας υποστιβάδας), πριν από κάθε σύζευξη ηλεκτρονίων, τοποθετούνται σε διαφορετικά τροχιακά της υποστιβάδας με το ίδιο (παράλληλο) spin.

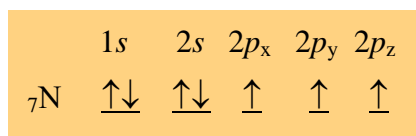
Ή διαφορετικά, δεν μπορούν να τοποθετηθούν στο ίδιο τροχιακό δυο ηλεκτρόνια, εφόσον στην ίδια υποστιβάδα υπάρχει άλλο ισοδύναμο τροχιακό άδειο.

Παράδειγμα εμπέδωσης:

Ποια είναι η ηλεκτρονιακή δομή του ατόμου του αζώτου; Δίνεται ${}_{7}\text{N}$.



Άρα, σύμφωνα και με τον Κανόνα του Hund, η κατανομή των ηλεκτρονίων στα τροχιακά θα είναι:



(και όχι $1s^2, 2s^2, 2p_x^2, 2p_y^1$).

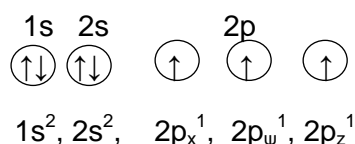
ΔΔΕ 11.23: Να γράφουν την ηλεκτρονιακή δομή ενός ατόμου στη θεμελιώδη του κατάσταση, εφαρμόζοντας την Αρχή Δόμησης AUFBAU (την Απαγορευτική Αρχή του Pauli, την Αρχή της Ελάχιστης Ενέργειας και τον Κανόνα του Hund).

Ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων τα οποία μπορεί να πάρει ένα τροχιακό είναι δύο (2).

Άρα:

υποστιβάδα	αρ. τροχιακών	μεγ. αρ. e ⁻
s (ℓ = 0)	1 (m _ℓ =0)	2
p (ℓ = 1)	3 (m _ℓ = +1, 0, -1)	6
d (ℓ = 2)	5 (m _ℓ = +2, +1, 0, -1, -2)	10

Βάση της Απαγορευτικής Αρχής του Pauli, του Κανόνα του Hund και της Αρχής της Ελάχιστης Ενέργειας για άτομο με Z=7 η δόμηση των ηλεκτρονιακών του στιβάδων στη θεμελιώδη κατάσταση είναι:



Άσκηση εμπέδωσης

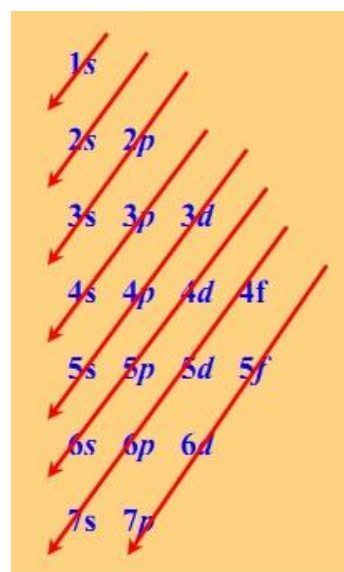
Να γράψετε την ηλεκτρονιακή δομή των στοιχείων: ${}_2\text{He}$, ${}_6\text{C}$, ${}_8\text{O}$, ${}_{15}\text{P}$, ${}_{20}\text{Ca}$

ΔΔΕ 11.24: Να χρησιμοποιούν τον μνημονικό κανόνα για τη διαδοχική συμπλήρωση των ατομικών τροχιακών με ηλεκτρόνια στα πολυηλεκτρονιακά άτομα.

Επειδή δύσκολα μπορεί να θυμηθεί κανείς το διάγραμμα διαδοχής των ενεργειακών σταθμών, δίνεται ένα μνημονικό διάγραμμα. Στο διάγραμμα αυτό, η συμπλήρωση των τροχιακών ακολουθεί μια - μια, με τη σειρά τις διαγώνιες, με τη φορά που δείχνουν τα βέλη.

Κατά αυτό τον τρόπο δομείται ηλεκτρονιακά το άτομο στη θεμελιώδη του κατάσταση.

Σχ. 6: Μνημονικός κανόνας για τη διαδοχική συμπλήρωση των ατομικών τροχιακών με ηλεκτρόνια στα πολυηλεκτρονιακά άτομα.



ΔΔΕ 11.25: Να εφαρμόζουν την Αρχή Δόμησης AUFBAU.

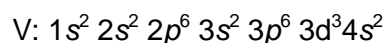
Παραδείγματα εμπέδωσης:

1. Πώς κατανέμονται, στη θεμελιώδη κατάσταση, τα εικοσιτρία (23) ηλεκτρόνια στο άτομο του βαναδίου, V;

Σύμφωνα με τις τρεις (3) Αρχές οι οποίες μελετήθηκαν προηγουμένως:

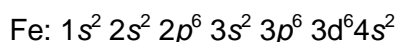
- Πρώτα τοποθετούνται δύο (2) ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 1s ($1s^2$).
- Μετά τοποθετούνται δύο (2) ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 2s ($1s^2 2s^2$).
- Ακολουθούν έξι (6) ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 2p ($1s^2 2s^2 2p^6$).
- Στη συνέχεια δύο (2) ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 3s ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$).
- Έξι (6) στην υποστιβάδα 3p ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$) και δύο (2) στην 4s ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$).
- Τα τελευταία τρία (3) ηλεκτρόνια πάνε στην υποστιβάδα 3d, η οποία χωράει συνολικά δέκα (10) ηλεκτρόνια.

Έτσι, η ηλεκτρονιακή δομή του βαναδίου είναι:



2. Πώς κατανέμονται, στη θεμελιώδη κατάσταση, τα εικοσιέξι (26) ηλεκτρόνια στο άτομο του σιδήρου, Fe;

- Πρώτα τοποθετούνται δύο (2) ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 1s ($1s^2$).
- Μετά τοποθετούνται δύο (2) ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 2s ($1s^2 2s^2$).
- Ακολουθούν έξι (6) ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 2p ($1s^2 2s^2 2p^6$).
- Στη συνέχεια δύο (2) ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 3s ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$).
- Έξι (6) στην υποστιβάδα 3p ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$) και δύο (2) στην 4s ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$).
- Τα τελευταία έξι (6) ηλεκτρόνια πάνε στην υποστιβάδα 3d, η οποία χωράει συνολικά δέκα (10) ηλεκτρόνια.
Έτσι, η ηλεκτρονιακή δομή του σιδήρου είναι:



Μετά την εισαγωγή ηλεκτρονίων στην υποστιβάδα 3d αυτή έχει λιγότερη ενέργεια από την 4s. Ανάλογα ισχύει και για τις υποστιβάδες 4d και 5s.

ΔΕΕ 11.26: Να ορίζουν τι είναι ατομική διέγερση, δηλαδή διεγερμένη ηλεκτρονιακή κατάσταση.

Διέγερση είναι η μετάβαση ενός ή περισσότερων ηλεκτρονίων από υποστιβάδα χαμηλότερης ενέργειας σε υποστιβάδα μεγαλύτερης ενέργειας μέσα στην ίδια στιβάδα και με ταυτόχρονη δημιουργία μονήρων ηλεκτρονίων.

ΔΕΕ 11.27: Να εφαρμόζουν τη θεωρία της διέγερσης στο άτομο του άνθρακα και του θείου και να προβλέπουν τον αριθμό των δεσμών των ατόμων τους όταν βρίσκονται σε θεμελιώδη και σε διεγερμένη κατάσταση.

Άτομο του άνθρακα

Μελετώντας την ηλεκτρονιακή δομή του ατόμου του άνθρακα στη θεμελιώδη κατάσταση, η οποία είναι: $1s^2, 2s^2, 2p_x^1, 2p_y^1$, το άτομο του άνθρακα έχει στην εξωτερική στιβάδα δυο (2) μονήρη ηλεκτρόνια και επομένως θα αναμενόταν να σχηματίζει δύο (2) συνολικά ομοιοπολικούς δεσμούς. Ο άνθρακας όμως σχηματίζει τις χημικές ενώσεις CH_4 και CO_2 , όπου το άτομο του άνθρακα έχει τέσσερις (4) ομοιοπολικούς δεσμούς.

Επομένως τίθεται το ερώτημα:

Πώς το άτομο του άνθρακα μπορεί να σχηματίσει περισσότερους ομοιοπολικούς δεσμούς από ότι είναι ο αριθμός των μονήρων ηλεκτρονίων του;

Η απόκτηση περισσότερων μονήρων ηλεκτρονίων, που παρατηρείται κατά τον σχηματισμό ομοιοπολικών δεσμών, εξηγείται με την διέγερση των ατόμων.

Άρα το άτομο του άνθρακα με ατομικό αριθμό 6 και ηλεκτρονιακή δομή $1s^2, 2s^2, 2p_x^1, 2p_y^1$, έχει στην εξωτερική στιβάδα τέσσερα (4) ηλεκτρόνια, τα οποία βάση της Απαγορευτικής Αρχής του Pauli και τον Κανόνα του Hund, είναι κατανεμημένα σε ατομικά τροχιακά όπως φαίνεται στο σχήμα 7.



Σχ. 7: Κατανομή των ηλεκτρονίων της εξωτερικής στιβάδας στο άτομο του άνθρακα σε ατομικά τροχιακά, στην θεμελιώδη κατάσταση.

Με τα δυο (2) μονήρη ηλεκτρόνια το άτομο του άνθρακα μπορεί να σχηματίσει δυο ομοιοπολικούς δεσμούς π.χ στο μόριο του CO.

Διέγερση

Όταν ένα (1) ηλεκτρόνιο της στιβάδας s απορροφήσει ενέργεια προωθείται από το συμπληρωμένο τροχιακό της υποστιβάδας 2s στο διαθέσιμο κενό τροχιακό της υποστιβάδας 2p. Αποτέλεσμα της διέγερσης του ατόμου του άνθρακα είναι η δημιουργία τεσσάρων (4) μονήρων ηλεκτρονίων. Έτσι το άτομο του άνθρακα μπορεί να δημιουργήσει τέσσερις (4) ομοιοπολικούς δεσμούς, π.χ. στα μόρια του CH₄ και του CO₂.

Η ενέργεια που καταναλώνεται για την διέγερση του ατόμου υπεραντισταθμίζεται κατά τον σχηματισμό χημικών δεσμών.



Σχ. 8: Κατανομή των ηλεκτρονίων της εξωτερικής στιβάδας στο άτομο του άνθρακα σε ατομικά τροχιακά, κατά τη διέγερση.

Μετά την διέγερση τα τροχιακά 2s και 2p υβριδίζονται (συνδιάζονται) και αποκτούν την ίδια ενέργεια και σχήμα.

Άτομο του θείου:

Μελετώντας την ηλεκτρονιακή δόμηση του ατόμου του θείου στη θεμελιώδη κατάσταση, η οποία είναι: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p_x^2, 3p_y^1, 3p_z^1$, το άτομο του θείου έχει στην εξωτερική στιβάδα δυο (2) μονήρη ηλεκτρόνια και επομένως θα αναμενόταν να σχηματίζει μόνο την χημική ένωση H₂S. Το θείο σχηματίζει τις χημικές ενώσεις SO₂, όπου το άτομο του θείου σχηματίζει συνολικά τέσσερις (4) ομοιοπολικούς δεσμούς, SO₃ και H₂SO₄ όπου το άτομο του θείου σχηματίζει συνολικά έξι (6) ομοιοπολικούς δεσμούς.

Επομένως τίθεται το ερώτημα:

Πώς το άτομο του θείου μπορεί να σχηματίσει περισσότερους ομοιοπολικούς δεσμούς από ότι είναι ο αριθμός των μονήρων ηλεκτρονίων του;

Η απόκτηση περισσότερων μονήρων ηλεκτρονίων, που παρατηρείται κατά τον σχηματισμό ομοιοπολικών δεσμών, εξηγείται με την διέγερση των ατόμων.

Άρα το θείο με ατομικό αριθμό 16 και ηλεκτρονιακή δομή $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p_x^2, 3p_y^1, 3p_z^1$, έχει στην εξωτερική στιβάδα έξι (6) ηλεκτρόνια, τα οποία βάση της Απαγορευτικής Αρχής του Pauli και τον Κανόνα του Hund, είναι κατανεμημένα σε ατομικά τροχιακά όπως φαίνεται στο σχήμα 9.



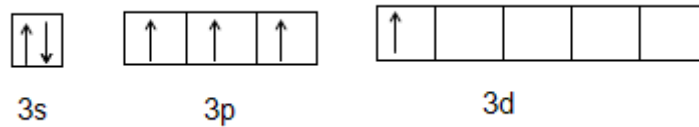
Σχ. 9: Κατανομή των ηλεκτρονίων της εξωτερικής στιβάδας στο άτομο του θείου σε ατομικά τροχιακά, στη θεμελιώδη κατάσταση.

Με τα δυο μονήρη ηλεκτρόνια το άτομο του θείου μπορεί να σχηματίσει δυο ομοιοπολικούς δεσμούς π.χ. στο μόριο του H_2S .

Πρώτη διέγερση

Όταν ένα ηλεκτρόνιο της στιβάδας p απορροφήσει ενέργεια προωθείται από το συμπληρωμένο τροχιακό της υποστιβάδας $3p$ σε ένα από τα διαθέσιμα κενά τροχιακά της υποστιβάδας $3d$. Αποτέλεσμα της διέγερσης του ατόμου είναι η δημιουργία τεσσάρων (4) μονήρων ηλεκτρονίων. Έτσι το άτομο του θείου μπορεί να δημιουργήσει συνολικά τέσσερις (4) ομοιοπολικούς δεσμούς, π.χ. στο μόριο του SO_2 .

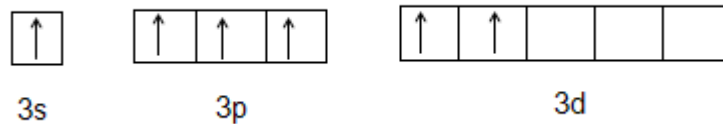
Η ενέργεια που καταναλώνεται για την διέγερση του ατόμου υπεραντισταθμίζεται κατά τον σχηματισμό χημικών δεσμών.



Σχ. 10: Κατανομή των ηλεκτρονίων της εξωτερικής στιβάδας στο άτομο του θείου σε ατομικά τροχιακά, κατά την πρώτη διέγερση.

Δεύτερη διέγερση

Κατά την δεύτερη διέγερση προωθείται και δεύτερο ηλεκτρόνιο από το τροχιακό $3s$ σε ένα από τα διαθέσιμα κενά τροχιακά της υποστιβάδας $3d$ με αποτέλεσμα το άτομο του θείου να αποκτά έξι (6) μονήρη ηλεκτρόνια στην εξωτερική του στιβάδα και να μπορεί έτσι να σχηματίσει συνολικά έξι (6) ομοιοπολικούς δεσμούς π.χ. στα μόρια του SO_3 και του H_2SO_4 .



Σχ. 11: Κατανομή των ηλεκτρονίων της εξωτερικής στιβάδας στο άτομο του θείου σε ατομικά τροχιακά, κατά τη δεύτερη διέγερση.

Μετά την διέγερση τα τροχιακά $3s$ και $3p$ υβριδίζονται (συνδιάζονται) και αποκτούν την ίδια ενέργεια και σχήμα.

Ασκήσεις

1. Να συμπληρώσετε τα κενά των πιο κάτω προτάσεων:

α) Είναι αδύνατον να προσδιορίσουμε με ακρίβεια ταυτόχρονα τη και την ενός μικρού σωματιδίου, όπως είναι το

β) Στην κβαντομηχανική δεν μιλάμε για τη θέση ενός ηλεκτρονίου, αλλά για την να βρίσκεται σε ορισμένο χώρο.

γ) Τα ατομικά τροχιακά περιγράφουν την του ηλεκτρονίου και μπορεί να υπάρχουν και

δ) Κάθε δυνατή τριάδα κβαντικών αριθμών καθορίζει ένα συγκεκριμένο τροχιακό του ατόμου.

ε) Ο κύριος κβαντικός αριθμός καθορίζει το του Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή του n τόσο πιο από τον πυρήνα είναι, κατά μέσο όρο, το

2. Να γράψετε τα τροχιακά για τη στιβάδα M.

3. Να δηλώσετε ποιες από τις πιο κάτω τετράδες κβαντικών αριθμών είναι επιτρεπτές και ποιες όχι:

I. (3, 1, -2, +1/2)

II. (4, 3, +3, -1/2)

III. (3, 0, +1, +1/2)

IV. (1, 0, 0, +1/2)

4. Για την τετράδα (2, 0, 0, +1/2) κβαντικών αριθμών να ονομάσετε: τη στιβάδα, την υποστιβάδα, το τροχιακό και το σπιν.

5. Να συμπληρώσετε τον πιο κάτω πίνακα:

Στιβάδα	Πλήθος υποστιβάδων	Πλήθος τροχιακών
M		
	2	
		16

6. (α) Αν ο κύριος κβαντικός αριθμός ενός ατομικού τροχιακού είναι 3, ποιες είναι οι επιτρεπτές τιμές του ℓ ;

(β) Αν ο αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός είναι 2, ποιες είναι οι επιτρεπτές τιμές του m_ℓ ;

7. Να γράψετε τα σύμβολα των υποστιβάδων με τους ακόλουθους κβαντικούς αριθμούς.

- α) $n=4, \ell=2$
- β) $n=2, \ell=1$
- γ) $n=2, \ell=2$
- δ) $n=4, \ell=0$

8. Να αναφέρεται ποιες από τις παρακάτω ομάδες κβαντικών αριθμών είναι επιτρεπτές για ένα ηλεκτρόνιο ατόμου και ποιες όχι.

Να εξηγήσετε την απάντησή σας.

- α) $n=0, \ell=0, m_\ell=0, m_s=+\frac{1}{2}$
- β) $n=1, \ell=1, m_\ell=0, m_s=+\frac{1}{2}$
- γ) $n=1, \ell=0, m_\ell=0, m_s=-\frac{1}{2}$
- δ) $n=2, \ell=1, m_\ell=-2, m_s=+\frac{1}{2}$
- ε) $n=2, \ell=1, m_\ell=-1, m_s=-1$

9. Ποιο από τα ακόλουθα διαγράμματα τροχιακών είναι αδύνατο σύμφωνα με την Απαγορευτική Αρχή του Pauli; Να γράψετε σύντομη εξήγηση.

- α) $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \quad \uparrow \uparrow \downarrow$
- β) $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \quad \uparrow \uparrow \circ$
- γ) $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \quad \uparrow \uparrow \downarrow$
- δ) $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \quad \uparrow \uparrow \uparrow$

10. Να γράψετε ένα διάγραμμα τροχιακών για τη θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου του:

- α) ατόμου του φωσφόρου
- β) ατόμου του καλίου
- γ) ατόμου του χλωρίου
- δ) ιόντος του ασβεστίου
- ε) ιόντος του καλίου
- στ) ιόντος του χλωρίου