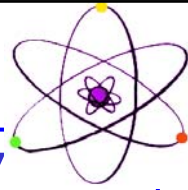


ΤΛ1001

Μάθημα-2

Άτομα & Ηλεκτρόνια



- *Άτομο Υδρογόνου*
- *Κβαντικοί αριθμοί*
- *Ατομικά Τροχιακά*

Λευτέρης Καπετανάκης



ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΚΡΗΤΗΣ
ΤΜΗΜΑ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗΣ

Άνοιξη 2010

ΣΗΜΕΙΩΣΗ: Στις διαφάνειες των διαλέξεων χρησιμοποιείται διδακτικό υλικό το οποίο έχει δανειστεί από διάφορα εκπαιδευτικά βιβλία και διαδικτυακές σελίδες. Ο εισηγητής δεν έχει καμιά αξίωση κατοχής του υλικού αυτού και το χρησιμοποιεί μόνο για λόγους διδασκαλίας εντός της τάξης. Οι εικόνες και οι πίνακες είναι κτήμα διαφόρων συγγραφέων και παρέχονται στον αντίστοιχο δικτυότόπό τους.

Η Συμπεριφορά των Διατάξεων Στερεάς Κατάστασης

- ☐ **Συνδέεται με:**
 - Την Ατομική Θεωρία
 - Την Κβαντομηχανική
 - Τα ηλεκτρονικά Μοντέλα
- ☐ **Με ποιόν τρόπο ένα ηλεκτρόνιο μεταφέρεται μέσα σε ένα κρύσταλλο ημιαγωγού**
- ☐ **Ηλεκτρονική Δομή των Ατόμων**
- ☐ **Αλληλεπίδραση των ατόμων και των ηλεκτρονίων με εξωτερική διέγερση όπως η απορρόφηση και η εκπομπή φωτός**

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 3

Φυσικά Μοντέλα

- ☐ Για την ερμηνεία ενός νέου φυσικού φαινομένου χρησιμοποιούνται, συνήθως, τα επαρκώς επαληθευμένα μοντέλα (φυσικοί νόμοι) ή οι επεκτάσεις αυτών
- ☐ **Η αξιωματική υπόθεση ενός νέου φυσικού φαινομένου απαιτείται όταν δεν υπάρχει δυνατότητα ερμηνείας νέων παρατηρήσεων με την υπάρχουσα αποδεκτή θεωρία**
- ☐ Κλασική Μηχανική (Ευδιάκριτα πράγματα σε μεγάλη κλίμακα)
- ☐ Κβαντική Μηχανική (Δυσδιάκριτα πράγματα σε ατομική κλίμακα)
 - Φύση του φωτός (δυϊσμός του φωτός= σωματιδιακή + κυματική φύση)
 - Συσχέτιση της οπτικής ενέργειας με την ενέργεια των ηλεκτρονίων μέσα στα άτομα

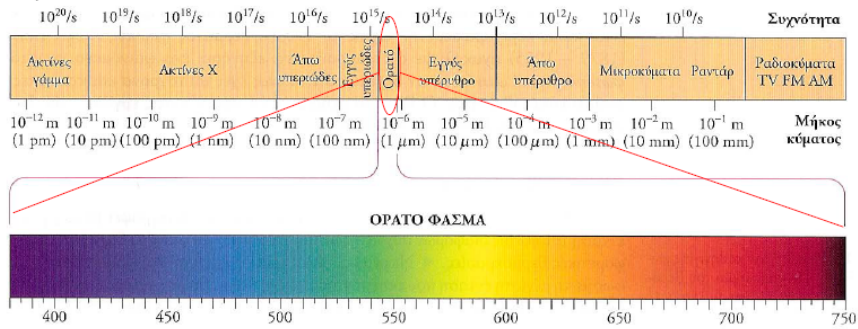
ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 4

ΚΥΜΑΤΙΚΗ ΦΥΣΗ ΤΟΥ ΦΩΤΟΣ

Το ορατό φως είναι ένα είδος **ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας**. Άλλα είδη ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας είναι οι **ακτίνες-X**, τα **μικροκύματα**, τα **ραδιοκύματα** κτλ. Το ορατό φάσμα αποτελεί μόνο ένα μικρό κομμάτι του φάσματος ηλεκτρομαγνητικών ακτινοβολιών



Η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία έχει κυματική μορφή η οποία χαρακτηρίζεται από το **μήκος κύματος** (λ , m) τη **συχνότητα** (ν , s^{-1} ή Hz), **ταχύτητα του φωτός** ($c = 2.99 \times 10^8$ m/s) μέσω των σχέσεων:

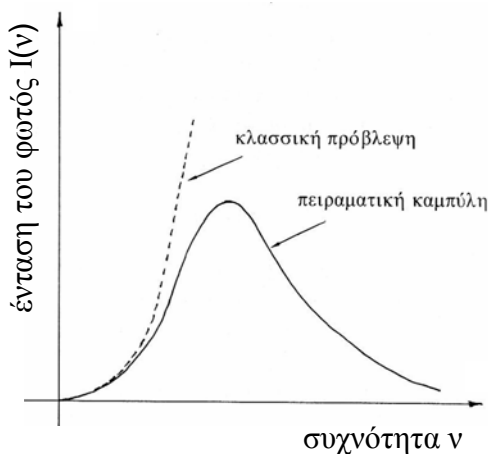
$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 5

Ακτινοβολία Μέλανος Σώματος



Φάσμα της ακτινοβολίας που εκπέμπει μια κοιλότητα μέσα σε ένα θερμό υλικό

Κλασική φυσική:

Εξηγεί μόνο τις μικρές συχνότητες του φάσματος.

Η κβαντική ερμηνεία εμπεριέγεται σε μία παραδοχή :

Planck: Η ενέργεια ενός στάσιμου κύματος μέσα στην κοιλότητα είναι κβαντωμένη.

Οι μόνες επιτρεπόμενες τιμές είναι τα ακέραια πολλαπλάσια της ποσότητας $h\nu$, με h η σταθερά του Planck.

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J-s}$$

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 6

ΕΝΑ ΚΒΑΝΤΟ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ

Ένα κβάντο φωτεινής ενέργειας (δηλαδή το φωτόνιο) έχει ενέργεια η οποία δίδεται από την σχέση: $E = h \cdot \nu$ Ο Planck έδειξε ότι η ακτινοβολία είναι ακέραιο Επίσης $E = h \cdot c / \lambda$ πολλαπλάσιο του $h\nu$, δηλαδή $h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots$ Όπου E = ενέργεια της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (J) και h = σταθερά του Planck (6.626×10^{-34} J s)

Παραδείγματα:

1. Ποία είναι η ενέργεια την οποία έχει η κίτρινη ακτινοβολία η οποία εκπέμπεται από δείγμα νατρίου (Na) κατά την ηλεκτρονική διέγερση του υλικό σε φλόγα καύσης μεθανίου αν έχει μετρηθεί φασματοσκοπικά ότι το μήκος κύματος της ακτινοβολίας είναι 589 nm ;

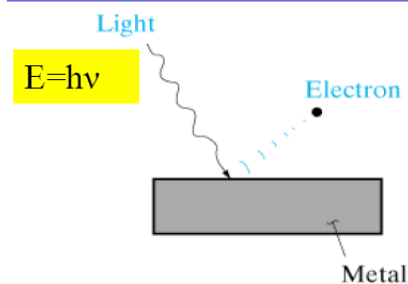
$$E = \frac{h \cdot c}{\lambda} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} \text{ (Js)} \cdot 2.997 \cdot 10^8 \text{ (ms}^{-1}\text{)}}{589 \text{ nm} \cdot \frac{10^{-9} \text{ m}}{1 \text{ nm}}} = 3.37 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

2. Ποίο είναι το μήκος κύματος ενός φωτονίου το οποίο έχει ενέργεια ίση με 4.21×10^{-19} J και τι χρώμα έχει ;

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{E} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} \text{ (Js)} \cdot 2.997 \cdot 10^8 \text{ (ms}^{-1}\text{)}}{4.21 \cdot 10^{-19} \text{ (J)}} = 472 \cdot 10^{-9} \text{ m} = 472 \text{ nm}$$

το χρώμα της ακτινοβολίας είναι ανοιχτό μπλε.

Φωτοηλεκτρικό Φαινόμενο (I)



Τα ηλεκτρόνια ενός μετάλλου απορροφούν ενέργεια από μία φωτεινή ακτινοβολία και μερικά από αυτά λαμβάνουν αρκετή ενέργεια ώστε να εξαχθούν από την επιφάνειά του μετάλλου στο κενό.

Διϋσμός του φωτός:

Το φως αποφασίζει τότε θα λειτουργεί σαν ηλεκτρομαγνητικό κύμα και τότε σαν ένα σύνολο από σωματίδια, τα φωτόνια

Αδυναμία της κλασικής φυσικής να εξηγήσει δύο βασικές παρατηρήσεις:

A) Η μέγιστη ενέργεια των εξερχόμενων ηλεκτρονίων δεν εξαρτάται από την φωτεινή ένταση παρά μόνο από τη συχνότητα της ακτινοβολίας.

B) Φωτοηλεκτρικό ρεύμα εμφανίζεται μόνο όταν η φωτεινή συχνότητα ν είναι μεγαλύτερη από μία ελάχιστη τιμή $\nu_{\min}$ χαρακτηριστική του υλικού του μετάλλου.

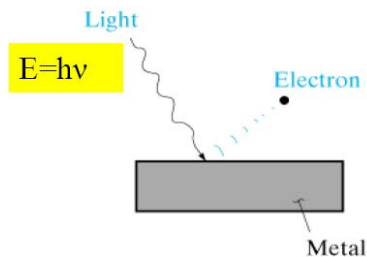
Η κβαντική φυσική σε μία προσπάθεια εξήγησης υπέθεσε την ύπαρξη των φωτονίων :

Einstein: Σωματιδιακή φύση του φωτός = Το φως αποτελείται από κβάντα ενέργειας που ονομάζονται φωτόνια, όπου h η σταθερά του Planck και ν η συχνότητα του κύματος.

Φωτοηλεκτρικό Φαινόμενο (II)

Τα ηλεκτρόνια του μετάλλου «συγκρούονται» με τα προσπίπτοντα φωτόνια, αυξάνουν την ενέργειά τους και φεύγουν από το υλικό.

Η ενέργεια που δέχονται τα ηλεκτρόνια εξαρτάται μόνο από την ενέργεια των φωτονίων, δηλ από τη συχνότητα της φωτεινής δέσμης.



$$E_m = h\nu - q\Phi$$

(Η μέγιστη ενέργεια των ηλεκτρονίων που εκπέμπονται
 $E_m = E$ προσπίπτοντος φωτός – Έργο εξαγωγής μετάλλου)

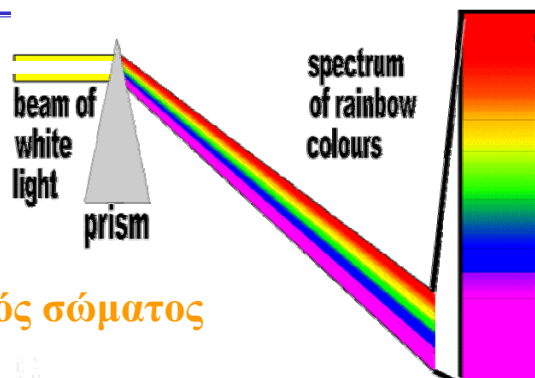
ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

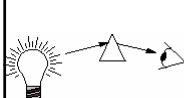
Slide 9

Φάσματα

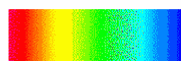
Με την βοήθεια ενός πρίσματος κάποιος μπορεί να αναλύσει το λευκό φως στα διάφορα χρώματα του ουράνιου τόξου → **φάσμα ορατού φωτός**



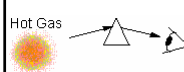
Φάσμα εκπομπής ενός σώματος



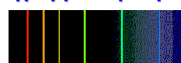
συνεχές φάσμα



Εάν το εκπέμπον σώμα είναι ένα **διάπυρο στερεό** (π.χ. σύρμα βολφραμίου σε ένα λαμπτήρα φωτισμού) **το φάσμα του είναι συνεχές**, δηλαδή μία συνεχής ταινία με τα χρώματα σε συνεχή σειρά (από το ερυθρό προς το ιώδες)



γραμμικό φάσμα



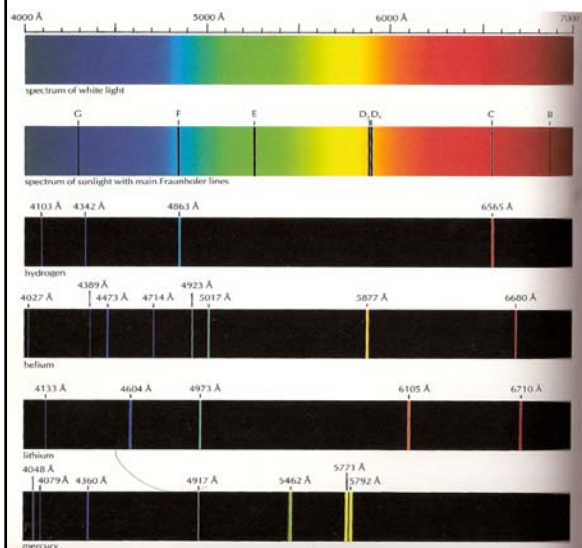
Εάν το εκπέμπον σώμα είναι **αέριο ή ατμός** (π.χ. αέριο στο οποίο γίνεται ηλεκτρική εκκένωση) **το φάσμα του θα είναι γραμμικό**, μια σειρά δηλαδή από λεπτές λωρίδες.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 10

Ατομικά Φάσματα



Τα ατομικά φάσματα είναι **γραμμικά φάσματα**. Τα ατομικά φάσματα κάθε στοιχείου είναι διαφορετικά έτσι μπορούν να χρησιμοποιηθούν για ταυτοποίηση κάποιου στοιχείου σε μείγμα ατόμων διαφόρων στοιχείων.

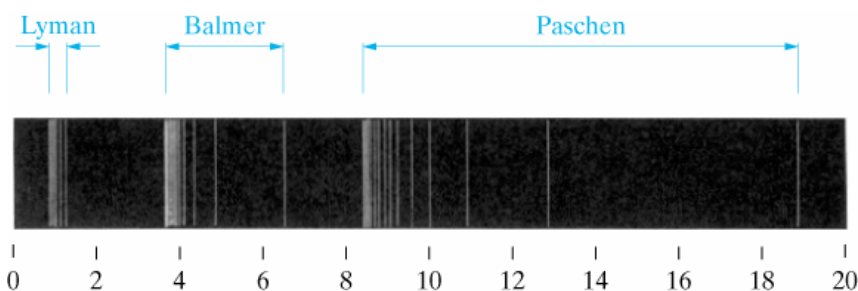
ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 11

Φάσμα Υδρογόνου

Μερικές σημαντικές γραμμές στο φάσμα εκπομπής του H



Μήκος Κύματος (λ) (χιλιάδες angstroms)

($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$)

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 12

Φάσμα Υδρογόνου

Οι σειρές των φασματικών γραμμών σε διαφορετικές περιοχές της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας μπορούσαν να περιγραφούν από εμπειρικές εξισώσεις, όπως φαίνεται παρακάτω

Lyman: $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 2, 3, 4, \dots$ Περιοχή υπεριώδους

Balmer: $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 3, 4, 5, \dots$ ορατή περιοχή

Paschen: $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 4, 5, 6, \dots$ Περιοχή υπερύθρων

R είναι η σταθερά Rydberg ($1.0974 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$)

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 13

ΑΤΟΜΙΚΟ ΠΡΟΤΥΠΟ BOHR: Μοντέλο Υδρογόνου

Ερώτημα 1: Σταθερότητα ατόμου

Ερώτημα 2: Διακριτικοποίηση τροχιών

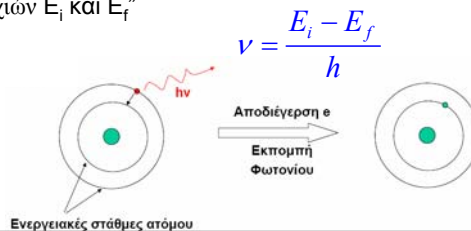
- Κλασική Μηχανική

- Κλασική Ηλεκτρομαγνητική θεωρία

Αξιώματα Bohr

1^ο αξίωμα Bohr: “τα ηλεκτρόνια θα πρέπει να κινούνται μόνο σε διακριτές τροχιές, τις στάσιμες (stationary), στις οποίες δεν επιτρέπεται η εκπομπή ακτινοβολίας”

2^ο αξίωμα Bohr: “Τα ηλεκτρόνια επιτρέπεται να εκπέμπουν ακτινοβολία μόνο όταν μεταπίπτουν από μια στάσιμη τροχιά υψηλής ενέργειας σε μια άλλη χαμηλότερης ενέργειας. Η συχνότητα της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας (ν) δεν συμπίπτει με τη συχνότητα της κυκλικής κίνησης του ηλεκτρονίου σε καμία από τις δύο στάσιμες τροχιές, αλλά σχετίζεται με τις ενέργειες των στάσιμων τροχιών E_i και E_f ”



ΤΛ1001 – 2010

Slide 14

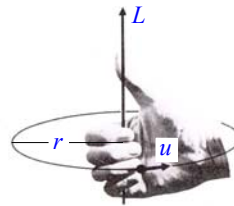
ΑΤΟΜΙΚΟ ΠΡΟΤΥΠΟ ΒΟΗΡ: Μοντέλο Υδρογόνου

Αξιιώματα Bohr (συνέχεια)

3^ο αξίωμα Bohr: Κβάντωση στροφορμής

$$L = m \cdot u \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Καθορισμός της φοράς του διανύσματος της τροχιακής στροφορμής του ηλεκτρονίου L.



ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 15

ΑΤΟΜΙΚΟ ΠΡΟΤΥΠΟ ΒΟΗΡ: Μοντέλο Υδρογόνου

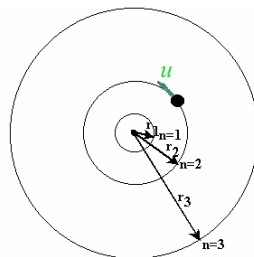
Υπολογισμός ακτίνας στάσιμων τροχιών στο άτομο υδρογόνου

- Συνθήκη Μηχανικής Σταθερότητας του Ατόμου του Υδρογόνου

$$|F_{Coulomb}| = F_K \Rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e \cdot e}{r^2} = m \cdot \frac{u^2}{r} \Rightarrow r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m u^2}$$

- Κβάντωση στροφορμής

$$m \cdot u \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$



$$r = \left(\frac{\epsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot m \cdot e^2} \right) \cdot n^2$$

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 16

ΑΤΟΜΙΚΟ ΠΡΟΤΥΠΟ ΒΟΗΡ: Μοντέλο Υδρογόνου

Προσδιορισμός ενέργειας στάσιμων τροχιών

- Ολική Ενέργεια = Κινητική Ενέργεια + Δυναμική Ενέργεια*

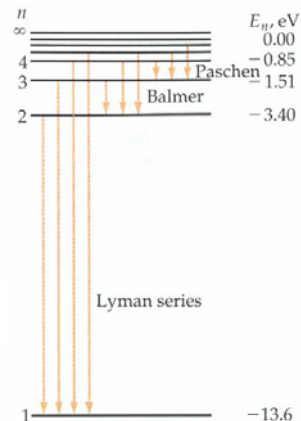
$$E_n = K_n + U_n = \frac{1}{2} m \cdot u^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e(-e)}{r_n}$$

- Κβάντωση στροφορμής

$$m \cdot u \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$

$$E_n = - \frac{e^4 \cdot m}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2} = - \frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

$13,6 \text{ eV} \equiv 1 R_H$

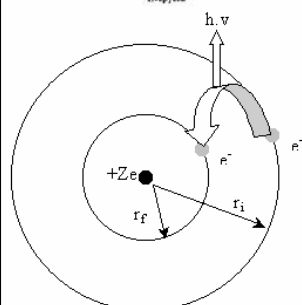
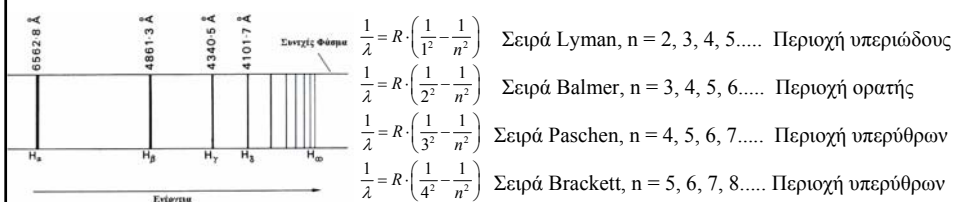


*Η δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου

= γινόμενο της ηλεκτροστατικής δύναμης και της απόστασης μεταξύ των φορτίων

ΑΤΟΜΙΚΟ ΠΡΟΤΥΠΟ ΒΟΗΡ: Μοντέλο Υδρογόνου

Εξήγηση ατομικού φάσματος υδρογόνου



Για το άτομο του υδρογόνου $Z = 1$

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

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{R_H}{h \cdot c} \cdot \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\text{με } \frac{R_H}{h \cdot c} = R \quad (\text{σταθ. Rydberg})$$

Η σταθερά αυτή χρησιμοποιείται, συνήθως, στην ατομική φυσική με τη μορφή ενέργειας

$$hcR \sim 13,6 \text{ eV} \equiv 1 R_H$$

ΑΣΚΗΣΗ

ΕΡΩΤΗΜΑ: Ποιό είναι το μήκος κύματος φωτονίου σε nm, το οποίο εκπέμπεται από το άτομο του υδρογόνου κατά την αποδιέγερση ηλεκτρονίου από την ενεργειακή στάθμη $n = 5$ στην ενεργειακή στάθμη $n = 2$;

ΛΥΣΗ: Από τα δεδομένα της άσκησης γνωρίζουμε ότι $n_i = 5$ $n_f = 2$

Επίσης γνωρίζουμε την σχέση $\Delta E = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \Rightarrow$

$13,6 \text{ eV} \sim 2,18 \times 10^{-18} \text{ J}$ $\Delta E = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J} \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{2^2} \right) \Rightarrow$
 $\Delta E = -4,58 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

Το μήκος κύματος δίνεται από την σχέση:

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{\Delta E} \Rightarrow \lambda = \frac{(2,997 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1})(6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js})}{4,58 \cdot 10^{-19} \text{ J}} = 4,33 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 433 \text{ nm}$$

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

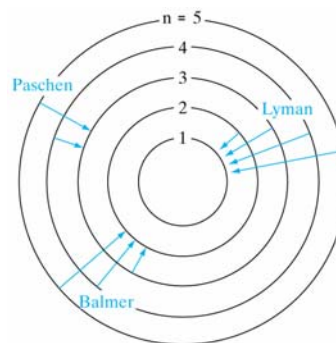
Slide 19

ΑΤΟΜΙΚΟ ΠΡΟΤΥΠΟ ΒΟΗΡ: Μοντέλο Υδρογόνου

Το μοντέλο Bohr μπορεί να περιγράψει με ακρίβεια τα χοντροειδή χαρακτηριστικά του φάσματος **υδρογόνου**.

Όμως, η επέκταση του μοντέλου σε πιο πολύπλοκα άτομα από το υδρογόνο είναι δύσκολη.

Η ανάγκη για μια θεωρία με μεγαλύτερο εύρος εφαρμογής, οδήγησε τελικά στην ανάπτυξη της **κβαντικής θεωρίας**.



ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 20

Κβαντομηχανική Προσέγγιση

Διαδική φύση του ηλεκτρονίου

1924: Louis de Broglie “Το e έχει σωματιδιακές και κυματικές ιδιότητες”

Προσδιορισμός συχνότητας και μήκους κύματος ηλεκτρονικών κυμάτων

$$v = \frac{E}{h}$$

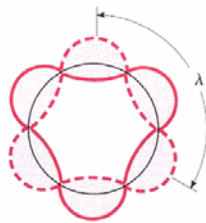
$$\lambda = \frac{h}{p}$$

ορμή του $e = mv$

Τι είναι οι στάσιμες τροχιές;

3^ο Αξίωμα Bohr: $m \cdot v \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi} \Rightarrow p \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi} \Rightarrow \frac{h}{\lambda} \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi} \Rightarrow 2\pi \cdot r = n \cdot \lambda$

Συνθήκη στάσιμου κύματος κλασικής κυματικής θεωρίας



Θεωρητική εξήγηση

- α) της διακριτικοποίησης τροχιών και
- β) της σταθερότητας του ατόμου

Η κβάντωση των στάσιμων τροχιών οδηγεί μονοσήμαντα στη κβάντωση των συχνοτήτων και ενεργειών τους

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 21

Κβαντομηχανική Προσέγγιση

Αρχή Απροσδιοριστίας Heisenberg

1926: Heisenberg “όσο αυξάνει η ακρίβεια προσδιορισμού της θέσης ενός ηλεκτρονίου τόσο μικραίνει η ακρίβεια προσδιορισμού της ταχύτητάς του ή αυξάνει η αβεβαιότητα προσδιορισμού της”

$$\Delta x \cdot \Delta u \geq \frac{h}{4\pi}$$

Η αρχή απροσδιοριστίας κάνει σαφές ότι είναι αδύνατο να γνωρίζουμε ακριβώς τόσο τη θέση όσο και τη ταχύτητα ενός ηλεκτρονίου. Συνεπώς, η ντετερμινιστική ιδέα του Bohr ότι ένα ηλεκτρόνιο ακολουθεί πλήρως καθορισμένη τροχιά, όπου η θέση και η ταχύτητά του είναι ακριβώς γνωστές, είναι ουτοπική και γιατί πρέπει να αντικατασταθεί με την πιθανότητα να βρίσκεται ένα ηλεκτρόνιο σε μια θέση ή καλύτερα σε μια περιοχή του τρισδιάστατου χώρου γύρω από τον πυρήνα.

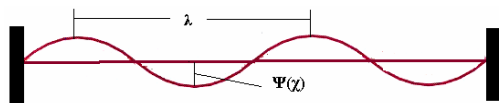
Ο Heisenberg και ο de Broglie έδωσαν τα θεωρητικά εργαλεία για μια ικανοποιητική περιγραφή του ατόμου και ώθησαν τον Erwin Schrödinger να αναπτύξει την κβαντομηχανική θεωρία.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 22

Από την Τροχιά (Orbit) στο Τροχιακό (Orbital)



$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \Psi$$

Στο τρισδιάστατο χώρο όπου διαδίδονται τα ηλεκτρονικά κύματα:

$$\nabla^2\Psi = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \Psi$$

Χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger:

$$\nabla^2\Psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} \cdot (E - U) \cdot \Psi = 0$$

Ολική
Ενέργεια

Δυναμική
Ενέργεια

Κάθε κυματοσυνάρτηση Ψ που αποτελεί λύση της εξίσωσης Schrödinger περιγράφει ένα τροχιακό. Σαν τροχιακή κατάσταση ηλεκτρονίου ή απλά τροχιακό ονομάζεται η περιοχή του χώρου μέσα στην οποία υπάρχει μεγάλη πιθανότητα να βρίσκεται το ηλεκτρόνιο. Η πιθανότητα δε αυτή είναι ανάλογη του τετραγώνου της κυματοσυνάρτησης Ψ δίνοντας πλέον με αυτό τον τρόπο φυσική σημασία σε αυτό το μέγεθος.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 23

Ατομο Υδρογόνου: Λύση της Εξίσωσης Schrödinger

Η δυναμική ενέργεια στην περίπτωση αυτή οφείλεται στην έλξη πρωτονίου-ηλεκτρονίου και είναι δυναμική ενέργεια Coulomb:

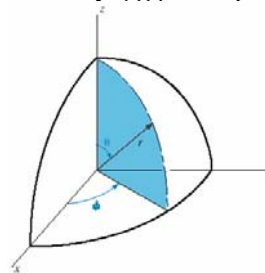
$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

όπου r είναι η απόσταση ηλεκτρονίου-πυρήνα (ο πυρήνας λαμβάνεται ως αρχή των αξόνων).

Το κατάλληλο σύστημα συνετεταγμένων για τη μελέτη του προβλήματος αυτού, είναι το σφαιρικό: $r=(r,\theta,\phi)$

Η εξ. Schrodinger χωρίζεται στο σύστημα αυτό, ενώ δεν χωρίζεται στο καρτεσιανό.

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$



Λύνοντας την εξ. Schrodinger για το άτομο του Υδρογόνου βρίσκουμε τις κυματοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν στις επιτρεπτές καταστάσεις του ηλεκτρονίου στο σύστημα,

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = R_n(r)\Theta_{l,m_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi)$$

καθώς και τις επιτρεπτές ενέργειες,

$$E_n = -\frac{e^4 \cdot m}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$

Περιγραφή Κβαντικής Κατάστασης Ηλεκτρονίου

ΟΙ ΚΒΑΝΤΙΚΟΙ ΑΡΙΘΜΟΙ

Οι κβαντικοί αριθμοί, n , l και m_l , προκύπτουν από τις λύσεις των εξισώσεων R , Θ και Φ , αντίστοιχα, ως συνέπεια των απαιτήσεων που πρέπει να ικανοποιούν οι κυματοσυναρτήσεις, ώστε να είναι παραδεκτές.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 25

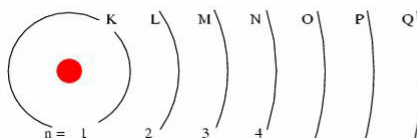
Περιγραφή Κβαντικής Κατάστασης Ηλεκτρονίου

Ο κύριος κβαντικός αριθμός n

Παίρνει ακέραιες τιμές $1, 2, 3 \dots \infty$.

Καθορίζει το μέγεθος του ηλεκτρονιακού νέφους (ή τροχιακού). Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή του n τόσο πιο απομακρυσμένο από τον πυρήνα είναι, κατά μέσο όρο, το ηλεκτρονιακό νέφος.

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



ΤΛ1001 – 2010

Slide 26

Περιγραφή Κβαντικής Κατάστασης Ηλεκτρονίου

Ο δευτερεύων ή αξιμουθιακός ή τροχιακός κβαντικός αριθμός (l)

Παίρνει τιμές ανάλογα με την τιμή που έχει ο n , δηλαδή, 0, 1, 2, ..., ($n-1$).

Καθορίζει το σχήμα του ηλεκτρονιακού νέφους (τροχιακού).

Αξιμουθιακός κβαντικός αριθμός, l	0	1	2	3	
υποστιβάδα	s	p	d	f	
τροχιακά	s	p	d	f	

s = sharp, p = principal, d = diffuse, f = fundamental

Περιγραφή Κβαντικής Κατάστασης Ηλεκτρονίου

Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l)

Παίρνει τιμές ανάλογα με την τιμή του l και συγκεκριμένα παίρνει τις τιμές: $-l, (-l+1), \dots, 0, \dots, l, (l-1), +l$.

Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_l καθορίζει τον προσανατολισμό του ηλεκτρονιακού νέφους σε σχέση με τους άξονες x, y, z . Σε κάθε τιμή του μαγνητικού κβαντικού αριθμού αντιστοιχεί και ένα τροχιακό.

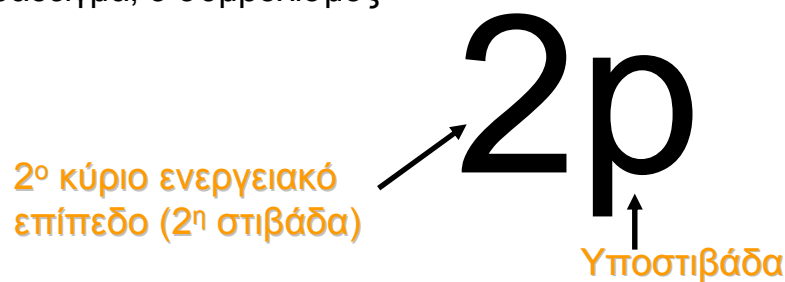
μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_l	+1	0	-1
δευτερεύων κβαντικός αριθμός $l=1$ τροχιακά	p_x	p_z	p_y

μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_l	+2	+1	0	-1	-2
δευτερεύων κβαντικός αριθμός $l=2$ τροχιακά	$d_{x^2-y^2}$	d_{xz}	d_z^2	d_{yz}	d_{xy}

Συμβολισμός ατομικών τροχιακών

Τα τροχιακά συμβολίζονται με τον κύριο κβαντικό αριθμό n που περιγράφει το κύριο ενεργειακό επίπεδο (στιβάδα) στο οποίο ανήκει το τροχιακό, ακολουθούμενο από το γράμμα που συμβολίζει το είδος του τροχιακού (δηλ. την υποστιβάδα $s, p, d, f, \dots$).

Για παράδειγμα, ο συμβολισμός



ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 29

Διαίρεση ενεργειακών σταθμών σε τροχιακά

Κβαντικοί αριθμοί			Τροχιακά		Συμβολισμός
n	l	m _l	Είδος	Αριθμός	
1	0	0	s	1	1s
2	0	0	s	1	2s
	1	-1,0,+1	p	3	2p
3	0	0	s	1	3s
	1	-1,0,+1	p	3	3p
	2	-2,-1,0,+1,+2	d	5	3d
4	0	0	s	1	4s
	1	-1,0,+1	p	3	4p
	2	-2,-1,0,+1,+2	d	5	4d
	3	-3,-2,-1,0,+1,+2,+3	f	7	4f

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 30

Στιβάδα	Υποστιβάδα	Τροχιακό
$n = 3$	$l = 2$ d	$+2$ $+1$ 0 -1 -2 $3d$
	$l = 1$ p	$+1$ 0 -1 $3p$
	$l = 0$ s	0 $3s$
$n = 2$	$l = 1$ p	$+1$ 0 -1 $2p$
	$l = 0$ s	0 $2s$
$n = 1$	$l = 0$ s	0 $1s$
n	l	m_l

ΤΑ1001 – 2010 L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια Slide 31

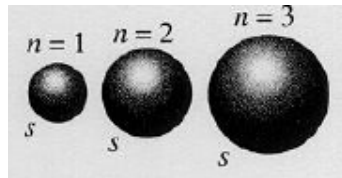
Απεικόνιση ατομικών τροχιακών

Η απεικόνιση των τροχιακών είναι πολύ δύσκολη διαδικασία, διότι τα τροχιακά περιγράφουν την πιθανότητα να βρίσκεται το ηλεκτρόνιο σε μια περιοχή γύρω από τον πυρήνα.

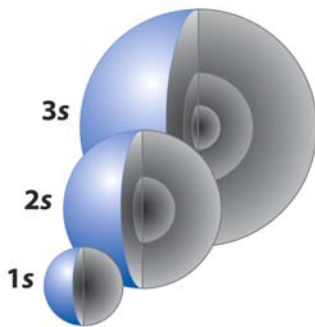
Συνήθως, τα ατομικά τροχιακά απεικονίζουν περιοχές του χώρου γύρω από τον πυρήνα στην επιφάνεια των οποίων υπάρχει πιθανότητα, συνήθως 90%, να βρίσκεται ένα ηλεκτρόνιο.

Γεωμετρία των ατομικών τροχιακών **s**

Τα τροχιακά **s** ορίζουν **σφαιρικές περιοχές** γύρω από τον πυρήνα.



Κάθε κύρια ενεργειακή στάθμη (στιβάδα) έχει ένα μόνο **s** τροχιακό, το μέγεθος του οποίου αυξάνει, καθώς αυξάνεται ο κύριος κβαντικός αριθμός n .



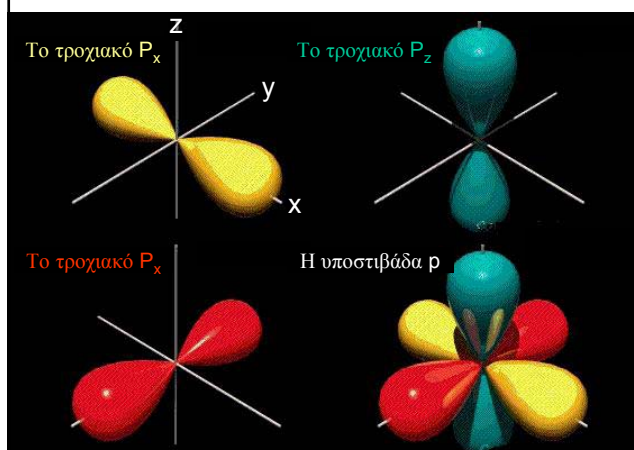
Τα **s** τροχιακά όλων των στιβάδων δομούνται στο χώρο, όπως ακριβώς δομείται και το κρεμμύδι με τα διαδοχικά του στρώματα.

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 33

Γεωμετρία των ατομικών τροχιακών **p**

Τα τροχιακά **p** έχουν δύο λοβούς εκατέρωθεν του πυρήνα (μοιάζουν σαν οχτάρια εκ περιστροφής).



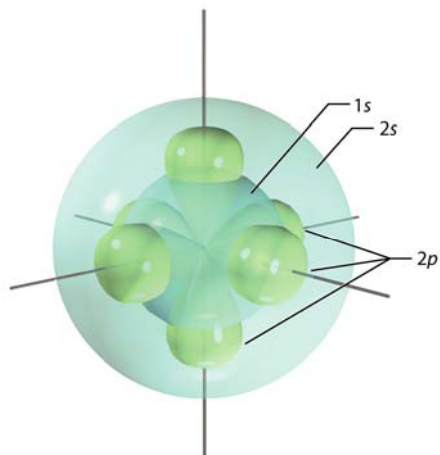
Κάθε κύρια ενεργειακή στάθμη με $n \neq 1$ έχει τρία **p** τροχιακά.

Τα τρία εκφυλισμένα **p** τροχιακά συμβολίζονται ως **p_x , p_y , p_z** .

Οι λοβοί των **p_x , p_y , p_z** τροχιακών κατευθύνονται κατά μήκος των αξόνων x , y , z ενός καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων που έχει αρχή τον πυρήνα.

Αυτή η χωροταξική διεύθυνση των **p** ατομικών τροχιακών επιτρέπει στα ηλεκτρόνια τους να βρίσκονται στη μεγαλύτερη δυνατή απόσταση το ένα από το άλλο.

Γραφική αναπαράσταση των 1s, 2s και 2p ατομικών τροχιακών



From Conceptual Chemistry, Second Edition by John Suckrook, Copyright © 2004 Benjamin Cummings, a division of Pearson Education.



Αυτή η αναπαράσταση μας φέρνει στο μυαλό το διδιάστατο «Πλανητικό» μοντέλο απεικόνισης του ατόμου

ΤΛ1001 – 2010

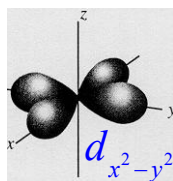
L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 35

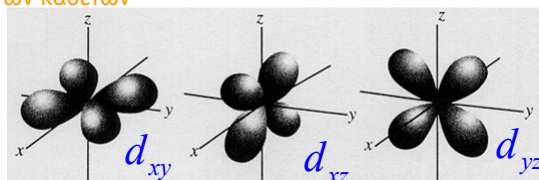
Γεωμετρία των ατομικών τροχιακών d

Κάθε κύρια ενεργειακή στάθμη με $n \geq 3$ έχει πέντε d τροχιακά, η μορφή των οποίων είναι πολύπλοκη τόσο στο σχήμα όσο και στον προσανατολισμό.

Τα τέσσερα από αυτά περιγράφονται με ένα σύστημα τεσσάρων λοβών που κατευθύνονται κατά μήκος δύο αξόνων καθέτων μεταξύ τους.

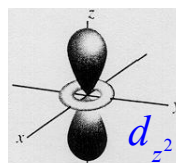


οι τέσσερις λοβοί κατευθύνονται κατά μήκος των αξόνων x, y ενός καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων που έχει αρχή τον πυρήνα.



οι τέσσερις λοβοί κατευθύνονται κατά μήκος καθέτων αξόνων που σχηματίζουν γωνίες 45° με τους άξονες x, y, z.

Το πέμπτο d ατομικό τροχιακό αποτελείται από ένα σύστημα δύο λοβών που διευθύνονται κατά μήκος του άξονα των z και ένα δακτύλιο υψηλής ηλεκτρονικής πυκνότητας που βρίσκεται στο επίπεδο xy και περιβάλλει το πυρήνα.

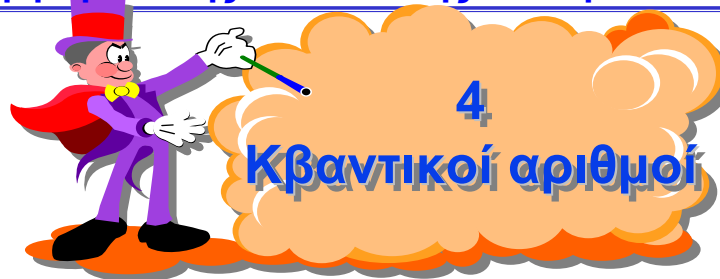


ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 36

Περιγραφή Κβαντικής Κατάστασης Ηλεκτρονίου



n ---> στιβάδα	1, 2, 3, 4, ... n
l ---> υποστιβάδα	0, 1, 2, ... $n - 1$
m_l ---> τροχιακό	$-l \dots 0 \dots +l$
m_s ---> spin e	$+1/2$ ή $-1/2$

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

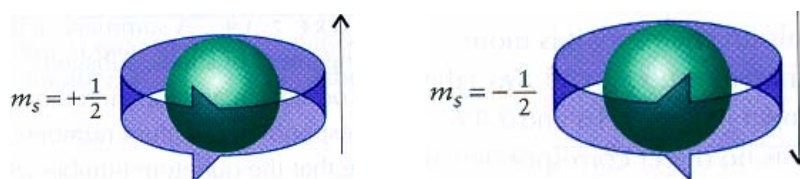
Slide 37

Περιγραφή Κβαντικής Κατάστασης Ηλεκτρονίου

Ο κβαντικός αριθμός του spin m_s είναι ο μόνος ο οποίος δεν προκύπτει από την εξίσωση του Schrödinger

Κάθε ηλεκτρόνιο μέσα σε ένα τροχιακό εκτός από την περιφορά του γύρω από τον πυρήνα περιφέρεται και γύρω από τον εαυτό του. Επομένως τα ηλεκτρόνια έχουν ιδιοστροφορμή (spin).

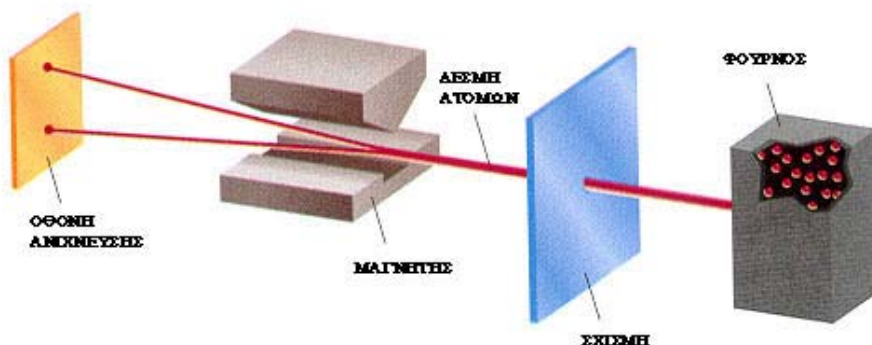
Ο κβαντικός αριθμός του spin παίρνει τιμές $+1/2$ ή $-1/2$ είναι δηλαδή ανεξάρτητος από τις τιμές των άλλων κβαντικών αριθμών.



ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 38



ΣΧΗΜΑ 2.44: Πείραμα Stern-Gerlach για την απόδειξη του spin:
 Δέσμη ατόμων με μονήρες ηλεκτρόνιο (π.χ. αλκαλίων) περνά από μια λεπτή σχισμή και στη συνέχεια από μαγνητικό πεδίο, οπότε διαχωρίζεται σε δύο επιμέρους δέσμες. Η μια αντιστοιχεί σε άτομα με αριστερόστροφο spin ηλεκτρονίων και η άλλη σε δεξιόστροφο.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

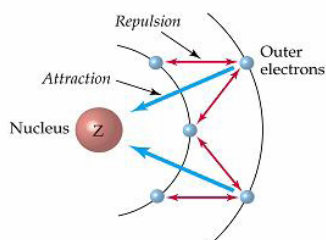
Slide 39

Πολυηλεκτρονικά άτομα

Η **κυματική εξίσωση του Schrödinger** δίνει ικανοποιητικές λύσεις για συστήματα τα οποία περιέχουν δυο μόνο αλληλεπιδρώντα σωματίδια. Τέτοια συστήματα είναι π.χ. το άτομο του Υδρογόνου (που διαθέτει ένα μόνο ηλεκτρόνιο).

Στα **πολυηλεκτρονικά** όμως άτομα, δηλαδή άτομα με περισσότερα από ένα ηλεκτρόνια στο ηλεκτρονικό τους περίβλημα, οι δυσκολίες για την επίλυση της κυματικής εξίσωσης του Schrödinger αυξάνονται καθώς αυξάνεται ο αριθμός των αλληλεπιδρώντων σωματιδίων.

Ενώ λοιπόν στο άτομο του Υδρογόνου και στα υδρογονοειδή ιόντα θεωρούμε ότι υπάρχουν μόνο ελκτικές δυνάμεις μεταξύ πυρήνα και ηλεκτρονίου, στα **πολυηλεκτρονικά** άτομα πέρα από τις αλληλεπιδράσεις πυρήνα-ηλεκτρονίων υπάρχουν και οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων.



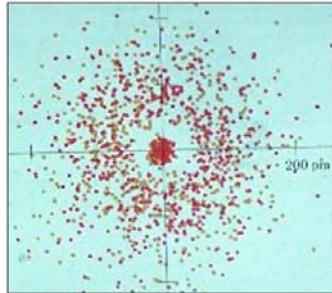
Στο άτομο του Υδρογόνου υπάρχουν μόνο ελκτικές δυνάμεις μεταξύ πυρήνα και ηλεκτρονίου, στα **πολυηλεκτρονικά** άτομα πέρα από τις αλληλεπιδράσεις πυρήνα-ηλεκτρονίων υπάρχουν και οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων.

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 40

Πολυηλεκτρονικά άτομα

Στα παρακάτω σχήματα που αποδίδουν σχηματικά ή με υπολογιστή αντίστοιχα το ηλεκτρονικό νέφος πολυηλεκτρονικών ατόμων βλέπουμε ότι υπάρχει ένα συνεχές ηλεκτρονικό νέφος με αυξανόμενη πυκνότητα. Το νέφος αποτελείται από όλα τα ηλεκτρόνια του ατόμου και είναι αδύνατο να ειπωθεί πού ακριβώς τελειώνει η πιθανότητα κατανομής του νέφους του ενός ηλεκτρονίου και πού αρχίζει του άλλου.



Η δυνατότητα λοιπόν να ληφθούν ακριβείς συναρτήσεις, για κάθε ηλεκτρόνιο ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου, οι οποίες να περιλαμβάνουν το σύνολο των αλληλεπιδράσεων είναι αδύνατη, και γι αυτό η επίλυση της εξίσωσης του Schrödinger για τα πολυηλεκτρονικά άτομα δεν είναι ακριβής. Είναι επομένως απαραίτητο, για την μελέτη των κυματοσυναρτήσεων των πολυηλεκτρονικών ατόμων να γίνουν **κάποιες παραδοχές** ώστε με κάποιες προσεγγίσεις η εξίσωση του Schrödinger να χρησιμοποιηθεί και στα πολυηλεκτρονικά άτομα.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 41

Πολυηλεκτρονικά άτομα: Παραδοχές

- A)** Στα πολυηλεκτρονικά άτομα διατηρούνται οι στιβάδες και οι υποστιβάδες μόνο που σε αυτή την περίπτωση δεν έχουν την ακρίβεια που έχουν στο άτομο του Υδρογόνου.
- B)** Στα πολυηλεκτρονικά άτομα υφίστανται τα ατομικά τροχιακά του ατόμου του Υδρογόνου και ότι αυτά χαρακτηρίζονται από τους ίδιους κβαντικούς αριθμούς με την ίδια φυσική σημασία όπως ορίστηκαν από την εξίσωση του Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 42

Πολυηλεκτρονικά άτομα: Ενέργεια τροχιακών

Στο άτομο του Υδρογόνου η ενέργεια ενός τροχιακού εξαρτάται μόνο από τον n και όχι από τον l και γιαυτό τροχιακά με τον ίδιο n αλλά διαφορετικό l (π.χ. $2s$, $2p$) έχουν την ίδια ενέργεια, θεωρούνται δηλαδή ενεργειακά εκφυλισμένα. Στα **πολυηλεκτρονικά** άτομα όμως η ενέργεια ενός τροχιακού επηρεάζεται επιπλέον και από τις αλληλεπιδράσεις των ηλεκτρονίων, επομένως καθορίζεται και από τον δευτερεύοντα κβαντικό αριθμό l , δηλαδή από το σχήμα των τροχιακών.

Αυτό που ισχύει γενικά είναι ότι, η δυναμική ενέργεια ενός ηλεκτρονίου που βρίσκεται κάτω από την έλξη του πυρήνα ελαττώνεται όσο μεγαλώνουν οι ελκτικές δυνάμεις του πυρήνα και αυξάνεται όσο μεγαλώνουν οι απωστικές δυνάμεις που δέχεται από τα άλλα ηλεκτρόνια.



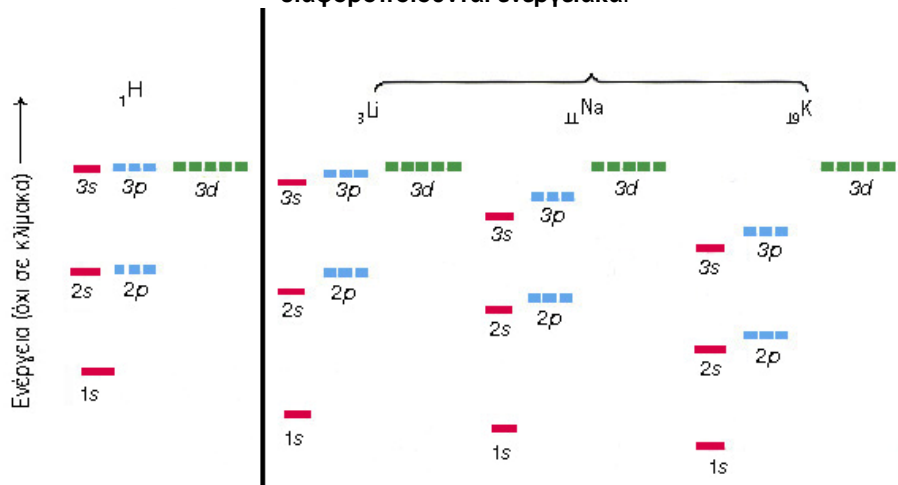
Η ενέργεια λοιπόν ενός συγκεκριμένου τροχιακού του ατόμου του Υδρογόνου διαφέρει από την ενέργεια του ίδιου τροχιακού πολυηλεκτρονιακού ατόμου διότι οι ελκτικές και οι απωστικές δυνάμεις που ασκούνται πάνω τους είναι διαφορετικές.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 43

Ο **ενεργειακός εκφυλισμός** που παρατηρείται στο άτομο του Υδρογόνου σε τροχιακά με τον ίδιο κύριο κβαντικό αριθμό, **αίρεται στα πολυηλεκτρονικά άτομα** με αποτέλεσμα τροχιακά με τον ίδιο κύριο κβαντικό αριθμό n και διαφορετικό δευτερεύοντα l , **διαφοροποιούνται ενεργειακά**.



Ενεργειακές στάθμες των τροχιακών του H (αριστερά) και των πολυηλεκτρονικών ατόμων Li , Na , K (δεξιά).

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 44

Πολυηλεκτρονικά άτομα: Αρχή της δομής

Για να βρούμε την **ηλεκτρονική δομή των ατόμων** όλων των στοιχείων στη θεμελιώδη τους κατάσταση θα θεωρήσουμε ότι ο πυρήνας του ατόμου περιβάλλεται από κενά τροχιακά και θα τα γεμίσουμε προσθέτοντας σταδιακά ηλεκτρόνια με βάση την **Αρχή της Δομής**.

Η **Αρχή της Δομής** είναι ο συνδυασμός

της **Αρχής ελάχιστης ενέργειας**,

της **Απαγορευτικής αρχής του Pauli** και

της **Αρχής του Hund**

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 45

Αρχή Ελάχιστης Ενέργειας

“Τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν πρώτα τα διαθέσιμα ατομικά τροχιακά χαμηλότερης ενέργειας και μετά, εφόσον υπάρχει περίσσεια ηλεκτρονίων, καταλαμβάνουν τροχιακά υψηλότερης ενέργειας δημιουργώντας μια δομή με τη μικρότερη δυνατή ενέργεια ”

Ενέργειες τροχιακών

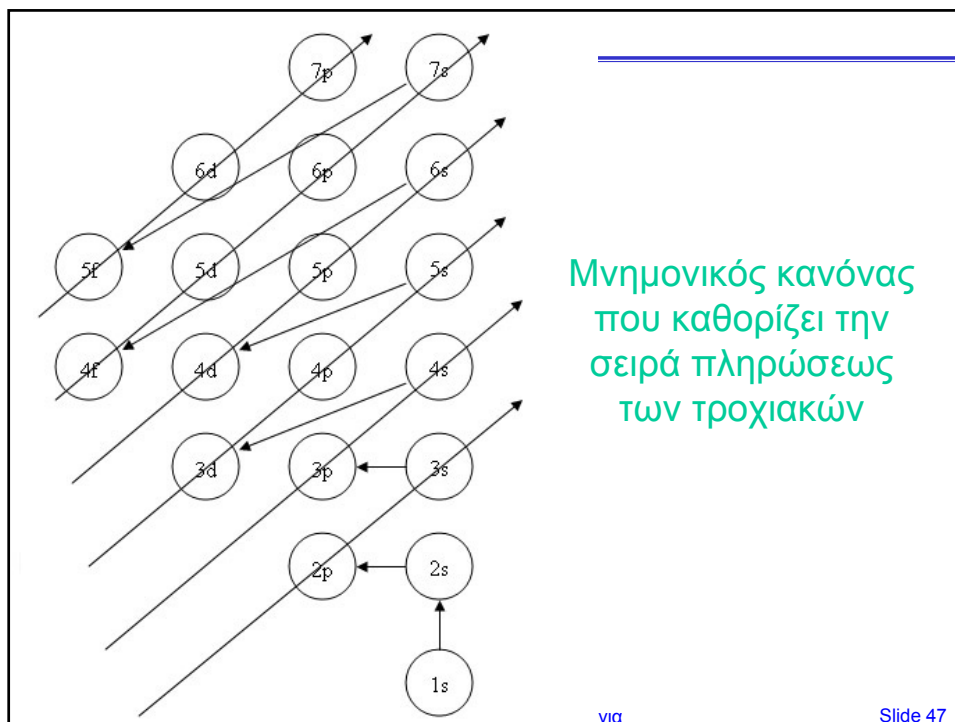


Γενικότερα η αύξηση της ενέργειας των τροχιακών άρα και η σειρά πληρώσεώς τους με ηλεκτρόνια ακολουθεί το σχήμα

$$ns < (n-2) f < (n-1) d < np$$

$$E 4s < E 3d$$

Slide 46



Απαγορευτική Αρχή Pauli

“Δεν είναι δυνατό στο ίδιο άτομο να υπάρχουν δυο ηλεκτρόνια που να έχουν ίδιους και τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς τους (n, l, m_l, m_s)”

Επομένως, **στο ίδιο τροχιακό** που χαρακτηρίζεται από ορισμένες τιμές για n, l και m_l **μπορούν να υπάρχουν το πολύ δυο ηλεκτρόνια** δεδομένου ότι ο m_s μόνο δυο τιμές μπορεί να λάβει ($m_s = \pm 1/2$)

Αρχή Hund

“όταν ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν ενεργειακά εκφυλισμένα τροχιακά (ισοδύναμης ενέργειας), η προτιμότερη διάταξη είναι αυτή που έχει το μέγιστο συνολικό spin.”

Από τις δυνατές τοποθετήσεις των τριών ηλεκτρονίων στα p τροχιακά του σχήματος προτιμότερη είναι η διάταξη γ) με τα spin παράλληλα και με συνολικό spin $S = 3 \times 1/2 = 3/2$.

α) $\uparrow \uparrow \downarrow$

β) $\uparrow \downarrow \uparrow$

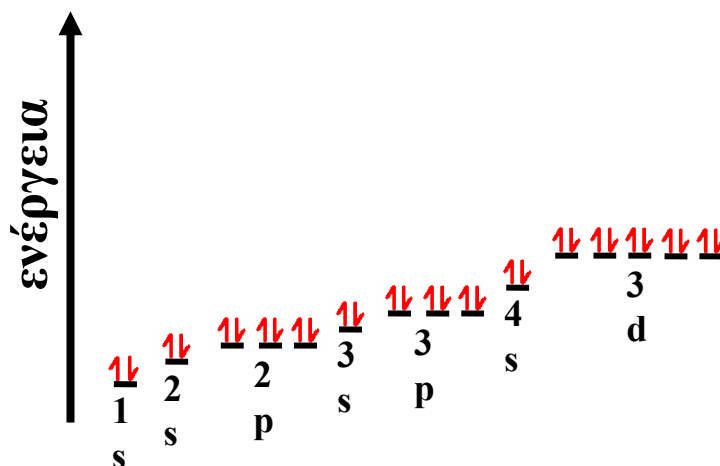
γ) $\uparrow \uparrow \uparrow$

Τα άτομα των στοιχείων τα οποία δεν διαθέτουν ασύζευκτα ηλεκτρόνια λέγονται **διαμαγνητικά** και **απωθούνται ελαφρά από το μαγνητικό πεδίο**. Τα άτομα των στοιχείων τα οποία διαθέτουν ασύζευκτα ηλεκτρόνια λέγονται **παραμαγνητικά** και **έλκονται από το μαγνητικό πεδίο**.

ΤΛ1001 – 2010

Ηλεκτρονική διαμόρφωση των ατόμων

Με βάση όλα τα προηγούμενα μπορούμε να διαμορφώσουμε το ηλεκτρονικό περίβλημα των ατόμων όλων των στοιχείων

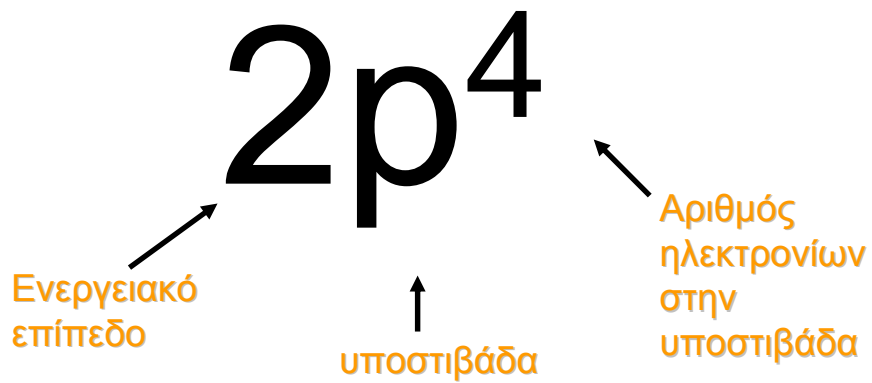


ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 50

Ηλεκτρονιακή διαμόρφωση -συμβολισμός



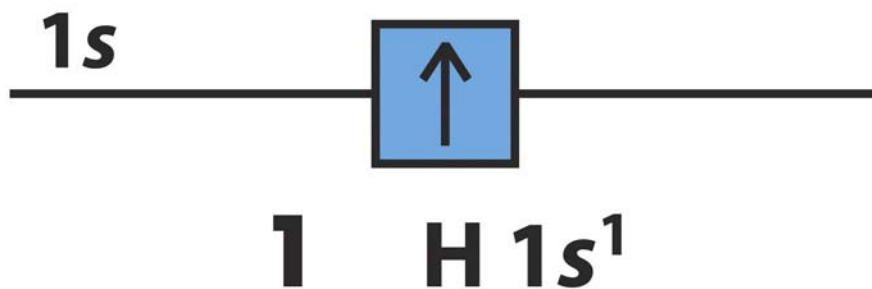
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} \dots$ κλπ.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 51

Υδρογόνο

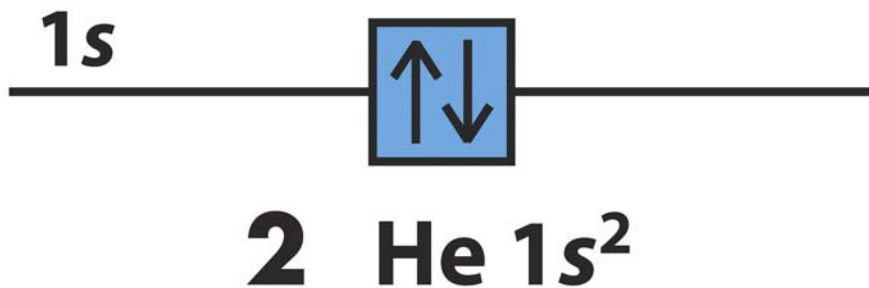


ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 52

Ήλιο



ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 53

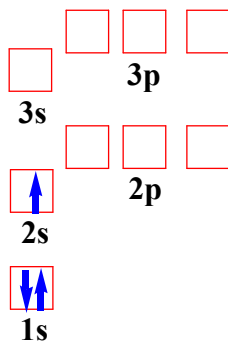


Li λίθιο

Ατομικός αριθμός = 3

1s²2s¹ ---> 3 e

Li: [He]2s¹



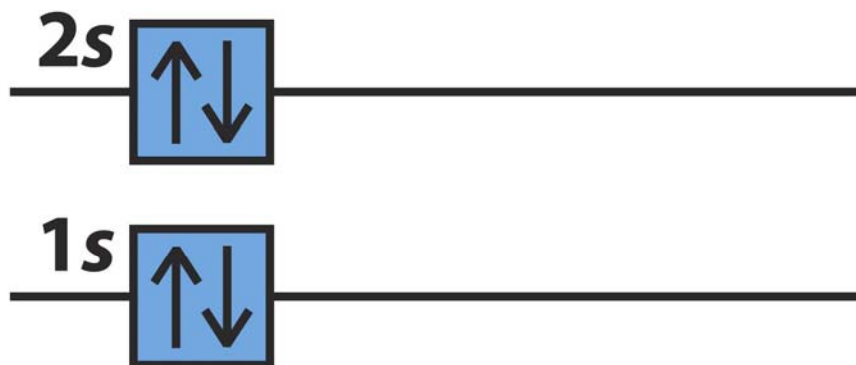
Για τον συμβολισμό της ηλεκτρονικής απεικόνισης (διαμόρφωσης) ενός στοιχείου, πολλές φορές χρησιμοποιείται η αναγραφή μόνο των **ηλεκτρονίων σθένους** που ακολουθούν μετά την δομή του ευγενούς αερίου που προηγείται το στοιχείου.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 54

Βηρύλλιο

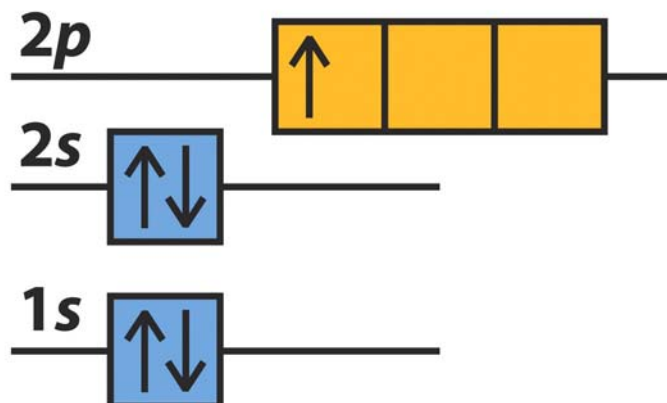


ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 55

Βόριο



ΤΛ1001 – 2010

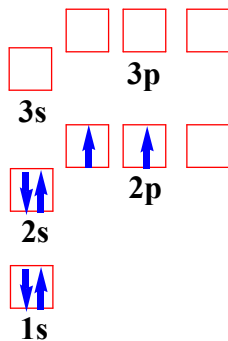
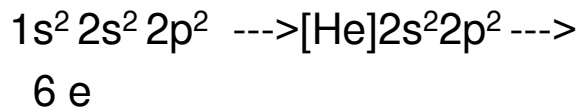
L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 56



C άνθρακας

Ατομικός αριθμός = 6



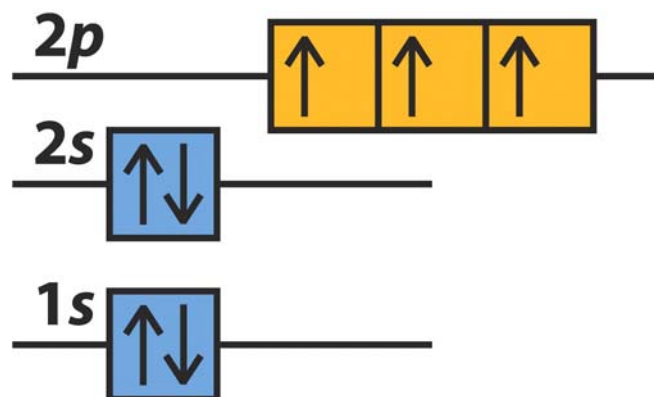
Το πρώτο στοιχείο που εφαρμόζεται ο κανόνας του **HUND**. Το τελευταίο e δεν μπαίνει στο ίδιο τροχιακό ώστε να έχουμε max άθροισμα του κβαντικού αριθμού των spin

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 57

Αζωτο

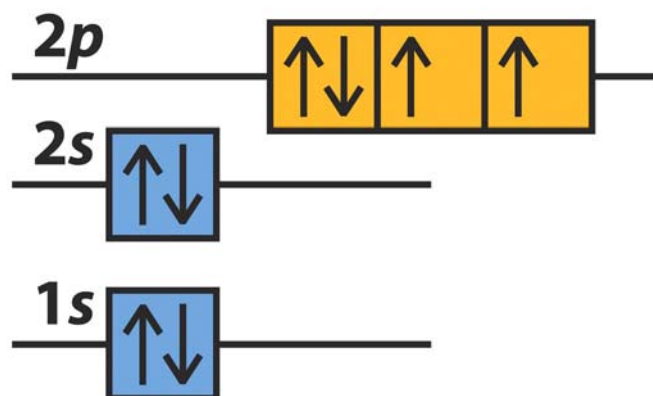


ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 58

Οξυγόνο



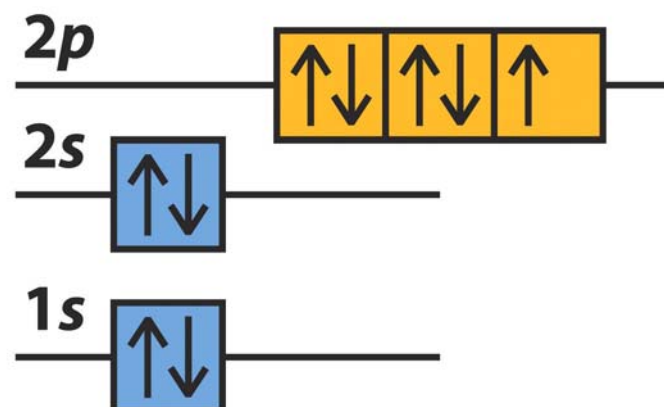
8 O $1s^2 2s^2 2p^4, [\text{He}] 2s^2 2p^4$

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 59

Φθόριο



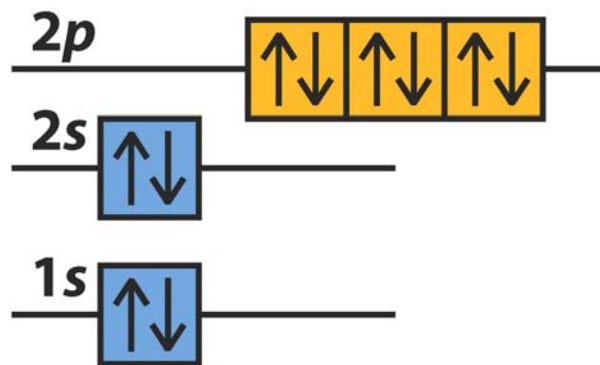
9 F $1s^2 2s^2 2p^5, [\text{He}] 2s^2 2p^5$

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 60

Νέον



10 Ne $1s^2 2s^2 2p^6$, [He] $2s^2 2p^6$

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 61

Περιοδικός πίνακας στοιχείων

Ο περιοδικός πίνακας αποτελεί μια ταξινόμηση των στοιχείων, η οποία αρχικά στηρίχθηκε στις παρατηρούμενες ιδιότητες των στοιχείων, ενώ σήμερα έχει πλήρως αιτιολογηθεί και κατανοηθεί μέσω της ηλεκτρονικής δομής των ατόμων όλων των στοιχείων.

Στον περιοδικό πίνακα τα στοιχεία ταξινομούνται κατά αύξοντα ατομικό αριθμό, δηλαδή κατά αύξον θετικό φορτίο στον πυρήνα τους ή ακόμα καλύτερα κατά αύξοντα αριθμό ηλεκτρονίων στα τροχιακά τους.

Συνεπώς, κάθε στοιχείο περιέχει ένα ηλεκτρόνιο περισσότερο από το ακριβώς προηγούμενό του στοιχείο.

Αντί όμως να δημιουργηθεί μια μακρά λίστα στοιχείων τοποθετώντας το ένα στοιχείο μετά το άλλο, τα στοιχεία διατάσσονται στον περιοδικό πίνακα σε οριζόντιες γραμμές, που ονομάζονται περίοδοι και κατακόρυφες γραμμές, που ονομάζονται ομάδες.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 62

Περίοδοι Περιοδικού Πίνακα

Κάθε περίοδος του περιοδικού πίνακα αντιστοιχεί σε ένα εξώτατο κύριο ενεργειακό επίπεδο και επομένως, θα περιέχει τόσα στοιχεία όσος είναι και ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων που μπορούν να περιέχονται σε αυτό, όπως φαίνεται στον πίνακα

Πίνακας 1.3. Αριθμός στοιχείων σε κάθε περίοδο						
Περίοδος	Κύριος κβαντικός αριθμός, n	Ενεργειακή σειρά τροχιακών			Μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων	Αριθμός στοιχείων
1 ^η Περίοδος	1	1s			2	2
2 ^η Περίοδος	2	2s		2p	8	8
3 ^η Περίοδος	3	3s		3p	8	8
4 ^η Περίοδος	4	4s	3d	4p	18	18
5 ^η Περίοδος	5	5s	4d	5p	18	18
6 ^η Περίοδος	6	6s	4f	5d	6p	32
7 ^η Περίοδος	7	7s	5f	6d	7p	32

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 63

Ομάδες Περιοδικού Πίνακα

Κάθε ομάδα του περιοδικού πίνακα περιέχει στοιχεία, τα οποία έχουν τον ίδιο αριθμό ηλεκτρονίων στην εξωτερική τους στοιβάδα (εξώτερο κύριο ενεργειακό επίπεδο) και συνεπώς, εμφανίζουν ανάλογες ιδιότητες.

Οι ομάδες χωρίζονται σε κύριες και δευτερεύουσες.

Τα στοιχεία που απαντούν στις κύριες ομάδες ονομάζονται κύρια στοιχεία και χωρίζονται σε δύο ενότητες: Την s-ενότητα που περιέχει τα στοιχεία, τα οποία έχουν ως εξώτερο ατομικό τροχιακό, το τροχιακό s (s-block) και την p-ενότητα που περιέχει τα στοιχεία, τα οποία έχουν ως εξώτερο ατομικό τροχιακό, το τροχιακό p (p-block)

Στις κύριες ομάδες του περιοδικού πίνακα αποδίδεται συνήθως ένας λατινικός αριθμός αρχής γενομένης από τα αριστερά του περιοδικού πίνακα. Έτσι απαντούν στον περιοδικό πίνακα επτά κύριες ομάδες με την αρίθμηση IA, IIA, IIIA, IVA, VA, VIA, VIIA και μια κύρια ομάδα με την αρίθμηση 0 ή VIIIA, η οποία συνηθέστερα είναι γνωστή με το όνομα κύρια ομάδα των ευγενών αερίων.

Ηλεκτρονική δομή ατόμων 2^{ης} περιόδου

	<u>1s</u>	<u>2s</u>	<u>2p</u>	<u>Configuration</u>
₃ Li	↑↓	↑	— — —	1s ² 2s ¹
₄ Be	↑↓	↑↓	— — —	1s ² 2s ²
₅ B	↑↓	↑↓	↑ — —	1s ² 2s ² 2p ¹
₆ C	↑↓	↑↓	↑ ↑ —	1s ² 2s ² 2p ²
₇ N	↑↓	↑↓	↑ ↑ ↑	1s ² 2s ² 2p ³
₈ O	↑↓	↑↓	↑↓ ↑ ↑	1s ² 2s ² 2p ⁴
₉ F	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑	1s ² 2s ² 2p ⁵
₁₀ Ne	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	1s ² 2s ² 2p ⁶

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

Slide 67

Ηλεκτρόνια σθένους

	<u>1s</u>	<u>2s</u>	<u>2p</u>	<u>Configuration</u>
₃ Li	↑↓	↑	— — —	1s ² 2s ¹
₄ Be	↑↓	↑ ↓	— — —	1s ² 2s ²
₅ B	↑↓	↑ ↓	↑ — —	1s ² 2s ² 2p ¹
₆ C	↑↓	↑ ↓	↑ ↑ —	1s ² 2s ² 2p ²
₇ N	↑↓	↑ ↓	↑ ↑ ↑	1s ² 2s ² 2p ³
₈ O	↑↓	↑ ↓	↑↓ ↑ ↑	1s ² 2s ² 2p ⁴

ΤΛ1001 – 2010

L2: Άτομα & Ηλεκτρόνια

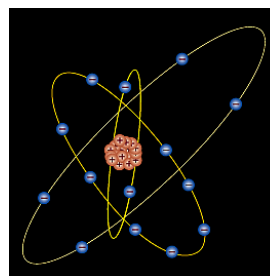
Slide 68

Ηλεκτρονική δομή ατόμων 3^{ης} περιόδου

		<u>3s</u>	<u>3p</u>	<u>Configuration</u>
₁₁ Na	[Ne]	↑	— — —	[Ne]3s ¹
₁₂ Mg	[Ne]	↑↓	— — —	[Ne]3s ²
₁₃ Al	[Ne]	↑↓	↑ — —	[Ne]3s ² 3p ¹
₁₄ Si	[Ne]	↑↓	↑ ↑ —	[Ne]3s ² 3p ²
₁₅ P	[Ne]	↑↓	↑ ↑ ↑	[Ne]3s ² 3p ³
₁₆ S	[Ne]	↑↓	↑↓ ↑ ↑	[Ne]3s ² 3p ⁴
₁₇ Cl	[Ne]	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑	[Ne]3s ² 3p ⁵
₁₈ Ar	[Ne]	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	[Ne]3s ² 3p ⁶

□ 14 ηλεκτρόνια
καταλαμβάνουν τα πρώτα 3
ενεργειακά επίπεδα:

—1s, 2s, 2p
συμπληρωμένα
τροχιακά με 10
ηλεκτρόνια
—3s, 3p τροχιακά με 4
ηλεκτρόνια (μη-
συμπληρωμένα)



ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Ηλεκτρονική δομή ατόμων 4^{ης} περιόδου

		<u>3d</u>	<u>4s</u>	<u>4p</u>	<u>Configuration</u>
₁₉ K	[Ar]	— — — — —	↑	— — —	[Ar] 4s ¹
₂₀ Ca	[Ar]	— — — — —	↑↓	— — —	[Ar] 4s ²
₂₁ Sc	[Ar]	↑ — — — —	↑↓	— — —	[Ar] 4s ² 3d ¹
₂₂ Ti	[Ar]	↑ ↑ — — —	↑↓	— — —	[Ar] 4s ² 3d ²
₂₃ V	[Ar]	↑ ↑ ↑ — —	↑↓	— — —	[Ar] 4s ² 3d ³
₂₄ Cr	[Ar]	↑ ↑ ↑ ↑ ↑	↑	— — —	[Ar] 4s ¹ 3d ⁵

Υπάρχει ένα επιπλέον μέτρο σταθερότητας το οποίο σχετίζεται με τα πλήρως συμπληρωμένα και ημι-συμπληρωμένα τροχιακά.

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 70

Ηλεκτρονική δομή ατόμων 4^{ης} περιόδου (συνεχ.)

	3d	4s	4p	Configuration
²⁵ Mn [Ar]	$\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$	$\uparrow\downarrow$	— — —	[Ar] 4s ² 3d ⁵
²⁶ Fe [Ar]	$\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$	$\uparrow\downarrow$	— — —	[Ar] 4s ² 3d ⁶
²⁷ Co [Ar]	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow$	$\uparrow\downarrow$	— — —	[Ar] 4s ² 3d ⁷
²⁸ Ni [Ar]	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow \uparrow$	$\uparrow\downarrow$	— — —	[Ar] 4s ² 3d ⁸
²⁹ Cu [Ar]	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow$	— — —	[Ar] 4s ¹ 3d ¹⁰
³⁰ Zn [Ar]	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	— — —	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 71

Ηλεκτρονική δομή ατόμων 4^{ης} περιόδου (συνεχ.)

	3d	4s	4p	Configuration
³¹ Ga [Ar]	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$ — —	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ¹
³² Ge [Ar]	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow$ —	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ²
³³ As [Ar]	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ³
³⁴ Se [Ar]	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow$	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴
³⁵ Br [Ar]	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow$	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁵
³⁶ Kr [Ar]	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁶

ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 72

Υβριδισμός Ατομικών Τροχιακών (Hybridization)

- ✓ **Υβριδισμός** ονομάζεται η μίξη των ατομικών τροχιακών που οδηγεί στη δημιουργία νέων ατομικών υβριδισμένων τροχιακών
- ✓ Από ενεργειακή άποψη, ο υβριδισμός αντιπροσωπεύει την ανάμιξη υψηλής ενέργειας τροχιακών με χαμηλής ενέργειας τροχιακά με σκοπό τη δημιουργία υβριδισμένων τροχιακών ενδιάμεσης ενέργειας. Η διαδικασία του υβριδισμού υπόκειται στην αρχή διατήρησης της ενέργειας
- ✓ Ο αριθμός των υβριδισμένων τροχιακών ισούται πάντα με τον αριθμό των ατομικών τροχιακών από τα οποία έχουν προκύψει

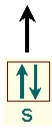
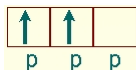
ΤΛ1001 – 2010

L2: Ατομα & Ηλεκτρόνια

Slide 73

Υβριδισμός sp^3 Ατομικών Τροχιακών Si

sp^3 Υβριδισμός τροχιακών πυριτίου



Si: $[\text{Ne}]3s^23p^2$

Ατομικά τροχιακά
στοιβάδας σθένους
ατόμου Si

Ασυμπλήρωτ
ος 3^{ος} φλοιός
(λείπουν 4
ηλεκτρόνια)

4 ηλεκτρόνια σθένους
στον 3^ο φλοιό
μοιράζονται με άλλα
άτομα

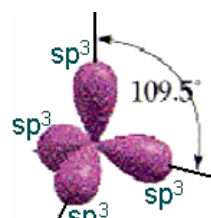
Τα ηλεκτρόνια
απωθούνται
μεταξύ τους

Ο πυρήνας έχει
14 πρωτόνια

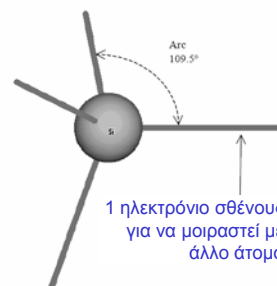
2 ηλεκτρόνια
στον 1^ο φλοιό

8 ηλεκτρόνια
στον 2^ο φλοιό

Διάταξη των sp^3
υβριδισμένων τροχιακών



Τετραεδρική Δομή



Το άτομο Si έχει τέσσερεις δεσμούς με άλλα άτομα Si

