

Γενική Χημεία

Ενότητα 3^η: Περιοδικότητα & Ατομική Δομή



Πανεπιστήμιο
Θεσσαλίας

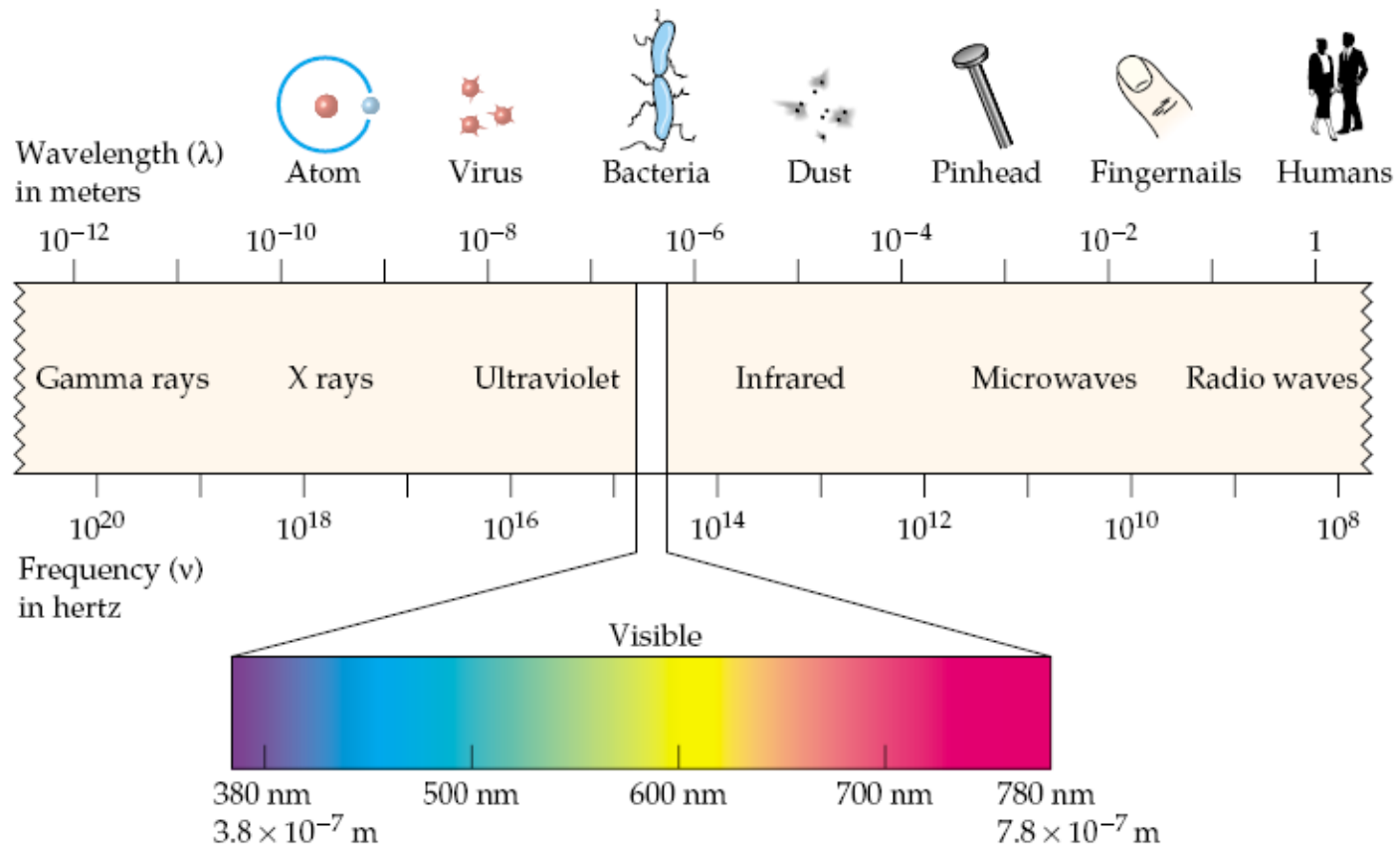
Τμήμα Επιστήμης Τροφίμων & Διατροφής

Οκτώβριος 2018

Δρ. Δημήτρης Π. Μακρής – Αναπληρωτής Καθηγητής

Φως & Ηλεκτρομαγνητικό Φάσμα

Το ορατό φως, η υπεριώδης ακτινοβολία, τα μικροκύματα, τα ραδιοκύματα και οι ακτίνες Χ είναι διάφορες μορφές **ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας**.



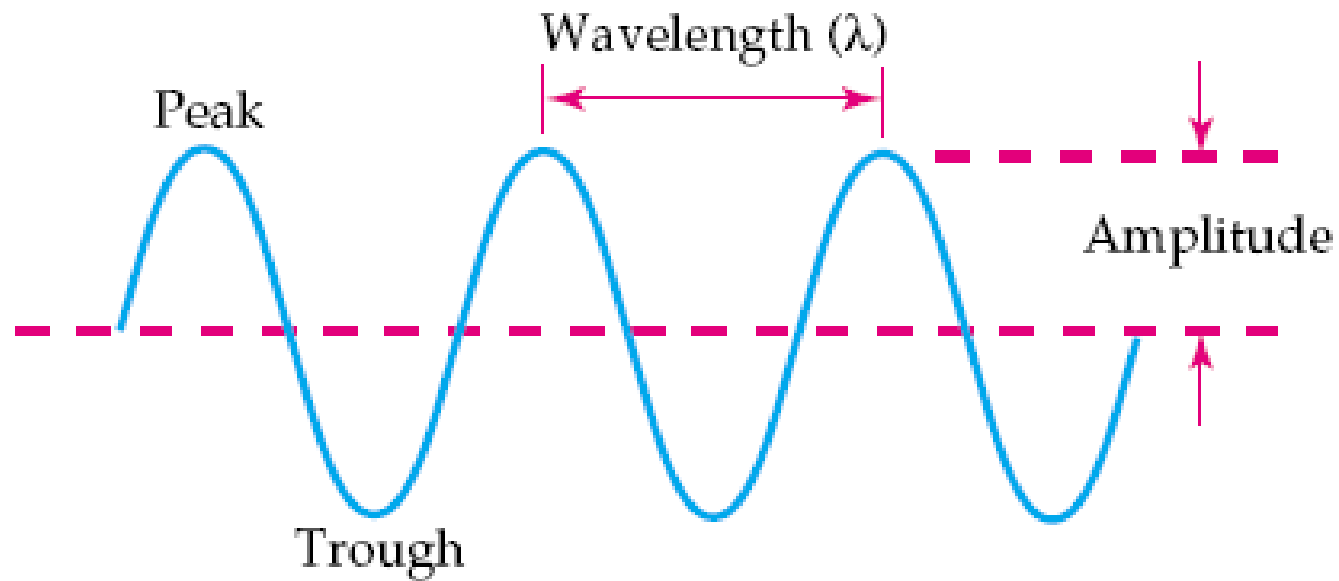
Φως & Ηλεκτρομαγνητικό Φάσμα

3

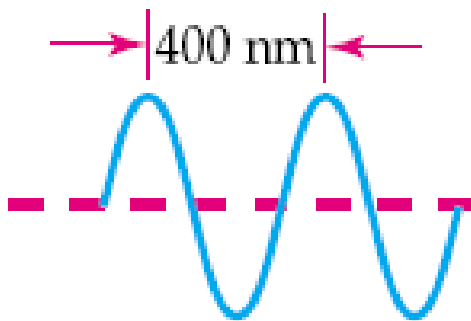
Η ηλεκτρομαγνητική (Η/Μ) ακτινοβολία χαρακτηρίζεται από τη *συχνότητα (frequency)*, το *μήκος κύματος (wavelength)* και το *πλάτος (amplitude)*.

Η συχνότητα (ν) ενός κύματος είναι ο αριθμός των κυματικών κορυφών που περνάνε από ένα δεδομένο σημείο ανά μονάδα χρόνου και εκφράζεται είτε ως $1/s$ (s^{-1}) είτε ως hertz ($1 \text{ Hz} = 1 \text{ s}^{-1}$).

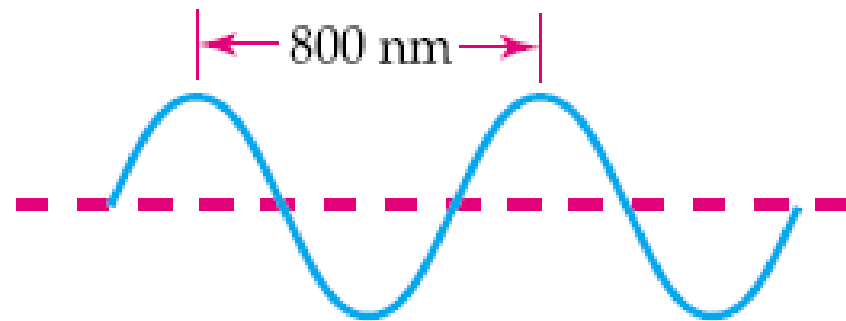
Το μήκος κύματος (λ) είναι η απόσταση της μιας κυματικής κορυφής από την επόμενη και το **πλάτος** είναι το ύψος που ορίζεται από την απόσταση της κεντρικής γραμμής μεταξύ κορυφής και του κατώτατου σημείου κάμψης.



(a)



Violet light
($\nu = 7.50 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$)



Infrared radiation
($\nu = 3.75 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$)

Φως & Ηλεκτρομαγνητικό Φάσμα

Πολλαπλασιάζοντας το μήκος κύματος (m) με τη συχνότητα (s^{-1}) ενός κύματος, υπολογίζεται η ταχύτητα του κύματος, εκπεφρασμένη σε m/s. Η ταχύτητα με την οποία όλη η Η/Μ ακτινοβολία διέρχεται μέσα από το κενό είναι σταθερή και ονομάζεται *ταχύτητα του φωτός* (c). Η αριθμητική τιμή της είναι $2.997\ 924\ 58 \times 10^8$ m/s, συνήθως στρογγυλεμένη ως 3.00×10^8 .

$$\text{Wavelength} \times \text{Frequency} = \text{Speed}$$

$$\lambda \text{ (m)} \times \nu \text{ (s}^{-1}\text{)} = c \text{ (m/s)}$$

which can be rewritten as:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \quad \text{or} \quad \nu = \frac{c}{\lambda}$$

Αυτή η εξίσωση δηλώνει ότι η συχνότητα και το μήκος κύματος σχετίζονται αντίστροφα. Δηλαδή, Η/Μ ακτινοβολία με μεγάλο μήκος κύματος έχει χαμηλή συχνότητα και το αντίστροφο.

Σωματιδιακές Ιδιότητες της Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας - Η Εξίσωση Planck

6

Μελετώντας την ακτινοβολία που εκλύεται από αντικείμενα που έχουν θερμανθεί, ο Planck συμπέρανε ότι η ενέργεια που ακτινοβολείται από ένα θερμαινόμενο αντικείμενο δεν μπορεί να μεταβάλλεται μ' ένα συνεχή τρόπο.

Αντιθέτως, η ενέργεια εκπέμπεται σε διακριτές ποσότητες, τα **κβάντα**.

Η ποσότητα της ενέργειας, E , που συνδέεται με ένα κβάντο $h\nu$ ενέργειας εξαρτάται από τη συχνότητα της ακτινοβολίας, ν , σύμφωνα με τη εξίσωση:

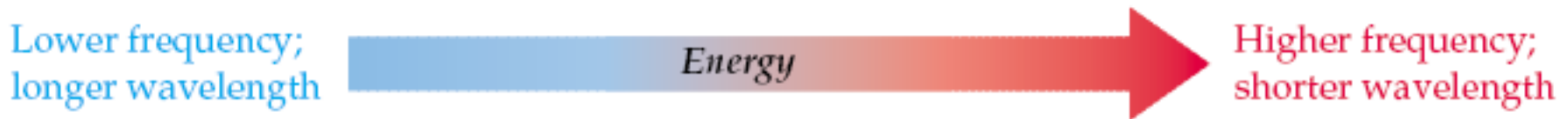
$$E = h\nu$$
$$\text{or, since } \nu = \frac{c}{\lambda}, \quad E = \frac{hc}{\lambda}$$

Το σύμβολο h αντιπροσωπεύει μια θεμελιώδη φυσική σταθερά, η οποία ονομάζεται σταθερά Planck ($h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$).

Σωματιδιακές Ιδιότητες της Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας - Η Εξίσωση του Planck

7

Υψηλότερες συχνότητες και βραχεία μήκη κύματος αντιστοιχούν σε ακτινοβολία υψηλότερης ενέργειας, ενώ χαμηλότερες συχνότητες και μακρύτερα μήκη κύματος αντιστοιχούν σε χαμηλή ενέργεια.



Για παράδειγμα, το κυανό φως ($\lambda \approx 450 \text{ nm}$) έχει βραχύτερο μήκος κύματος και φέρει περισσότερη ενέργεια από το ερυθρό φως ($\lambda \approx 650 \text{ nm}$). Ομοίως, μια ακτίνα X ($\lambda \approx 1 \text{ nm}$) έχει μικρότερο μήκος κύματος και φέρει περισσότερη ενέργεια απ' ότι ένα ραδιοκύμα FM ($\lambda \approx 10^{10} \text{ nm}$ ή 10 m).

Κυματικές Ιδιότητες της Ύλης - Η Εξίσωση de Broglie

Ο de Broglie πρότεινε ότι εάν το φως μπορεί να συμπεριφέρεται σε ορισμένες περιπτώσεις ως ύλη (υπό τη μορφή σωματιδίων που ονομάζονται φωτόνια), τότε ίσως και η ύλη να μπορεί να συμπεριφερθεί ως φως.

Δηλαδή, και το φως και η ύλη μπορούν να συμπεριφέρονται και ως σωματίδια και ως κύματα.

Για την υποστήριξη αυτής της θεωρίας, ο de Broglie χρησιμοποίησε την εξίσωση του Einstein:

$$\text{Since } E = mc^2 \quad \text{then } m = \frac{E}{c^2}$$

Κυματικές Ιδιότητες της Ύλης - Η Εξίσωση de Broglie

Επειδή $E = hc/\lambda$, σύμφωνα με την εξίσωση Planck, είναι δυνατό ν' αντικατασταθεί το E για να ληφθεί μια παράγωγη εξίσωση, που συνδέει τη μάζα με το μήκος κύματος:

$$m = \frac{E}{c^2} = \frac{hc/\lambda}{c^2} = \frac{h}{\lambda c}$$

Ο de Broglie πρότεινε ότι μια παρόμοια εξίσωση μπορεί να εφαρμοστεί σ' ένα ηλεκτρόνιο, αντικαθιστώντας την ταχύτητα του φωτός (c) με την ταχύτητα του ηλεκτρονίου (u).

Η **εξίσωση de Broglie**, λοιπόν, επιτρέπει τον υπολογισμό του «μήκους κύματος» ενός ηλεκτρονίου ή οποιουδήποτε άλλου σωματιδίου ή αντικειμένου, που έχει μάζα m και κινείται με ταχύτητα u :

$$\text{DE BROGLIE EQUATION} \quad m = \frac{h}{\lambda u} \quad \text{or} \quad \lambda = \frac{h}{mu}$$

Κβαντική Μηχανική & Η Αρχή Αβεβαιότητας του Heisenberg

10

Ο Heisenberg διατύπωσε ότι είναι αδύνατο να γνωρίζουμε ακριβώς που βρίσκεται ένα ηλεκτρόνιο και ποια πορεία ακολουθεί. Αυτή η διατύπωση ονομάστηκε **Αρχή Αβεβαιότητας του Heisenberg**.

Με μαθηματικούς όρους, η αρχή του Heisenberg εκφράζει ότι η αβεβαιότητα της θέσης ενός ηλεκτρονίου, Δx , επί την αβεβαιότητα της ορμής του, Δmu , ισούται ή είναι μεγαλύτερη της ποσότητας $h/4\pi$.

$$\text{HEISENBERG UNCERTAINTY PRINCIPLE} \quad (\Delta x)(\Delta mv) \geq \frac{h}{4\pi}$$

Σύμφωνα μ' αυτή την εξίσωση, δεν μπορεί ποτέ να είναι γνωστά και η θέση και η ταχύτητα ενός ηλεκτρονίου (ή οποιουδήποτε άλλου αντικειμένου), πέρα από κάποιο όριο ακρίβειας.

Εάν γνωρίζουμε την ταχύτητα με μεγάλο βαθμό βεβαιότητας (μικρή Δmu), τότε η θέση ενός ηλεκτρονίου πρέπει να είναι αβέβαιη (η Δx πρέπει να είναι μεγάλη) και αντιστρόφως.

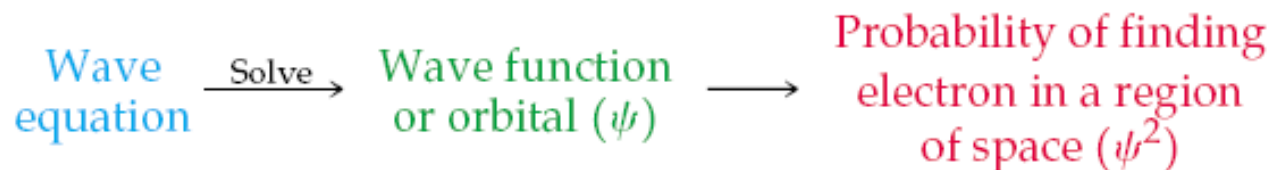
Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

11

Το μοντέλο κβαντικής μηχανικής της ατομικής δομής του Schrödinger πλαισιώνεται στη μορφή μιας *κυματικής εξίσωσης*, και είναι μια μαθηματική εξίσωση παρόμοιας μορφής με αυτή που χρησιμοποιείται να περιγράψει τα συνήθη κύματα στα ρευστά.

Οι λύσεις αυτής της εξίσωσης (υπάρχουν περισσότερες από μία) ονομάζονται **κυματικές συναρτήσεις** ή **τροχιακά** και αναπαριστώνται με το σύμβολο ψ . Η έκφραση ψ^2 ορίζει την πιθανότητα της παρουσίας ενός ηλεκτρονίου μέσα σ' ένα δεδομένο όγκο γύρω από τον πυρήνα.

Όπως ορίζει η αρχή του Heisenberg, δεν υπάρχει απόλυτη βεβαιότητα για τη θέση ενός ηλεκτρονίου. Εντούτοις, μια κυματική συνάρτηση μπορεί να δηλώσει που υπάρχουν περισσότερες πιθανότητες να βρίσκεται ένα ηλεκτρόνιο.



Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

12

Μια κυματική συνάρτηση περιέχει τρεις μεταβλητές που ονομάζονται **κβαντικοί αριθμοί** και αναπαριστώνται ως n , l και m_l .

Αυτοί οι αριθμοί περιγράφουν το επίπεδο ενέργειας ενός τροχιακού και το τρισδιάστατο σχήμα της περιοχής στο χώρο, όπου βρίσκεται το ηλεκτρόνιο.

Ο **κύριος κβαντικός αριθμός (n)** είναι ένας θετικός ακέραιος ($n = 1, 2, 3$ κτλ.) από τον οποίο εξαρτώνται κυρίως το μέγεθος και το ενεργειακό επίπεδο ενός τροχιακού.

Για άτομα που περιέχουν ένα ηλεκτρόνιο (υδρογόνο), η ενέργεια ενός τροχιακού εξαρτάται μόνο από το n . Για άτομα με περισσότερα ηλεκτρόνια εξαρτάται και από το n και από το l .

Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

13

Καθώς αυξάνει η τιμή n , αυξάνει και ο αριθμός των επιτρεπόμενων τροχιακών και το μέγεθος αυτών των τροχιακών μεγεθύνεται, επιτρέποντας έτσι στο ηλεκτρόνιο να βρίσκεται σε μεγαλύτερη απόσταση από τον πυρήνα.

Επειδή απαιτείται ενέργεια για την απομάκρυνση ενός αρνητικού από ένα θετικό φορτίο, αυτή η αυξημένη απόσταση μεταξύ του πυρήνα και του ηλεκτρονίου σημαίνει ότι η ενέργεια του ηλεκτρονίου στο τροχιακό αυξάνει, καθώς αυξάνει ο κβαντικός αριθμός n .

Τα τροχιακά συχνά αναφέρονται σαν να είναι ομαδοποιημένα, σύμφωνα με τον αριθμό n σε διαδοχικά στρώματα, ή στοιβάδες, γύρω από το άτομο. Για παράδειγμα, τα τροχιακά με $n = 3$ βρίσκονται στην τρίτη στοιβάδα.

Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

14

Ο **κβαντικός αριθμός στροφορμής (l)** ορίζει το τρισδιάστατο σχήμα του τροχιακού. Για ένα τροχιακό του οποίου ο κύριος κβαντικός αριθμός είναι n , ο αριθμός l μπορεί να πάρει τιμές οποιοδήποτε ακέραιο αριθμό από το 0 έως το $n - 1$. Μέσα σε κάθε στοιβάδα, δηλαδή, υπάρχουν n διαφορετικά σχήματα τροχιακών.

If $n = 1$, then $l = 0$

If $n = 2$, then $l = 0$ or 1

If $n = 3$, then $l = 0, 1,$ or 2

Τα τροχιακά ομαδοποιούνται, σύμφωνα με τον αριθμό l , σε υποστοιβάδες. Οι διαφορετικές υποστοιβάδες αναφέρονται με τα γράμματα $s, p, d,$ και f . Μετά το f , οι συμβολισμοί γίνονται με γράμματα του αγγλοσαξονικού αλφάβητου, κατ' αλφαβητική σειρά (g, h, i κτλ.).

Quantum number l :	0	1	2	3	4 ...
Subshell notation:	s	p	d	f	g ...

Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

Για παράδειγμα, ένα τροχιακό με $n = 3$ και $l = 2$ είναι ένα $3d$ τροχιακό. Το 3 αντιπροσωπεύει την τρίτη στοιβάδα και το d τη $l = 2$ υποστοιβάδα.

Ο **μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l)** ορίζει τον χωρικό προσανατολισμό του τροχιακού σε σχέση με ένα δεδομένο σύνολο συντεταγμένων αξόνων.

Για ένα τροχιακό του οποίου ο κβαντικός αριθμός στροφορμής είναι l , η τιμή m_l μπορεί να είναι οποιοσδήποτε ακέραιος αριθμός μεταξύ $-l$ και $+l$. Έτσι, μέσα σε κάθε υποστοιβάδα υπάρχουν $2l + 1$ διαφορετικοί χωρικοί προσανατολισμοί γι' αυτά τα τροχιακά.

If $l = 0$, then $m_l = 0$

If $l = 1$, then $m_l = -1, 0, \text{ or } +1$

If $l = 2$, then $m_l = -2, -1, 0, +1, \text{ or } +2$

Allowed Combinations of Quantum Numbers n , l , and m_l for the First Four Shells

n	l	m_l	Orbital Notation	Number of Orbitals in Subshell	Number of Orbitals in Shell
1	0	0	1s	1	1
2	0	0	2s	1	4
	1	-1, 0, +1	2p	3	
3	0	0	3s	1	9
	1	-1, 0, +1	3p	3	
	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	5	
4	0	0	4s	1	16
	1	-1, 0, +1	4p	3	
	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	5	
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	7	

Τα Σχήματα των Τροχιακών

Από τις διάφορες πιθανότητες, τα τροχιακά s , p , d και f είναι τα πιο σημαντικά, επειδή μόνο αυτά καταλαμβάνονται από ηλεκτρόνια στα γνωστά στοιχεία.

Τροχιακά s

Όλα τα s τροχιακά είναι σφαιρικά, που σημαίνει ότι η πιθανότητα εύρεσης ενός ηλεκτρονίου εξαρτάται μόνο από την απόσταση από τον πυρήνα και όχι από την κατεύθυνση.

Επιπλέον, επειδή υπάρχει μόνο ένας πιθανός προσανατολισμός μιας σφαίρας στο χώρο, ένα s τροχιακό έχει $m_l = 0$ και υπάρχει μόνο ένα s τροχιακό ανά στοιβάδα.

Τα Σχήματα των Τροχιακών

Η τιμή ψ^2 για ένα s τροχιακό είναι υψηλή κοντά στον πυρήνα και μειώνεται δραστικά καθώς η απόσταση από τον πυρήνα αυξάνει, αν και δεν μηδενίζεται ποτέ, ακόμα και για μεγάλες αποστάσεις.

Αν και όλα τα s τροχιακά είναι σφαιρικά, υπάρχουν σημαντικές διαφορές μεταξύ των s τροχιακών των διαφόρων στοιβάδων.

Πρώτον, γιατί το μέγεθος ενός s τροχιακού αυξάνει στις διαδοχικές υψηλότερες στοιβάδες, που σημαίνει ότι ένα ηλεκτρόνιο σ' ένα s τροχιακό εξώτερης στοιβάδας βρίσκεται μακρύτερα από τον πυρήνα.

Δεύτερον, η ηλεκτρονιακή κατανομή σ' ένα s τροχιακό εξώτερης στοιβάδας έχει αρκετές περιοχές υψηλής πιθανότητας.

Τα Σχήματα των Τροχιακών

Για παράδειγμα, ένα $2s$ τροχιακό είναι σαν σφαίρα μέσα σε σφαίρα.

Υπάρχουν δύο περιοχές υψηλής πιθανότητας, που διαχωρίζονται από μια επιφάνεια μηδενικής πιθανότητας, που ονομάζεται **κόμβος**.

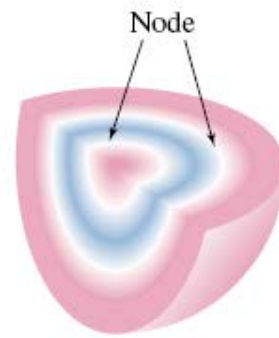
Ομοίως, ένα $3s$ τροχιακό έχει τρεις περιοχές υψηλής πιθανότητας και δύο σφαιρικούς κόμβους.



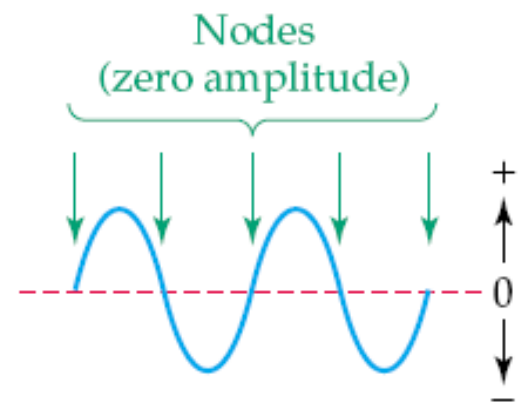
(a)



(b)



(c)



(b)

Τα Σχήματα των Τροχιακών

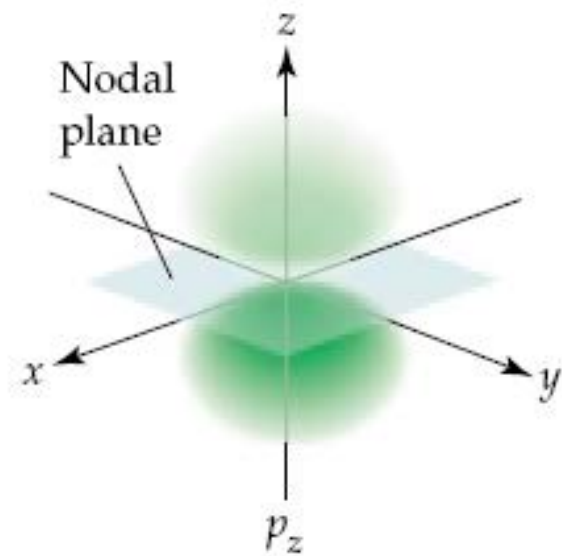
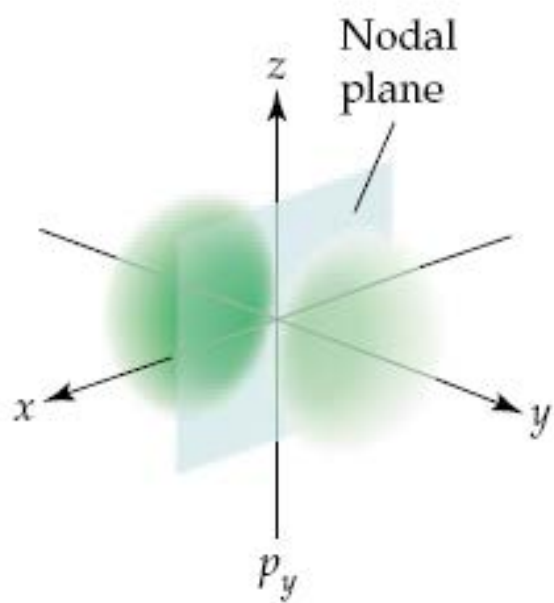
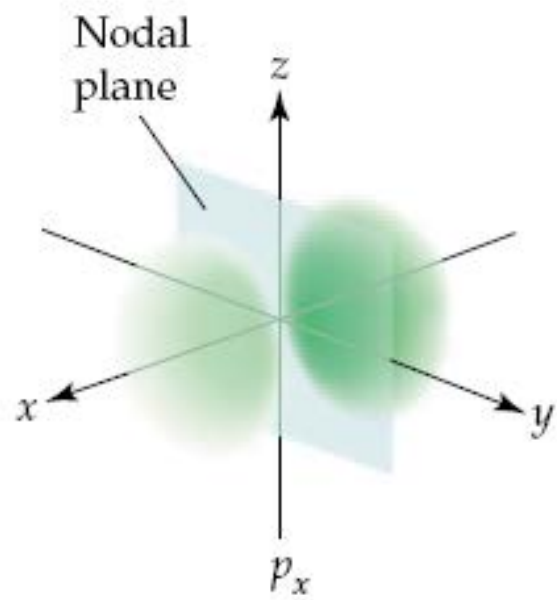
21

Τροχιακά p

Τα p τροχιακά έχουν σχήμα «αλτήρα» και η κατανομή των ηλεκτρονίων συγκεντρώνεται σε δύο πανομοιότυπους λοβούς εκατέρωθεν του πυρήνα, που διαχωρίζονται από ένα επίπεδο κόμβο, ο οποίος διαπερνάει τον πυρήνα. Ως αποτέλεσμα, η πιθανότητα να βρίσκεται ένα p ηλεκτρόνιο κοντά στον πυρήνα είναι 0.

Υπάρχουν τρεις επιτρεπτές τιμές για τον αριθμό m_l , όταν $l = 1$. Έτσι, κάθε στοιβάδα έχει τρία p τροχιακά, τα οποία είναι προσανατολισμένα στο χώρο σε γωνίες 90° μεταξύ τους, κατά μήκος τριών συντεταγμένων x, y, z .

Για παράδειγμα, τα τρία p τροχιακά της δεύτερης στοιβάδας προσδιορίζονται ως $2p_x$, $2p_y$ και $2p_z$.



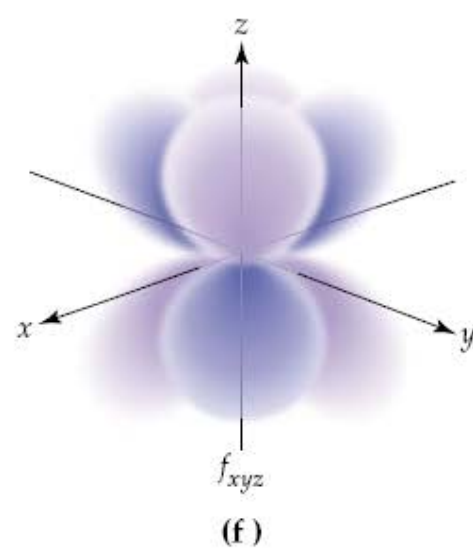
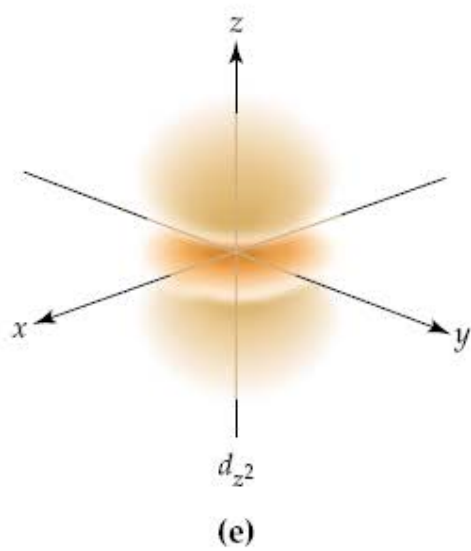
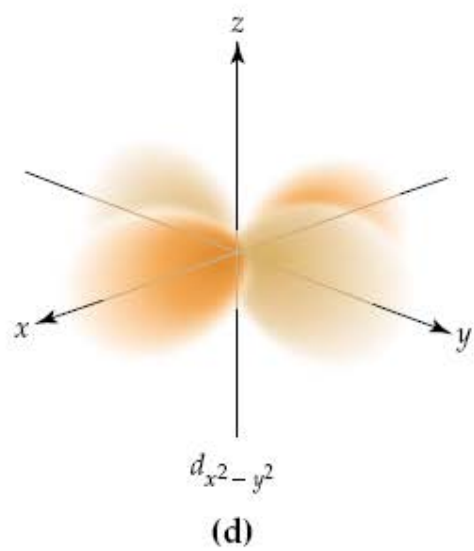
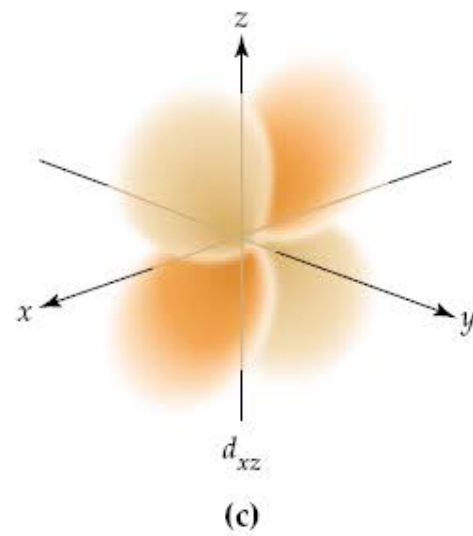
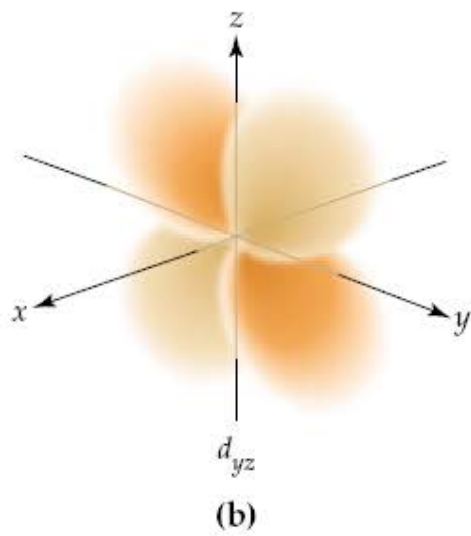
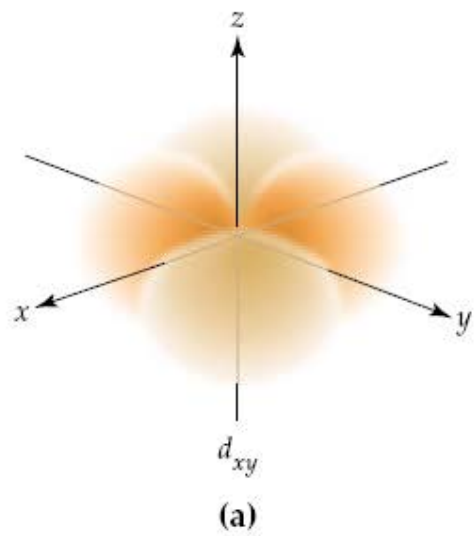
Τα Σχήματα των Τροχιακών

Τροχιακά d και f

Η τρίτη και οι υψηλότερες στοιβάδες έχουν η καθεμία από πέντε d τροχιακά, τα οποία διαφέρουν από τα αντίστοιχα s και p , επειδή έχουν δύο διαφορετικά σχήματα.

Τέσσερα από τα πέντε d τροχιακά έχουν σχήμα φύλλου τριφυλλιού και έχουν τέσσερις λοβούς μέγιστης πιθανότητας, οι οποίοι διαχωρίζονται από δύο κομβικά επίπεδα διαμέσων του πυρήνα.

Το πέμπτο d τροχιακό είναι όμοιο σε σχήμα μ' ένα p_z τροχιακό, αλλά έχει μια επιπρόσθετη περιοχή υψηλής πιθανότητας σχήματος $daughnut$, με κέντρο το επίπεδο xy . Παρά το διαφορετικό σχήμα, όλα τα d τροχιακά σε μια στοιβάδα έχουν την ίδια ενέργεια.

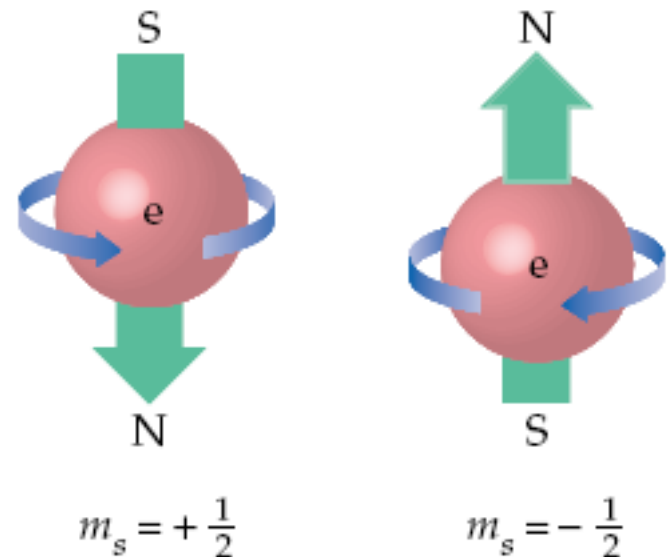


Ηλεκτρονιακή Περιστροφή & Η Απαγορευτική Αρχή Pauli

25

Τα ηλεκτρόνια συμπεριφέρονται και ως περιστρεφόμενα γύρω από έναν άξονα, και αυτή η περιστροφή μπορεί να είναι σύμφωνα ή αντίθετα με την κίνηση των δεικτών του ρολογιού.

Επειδή τα ηλεκτρόνια είναι φορτισμένα, το περιστροφικό φορτίο δημιουργεί ένα ασθενές μαγνητικό πεδίο, το οποίο περιγράφεται από τον **κβαντικό αριθμό περιστροφής** (ή **κβαντικό αριθμό spin**), m_s .



Ηλεκτρονιακή Περιστροφή & Η Απαγορευτική Αρχή Pauli

Ο αριθμός m_s μπορεί να λάβει δύο τιμές $-\frac{1}{2}$ ή $+\frac{1}{2}$, οι οποίες συμβολίζονται ως (\uparrow) και (\downarrow), αντίστοιχα. Να σημειωθεί ότι ο αριθμός m_s είναι ανεξάρτητος των τριών άλλων κβαντικών αριθμών, οι οποίοι σχετίζονται μεταξύ τους.

Η σημασία του αριθμού m_s φαίνεται όταν τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν καθορισμένα τροχιακά σε άτομα με πολλά ηλεκτρόνια. Σύμφωνα με την **απαγορευτική αρχή του Pauli**, δύο ηλεκτρόνια σ' ένα τροχιακό δεν μπορούν να έχουν ίδιους και τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς.

Έτσι εάν ένα τροχιακό το καταλαμβάνουν δύο ηλεκτρόνια, έχουν ίδιους τους κβαντικούς αριθμούς n , l , m_l , αλλά διαφορετικό m_s . Δηλαδή ένα τροχιακό μπορεί να έχει μόνο δύο ηλεκτρόνια, τα οποία πρέπει να έχουν αντιπαράλληλο spin. Άρα, ένα άτομο με χ ηλεκτρόνια, έχει τουλάχιστον $\chi/2$ τροχιακά.

Ενεργειακά Επίπεδα Τροχιακών σε Πολυ-Ηλεκτρονιακά Άτομα

Όπως ειπώθηκε προηγουμένως, τα τροχιακά s , p , d και f μιας δεδομένης στοιβάδας έχουν ελαφρώς διαφορετικές ενέργειες μέσα σ' ένα πολυ-ηλεκτρονιακό άτομο.

Η διαφορά στην ενέργεια μεταξύ των υποστοιβάδων είναι αποτέλεσμα απώσεων (απωθητικών δυνάμεων) μεταξύ των ηλεκτρονίων.

Η άπωση των ηλεκτρονίων των εξώτερων στοιβάδων από αυτά των εσώτερων στοιβάδων είναι πολύ σημαντική, γιατί τα εξώτερα ηλεκτρόνια απωθούνται πιο μακριά από τον πυρήνα, κι έτσι συγκρατούνται λιγότερο ισχυρά.

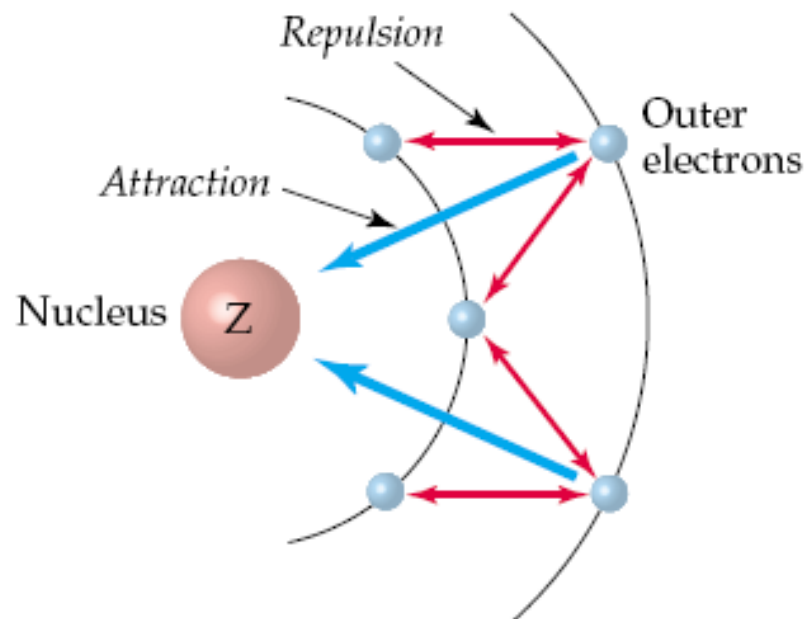
Ένα μέρος της έλξης του πυρήνα προς ένα εξώτερο ηλεκτρόνιο, δηλαδή, ακυρώνεται. Υπάρχει λοιπόν ένα φαινόμενο, όπου τα εσώτερα ηλεκτρόνια «θωρακίζουν» (καλύπτουν) τον πυρήνα από τα εξώτερα (shielding).

Ενεργειακά Επίπεδα Τροχιακών σε Πολυ-Ηλεκτρονιακά Άτομα

28

Το καθαρό πυρηνικό φορτίο, συνεπώς, που επιδρά πάνω σ' ένα ηλεκτρόνιο, το οποίο ονομάζεται **δραστικό πυρηνικό φορτίο** (effective nuclear charge – Z_{eff}), είναι συχνά σημαντικά χαμηλότερο από το πραγματικό πυρηνικό φορτίο Z .

EFFECTIVE NUCLEAR CHARGE $Z_{eff} = Z_{actual} - \text{Electron shielding}$

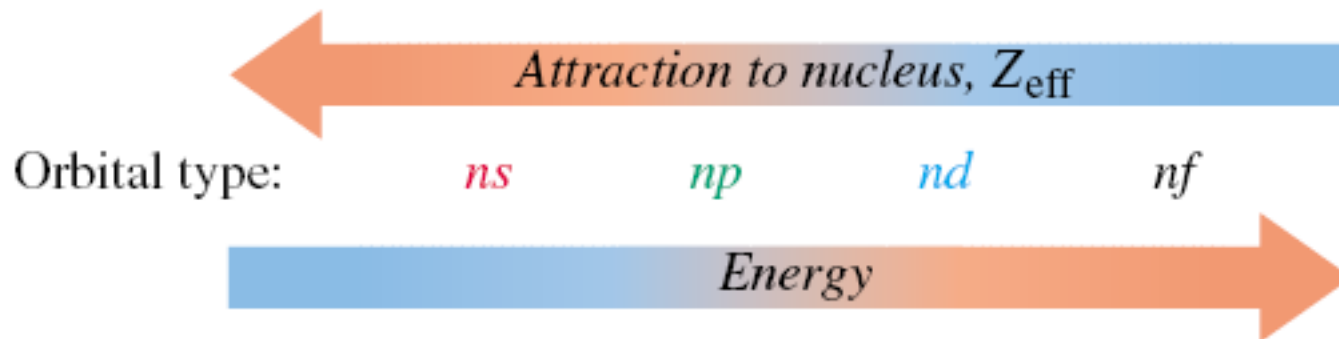


Ενεργειακά Επίπεδα Τροχιακών σε Πολυ-Ηλεκτρονιακά Άτομα

29

Για παράδειγμα, ένα $2s$ τροχιακό είναι σφαιρικό και έχει μεγάλη πιθανότητα πυκνότητας γύρω από τον πυρήνα, ενώ ένα $2p$ έχει σχήμα αλτήρα και έχει κόμβο στον πυρήνα.

Ένα $2s$ τροχιακό, δηλαδή, βρίσκεται για περισσότερο χρόνο γύρω από τον πυρήνα, έχει υψηλότερο Z_{eff} και συνεπώς, αφού συγκρατείται ισχυρότερα από τον πυρήνα, έχει χαμηλότερη ενέργεια.



Δόμηση Ηλεκτρονίων των Πολυ-Ηλεκτρονιακών Ατόμων

Εάν είναι γνωστές οι σχετικές ενέργειες των διαφόρων τροχιακών, είναι δυνατό να προβλεφθεί για κάθε στοιχείο ποια τροχιακά καταλαμβάνουν ηλεκτρόνια – η **ηλεκτρονιακή δομή** (electron configuration) του στοιχείου.

Για τον προσδιορισμό της δόμησης εφαρμόζονται τρεις κανόνες που αποτελούν την **αρχή aufbau** (δόμηση στα γερμανικά).

Γενικά, κάθε διαδοχικό ηλεκτρόνιο που προστίθεται σ' ένα άτομο καταλαμβάνει το τροχιακό με τη χαμηλότερη διαθέσιμη ενέργεια. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τη δόμηση της χαμηλότερης ενέργειας, η οποία ονομάζεται **δόμηση θεμελιώδους κατάστασης** (ground-state configuration).

Έτσι, μπορεί να συμβεί αρκετά τροχιακά να έχουν το ίδιο ενεργειακό επίπεδο. Αυτά τα τροχιακά ονομάζονται **εκφυλισμένα τροχιακά**.

Δόμηση Ηλεκτρονίων των Πολυ-Ηλεκτρονιακών Ατόμων

31

Κανόνες της αρχής aufbau

1. Τα τροχιακά χαμηλής ενέργειας συμπληρώνονται πριν από τα τροχιακά υψηλής ενέργειας.
2. Ένα τροχιακό μπορεί να έχει μόνο δύο ηλεκτρόνια, τα οποία πρέπει να έχουν αντιπαράλληλο spin.
3. Εάν είναι διαθέσιμα δύο εκφυλισμένα τροχιακά, τότε στο καθένα πάει ένα ηλεκτρόνιο, μέχρι να είναι ημικατειλιμένα. Αυτό ονομάζεται **κανόνας του Hunt**.

Μόνο τότε ένα δεύτερο ηλεκτρόνιο συμπληρώνει ένα από τα δύο αυτά τροχιακά. Επιπλέον, τα ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τα ημικατειλιμένα τροχιακά θα πρέπει να έχουν τον ίδιο αριθμό spin.

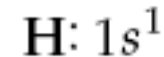
Δόμηση Ηλεκτρονίων των Πολυ-Ηλεκτρονιακών Ατόμων

32

Παραδείγματα

Υδρογόνο: Έχει ένα ηλεκτρόνιο, το οποίο πρέπει να τοποθετηθεί στο τροχιακό της πιο χαμηλής ενέργειας, το $1s$. Σ' αυτήν την περίπτωση η δόμηση θεμελιώδους κατάστασης χαρακτηρίζεται ως $1s^1$.

Ο επιγεγραμμένος άνω δείκτης υποδεικνύει τον αριθμό των ηλεκτρονίων που βρίσκονται στο συγκεκριμένο τροχιακό.



Λίθιο και βηρύλλιο: Αφού το τροχιακό $1s$ είναι συμπληρωμένο, τα επόμενα δύο ηλεκτρόνια τοποθετούνται στο επόμενο διαθέσιμο, το $2s$.



Δόμηση Ηλεκτρονίων & Περιοδικός Πίνακας

Η εξώτερη στοιβάδα ηλεκτρονίων ενός ατόμου ονομάζεται **στοιβάδα σθένους**. Όλα τα στοιχεία μιας ομάδας στον περιοδικό πίνακα έχουν την ίδια δόμηση ηλεκτρονίων στη στοιβάδα σθένους.

Για παράδειγμα, όλα τα στοιχεία της ομάδας 1A έχουν μια s^1 δόμηση στη στοιβάδα σθένους. Τα στοιχεία της ομάδας 2A έχουν δόμηση s^2 και τα στοιχεία της 3A $s^2 p^1$.

Επιπλέον, επειδή τα ηλεκτρόνια σθένους είναι αυτά που συγκρατούνται λιγότερο ισχυρά, είναι τα πιο σημαντικά στον προσδιορισμό των ιδιοτήτων ενός στοιχείου.

Αυτό εξηγεί γιατί τα στοιχεία μιας ομάδας του περιοδικού πίνακα έχουν παρόμοια χημική συμπεριφορά.

Δόμηση Ηλεκτρονίων & Περιοδικός Πίνακας

Ο περιοδικός πίνακας μπορεί να διαχωριστεί σε τέσσερις περιοχές ή *blocks* των στοιχείων, ανάλογα με το ποια τροχιακά είναι συμπληρωμένα.

Οι ομάδες 1A και 2A στ' αριστερά του πίνακα είναι τα στοιχεία του **s-block**, γιατί προκύπτουν από τη συμπλήρωση ενός *s* τροχιακού.

Οι ομάδες 3A – 8A είναι τα στοιχεία του **p-block**, γιατί προκύπτουν από τη συμπλήρωση *p* τροχιακών.

Τα μέταλλα μετάπτωσης προκύπτουν από τη συμπλήρωση *d* τροχιακών (**d-block**).

Οι λανθανίδες / ακτινίδες, στο αποκομμένο τμήμα του περιοδικού πίνακα προκύπτουν από τη συμπλήρωση των *f* τροχιακών (**f-block**).

