

Τα ηλεκτρόνια κατανέμονται σε ενεργειακές στάθμες που αντιστοιχούν σε ένα ή περισσότερα Ατομικά τροχιακά. (11)

1. Κύριος κβαντικός αριθμός, n

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$
 Στοιβάδα \rightarrow K L M N
 Καθορίζει την ολική ενέργεια ενός στοιβάδας

2. Αξιωματικός ή δευτερεύων κβαντικός αριθμός, l

Καθορίζει υποστοιβάδα από τις οποίες αποτελείται η κάθε στοιβάδα. Καθορίζει σχήμα ηλεκτρονιακού νέφους.

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, n-1$$

\downarrow s \downarrow p \downarrow d \downarrow f \downarrow g \downarrow h

Για $n=1 \Rightarrow l=0$	1s	} ονομα τροχιακά υποστοιβάδας
Για $n=2 \Rightarrow l=0, 1$	2s, 2p	
Για $n=3 \Rightarrow l=0, 1, 2$	3s, 3p, 3d	
Για $n=4 \Rightarrow l=0, 1, 2, 3$	4s, 4p, 4d, 4f	

Αριθμός υποστοιβάδων = n

3. Μαγνητικός υφαντικός αριθμός, m_l

Ο αριθμός αυτός χαρακτηρίζει τα τροχιακά που αποτελούν κάθε υποστρώμα. Καθορίζει προσανατολισμό ηλεκτρονικού νέφους στο χώρο

$$m_l = -l, \dots, +l$$

π.χ. Για $l=1$ $m_l = -1, 0, +1$ (3 τροχιακά για την $l=1$ υποστρώμα)

Για $l=2$ $m_l = -2, -1, 0, +1, +2$ (5 τροχιακά για την $l=2$)

Για $l=3$ $m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$

⋮

Για $l=0 \Rightarrow m_l = 0$ (1 μόνο τροχιακό για την $l=0$ υποστρώμα)

Στοιβάδα (n)

↓
Υποστρώματα (l) Υπάρχουν n υποστρώματα

↓
Τροχιακά (m_l) Υπάρχουν $2l+1$ τροχιακά για κάθε υποστρώμα

	l	m_l	
$n=3$	0 (s)	0	→ 3s τροχιακό
	1 (p)	-1, 0, +1	→ 3p τροχιακά
	2 (d)	-2, -1, 0, +1, +2	→ 3d τροχιακά
1 στρώμα	3 υποστρώματα	9 συνολικά τροχιακά	

4. Κβαντικός αριθμός m_s

Περιγραφή, προώθηση, από την περιστροφή του ηλεκτρονίου γύρω από τον άξονά του (ιδιοπεριστροφή)

$$m_s \begin{cases} +\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{cases}$$

Άρα, ένα τροχιακό στο οποίο μπορεί να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο χαρακτηρίζεται από ~~τρεις~~ ^{τρεις} κβαντικούς αριθμούς:

$$n, l, m_l \neq m_s$$

και υπάρχει ένας επιπλέον κβ. αριθμός που καθορίζει την φορά περιστροφής των e^- γύρω από τον άξονά του.

$$m_s$$

Pauli Ανασχετικώς αρχή: Σε ένα άτομο δεν μπορούν να υπάρχουν 2 ηλεκτρόνια με ^{τα} τέσσερις κβ. αριθμούς ίδιους.

Ετσι π.χ. ένα συγκεκριμένο ατομικό τροχιακό με συγκεκριμένους n, l, m_l μπορεί να χρησιμοποιήσει το ποσό

δύο ηλεκτρόνια. Το ένα θα έχει $m_s = +\frac{1}{2}$ και το άλλο $m_s = -\frac{1}{2}$

Απεικόνιση ατομικών τροχιακών

Η πιο συνδεδεμένη απεικόνιση της πυκνότητας του ηλεκτρονιακού νέφους είναι οι λεγόμενοι

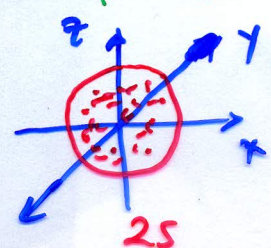
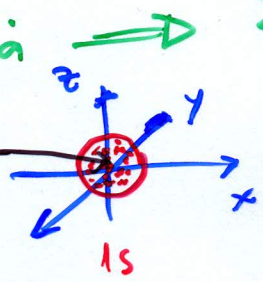
Περιγραμματοί χάρτες - Οριακή πυκνότητα

Μέσα στο χώρο του περιγράμματος το ηλεκτρόνιο έχει πιθανότητα > 90% να βρεθεί.

ή αλλιώς η πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους είναι πολύ υψηλή (90-99%)

S-τροχιακά ⇒ Σχήμα σφαίρας

Πολύ μεγάλη πιθανότητα να βρεθεί το e⁻ κοντά στον πυρήνα



$l = 0$

Σφαιρική συμμετρία: Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε μια ορισμένη απόσταση από τον πυρήνα είναι ανεξάρτητη από την κατεύθυνση (γωνία).

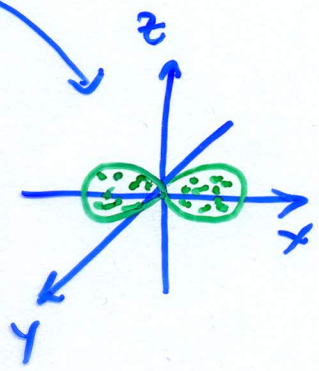
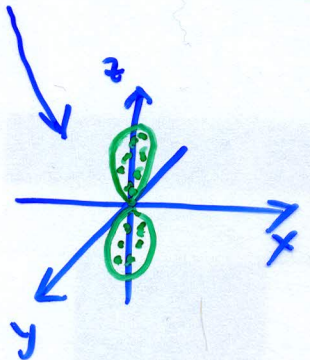
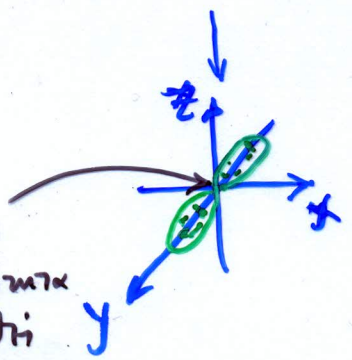
P-τροχιακά ⇒ Δύο λοβοί (εφαπτόμενοι σφαίρες) και ένα δεσφ. Προσανατολισμένοι είτε κατά μήκος του άξονα x, ή τον y ή τον z

Όχι σφαιρική συμμετρία
Η κατεύθυνση παίζει ρόλο.

p- τροχιακά (συνέχεια)
l=1

m_l = -1, 0, +1

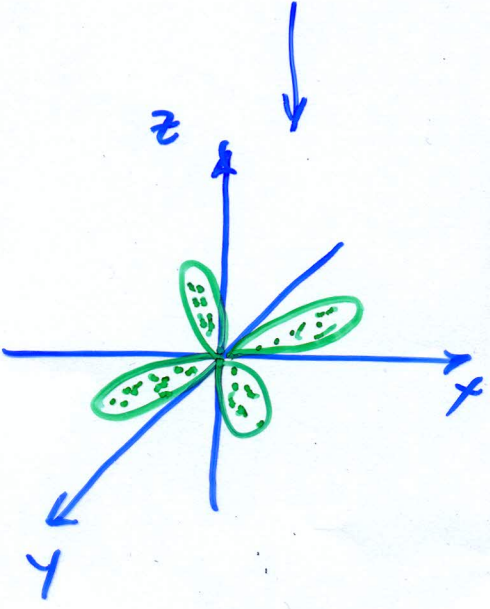
↓ ↓ ↓
p_y p_z p_x



Στον
αυτή να
η πιθανότητα
να βρεθεί
το e⁻ είναι ↑mδtν

d- τροχιακά : 4 λοβοί (μοιχίς) και ένας δόρυφος.
l=2

m_l = -2, -1, 0, +1, +2
↓ ↓ ↓ ↓ ↓
d_{xy} d_{yz} d_{z²} d_{xz} d_{x²-y²}



Εφαρμογές

(n, l, m_l, m_s)

16

1) Ποιές από τις παρακάτω τετράδες υφαντικών αριθμών που χαρακτηρίζουν ηλεκτρόνια είναι σωστή και ποιά λάθος;

(α) $(2, 0, 1, +\frac{1}{2})$: $n=2 \Rightarrow l=0, 1$
 $l=0 \Rightarrow m_l=0$ μόνο.
 Αδύνατο $m_l=1$ όταν $l=0$

(β) $(2, 2, 1, -\frac{1}{2})$: $n=2 \Rightarrow l=0, 1$ μόνο
 $l=2$ αδύνατο

(γ) $(5, 2, 1, 0)$ Λάθος
 $n=5 \Rightarrow l=0, 1, 2, 3, 4$
 $l=2$ οκ $m_l = -2, -1, 0, +1, +2$
 $m_l=1$ οκ
 $m_s=0$ Αδύνατο $m_s = \pm \frac{1}{2}$ μόνο

(δ) $(3, 2, -2, -\frac{1}{2})$ Σωστή Ηλεκτρόνιο σε φοχιακό 3d
 $n=3 \quad l=2$

(ε) $(4, 3, 3, +\frac{1}{2})$ Σωστή Ηλεκτρόνιο σε φοχιακό 4f
 $n=4 \quad l=3$

(2) Να γραφούν οι υφαντικοί αριθμοί (οριζάνης τετράδες) (α) ηλεκτρονίου σε φοχιακό 3p

$n=3 \quad l=1$ Άρα $m_l = -1, 0, +1$

Τριπλήττα

- ⊂ $(3, 1, 1, +\frac{1}{2})$
- ⊂ $(3, 1, 1, -\frac{1}{2})$
- ⊂ $(3, 1, 0, +\frac{1}{2})$
- ⊂ $(3, 1, 0, -\frac{1}{2})$
- ⊂ $(3, 1, -1, +\frac{1}{2})$
- ⊂ $(3, 1, -1, -\frac{1}{2})$

Ένα ηλεκτρόνιο φοχιακό 3p μπορεί να χαρακτηριστεί από μία από αυτές τις έξι οριζάνης τετράδες.

Ενέργεια ατομικών τροχιακών

Εξαρτάται από τους υφαντικούς αριθμούς των τα χαρακτηριστικά και βασικά από τους n και l

Ενέργεια ανάλογη του αθροίσματος n+l

Αν δύο υποομοιοβάθια έχουν ίδιο n+l \Rightarrow μικρότερη ενέργεια έχει εκείνη με το μικρότερο n.

Π.χ. 3d - 4s Άρα 4s < 3d
 $\left. \begin{matrix} n=3 \\ l=2 \end{matrix} \right\} 5$ $\left. \begin{matrix} n=4 \\ l=0 \end{matrix} \right\} 4$

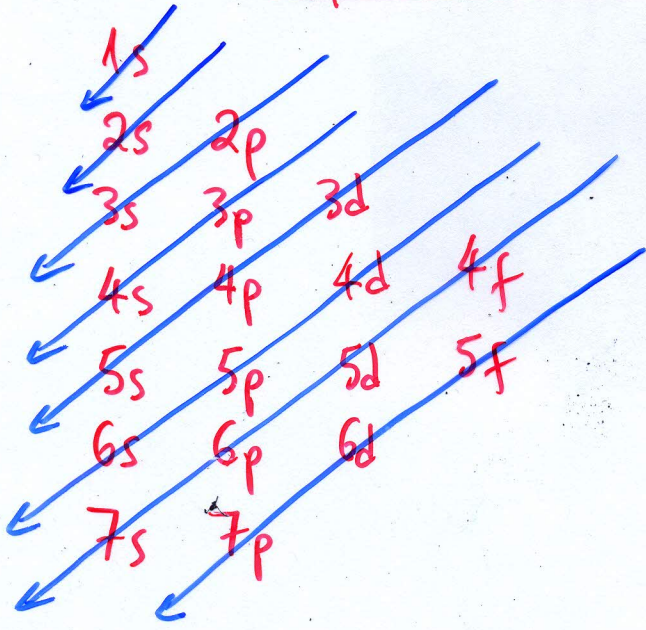
Ανάμεσα στα τροχιακά της ίδιας υποομοιοβάθιας (ίδιο n)

$s < p < d < f$ εντός από
 $s = p = d = f$

το άτομο του υδρογόνου οπότε

Όλα τα τροχιακά μίας υποομοιοβάθιας με ίδια n και l έχουν ίδια ενέργεια. Π.χ. 2p $\left. \begin{matrix} n=2 \\ l=1 \end{matrix} \right\}$ υπάρχουν $\left. \begin{matrix} 2p_x \\ 2p_y \\ 2p_z \end{matrix} \right\}$ ίδια ενέργεια.

Μνημονιακός κανόνας



Σειρά συμπλήρωσης
1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, ...

1) Αρχή της ελάχιστης ενέργειας

Τα e^- καταλαμβάνουν πρώτα τα τροχιακά με τη μικρότερη ενέργεια (Μικρότερη ενέργεια \rightarrow Μεγαλύτερη σταθερότητα)

2) Αναφορική αρχή του Pauli

3) Κανόνας του Hund.

Τα e^- καταλαμβάνουν τροχιακά έτσι ώστε τα σπιν τους να είναι παράλληλα (απτήμα της αρχής της ελάχιστης ενέργειας)

Π.χ. $6C : 1s^2 2s^2 2p^2$

$\uparrow\downarrow$
1s ²

$\uparrow\downarrow$
2s ²

\uparrow	\uparrow	
2p ²		

όχι

$\uparrow\downarrow$		
2p ²		

Hund: Όταν τα σπιν είναι παράλληλα έχουν μικρότερη ενέργεια

$7N : 1s^2 2s^2 2p^3$

$\uparrow\downarrow$
1s

$\uparrow\downarrow$
2s

\uparrow	\uparrow	\uparrow
2p		

3 μονήρη ή ασθένια ηλεκτρονία

$8O : 1s^2 2s^2 2p^4$

$\uparrow\downarrow$
1s

$\uparrow\downarrow$
2s

$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow
2p		

2 μονήρη ηλεκτρονία

Hund: Τα e^- έχουν ομώνυμο φορτίο, απωθούνται και προτιμούν να βρεθούν όσο γίνεται μακριά μεταξύ τους. Αν έχουν τη δυνατότητα, το εμμεταλλώνονται.

1) Διαμόρφωση ευγενών αερίων. ns^2, np^6

$\text{Π.χ. } {}_{10}\text{Ne } 1s^2 2s^2 2p^6$ Στοιβάδα L έχει 8 e^-
 και οι υπό μέρη συμπληρωθείς
 (n=2)

${}_{18}\text{Ar } 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ Στοιβάδα M (n=3)
 έχει 8 e^-

${}_{17}\text{Cl}^-$ Το ${}_{17}\text{Cl}$ είναι: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
 Το ${}_{17}\text{Cl}^-$ έχει επιπλέον ένα e^- το οποίο
 θα συμπληρωθεί στην $3p^5$

Άρα ${}_{17}\text{Cl}^-$ έχει διαμόρφωση ίδια με ${}_{18}\text{Ar}$
 η/μνι

Ευσταθής διαμόρφωση

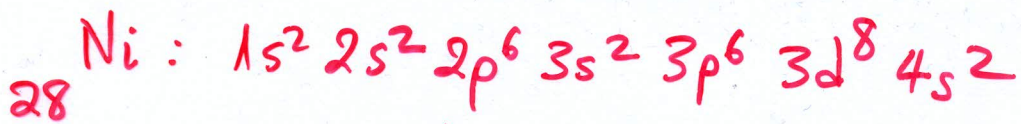
2) Όταν η στοιβάδα d είναι d^5 (ημι συμπληρωμένη) ή d^{10} (συμπληρωμένη) \Rightarrow αυξημένη σταθερότητα.

$\text{Π.χ. } {}_{24}\text{Cr } 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$
 $[\text{Ar}] 4s^2 3d^4$
 $[\text{Ar}] 3d^4 4s^2 : \underline{\underline{\text{OXI}}}$
 Προτιμάται $[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$

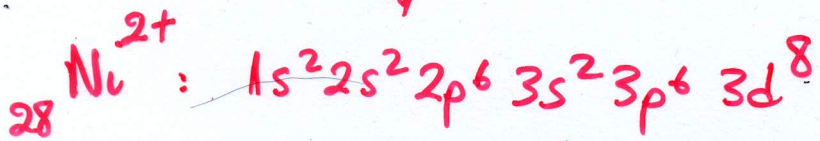
${}_{29}\text{Cu} : [\text{Ar}] 3d^9 4s^2 \text{ OXI}$
 Προτιμάται η $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$

Σημείωση: Η υποστοιβάδα $4s < 3d$ άρα συμπληρώνεται πρώτη. Όταν όμως η $4s$ συμπληρωθεί και αρχίσει η $3d$, τότε $4s > 3d$. Οπότε πρώτα χάνονται την $3d$ και μετά την $4s$.

$\text{Π.χ. } {}_{28}\text{Ni} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$



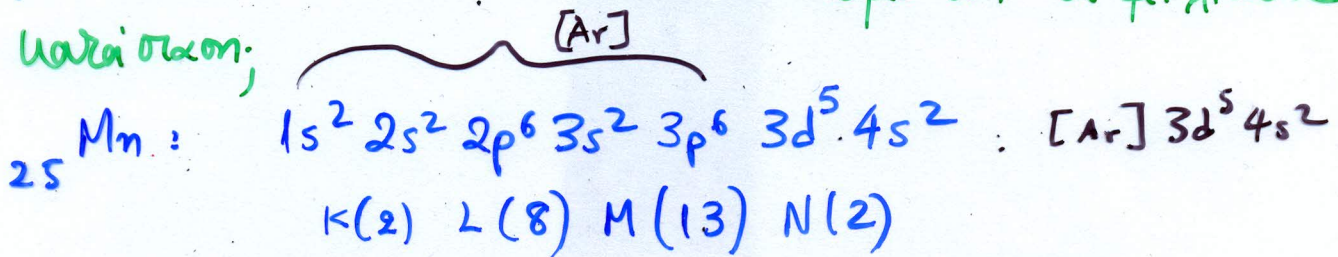
(20)



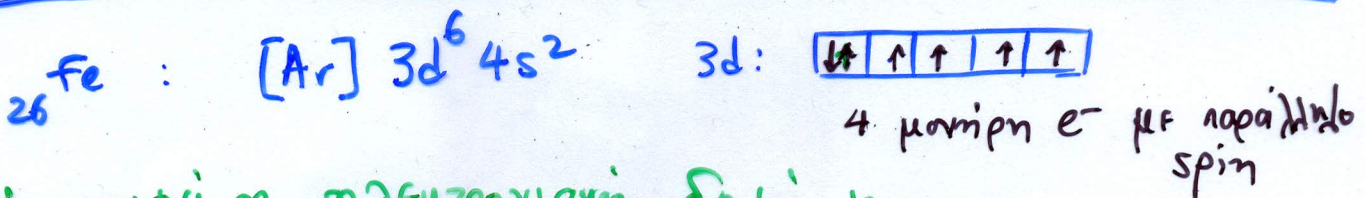
Άρα κατά τον ιοντισμό, πρώτα φεύγουν τα e^- της $4s^2$ που έχει την πιο χαμηλή ενέργεια από την $3d$.

Εφαρμογή

1) Να γραφτεί η ηλεκτρονιακή δομή σε σπειράδα και σε υποσπειράδα για τα άτομα ${}_{25}\text{Mn}$ και ${}_{26}\text{Fe}$. Πόσα μονήρη e^- διαθέτει το κάθε άτομο στη δεξιά δωδεκαυαρίσκα;



3d: $\boxed{\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow}$ 4s $\boxed{\uparrow \downarrow}$
 $n=3$ $n=4, l=0, m_l=0$
 $l=2, m_l=-2, -1, 0, 1, 2$ 5 μονήρη e^- με παράλληλο spin



2) Να γραφτεί η ηλεκτρονιακή δομή για τα ιόντα Mn^{2+} , Fe^{2+} , Fe^{3+}

