

ΔΟΜΗ ΤΟΥ ΑΤΟΜΟΥ

Υποατομικά σωματίδια

Πρωτόνια, νετρόνια και ηλεκτρόνια.

	σχετική μάζα	σχετικό φορτίο	
πρωτόνιο	1 ($1,67 \times 10^{-24} \text{g}$)	+1	
νετρόνιο	1	0	} $1,6 \times 10^{-19} \text{Cb}$
ηλεκτρόνιο	1/1836 ($9 \times 10^{-28} \text{g}$)	-1	

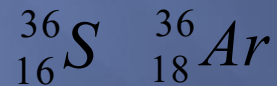
Ο πυρήνας

- ▣ Ο πυρήνας βρίσκεται στο κέντρο του ατόμου και περιέχει πρωτόνια και νετρόνια. Τα πρωτόνια και τα νετρόνια καλούνται **νουκλεόνια**.
- ▣ Σχεδόν όλη η μάζα του ατόμου είναι συγκεντρωμένη στον πυρήνα.

Ισότοπα- Ισοβαρή- Ισότονα

• **Ισότοπα:** Ίδιος ατομικός, διαφορετικός μαζικός αριθμός
Ίδιες χημικές, διαφορετικές φυσικές ιδιότητες
(Sn: 10 ισότοπα)

• **Ισοβαρή:** Ίδιος μαζικός, διαφορετικός ατομικός αριθμός
Διαφορετικές φυσικές και χημικές ιδιότητες,
διαφορετικά στοιχεία



• **Ισότονα:** Ίδιος αριθμός νετρονίων



Τα ηλεκτρόνια

- Τα άτομα είναι ηλεκτρικά ουδέτερα και το θετικό φορτίο των πρωτονίων εξισορροπείται από το αρνητικό φορτίο των ηλεκτρονίων. Σε ένα ουδέτερο άτομο:

Αριθμός ηλεκτρονίων = Αριθμός πρωτονίων

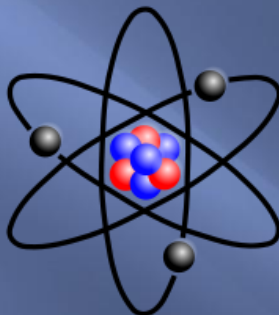
Ατομικά πρότυπα

- ▣ Πρότυπο Thomson- Perrin
 - Συμπαγής σφαίρα θετικού ηλεκτρισμού (πρωτόνια) μέσα στην οποία είναι τόσα ηλεκτρόνια, όσα απαιτούνται για την εξουδετέρωση του θετικού φορτίου.
 - Η σταθερότητα του ατόμου επιτυγχάνεται από τις ελκτικές δυνάμεις πρωτονίων- ηλεκτρονίων και τις απωστικές δυνάμεις μεταξύ ηλεκτρονίων.
 - Διάταξη των ηλεκτρονίων σε ομόκεντρες σφαιρικές επιφάνειες (στοιβάδες ή φλοιούς), ο αριθμός των οποίων αυξάνεται με αύξηση του αριθμού των ηλεκτρονίων.

Ατομικά πρότυπα

▣ Πρότυπο Rutherford (πλανητικό ατομικό πρότυπο)

- Το άτομο αποτελείται από τον πυρήνα, που είναι θετικά φορτισμένος και τα ηλεκτρόνια, που είναι αρνητικά φορτισμένα και κινούνται σε μια μόνο κυκλική τροχιά, γύρω από τον πυρήνα.

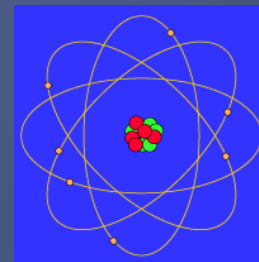


Άτομο λιθίου (Li)

Ατέλειες του μοντέλου

- ☞ Η συνεχής κίνηση e γύρω από τον πυρήνα (απώλεια ενέργειας) θα οδηγούσε σε σύγκρουση με τον πυρήνα, μετά από ελικοειδή κίνηση.
- ☞ Η συνεχής ελάττωση της ενέργειας του e λόγω περιστροφής συνεπάγεται και ελάττωση της συχνότητας της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας → συνεχές φάσμα εκπομπής.

Ατομικά πρότυπα



□ Πρότυπο Bohr

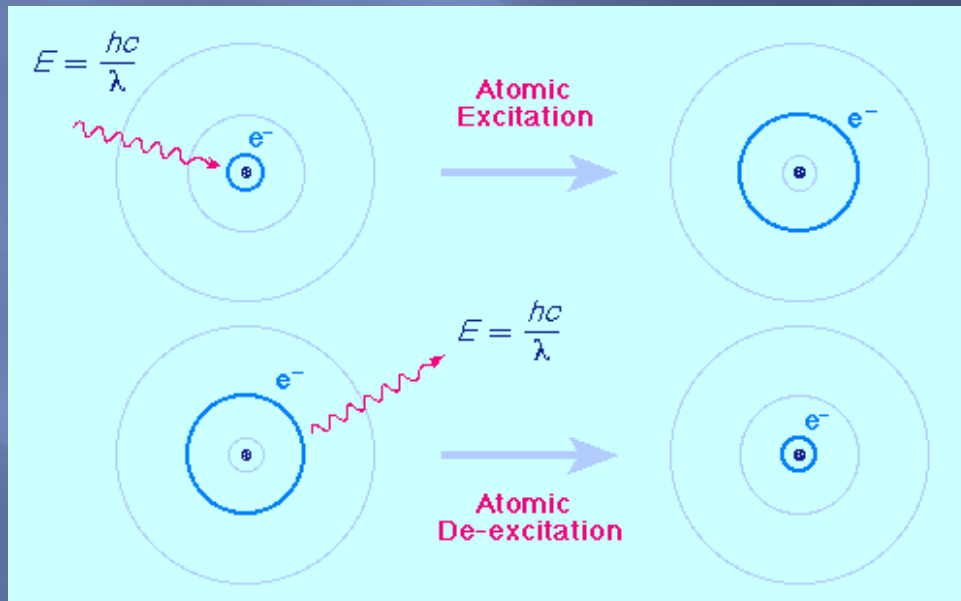
- Το άτομο αποτελείται από τον πυρήνα, που είναι θετικά φορτισμένος και τα ηλεκτρόνια, που είναι αρνητικά φορτισμένα και κινούνται σε ορισμένες κυκλικές τροχιές, γύρω από τον πυρήνα, τις λεγόμενες επιτρεπόμενες και έχουν καθορισμένη ενέργεια.

n : κύριος κβαντικός αριθμός

Τιμές n	1	2	3	4	5	6	7	...
Στοιβάδα	1 ^η ή θεμελιώδης	2 ^η ή 1 ^η διεγερμένη	3 ^η ή 2 ^η διεγερμένη	4 ^η ή 3 ^η διεγερμένη	5 ^η ...	6 ^η ...	7 ^η
Ονομασία	K	L	M	N	O	P	Q	...

Ατομικά πρότυπα

- Η μεταπήδηση e από μια τροχιά με E_1 σε μια τροχιά με E_2 , όπου $E_2 > E_1$ συνοδεύεται από απορρόφηση ακτινοβολίας $E_2 - E_1 = h\nu$
- Η μεταπήδηση e από μια τροχιά με E_2 σε μια τροχιά με E_1 , όπου $E_2 > E_1$ συνοδεύεται από εκπομπή ακτινοβολίας $E_2 - E_1 = h\nu \rightarrow$ γραμμικό φάσμα.



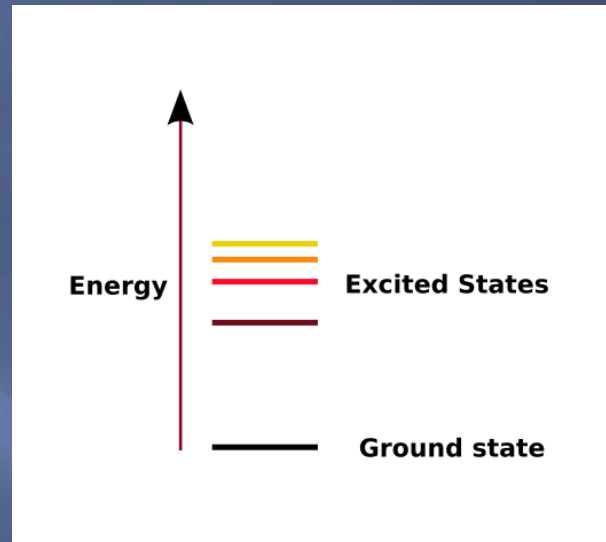
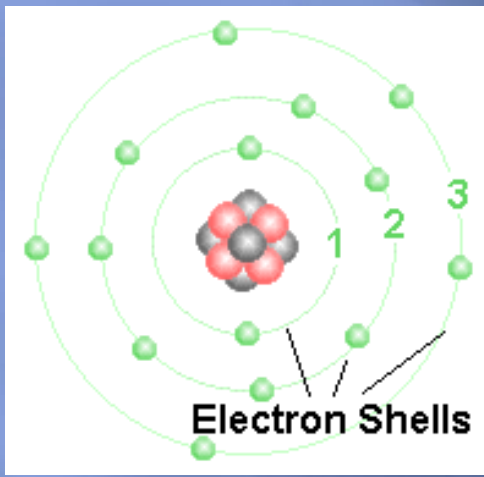
Άτομο υδρογόνου (H)

Ατομικά πρότυπα

Ενέργεια του ηλεκτρονίου

$$E_n = -\frac{2,18 \cdot 10^{-18}}{n^2} J$$

όπου n ο κύριος κβαντικός αριθμός

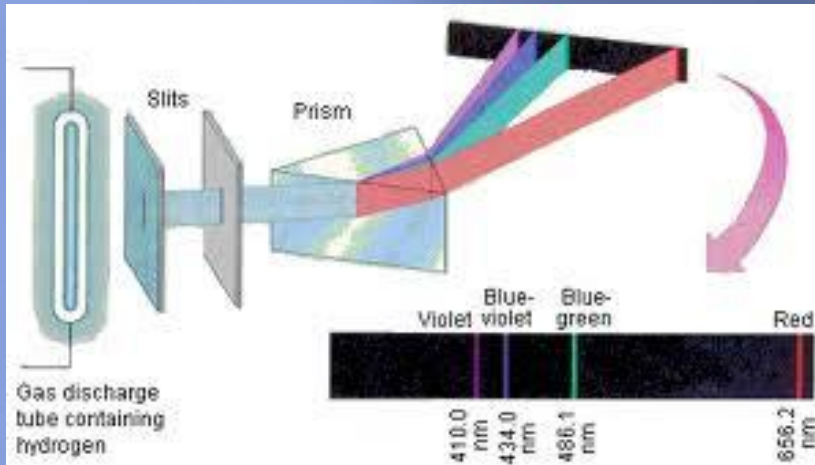


Διηγευμένη κατάσταση	K	L(n=2)	M(n=3)	N (n=4)	O (n=5)	...	(n=∞)
Ενέργεια διηγευμένης κατάστασης	E_1	$E_2 = \frac{E_1}{4}$	$E_3 = \frac{E_1}{9}$	$E_4 = \frac{E_1}{16}$	$E_5 = \frac{E_1}{25}$...	$E_\infty = 0$

Ατομικά πρότυπα

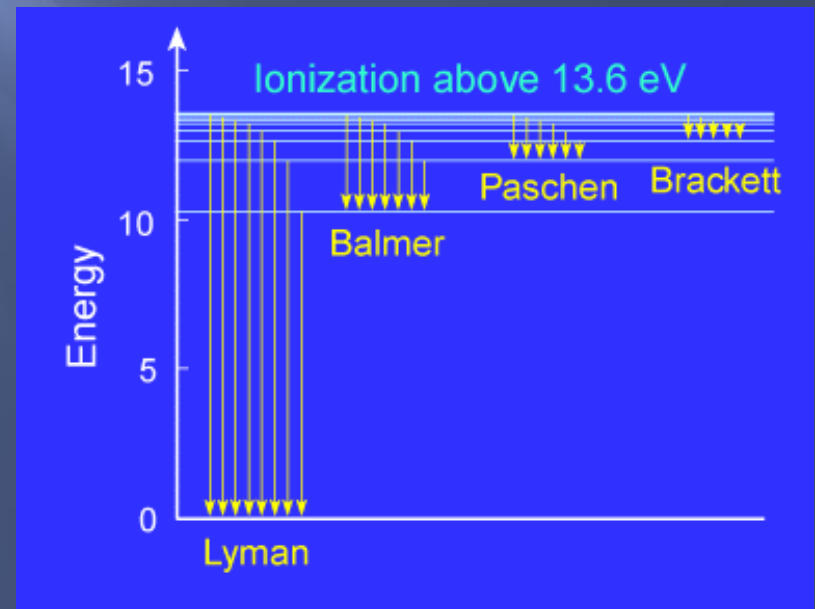
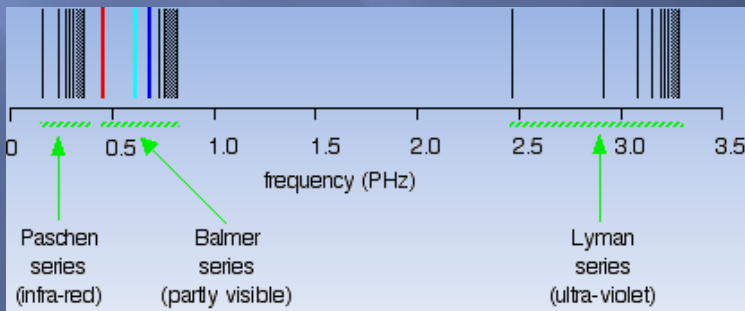
Φάσμα εκπομπής υδρογόνου

http://www.youtube.com/watch?v=QI50GBUJ48s&feature=player_detailpage#t=13s



Εξίσωση Rydberg

$$\nu = 3,29 \cdot 10^{15} \left(\frac{1}{n_x^2} - \frac{1}{n_y^2} \right) s^{-1}$$



Ατομικά πρότυπα

▣ Πρότυπο de Broglie (κβαντομηχανική)

*Κάθε υποατομικό σωματίδιο έχει διπλή φύση
υλική και κυματική*

☞ Εξίσωση de Broglie ($\lambda = h / m v$, h η σταθερά του Planck = $6,62610^{-34}$ Js)

Ατομικά πρότυπα

- ☞ Αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg
«Είναι αδύνατο να γνωρίζουμε ταυτόχρονα και με ακρίβεια τη θέση και την ορμή ενός τόσο μικρού σωματιδίου όπως είναι το ηλεκτρόνιο»

- ☞ Κυματική εξίσωση του Schrodinger (περιγραφή της κίνησης του ηλεκτρονίου, ως κύματος, γύρω από τον πυρήνα)

Ατομικά πρότυπα

Ατομικά τροχιακά

Το σύνολο των αποδεκτών λύσεων της εξίσωσης του Schrödinger, που αντιστοιχούν σε συγκεκριμένη τιμή ενέργειας $E_n = -2,18 \cdot 10^{-18} \text{J} / n^2$.

Εκφράζουν την πιθανότητα ή την κατανομή 90-95% να βρεθεί το e σε ορισμένο σημείο του χώρου γύρω από τον πυρήνα

Ατομικά πρότυπα

- ▣ Πρότυπο de Broglie (κβαντομηχανική)

Ηλεκτρονιακό νέφος

Ηλεκτρονιακή πυκνότητα

electron

proton



Ατομικά πρότυπα

▣ Πρότυπο de Broglie (κβαντομηχανική)

Κβαντικοί αριθμοί

Καθορίζουν την ενέργεια και το σχήμα των τροχιακών και των ηλεκτρονιακών νεφών.

Προκύπτουν από την επίλυση της εξίσωσης του Schrödinger.

Κβαντικοί αριθμοί



Κύριος κβαντικός αριθμός (n)

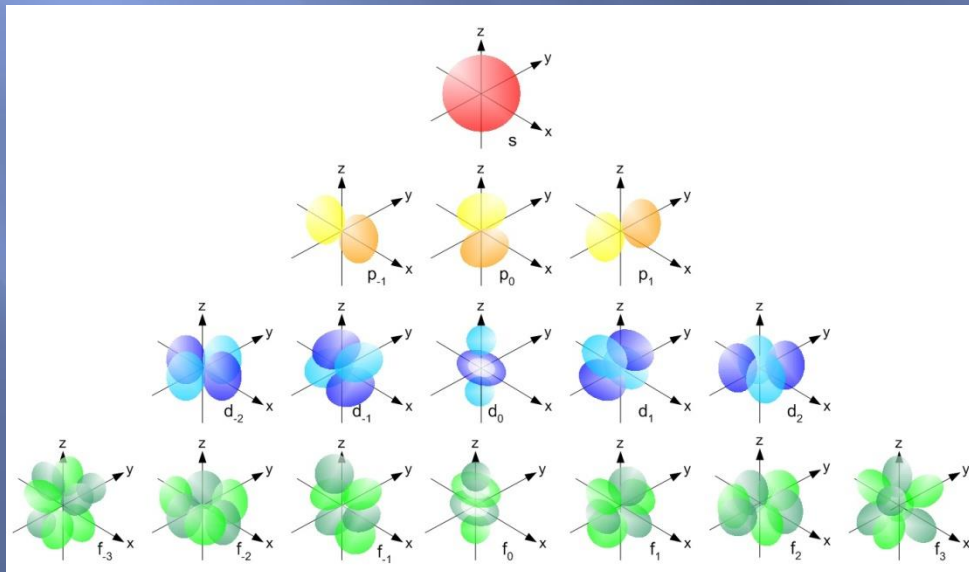
- ☞ Τιμές από 1- ∞ (στην πράξη n=1-7)
- ☞ Καθορίζει την ενέργεια του e, $E_n = -2,18 \cdot 10^{18} \text{J} / n^2$ και το μέγεθος του ηλεκτρονιακού νέφους
- ☞ $\uparrow n \Rightarrow$ ηλεκτρονιακό νέφος μεγαλύτερο και πιο απομακρυσμένο από τον πυρήνα
- ☞ n ενδεικτικός της έλξης του πυρήνα
- ☞ Σύνολο τροχιακών με ίδιο n \Rightarrow ηλεκτρονιακές στοιβάδες ή φλοιοί

Κβαντικοί αριθμοί



Δευτερέων ή αξιμουθιακός αριθμός (l)

- ☞ Τιμές από $0, 1, 2, 3, \dots, n-1$
- ☞ Καθορίζει το σχήμα του ηλεκτρονιακού νέφους
- ☞ Ενδεικτικός της άπωσης μεταξύ των ηλεκτρονίων
- ☞ Σε κάθε τιμή l αντιστοιχεί υποσύνολο τροχιακών με $2l+1$ τροχιακά



s (sharp)
p (principal)
d (diffuse)
f (Fundamental)

Κβαντικοί αριθμοί

- ▣ Τρίτος ή μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l)
 - ☞ Τιμές από $-l, \dots, 0, \dots, +l$ ($2l+1$)
 - ☞ Καθορίζει τον προσανατολισμό του ηλεκτρονιακού νέφους σε σχέση με τους άξονες x, y, z
 - ☞ Σε κάθε τιμή m_l αντιστοιχεί ένα τροχιακό

Κβαντικοί αριθμοί

▣ Τέταρτος μαγνητικός κβαντικός αριθμός του spin (m_s)

☞ Τιμές $+1/2$ και $-1/2$

☞ Καθορίζει την περιστροφή του e γύρω από τον άξονά του

☞ Δε συμμετέχει στη διαμόρφωση της τιμής της ενέργειας του e ούτε στον καθορισμό του τροχιακού

Κβαντικοί αριθμοί

n	στοιβάδα	l	υποστοιβάδα	m_l	m_s	Αριθμός ηλεκτρονίων
1	K	0	s	0	$\pm 1/2$	2
2	L	0	s	0	$\pm 1/2$	2
		1	p	-1,0,1	$\pm 1/2$	
3	M	0	s	0	$\pm 1/2$	2
		1	p	-1,0,1	$\pm 1/2$	
		2	d	-2,-1,0,1,2	$\pm 1/2$	
4	N	0	s	0	$\pm 1/2$	2
		1	p	-1,0,1	$\pm 1/2$	
		2	d	-2,-1,0,1,2	$\pm 1/2$	
		3	f	-3,-2,-1,0,1,2,3	$\pm 1/2$	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
n	$0 \rightarrow n-1$			$-(n-1), \dots, 0, \dots, (n-1)$	$\pm 1/2$	$2n^2$

Αρχές δόμησης πολυηλεκτρονικών ατόμων

- ▣ Η απαγορευτική αρχή του Pauli
- ▣ Η αρχή της ελάχιστης ενέργειας
- ▣ Ο κανόνας του Hund

Αρχές δόμησης πολυηλεκτρονικών ατόμων Η απαγορευτική αρχή του Pauli

«Είναι αδύνατο να υπάρχουν στο ίδιο άτομο δύο e με την ίδια ενεργειακή κατάσταση (ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών)»



Υπολογισμός μέγιστου αριθμού ηλεκτρονίων σε κάθε τροχιακό, υποστοιβάδα και στοιβάδα.

Αρχές δόμησης πολυηλεκτρονικών ατόμων Η αρχή της ελάχιστης ενέργειας

«Κατά την ηλεκτρονιακή διαμόρφωση ενός πολυηλεκτρονιακού ατόμου, τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τροχιακά με τη μικρότερη ενέργεια, ώστε να αποκτήσουν τη μέγιστη σταθερότητα στη θεμελιώδη κατάσταση»

Κανόνας 1^{ος}

Ανάμεσα σε δύο υποστοιβάδες, τη χαμηλότερη ενέργεια έχει εκείνη η οποία έχει το μικρότερο άθροισμα των δύο πρώτων κβαντικών αριθμών $n+l$.

Κανόνας 2^{ος}

Ανάμεσα σε δύο υποστοιβάδες, με ίδιο άθροισμα, τη χαμηλότερη ενέργεια έχει εκείνη η οποία έχει το μικρότερο n .

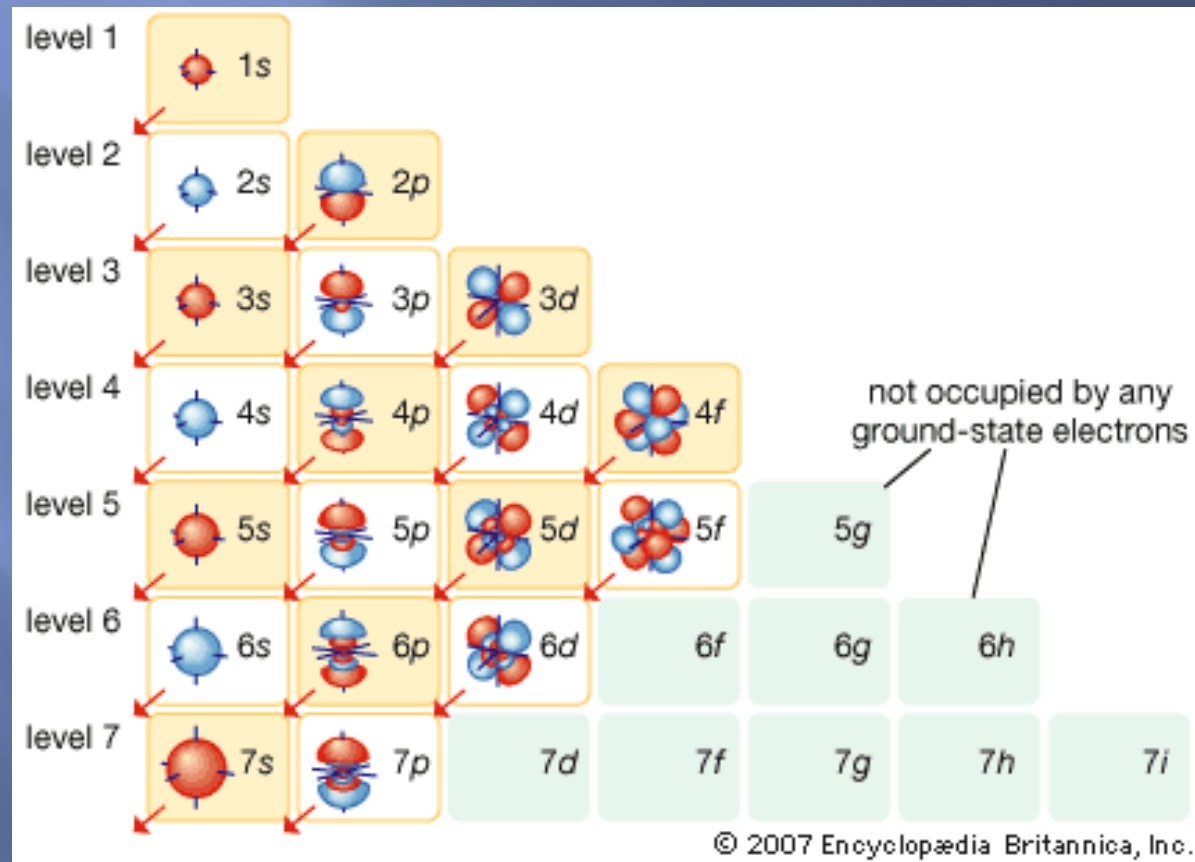
Ερώτηση:

Να συγκριθούν οι ενέργειες των υποστοιβάδων:

α) 3d και 4s

β) 3d και 4p

Αρχές δόμησης πολυηλεκτρονικών ατόμων Η αρχή της ελάχιστης ενέργειας (2)



Αρχές δόμησης πολυηλεκτρονικών ατόμων

Η αρχή της ελάχιστης ενέργειας (3)



Εξαιρέσεις στην κατανομή των ηλεκτρονίων ενός ατόμου

Cr (A.A.=24) και Cu (A.A.=29)



Κατανομή των ηλεκτρονίων ενός ιόντος

- Κατανομή των ηλεκτρονίων στο άτομο
- Για κατιόν, αφαιρούμε τόσα ηλεκτρόνια όσα και το φορτίο του από τη μεγαλύτερη ενεργειακά υποστοιβάδα
- Για ανιόν, προσθέτουμε τόσα ηλεκτρόνια όσα και το φορτίο του σύμφωνα με τα προηγούμενα διαγράμματα

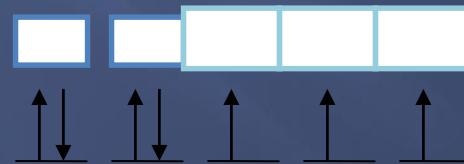
Αρχές δόμησης πολυηλεκτρονικών ατόμων Ο κανόνας του Hund

«Όταν τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας (ίδια υποστοιβάδα), έχουν κατά προτίμηση παράλληλα spin, ώστε τα ηλεκτρόνια να αποκτήσουν το μεγαλύτερο άθροισμα του κβαντικού αριθμού του spin, m_s »

π.χ

7N

$1s^2 2s^2 2p^3$



Αρχές δόμησης πολυηλεκτρονικών ατόμων

Η απαγορευτική αρχή του Pauli

