

ΤΡΟΧΙΑΚΑ – VSEPR- ΠΟΛΙΚΟΤΗΤΑ ΜΟΡΙΩΝ

Κβαντικοί αριθμοί

ΔΕΕ 1: Να εξηγούν ότι το ηλεκτρόνιο παρουσιάζει διττή φύση, σωματιδίου (κβάντα) και κύματος (ηλεκτρομαγνητικό φάσμα).

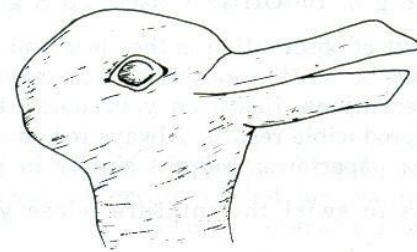
Το ηλεκτρόνιο είναι ένα σωματίδιο το οποίο συμπεριφέρεται και ως κύμα (διττή φύση). Ο κλάδος της Φυσικής ο οποίος περιγράφει μαθηματικά τις κυματικές ιδιότητες στοιχειωδών σωματιδίων, όπως το ηλεκτρόνιο, ονομάζεται κβαντομηχανική.

Οι πρώτες θεωρίες για το ηλεκτρόνιο είναι ανεπαρκείς αφού περιγράφουν το ηλεκτρόνιο λες και αποτελείται μόνο από ύλη.

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 στο 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).



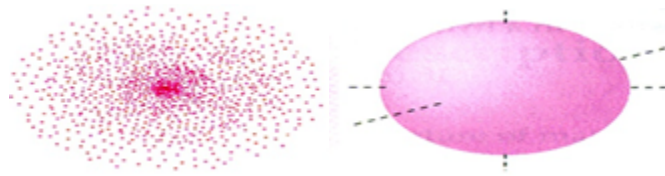
Σχ. 1: Όπως στο σχήμα συνυπάρχουν ένας λαγός και ένα πουλί, έτσι και στο ηλεκτρόνιο συνυπάρχουν το σωματίδιο και το κύμα.

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 μια ορισμένη θέση το ηλεκτρόνιο.

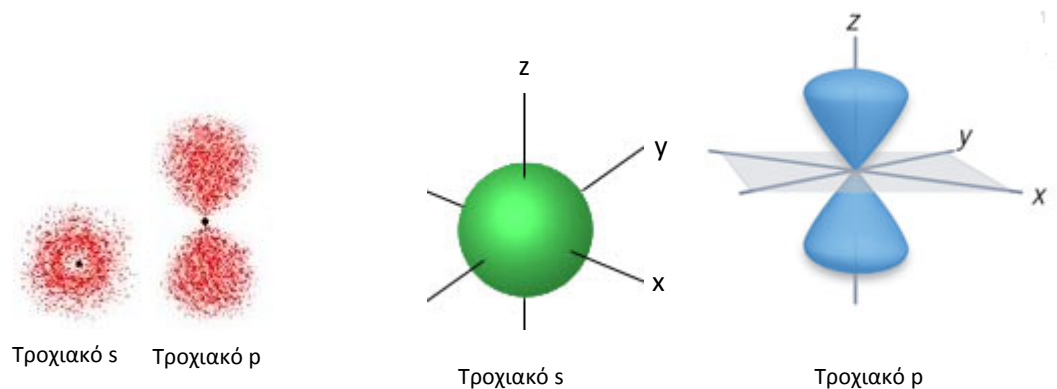
Σήμερα, δηλαδή, δε θεωρούμε πλέον ότι ένα ηλεκτρόνιο κινείται σε μια ορισμένη τροχιά γύρω από τον πυρήνα. Στην κβαντομηχανική δε μιλάμε για τη θέση ενός ηλεκτρονίου, αλλά για την πιθανότητα να βρίσκεται σε μια ορισμένη θέση ένα ηλεκτρόνιο.

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 φωτογραφήσουμε το ηλεκτρόνιο καθώς κινείται γύρω από τον πυρήνα θα παίρναμε την πιο κάτω εικόνα που επειδή θυμίζει νέφος, ονομάζεται ηλεκτρονικό νέφος. Το ηλεκτρονιακό νέφος παρουσιάζεται και με οριακές καμπύλες, που είναι και η πιο συνηθισμένη απεικόνιση των της πυκνότητας του ηλεκτρονιακού νέφους, το περίγραμμα της καμπύλης περικλείει τη μέγιστη πυκνότητα του ηλεκτρονικού νέφους π.χ. 90-99% αυτής.



Σχ. 2: Σχηματική απεικόνιση της πυκνότητας του ηλεκτρονιακού νέφους του ατόμου του υδρογόνου σε μη διεγερμένη κατάσταση: α) με «σιγμές» β) με «οριακές» καμπύλες (πάνω). Γραφική παράσταση της πυκνότητας του ηλεκτρονιακού νέφους σε συνάρτηση με την απόσταση από τον πυρήνα (κάτω).

Η περιγραφή του χώρου γύρω από τον πυρήνα όπου υπάρχει μεγάλη πιθανότητα (90-99%) εύρεσης του ηλεκτρονίου 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 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 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. και 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 ιδιοστροφομή του ηλεκτρονίου).

ΔΕΕ 3: Να εξηγούν ότι ο χώρος όπου υπάρχει μεγάλη πιθανότητα να βρίσκεται ένα ηλεκτρόνιο ονομάζεται ηλεκτρονική στιβάδα και εκφράζεται με τον κβαντικό αριθμό n .

Με βάση την κβαντομηχανική:

Ο κύριος κβαντικός αριθμός, n , καθορίζει την ενέργεια του ηλεκτρονίου και το 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 4: Να αναφέρουν τις τιμές οι 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 5: Να αναφέρουν πώς σχετίζονται οι τιμές του κύριου κβαντικού αριθμού με την ενέργεια του ηλεκτρονίου και το χώρο στον οποίο κινείται το ηλεκτρόνιο.

Η κάθε τιμή n αντιστοιχεί σε καθορισμένη ενεργειακή στάθμη.

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

Κάθε κύρια στιβάδα (περιγράφεται με το n) χωρίζεται 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 6: Να δηλώνουν ότι ο δευτερεύων ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός, l , διακρίνει συγκεκριμένες περιοχές σε μια ηλεκτρονική στιβάδα οι οποίες έχουν διαφορετικά σχήματα και ονομάζονται υποστιβάδες ή υποφλοιοί.

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

Ο δευτερεύων ή αζιμουθιακός αριθμός, l , διακρίνει υποστιβάδες οι οποίες έχουν διαφορετικά σχήματα. π.χ. η στιβάδα με $n=2$ έχει δύο (2) διαφορετικά είδη υποστιβάδων.

ΔΕΕ 7: Να συσχετίζουν το σχήμα της υποστιβάδας με τον δευτερεύων κβαντικό αριθμό έτσι που να αναγνωρίζουν από το σχήμα τον δευτερεύων κβαντικό αριθμό και αντίστροφα.

Να δείχνονται τρισδιάστατες εικόνες με τα σχήματα μόνο των υποστιβάδων $l=0$ και $l=1$.

ΔΕΕ 8: Να υπολογίζουν τις τιμές τις οποίες μπορεί να πάρει ο δευτερεύων κβαντικός αριθμός, l , με βάση τον κύριο κβαντικό αριθμό.

1. Ο αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός l καθορίζει το σχήμα του ηλεκτρονικού νέφους (τροχιακού).
2. Ο l παίρνει όλες τις ακέραιες τιμές από $0 - (n-1)$ [$l = 0, 1, \dots, (n-1)$]
3. Κάθε κύρια στιβάδα, που περιγράφεται με τον κβαντικό αριθμό n , χωρίζεται σε διάφορα ενεργειακά επίπεδα, τις υποστιβάδες.
4. Οι υποστιβάδες ή υποφλοιοί συμβολίζονται με γράμματα. Με τον ίδιο τρόπο συμβολίζονται και τα αντίστοιχα ατομικά τροχιακά, όπως φαίνεται στο παρακάτω πίνακα:

Αζιμουθιακός 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>	

5. Υποστιβάδα ή υποφλοιός ονομάζεται το σύνολο των ατομικών τροχιακών ενός ατόμου που έχουν τις ίδιες τιμές κβαντικών αριθμών n και l .
6. Ηλεκτρόνια που βρίσκονται στην ίδια στιβάδα (δηλ. έχουν ίδιο n) αλλά σε διαφορετική υποστιβάδα (δηλ. έχουν διαφορετικό l) έχουν διαφορετική ενέργεια.

ΔΕΕ 9: Να καθορίζουν τον αριθμό των υποστιβάδων με βάση τον αριθμό της στιβάδας (κύριο κβαντικό αριθμό).

Ο κύριος κβαντικός αριθμός, n , καθορίζει τον μέγιστο αριθμό υποστιβάδων ο οποίος μπορεί να υπάρχει.

Παραδείγματα: $n=3 \Rightarrow$ μέγιστος αριθμός υποστιβάδων 3 ($l=0, l=1$ και $l=2$)

$n=2 \Rightarrow$ μέγιστος αριθμός υποστιβάδων 2 ($l=0, l=1$)

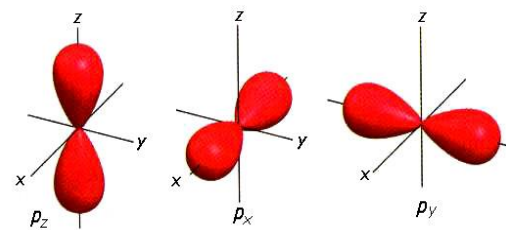
ΔΕΕ 10: Να αναγνωρίζουν τα σύμβολα των υποστιβάδων με τους λατινικούς χαρακτήρες *s, p, d, f*.

Σύμβολο υποστιβάδας : *s, p, d, f*

ΔΕΕ 11: Να αναφέρουν ότι για κάθε τιμή του δευτερεύοντος κβαντικού αριθμού l , αντιστοιχεί κι ένας λατινικός χαρακτήρας (σύμβολο της υποστιβάδας).

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

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



π.χ. Για την υποστιβάδα με κβαντικούς αριθμούς $n=1$ και $l=0$ χρησιμοποιούμε το συμβολισμό $1s$.

ΔΕΕ 12: Να διακρίνουν το ηλεκτρόνιο με τη μεγαλύτερη ενέργεια όταν τους δίνονται οι τιμές των n και l οι οποίες περιγράφουν ένα ηλεκτρόνιο.

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

Μεταξύ δύο υποστιβάδων χαμηλότερη ενέργεια έχει εκείνη η οποία έχει το μικρότερο άθροισμα των δύο πρώτων κβαντικών αριθμών ($n + l$). Αν το άθροισμα είναι το ίδιο, τότε χαμηλότερη ενέργεια έχει η υποστιβάδα με το μικρότερο κύριο κβαντικό αριθμό n . $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d \dots$

ΔΕΕ 13: Να διακρίνουν τις έννοιες της στιβάδας, της υποστιβάδας και του τροχιακού.

Διάκριση των εννοιών στιβάδας, υποστιβάδας και τροχιακού.

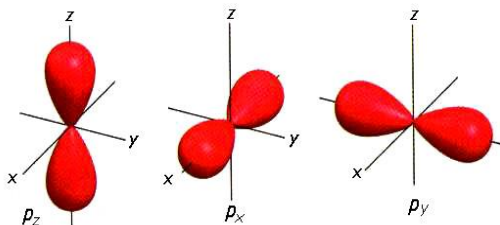
Παράδειγμα:

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

➤ Η υποστιβάδα $l=0$ (s) με σχήμα σφαιρικό αποτελεί και τροχιακό, το τροχιακό s.

➤ Η υποστιβάδα $l=1$ (p)
τροχιακά, ένα σε κάθε άξονα

αποτελείται από 3
(τροχιακά p_x , p_y , p_z).



Σχ. 4 Εικονική αναπαράσταση των p_x , p_y , p_z

ΔΕΕ 14: Να αναγνωρίζουν ότι ο τρίτος κβαντικός αριθμός, μαγνητικός αριθμός m_l , καθορίζει τον προσανατολισμό των τροχιακών στο χώρο.

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

Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_l καθορίζει τον προσανατολισμό των τροχιακών σε σχέση με τους άξονες x , y , 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 (Σχήμα 4).

ΔΕΕ 15: 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:

- $\ell=0$, $m_\ell = 0$ 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 στο 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 στο χώρο.

Υποστιβάδες και τροχιακά

Συνοψίζοντας τα πιο πάνω μπορούμε να πούμε ότι η στιβάδα $n=2$ έχει δυο υποστιβάδες ($\ell=0, \ell=1$) ή 2s, 2p. Η κάθε στιβάδα περιέχει τροχιακά με διαφορετικό προσανατολισμό στο 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.

πχ: η 2^n στιβάδα έχει: $2^2 = 4$ τροχιακά: (2, 0, 0) ή 2s, (2, 1, -1) ή $2p_y$, (2, 1, 0) ή $2p_z$, (2, 1, 1) ή $2p_x$

ΔΕΕ 16: Να αναφέρουν ότι ο τέταρτος κβαντικός αριθμός m_s , δίνει πληροφορίες για τον προσανατολισμό του spin και μπορεί να πάρει τιμές $+\frac{1}{2}$ ή $-\frac{1}{2}$.

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 το χώρο στον οποίο μπορεί να εντοπιστεί το ηλεκτρόνιο.

Ο κβαντικός αριθμός του spin (m_s) παίρνει τιμές ή $+1/2$ 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 m_s .

Συνοψίζοντας όλα τα πιο πάνω, οι τέσσερις 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 spin

ΔΕΕ 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 18: Να εξάγουν το 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.

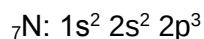
Ένα ατομικό τροχιακό μπορεί να μην περιέχει ηλεκτρόνιο ή να έχει 1 ηλεκτρόνιο ή να έχει 2 ηλεκτρόνια με αντιπαράλληλα spin.

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

n	ℓ	m_ℓ	m_s	
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 $3 \cdot 2 = 6$ το πολύ ηλεκτρόνια.
	1	-1	+1/2, -1/2	
		0	+1/2, -1/2	
	1	+1	+1/2, -1/2	
	0	0	+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 τρία τροχιακά με $3 \cdot 2 = 6$ ηλεκτρόνια (το μέγιστο) και στην d πέντε τροχιακά με $5 \cdot 2 = 10$ ηλεκτρόνια (το μέγιστο).
1	-1	+1/2, -1/2		
	0	+1/2, -1/2		
	+1	+1/2, -1/2		
3	2	-2	+1/2, -1/2	
		-1	+1/2, -1/2	
		0	+1/2, -1/2	
		+1	+1/2, -1/2	
		+2	+1/2, -1/2	

Παράδειγμα:

Ποια είναι η ηλεκτρονιακή δομή του ${}^7\text{N}$;



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

	1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z
${}^7\text{N}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$

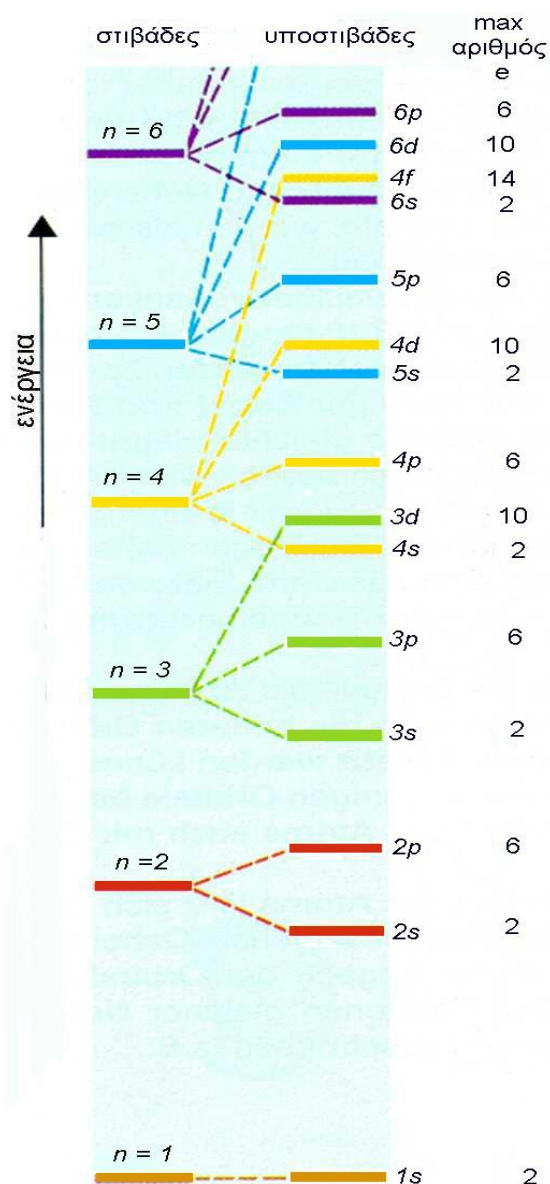
(και όχι $1s^2, 2s^2, 2p_x^2, 2p_y^1$).

ΔΔΕ 21: Να διατυπώνουν την Αρχή της Ελάχιστης Ενέργειας.

Σύμφωνα με την αρχή της ελάχιστης ενέργειας, κατά την ηλεκτρονιακή δόμηση ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου, τα ηλεκτρόνια οφείλουν να καταλάβουν τροχιακά με τη μικρότερη ενέργεια, ώστε να αποκτήσουν τη μεγίστη σταθερότητα στη θεμελιώδη κατάσταση.

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

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



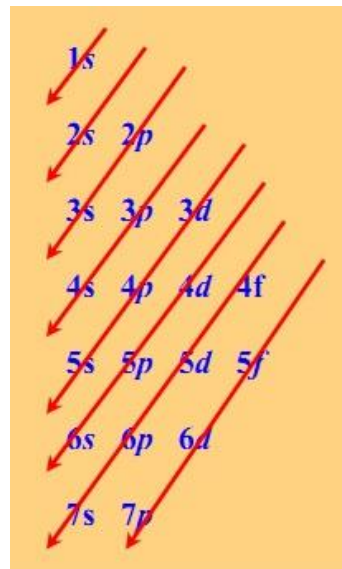
ΔΔΕ 22: Να εφαρμόζουν την Αρχή της Ελάχιστης Ενέργειας

Εφαρμογή της Αρχή της Ελάχιστης Ενέργειας κατά την ηλεκτρονιακή δόμηση

ΔΔΕ 23: Να χρησιμοποιούν τον μνημονικό κανόνα για τη διαδοχική συμπλήρωση των ατομικών τροχιακών με ηλεκτρόνια στα πολυηλεκτρονικά άτομα.

Επειδή δύσκολα μπορεί να θυμηθεί κανείς το διάγραμμα διαδοχής των ενεργειακών σταθμών, που παρατίθεται παραπλεύρως, 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.

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

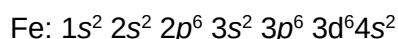


Σχ. 5: Μνημονικός κανόνας για τη διαδοχική συμπλήρωση των ατομικών τροχιακών με ηλεκτρόνια στα πολυηλεκτρονικά άτομα.

Παράδειγμα:

Πώς κατανέμονται, στη θεμελιώδη κατάσταση, τα 26 ηλεκτρόνια στο άτομο του σιδήρου;

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



- Να παρατηρήσουμε ότι μετά την εισαγωγή ηλεκτρονίων στην υποστιβάδα 3d αυτή έχει λιγότερη ενέργεια από την 4s. Ανάλογα ισχύει και για τις 4d και 5s.

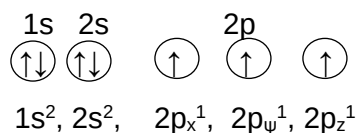
ΔΔΕ 24: Να γράφουν την ηλεκτρονιακή δομή ενός ατόμου στη θεμελιώδη του κατάσταση, εφαρμόζοντας την απαγορευτική αρχή του Pauli, την αρχή της ελάχιστης ενέργειας και τον κανόνα του Hund (AUFBAU PRINCIPLE).

Ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων τα οποία μπορεί να πάρει ένα τροχιακό είναι 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 ηλεκτρονικών του στιβάδων στη θεμελιώδη κατάσταση είναι:



Εφαρμογή:

Ποια είναι η ηλεκτρονιακή δομή του ${}_2\text{He}$, ${}_6\text{C}$, ${}_8\text{O}$, ${}_{15}\text{P}$, ${}_{20}\text{Ca}$;

ΔΕΕ 25: Να συσχετίζουν τους κβαντικούς αριθμούς με τον αντίστοιχο συμβολισμό μέχρι και την 4s υποστιβάδα και αντίστροφα.

Εφαρμογή:

Κβαντικοί αριθμοί:

α) $n=3$, $l=1$, $m_l = +1$ ή 0 ή -1 , $m_s = +\frac{1}{2}$ ή $-\frac{1}{2}$ Συμβολισμός: $3p_x^1$

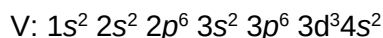
β) $n=2$, $l=0$, $m_l = 0$, $m_s = +\frac{1}{2}$ Συμβολισμός: $2s^1$

ΔΕΕ 26: Να εφαρμόζουν το φαινόμενο της αντιμετάθεσης κατά την ηλεκτρονιακή δόμηση πολυηλεκτρονιακών ατόμων.

Παράδειγμα:

Πώς κατανέμονται, στη θεμελιώδη κατάσταση, τα 23 ηλεκτρόνια στο άτομο του βαναδίου, V;
Σύμφωνα με τις 3 αρχές τις οποίες είδαμε προηγουμένως θα έχουμε:

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



ΔΕΕ 27: Να εφαρμόζουν τους πιο πάνω κανόνες και αρχές για να διακρίνουν το ηλεκτρόνιο (μέχρι την 4s) με τη μεγαλύτερη ενέργεια όταν δίνονται οι κβαντικοί αριθμοί ή τα σύμβολα.

Εφαρμογή:

Επιλογή του ηλεκτρονίου με την μεγαλύτερη ενέργεια:

α) $n=3, \ell=1, m_\ell=+1, m_s=+\frac{1}{2}$

β) $n=4, \ell=1, m_\ell=0, m_s=-\frac{1}{2}$

γ) $n=2, \ell=1, m_\ell=0, m_s=+\frac{1}{2}$

δ) $3p_x, 2p_z, 4s$

ΔΕΕ 28: Να ορίζουν τι είναι ατομική διέγερση, δηλαδή διεγερμένη ηλεκτρονική κατάσταση.

ΔΕΕ 29: Να εφαρμόζουν την θεωρία της διέγερσης στο άτομο του θείου και να προβλέπουν τον αριθμό των δεσμών του ατόμου του θείου όταν βρίσκεται σε θεμελιώδη και σε διεγερμένη κατάσταση.

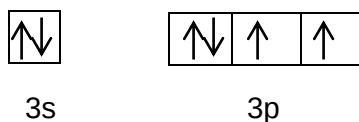
Εάν μελετήσουμε την ηλεκτρονιακή δόμηση του ατόμου του θείου στη θεμελιώδη κατάσταση, η οποία είναι: $[\text{Ne}](1s^2, 2s^2, 2p^6) 3s^2, 3p_x^2, 3p_y^1, 3p_z^1$ βλέπουμε πώς το άτομο του θείου έχει στην εξωτερική στιβάδα δυο μονήρη ηλεκτρόνια και επομένως θα αναμέναμε να σχηματίζει μόνο την χημική ένωση H_2S . Γνωρίζουμε όμως ότι το θείο σχηματίζει και τις χημικές ενώσεις SO_2 , όπου το άτομο του θείου έχει 4 ομοιοπολικούς δεσμούς, και SO_3 και H_2SO_4 όπου το άτομο του θείου έχει 6 ομοιοπολικούς δεσμούς.

Επομένως τίθενται τα ερωτήματα: Πώς το άτομο του θείου μπορεί να σχηματίσει περισσότερους ομοιοπολικούς δεσμούς από ότι είναι ο αριθμός των μονήρη ηλεκτρονίων του;

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

Διέγερση σημαίνει μετάβαση (προώθηση) ενός ή περισσότερων ηλεκτρονίων από συμπληρωμένο τροχιακό μιας υποστιβάδας σε διαθέσιμο (άδειο) τροχιακό άλλης υποστιβάδας μεγαλύτερης ενέργειας, μέσα στην ίδια στιβάδα και με ταυτόχρονη δημιουργία μονήρων ηλεκτρονίων.

Άρα το θείο με ατομικό αριθμό 16 και ηλεκτρονική δομή $[\text{Ne}](1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p_x^2, 3p_y^1, 3p_z^1)$, έχει στην εξωτερική στιβάδα 6 ηλεκτρόνια, τα οποία βάση της απαγορευτικής αρχής του Pauli και τον κανόνα του Hund, είναι κατανεμημένα σε ατομικά τροχιακά όπως φαίνεται στο πιο κάτω σχήμα.



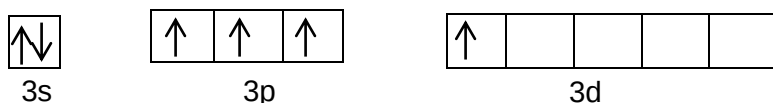
Σχ. 6: Κατανομή των ηλεκτρονίων της εξωτερικής στιβάδας στο άτομο του θείου σε ατομικά τροχιακά, στην θεμελιώδη κατάσταση.

Με τα δυο μονήρη ηλεκτρόνια το άτομο του θείου μπορεί να σχηματίσει δυο ομοιοπολικούς δεσμούς π.χ στο 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 τροχιακά της υποστιβάδας 3d. Αποτέλεσμα της διέγερσης του ατόμου είναι η δημιουργία 4 μονήρων ηλεκτρονίων. Έτσι το άτομο του θείου μπορεί να δημιουργήσει 4 ομοιοπολικούς δεσμούς, π.χ. στο SO_2 .

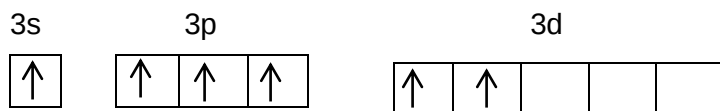
Η ενέργεια που καταναλώνεται για την διέγερση του ατόμου υπεραντισταθμίζεται κατά τον σχηματισμό χημικών δεσμών.



Σχ. 7: 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 στο τροχιακό 3d με αποτέλεσμα το άτομο του θείου να αποκτά 6 μονήρη ηλεκτρόνια στην εξωτερική του στιβάδα και να μπορεί έτσι να σχηματίσει 6 ομοιοπολικούς δεσμούς π.χ. στο SO_3 και στο H_2SO_4 .



Σχ. 8: Κατανομή των ηλεκτρονίων της εξωτερικής στιβάδας στο άτομο του θείου σε ατομικά τροχιακά, κατά την δεύτερη διέγερση.

Μετά την διέγερση τα τροχιακά 3s, 3p και 3d αναμιγνύονται και αποκτούν την ίδια ενέργεια και σχήμα. Το φαινόμενο του υβριδισμού θα μελετηθεί στην οργανική χημεία.

Ασκήσεις:

1. Να συμπληρώσετε τα κενά των πιο κάτω προτάσεων:

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

Στην κβαντομηχανική δε μιλάμε για τη θέση ενός ηλεκτρονίου, αλλά για την να βρίσκεται σε μια ορισμένη θέση ένα ηλεκτρόνιο.

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

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

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 γραφούν τα τροχιακά για τη M στιβάδα.

3. Να βρείτε 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. Αν ο κύριος κβαντικός αριθμός ενός ατομικού τροχιακού είναι 3, ποιες είναι οι επιτρεπτές τιμές του l ; Αν ο αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός είναι 2, ποιές είναι οι επιτρεπτές τιμές του m_l ;

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

α) $n=4$, $l=2$

β) $n=2$, $l=1$

γ) $n=2$, $l=2$

δ) $n=4$, $l=0$

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

α) $n=0, \ell=0, m_\ell=0, m_s=+\frac{1}{2}$

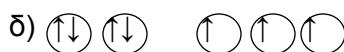
β) $n=1, \ell=1, m_\ell=0, m_s=+\frac{1}{2}$

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 δώσετε σύντομη εξήγηση.



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

α) φωσφόρου

β) καλίου

γ) χλωρίου

δ) ιόν ασβεστίου

ε) ιόν καλίου

στ) ιόν χλωρίου

ΔΔΕ 30: Να εξηγούν ότι ο αριθμός και η διεύθυνση των δεσμικών και μη δεσμικών ζευγών ηλεκτρονίων καθορίζουν την μοριακή γεωμετρία.

Εξήγηση του μοντέλου VSEPR (Άπωσης των ηλεκτρονικών ζευγών της στιβάδας σθένους).

Το μοντέλο της Άπωσης Ζευγών Ηλεκτρονίων της Στιβάδας Σθένους, είναι εργαλείο πρόβλεψης της γεωμετρίας των μορίων μελετώντας τη δομή Lewis του κεντρικού ατόμου (Κεντρικό άτομο είναι αυτό που έχει δείκτη 1 στο μοριακό τύπο της χημικής ένωσης. Εάν υπάρχουν δυο άτομα με δείκτη 1 επιλέγουμε το λιγότερο ηλεκτραρνητικό άτομο. Ως κεντρικό άτομο αποκλείεται το υδρογόνο). Ο αριθμός των δεσμικών και μη δεσμικών ζευγών ηλεκτρονίων του κεντρικού ατόμου σε συνδυασμό με τις απώσεις μεταξύ των ζευγών (δεσμικών ή/και μη δεσμικών), καθορίζουν την διεύθυνση των περιφερειακών ατόμων στο χώρο έτσι ώστε οι απώσεις να ελαχιστοποιούνται και να δημιουργείται σταθερότερη διάταξη. Κατά την πρόβλεψη της γεωμετρίας των μορίων, λαμβάνεται επίσης υπόψη και η σχετική ισχύς των απώσεων μεταξύ των ηλεκτρονιακών ζευγών, η οποία ακολουθεί τη σειρά:

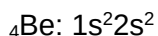
$$\Delta.Z. - \Delta.Z. < M.\Delta.Z. - \Delta.Z. < M.\Delta.Z. - M.\Delta.Z.$$

όπου $\Delta.Z.$: Δεσμικό Ζεύγος, $M.\Delta.Z.$: Μη Δεσμικό Ζεύγος

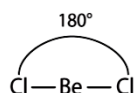
Ηλεκτρονικά Ζεύγη			
Συνολικά	Δεσμικά	Μη Δεσμικά	Μοριακή Γεωμετρία
2	2	0	Γραμμική AX_2
3	3	0	Επίπεδη τριγωνική AX_3
	2	1	κεκαμμένη, AX_2
4	4	0	Τετραεδρική, AX_4
	3	1	Τριγωνική πυραμιδική, AX_3
	2	2	κεκαμμένη, AX_2

Παράδειγμα 1:

Να βρεθεί το σχήμα του μορίου $BeCl_2$ και να δικαιολογήσετε την απάντησή σας.



Το κεντρικό άτομο Be έχει δύο $\Delta.Z.$ και καθόλου $M.\Delta.Z.$ άρα θα έχει γραμμική γεωμετρία δηλαδή

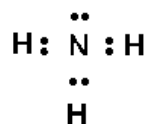


Παράδειγμα 2:

Να προβλεφθεί το σχήμα του μορίου NH_3 .

Το άτομο του ${}^7\text{N}$ έχει ηλεκτρονική δομή $1s^2 2s^2 p^3$. Έχει συνολικά 5 e σθένους από τα οποία χρησιμοποιεί 3 μονήρη για σχηματισμό 3 ομοιοπολικών δεσμών με 3 άτομα H.

Δομή Lewis του μορίου:



Το κεντρικό άτομο N έχει τρία Δ.Ζ. και ένα Μ.Δ.Ζ. Λόγω των απώσεων μεταξύ των δεσμικών και του μη δεσμικού ζεύγους η διάταξη σταθεροποιείται ως τριγωνική πυραμίδα.

Παράδειγμα 3:

Να προβλεφθεί το σχήμα του μορίου SO_2

Στο SO_2 η διευθέτηση των δεσμικών ζευγών και του μη δεσμικού ζεύγους είναι επίπεδη τριγωνική. Οι απωστικές δυνάμεις μεταξύ τους καθορίζουν τις γωνίες μεταξύ των δεσμών.

Έτσι, η μοριακή γεωμετρία του μορίου είναι κεκαμμένη (γωνιακή).

ΔΕΕ 31: Να προβλέπουν και να δικαιολογούν το γεωμετρικό σχήμα των μορίων με βάση τον αριθμό των δεσμικών και μη δεσμικών ζευγών ηλεκτρονίων της στιβάδας σθένους (για τι ενώσεις των πρώτων 20 στοιχείων).

Κάθε πολλαπλός δεσμός μετρά όπως ένας απλός δεσμός

Παράδειγμα:

CO_2 ως να έχει δυο δεσμικά ζεύγη