

# ΦΥΣΙΚΗ

## ΔΙΑΛΕΞΗ 3: ΑΤΟΜΙΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

Διδάσκων  
Ευθύμιος Τάγαρης  
Φυσικός, Δρ Περιβαλλοντικών Επιστημών

Ατομικό τροχιακό: η κυματοσυνάρτηση  $\psi$  που προέρχεται από την επίλυση της εξίσωσης Shrodinger περιγράφει την κατάσταση του ηλεκτρονίου με ορισμένη ενέργεια

Το τετράγωνο του ατομικού τροχιακού δίνει την πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους στα διάφορα σημεία του χώρου

# Για τον καθορισμό του Ατομικού τροχιακού Κβαντικοί αριθμοί

Κύριος κβαντικός αριθμός ( $n$ )

Δευτερεύον (αζιμουθιακός) κβαντικός αριθμός ( $l$ )

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός ( $m_l$ )

# Κύριος Κβαντικός Αριθμός (n)

Καθορίζει το μέγεθος του τροχιακού

$n=1,2,3,\dots$

Τροχιακά με ίδιο n .....Στοιβάδα

$n=1 \dots\dots K$

$n=2 \dots\dots L$

$n=3 \dots\dots M$

$n=4 \dots\dots N$

# ΔΕΥΤΕΡΕΥΟΝ ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ (l)

Καθορίζει το σχήμα του τροχιακού

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

Τροχιακά με ίδιο  $n$  και  $l$ .....υποστιβάδα

$$l=0 \dots \dots \dots s$$

$$l=1 \dots \dots \dots p$$

$$l=2 \dots \dots \dots d$$

$$l=3 \dots \dots \dots f$$

# ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΣ ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ ( $m_l$ )

Καθορίζει τον προσανατολισμό του  
ηλεκτρονιακού νέφους

$$m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$$

# ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ ΤΟΥ SPIN ( $m_s$ )

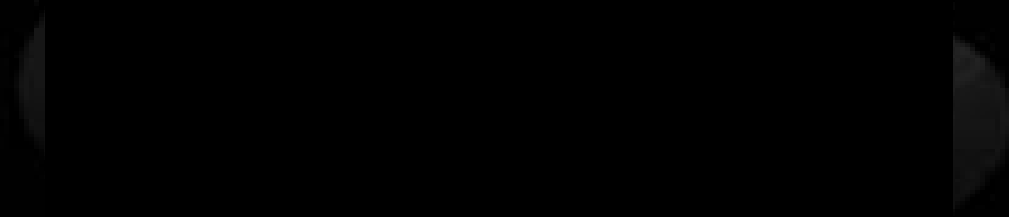
Δεν συμμετέχει στον καθορισμό του ατομικού τροχιακού

Καθορίζει την ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου

$$m_s = \pm 1/2$$

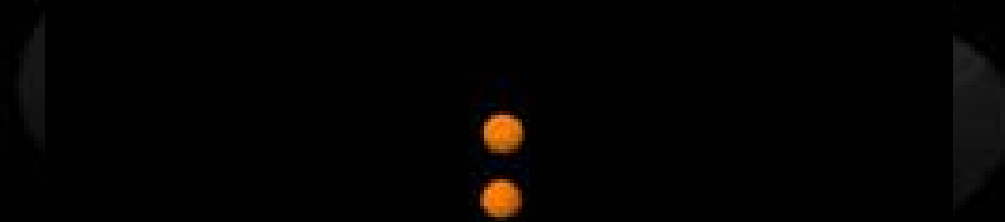
(+1/2 παράλληλο spin  
-1/2 αντιπαράλληλο spin)

# ΓΡΑΦΙΚΗ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗ ΑΤΟΜΙΚΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ

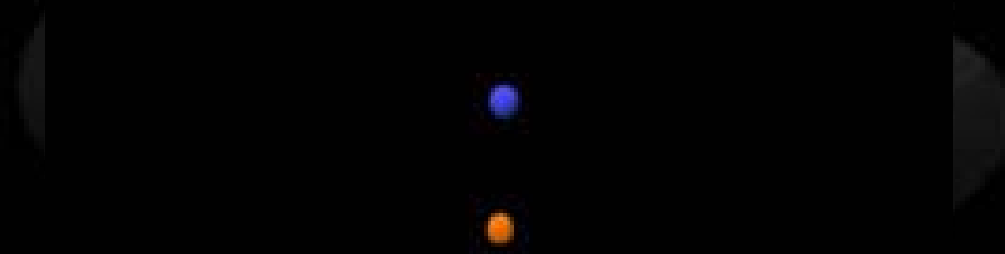




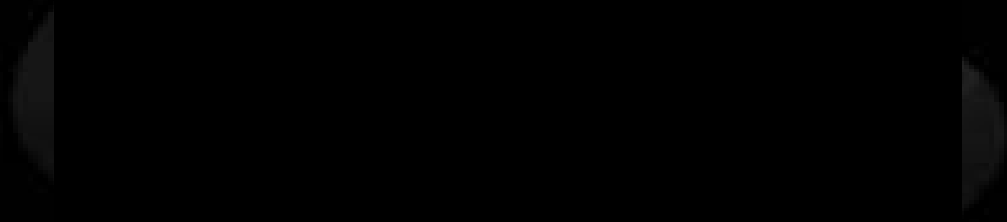
# ΓΡΑΦΙΚΗ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗ ΑΤΟΜΙΚΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ



# ΓΡΑΦΙΚΗ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗ ΑΤΟΜΙΚΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ



# ΓΡΑΦΙΚΗ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗ ΑΤΟΜΙΚΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ



# ΑΡΧΕΣ ΔΟΜΗΣΗΣ ΠΟΛΥΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΩΝ ΑΤΟΜΩΝ

## 1. ΑΠΑΓΟΡΕΥΤΙΚΗ ΑΡΧΗ ΤΟΥ PAULI

Το τροχιακό δεν μπορεί να χωρέσει πάνω από δύο ηλεκτρόνια

Ή

Είναι αδύνατο να υπάρξουν στο ίδιο άτομο δύο ηλεκτρόνια με την ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών ( $n, l, m_l, m_s$ )

(Υπενθύμιση:  $m_s = \pm 1/2$ , αντιπαράλληλα spin)

n	l	$m_l$	$m_s$	Τροχιακό
1	0	0	+1/2	(1,0,0,+1/2)
			-1/2	(1,0,0,-1/2)
2	0	0	+1/2	(2,0,0,+1/2)
			-1/2	(2,0,0,-1/2)
	1	-1	+1/2	(2,1,-1,+1/2)
			-1/2	(2,1,-1,-1/2)
	0	0	+1/2	(2,1,0,+1/2)
			-1/2	(2,1,0,-1/2)
1	1	+1	(2,1,1,+1/2)	
		-1	(2,1,1,-1/2)	

Στο  $n=1$  αντιστοιχούν 2 ηλεκτρόνια

Στο  $n=2$  αντιστοιχούν 8 ηλεκτρόνια

Γενικά: αριθμός  
ηλεκτρονίων..... $2n^2$

## 2. ΑΡΧΗ ΕΛΑΧΙΣΤΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ

Κατά την ηλεκτρονιακή δόμηση ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου, τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τροχιακά με τη μικρότερη ενέργεια, ώστε να γίνουν πιο σταθερά

Μικρότερο άθροισμα  $n+l$

Αν  $n+l$  ίδιο, μικρότερο  $n$

# Πίνακας συμπλήρωσης ατομικών τροχιακών

1s			
2s	2p		
3s	3p	3d	
4s	4p	4d	4f
5s	5p	5d	5f
6s	6p	6d	
7s	7p		

Συμπλήρωση:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} \dots$

Γράφεται:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 \dots$

### 3. ΚΑΝΟΝΑΣ ΤΟΥ HUND

(Κατανομή ηλεκτρονίων στο ίδιο τροχιακό)

Ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας υποστιβάδας έχουν κατά προτίμηση παράλληλα spin ώστε τα ηλεκτρόνια να αποκτήσουν μέγιστο άθροισμα κβαντικών αριθμών

	1s	2s	2p <sub>x</sub>	2p <sub>y</sub>	2p <sub>z</sub>
7e	↑ ↓	↑ ↓	↑	↑	↑
8e	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑	↑