

Ηλεκτρονιακή Δόμηση των ατόμων

Αρχή ηλεκτρονιακής Δόμησης (aufbau prinzip)

1. Αναγορευτική αρχή Pauli
2. Αρχή ελάχιστης ενέργειας
3. κανόνας του Hund.

1. Αναγορευτική αρχή Pauli

Είναι αδύνατο, στο ίδιο άτομο, να υπάρχουν 2 e^- με την ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών

Άρα $\underbrace{n, l, m_l}_{\text{τροχιακό}} \begin{cases} \rightarrow m_s = +\frac{1}{2} \\ \rightarrow m_s = -\frac{1}{2} \end{cases} \} \text{ ως } 2e^- \text{ σε κάθε τροχιακό}$

Επομένως : υποσυνάδα $s \rightarrow s^2$ (1 τροχ.)

” $p \rightarrow p^6$ (3 τροχ.)

” $d \rightarrow d^{10}$ (5 τροχ.)

” $f \rightarrow f^{14}$ (7 τροχ.)

2. Αρχή της ελάχιστης ενέργειας

Κατά την ηλεκτρονιακή δόμηση ενός πολυηλεκτρονιακού ατόμου, τα e^- καταλαμβάνουν τροχιακά με την μικρότερη ενέργεια, ώστε να αποκτήσουν τη μέγιστη σταθερότητα στη θεμελιώδη κατάσταση.

Σύγκριση ενεργειών υποσυνβάδων σε πολυηλεκτρονικά άτομα.

Παράγοντες: α) Η ελκυστική δύναμη πυρήνα- e^- .

Όσο μεγαλύτερη είναι η ελκυστική δύναμη πυρήνα- e^- , τόσο πιο μικρή είναι η ενέργειά του. (Για μικρότερο n)

$$n \uparrow \Rightarrow \text{ελκυστική δύναμη} \downarrow \Rightarrow E_e \uparrow$$

β) Οι απωστικές δυνάμεις ανάμεσα στα e^-

$$e \uparrow \Rightarrow \text{αύξηση απωστικών δυνάμεων} \Rightarrow E_e \uparrow$$

Έτσι: Ανάμεσα σε 2 υποσυνβάδες μικρότερη ενέργεια έχει αυτή με το μικρότερο άθροισμα $n+l$.

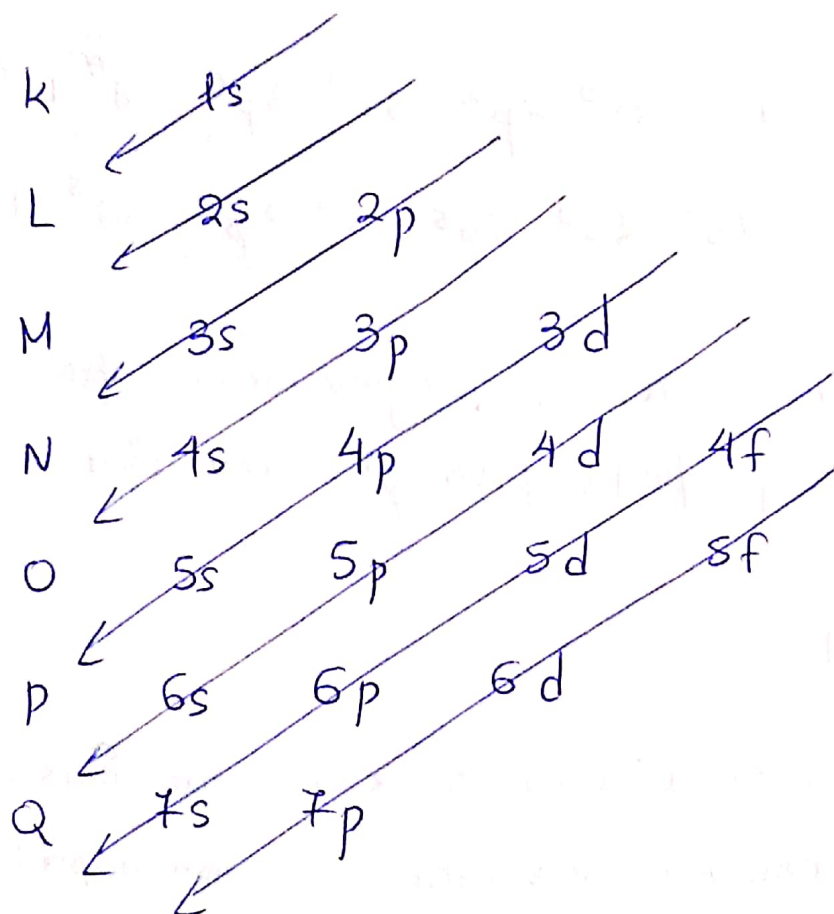
Αν έχουν ίδιο $n+l$, μικρότερη ενέργεια έχει αυτή με το μικρότερο n .

Πραοχή: Στο άτομο του υδρογόνου και τα υδρογονοειδή ιόντα όλες οι υποσυνβάδες (και τα τροχιακά)

μιας υποβάδας έχουν ίδιο n , άρα έχουν ίδια ενέργεια (εκφυλισμένα) αφού δεν υπάρχουν ανώσεις από άλλα e^- .

Η σειρά κατάληψης των υποοβιδων με e^- γίνεται

εύκολα με τον παρακάτω μνημονικό κανόνα.



Αποκρίσεις:

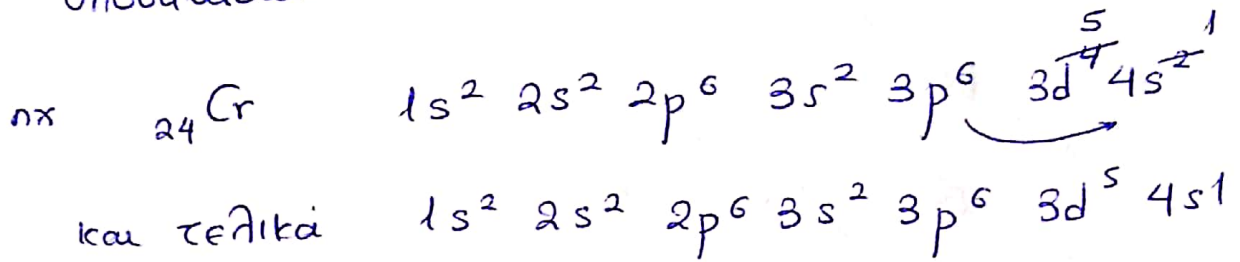
α) $(n-1)d$, ns

Η 4s υποοβίδα ($4+0=4$) έχει μικρότερη ενέργεια από την 3d ($3+2=5$). Έτσι συμπληρώνεται πρώτη.

Όταν όψως μπου e^- στην 4s και αρχίζουν να

μπαίνουν στην 3d τότε τα e^- της 3d έλκονται πιο ισχυρά από τον πυρήνα (αύξηση του πυρηνικού φορτίου) οπότε τα e^- της 3d έχουν πιο μικρή ενέργεια από την 4s, και γράφονται πιο πριν. [το ίδιο στην $(n-2)f$ και $n s$ αλλά δεν κάνει αναφορά το σχολικό].

8) Σταθερότητα συμπληρωμένων d^{10} και ημισυμπληρωμένων d^5 υποσυντάδων.



* Αξημένη σταθερότητα παρουσιάζουν και οι συμπληρωμένες p^6 και οι ημισυμπληρωμένες p^3 υποσυντάδες

3. Κανόνας Hund

Ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας (της ίδιας υποσυντάδας) έχουν κατά προτίμηση παράλληλα spin.

* Όστε να ηρκύνται ο μέγιστος αριθμός μονήρων (αδύφευκτων) e^- .

[** Χαμηλότερη ενέργεια $\Rightarrow$ σταθερότερη κατάσταση. αλλά δεν κάνει αναφορά το σχολικό]

