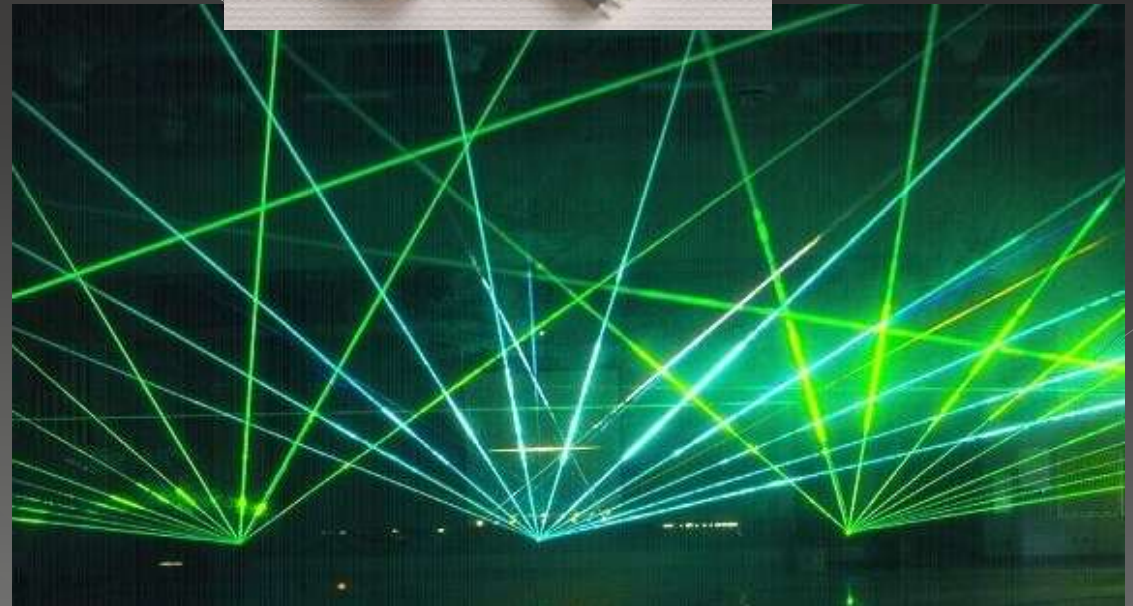
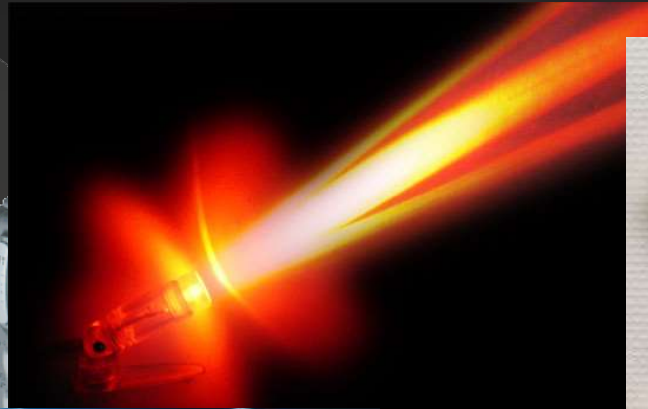
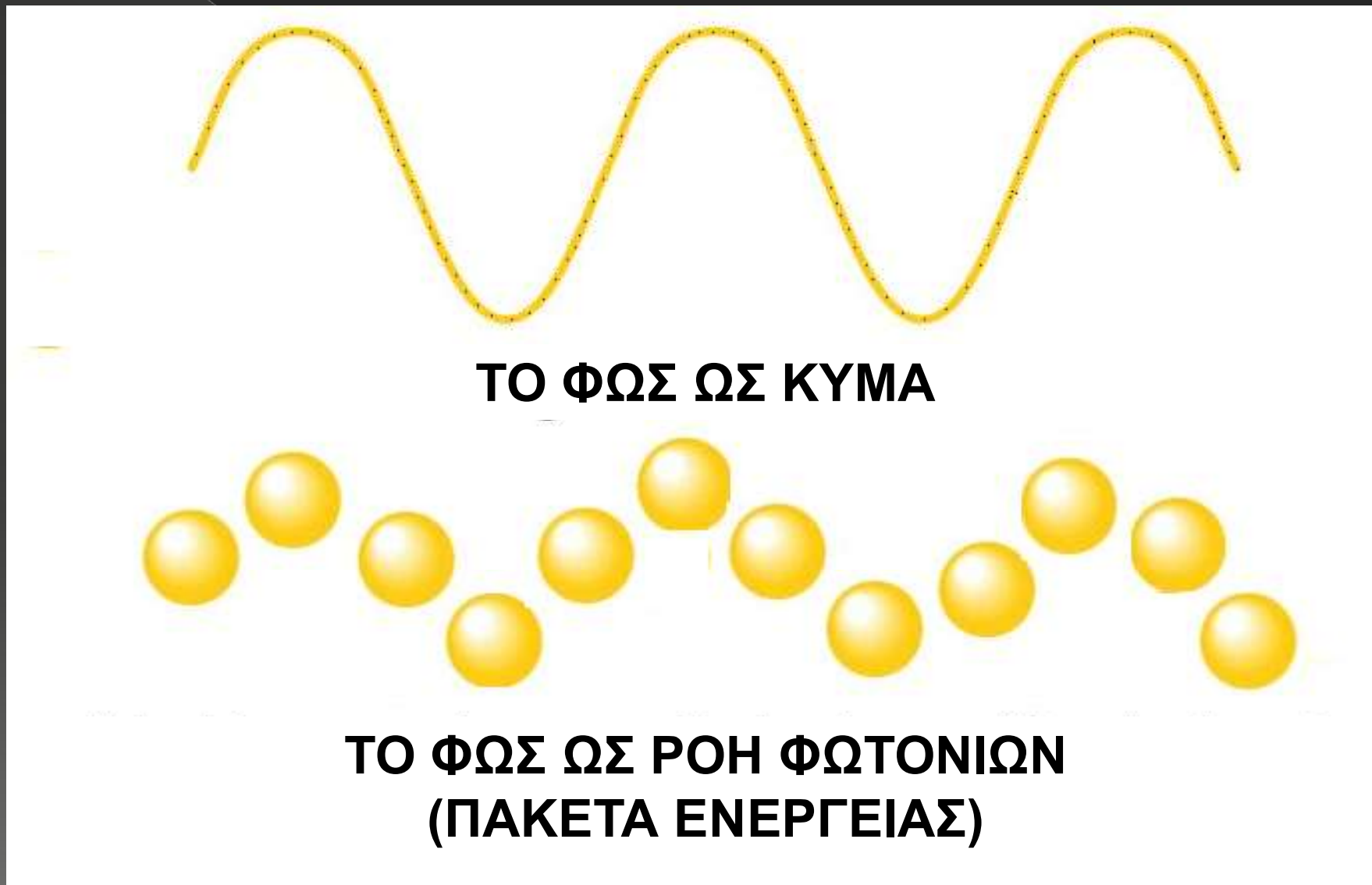


Η Σύγχρονη Ατομική Θεωρία

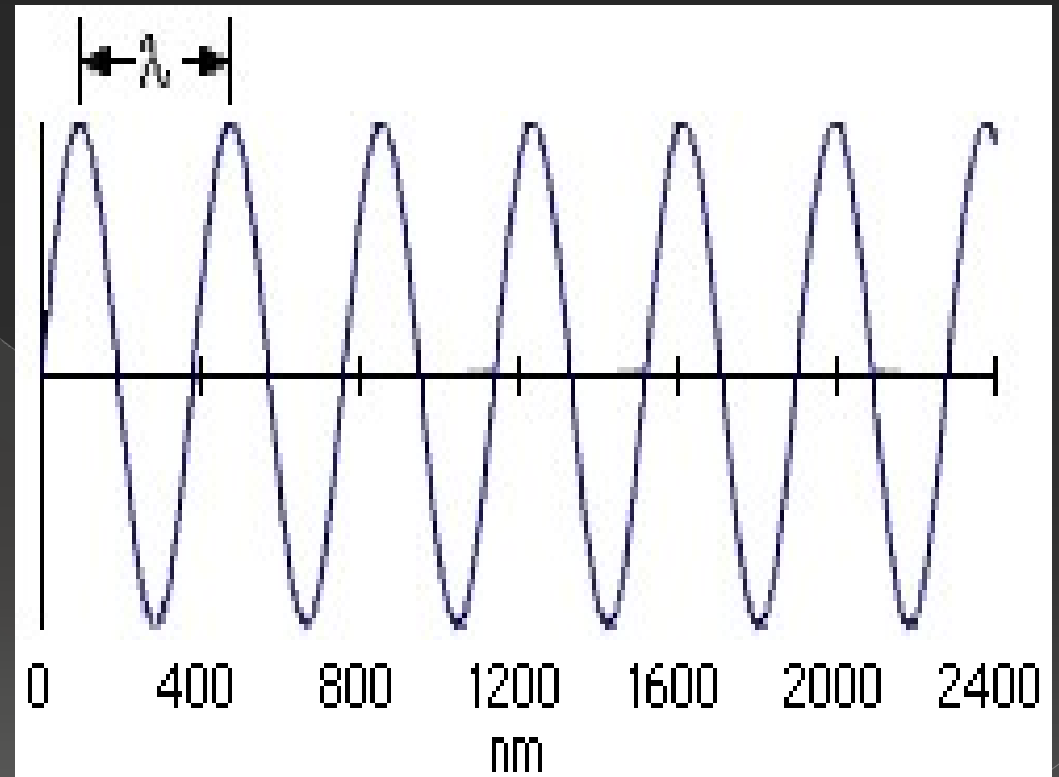


Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία

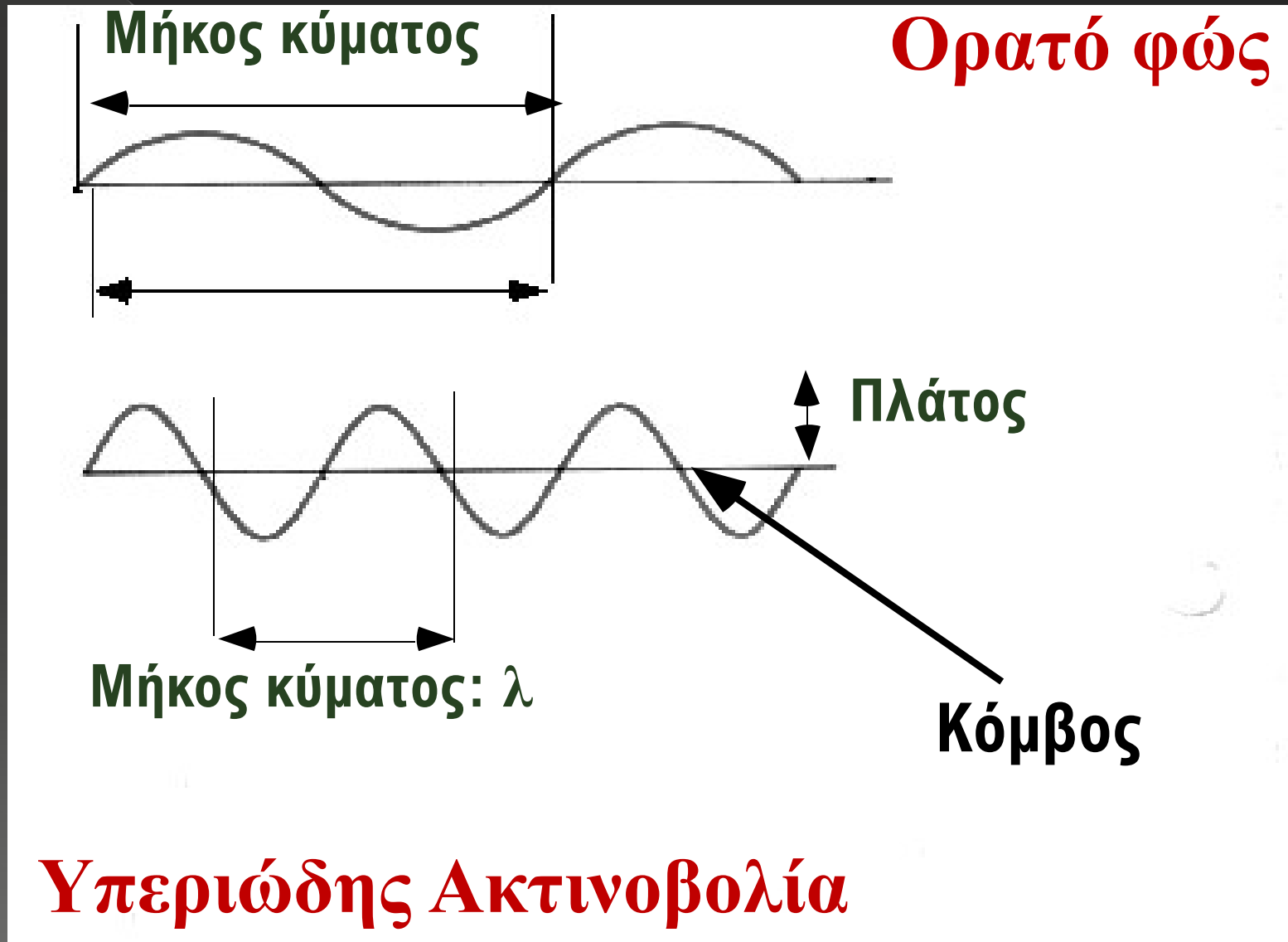


Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία

- Τα περισσότερα υποατομικά σωματίδια συμπεριφέρονται ως **ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ** και υπακούουν στους νόμους της κυματικής φυσικής.



Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία



Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία

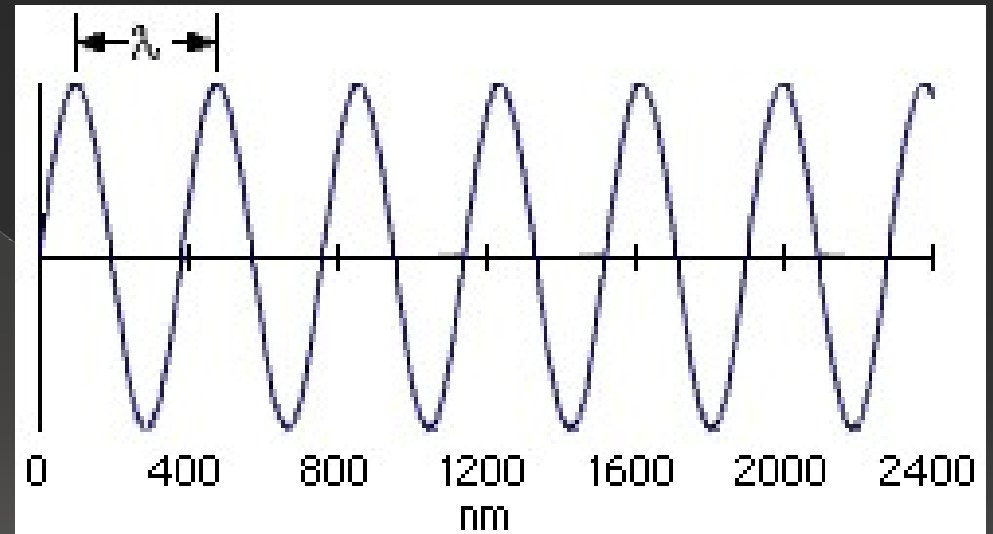
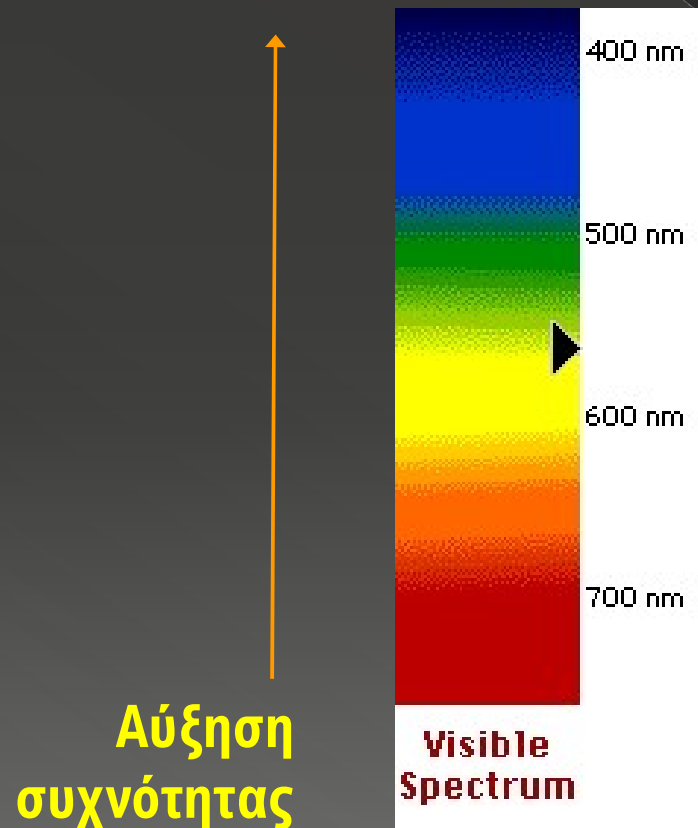
- Τα κύματα έχουν “συχνότητα” μετάδοσης
- Η συχνότητα συμβολίζεται από το ελληνικό γράμμα ν , και έχει μονάδα μέτρησης “κύκλοι ανά δευτερόλεπτο”
- Για όλες τις ακτινοβολίες ισχύει: $\lambda \cdot \nu = c$

όπου c είναι η ταχύτητα του φωτός $= 3,00 \times 10^8 \text{ m/sec}$

Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία

Μεγάλο μήκος κύματος $\rightarrow$ μικρή συχνότητα

Μικρό μήκος κύματος $\rightarrow$ μεγάλη συχνότητα



Αύξηση
μήκους κύματος

Ηλεκτρομαγνητικό Φάσμα

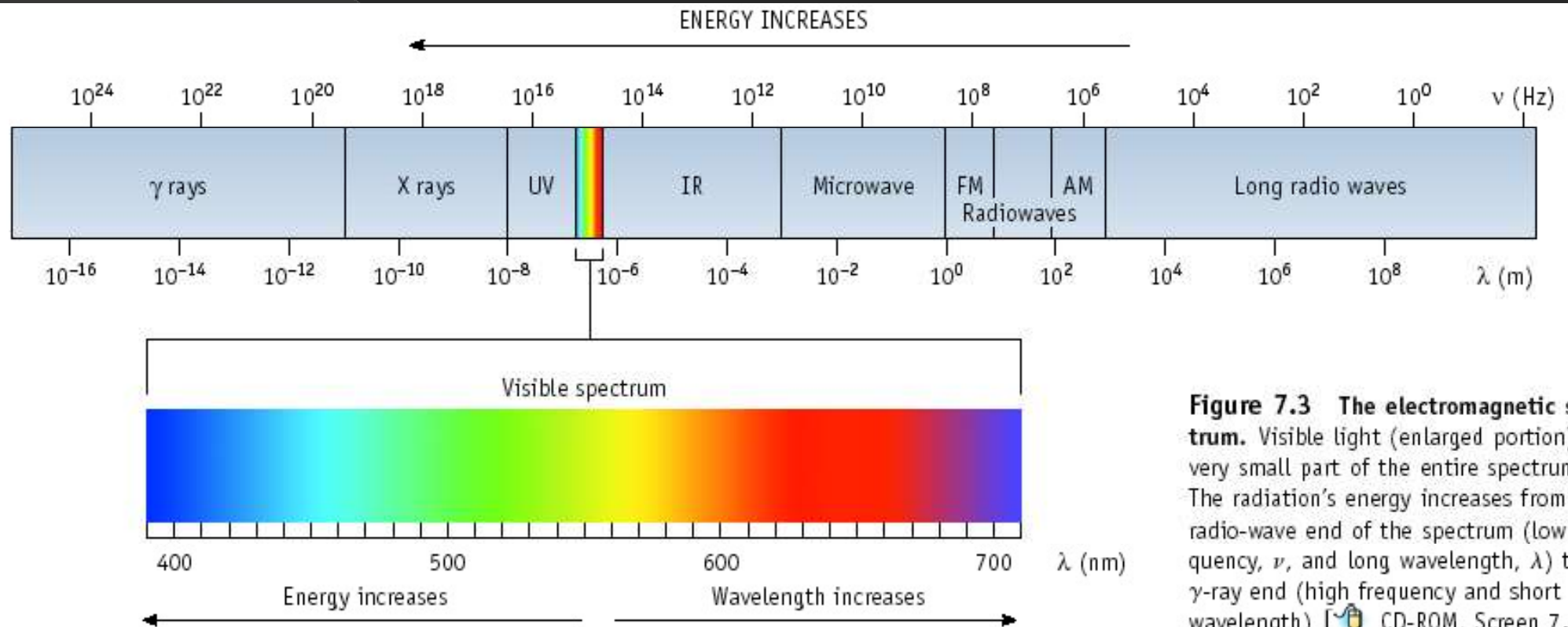


Figure 7.3 The electromagnetic spectrum. Visible light (enlarged portion) is a very small part of the entire spectrum. The radiation's energy increases from the radio-wave end of the spectrum (low frequency, ν , and long wavelength, λ) to the γ -ray end (high frequency and short wavelength) [CD-ROM, Screen 7.4].

Κατά αυξανόμενη ενέργεια

ROY G BIV



Electricity off.
Colorless gases.



Electricity on.
Excited electrons.

Gases such as neon are colorless. However, if electricity is passed through the gas, the atoms are excited, and the gas glows.

Διεγερμένα Αέρια & ηλεκτρονική δομή



Γραμμικό Ατομικό Φάσμα εκπομπής και ο Niels Bohr



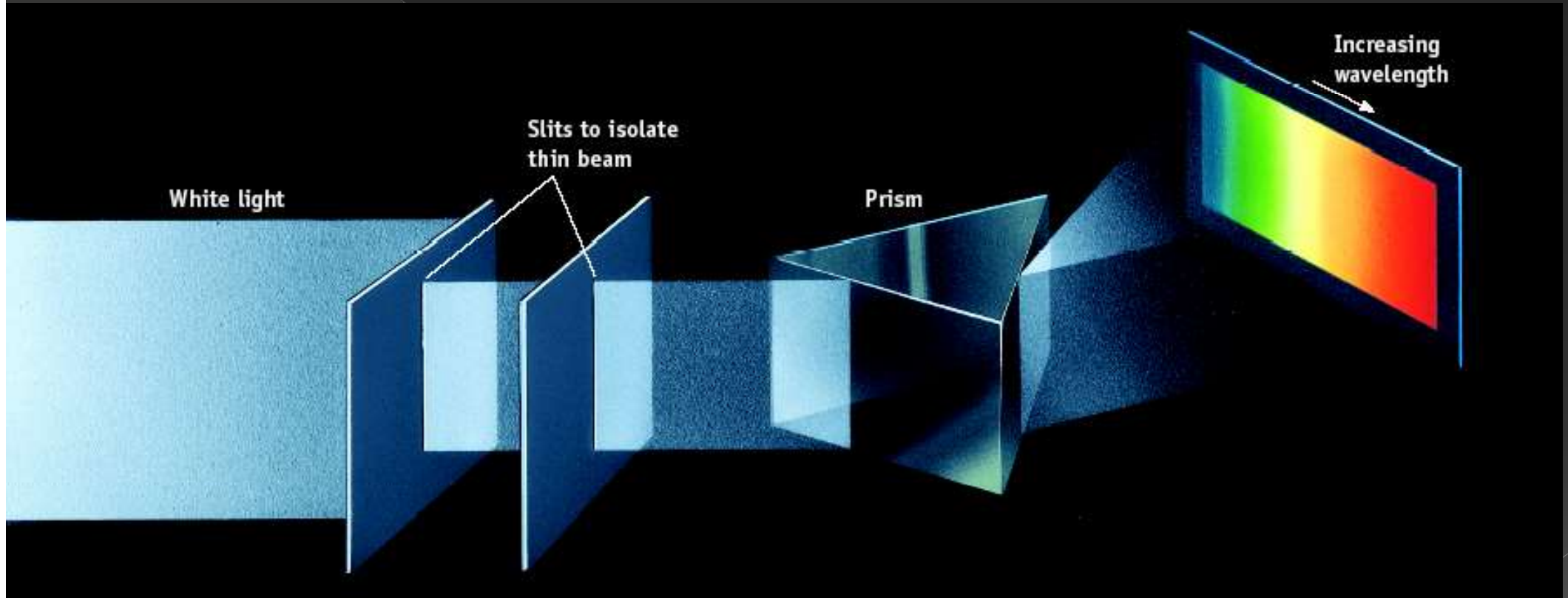
Niels Bohr
(1885-1962)

Η μεγαλύτερη συνεισφορά του Bohr στην επιστήμη υπήρξε η περιγραφή του ατόμου του Υδρογόνου.

Βασισμένη στην κατανόηση του
**ΓΡΑΜΜΙΚΟΥ ΑΤΟΜΙΚΟΥ ΦΑΣΜΑΤΟΣ
ΕΚΠΟΜΠΗΣ** διεγερμένων ατόμων

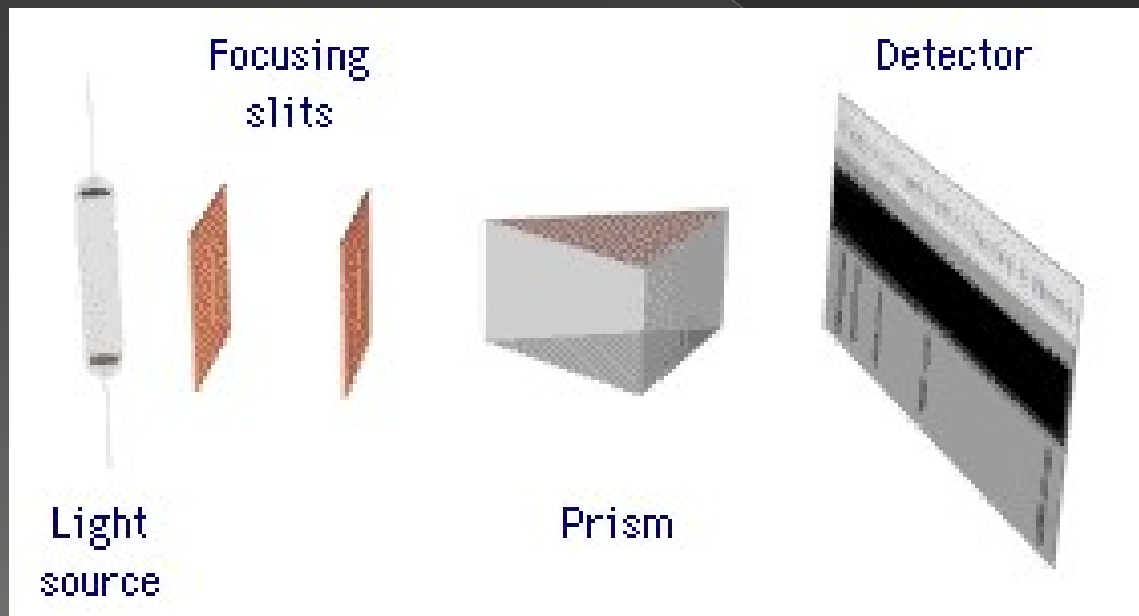
Το πρόβλημα ήταν ότι το μοντέλο είχε εφαρμογή μόνον στο άτομο του Υδρογόνου (H)

Το Φάσμα του Λευκού Φωτός

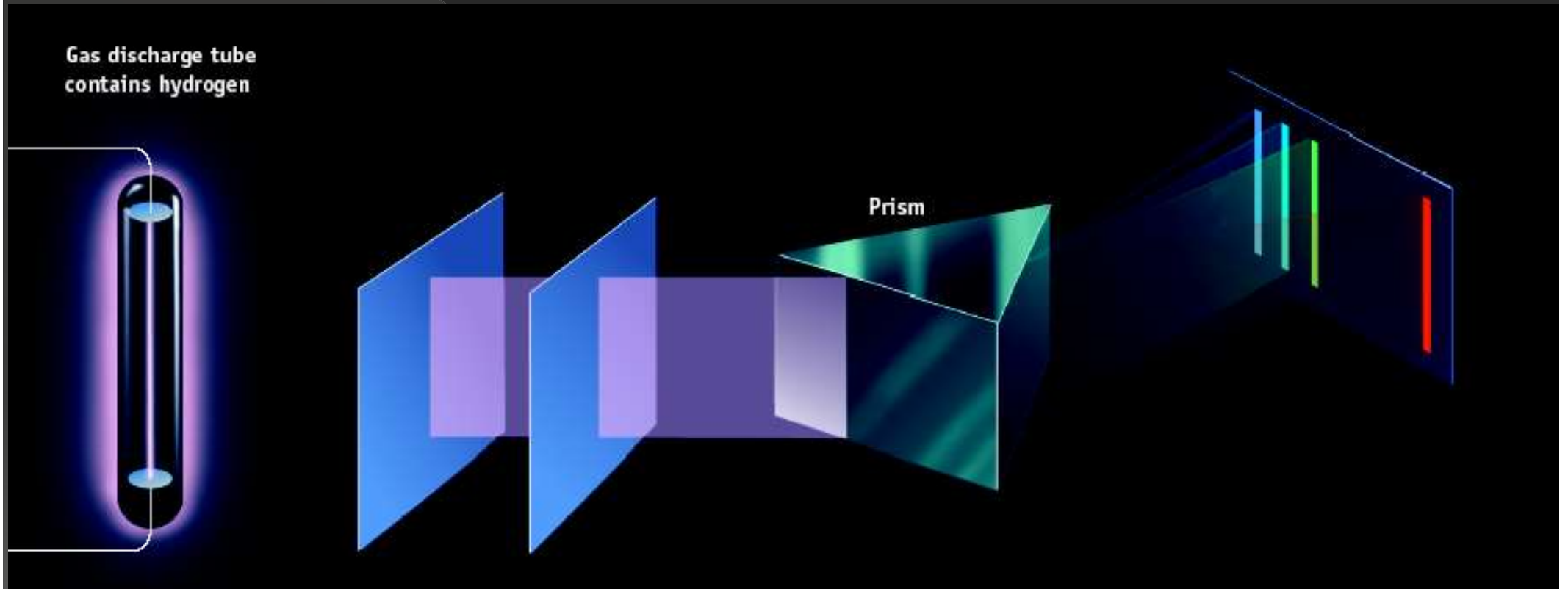


Γραμμικό Ατομικό Φάσμα εκπομπής διεγερμένων ατόμων

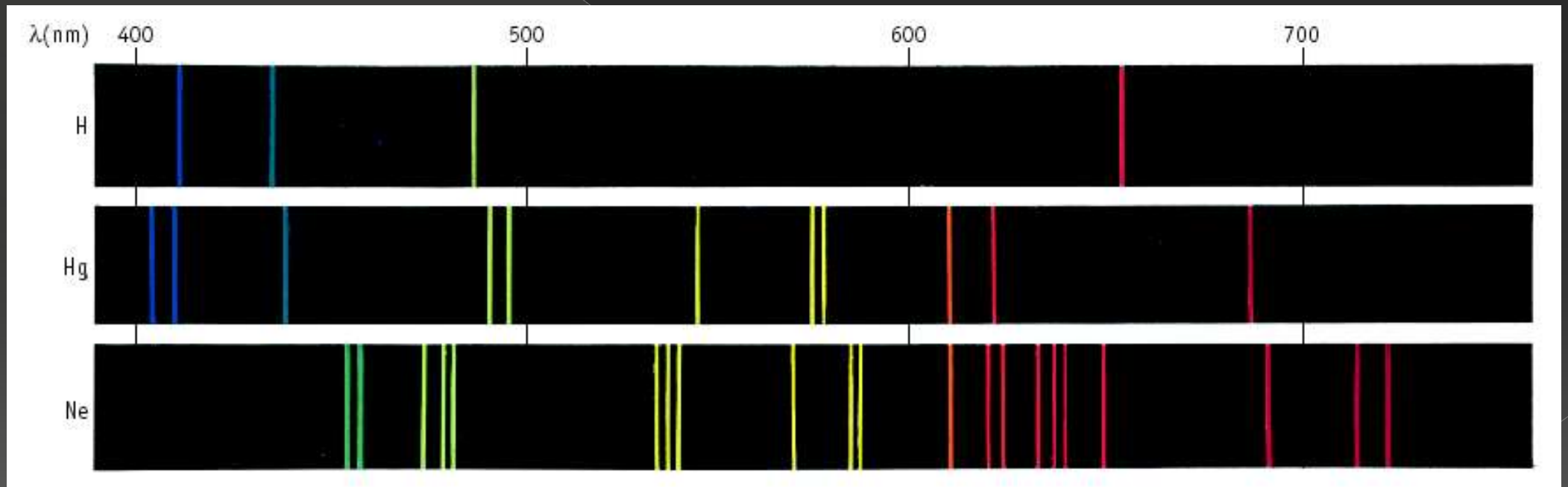
- Διεγερμένα άτομα εκπέμπουν φώς συγκεκριμένου μήκους κύματος
- Το μήκος κύματος του εκπεμπόμενου φωτός εξαρτάται από το χημικό στοιχείο.



Φάσμα εκπομπής διεγερμένου ατόμου αερίου Υδρογόνου

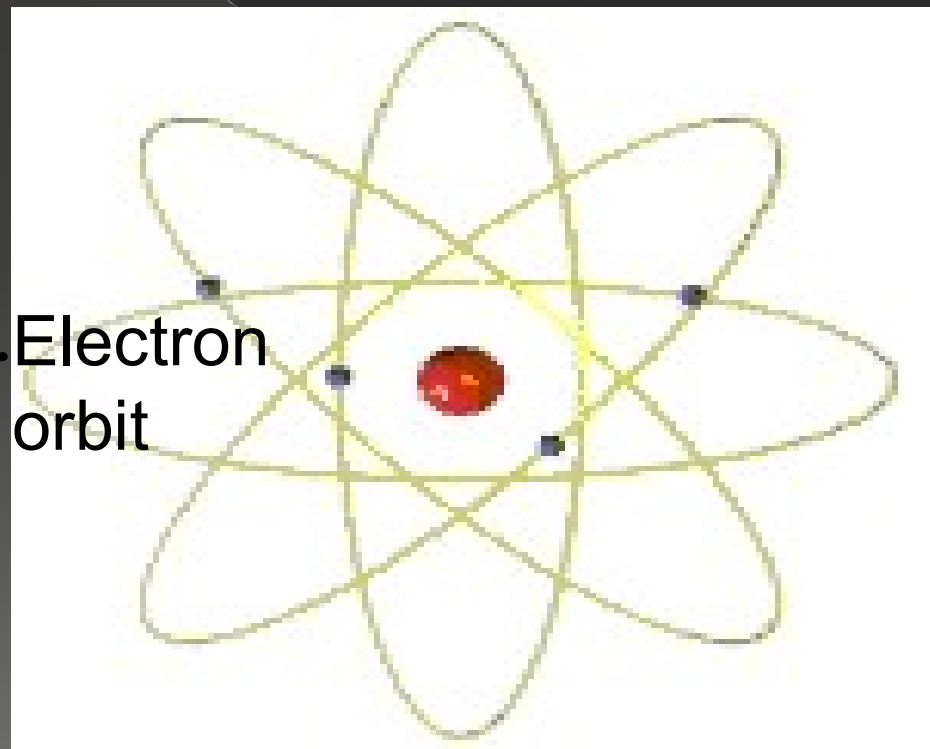
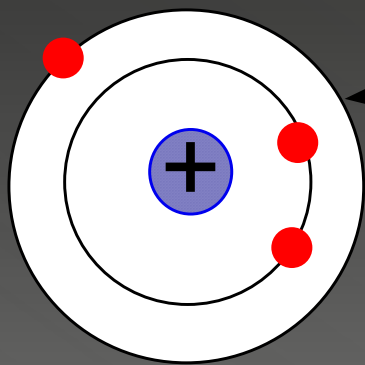


Γραμμικό Φάσμα εκπομπής ατόμων των Χημικών Στοιχείων: H, Hg, Ne



Ατομικά Φάσματα

Στις αρχές του 20^{ου} αιώνα η επικρατούσα άποψη για την περιγραφή του ατόμου ήταν ότι τα ηλεκτρόνια (e^-) κινούνται σε καθορισμένη τροχιά γύρω από τον πυρήνα.



Ατομικά Φάσματα και ο Bohr

Ο Bohr εκτιμά ότι η θεωρία για το άτομο είναι λάθος.

Ανάγκη για μια νέα θεωρία ονομαζόμενη

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ή ΚΥΜΑΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ.

Το e^- μπορεί να υπάρξει μόνον σε συγκεκριμένες διακριτές τροχιές

Το e^- περιορίζεται σε **ΚΒΑΝΤΙΣΜΕΝΗ** ενεργειακή κατάσταση
(κβάντο = πακέτο ενέργειας)

Quantum Mechanics ή Κυματομηχανική



E. Schrodinger
1887-1961

Ο Schrodinger εφάρμοσε μια νέα ιδέα σε ότι αφορά την συμπεριφορά των ηλεκτρονίων στο άτομο. Ανάπτυξε τις **ΚΥΜΑΤΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ**

η επίλυση των οποίων οδηγεί στις **ΚΥΜΑΤΟΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ, Ψ** που περιγράφουν ένα επιτρεπόμενο επίπεδο ενέργειας κάποιου συγκεκριμένου ηλεκτρονίου (e^-).

Ο Heisenberg και η «αβεβαιότητα»



W. Heisenberg
1901-1976

- Πρώτος περιγράφει την φύση των ηλεκτρονίων στο άτομο.
- Ισχυρίζεται ότι δεν είναι δυνατόν να οριστεί η ακριβής θέση και ταυτόχρονα η ορμή ($m \cdot v$) οποιουδήποτε ηλεκτρονίου σε ένα άτομο.
- Αν μπορεί να περιγραφεί η ακριβής ενέργεια ενός ηλεκτρονίου σε ένα άτομο, δεν μπορεί να οριστεί και η ακριβής θέση του.

Κατανομή των ηλεκτρονίων στα άτομα

Τα ηλεκτρόνια κατανέμονται σε ένα άτομο ως εξής:

ΣΤΙΒΑΔΑ (n)



ΥΠΟΣΤΙΒΑΔΑ (ℓ)



ΤΡΟΧΙΑΚΟ (m_ℓ)



Κβαντικοί Αριθμοί

Το ΣΧΗΜΑ, το ΜΕΓΕΘΟΣ, και η ΕΝΕΡΓΕΙΑ κάθε τροχιακού είναι συνάρτηση των 3 κβαντικών αριθμών οι οποίοι περιγράφουν την θέση ενός ηλεκτρονίου σε ένα άτομο ή σε ένα ιόν.

n (κύριος) --> ενεργειακό επίπεδο

ℓ (δευτερεύων) --> σχήμα τροχιακού (ή αζιμουθιακός).

m_ℓ (μαγνητικός) --> προσανατολισμός

Ο τέταρτος κβαντικός αριθμός – *ο οποίος δεν προκύπτει από τις κυματοσυναρτήσεις* – είναι ο s (*spin*) --->

ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου (δεξιόστροφα ή αριστερόστροφα: $\frac{1}{2}$ or $-\frac{1}{2}$)

Κβαντικοί Αριθμοί

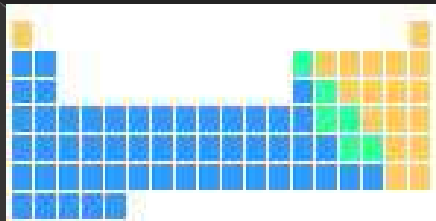
Επομένως, εάν δύο ηλεκτρόνια βρίσκονται στον ίδιο χώρο κατά την ίδια χρονική στιγμή, πρέπει να απωθούνται και επομένως ο κβαντικός αριθμός spin είναι οπωσδήποτε διαφορετικός!

Η απαγορευτική αρχή του Pauli εκφράζει ακριβώς αυτό.

Στο ίδιο άτομο ή ιόν, δύο ηλεκτρόνια δεν μπορεί να έχουν την ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών.

Αν δύο ηλεκτρόνια ίδιας ενεργειακής στάθμης, στην ίδια υποστιβάδα βρίσκονται στο ίδιο τροχιακό, τότε απωθούνται! Ας θυμόμαστε τους 4 κβαντικούς αριθμούς κάποιου ηλεκτρονίου ως την διεύθυνση του:

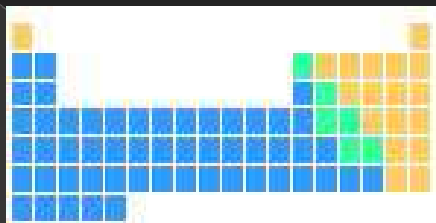
Ηλεκτρόνιο ... Χώρα > Νομός > Πόλη > Οδός



Ενεργειακά επίπεδα

Κάθε ενεργειακό επίπεδο περιγράφεται
από τον **ΚΥΡΙΟ ΚΒΑΝΤΙΚΟ ΑΡΙΘΜΟ, « n »**

Παίρνει τιμές από 1 έως 7, αφού υπάρχουν
7 Περίοδοι στον Περιοδικό Πίνακα.



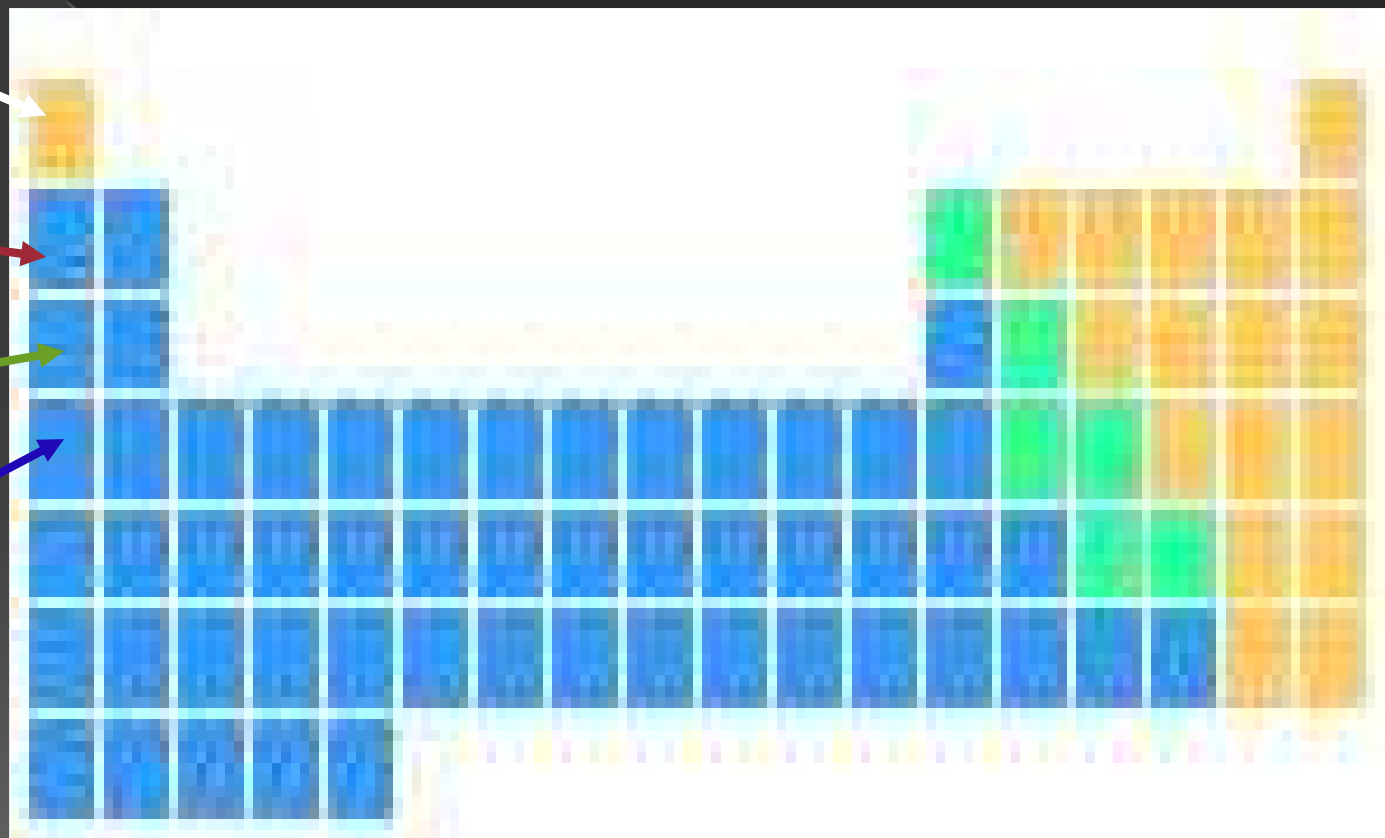
Ενεργειακά επίπεδα

$n = 1$

$n = 2$

$n = 3$

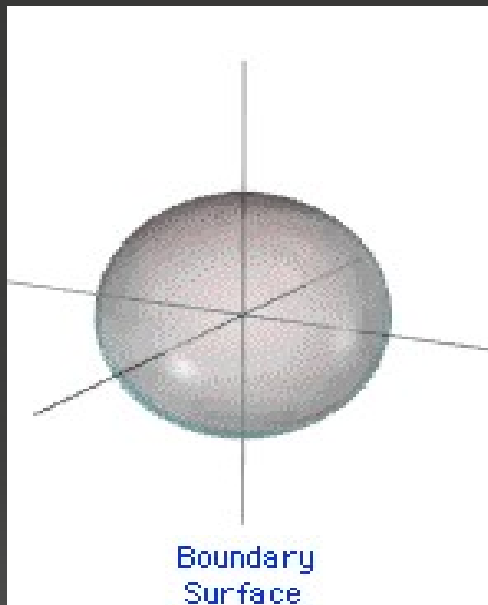
$n = 4$



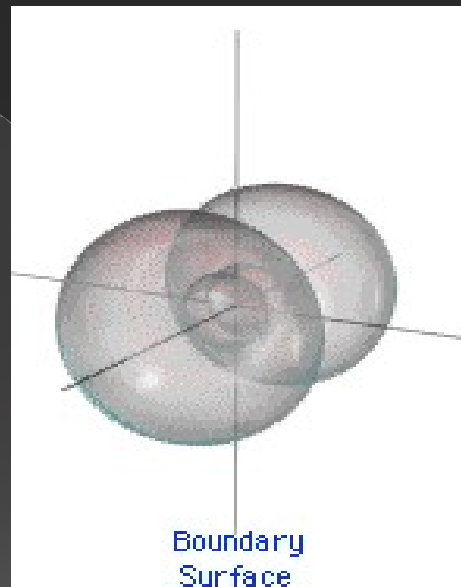
Τύποι Τροχιακών - s, p, d, f

- Ο πιθανός χώρος όπου μπορεί να βρεθούν ηλεκτρόνια έχει διάφορα σχήματα ανάλογα το τροχιακό
- Μέχρι τώρα, γνωρίζουμε 4 σχήματα. Ονομάζονται **s, p, d & f**.
- Το πολύ μέχρι 2 e^- μπορεί να καταλαμβάνουν ένα ατομικό τροχιακό – το ένα με δεξιόστροφο spin, το άλλο με αριστερόστροφο spin

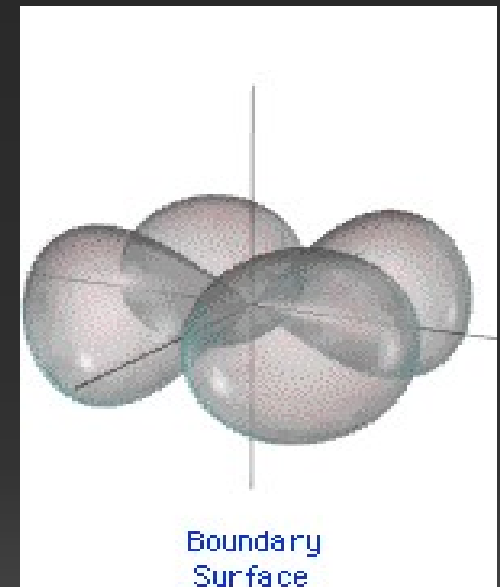
Τύποι Τροχιακών (κβαντικός αρ. ℓ)



s τροχιακό

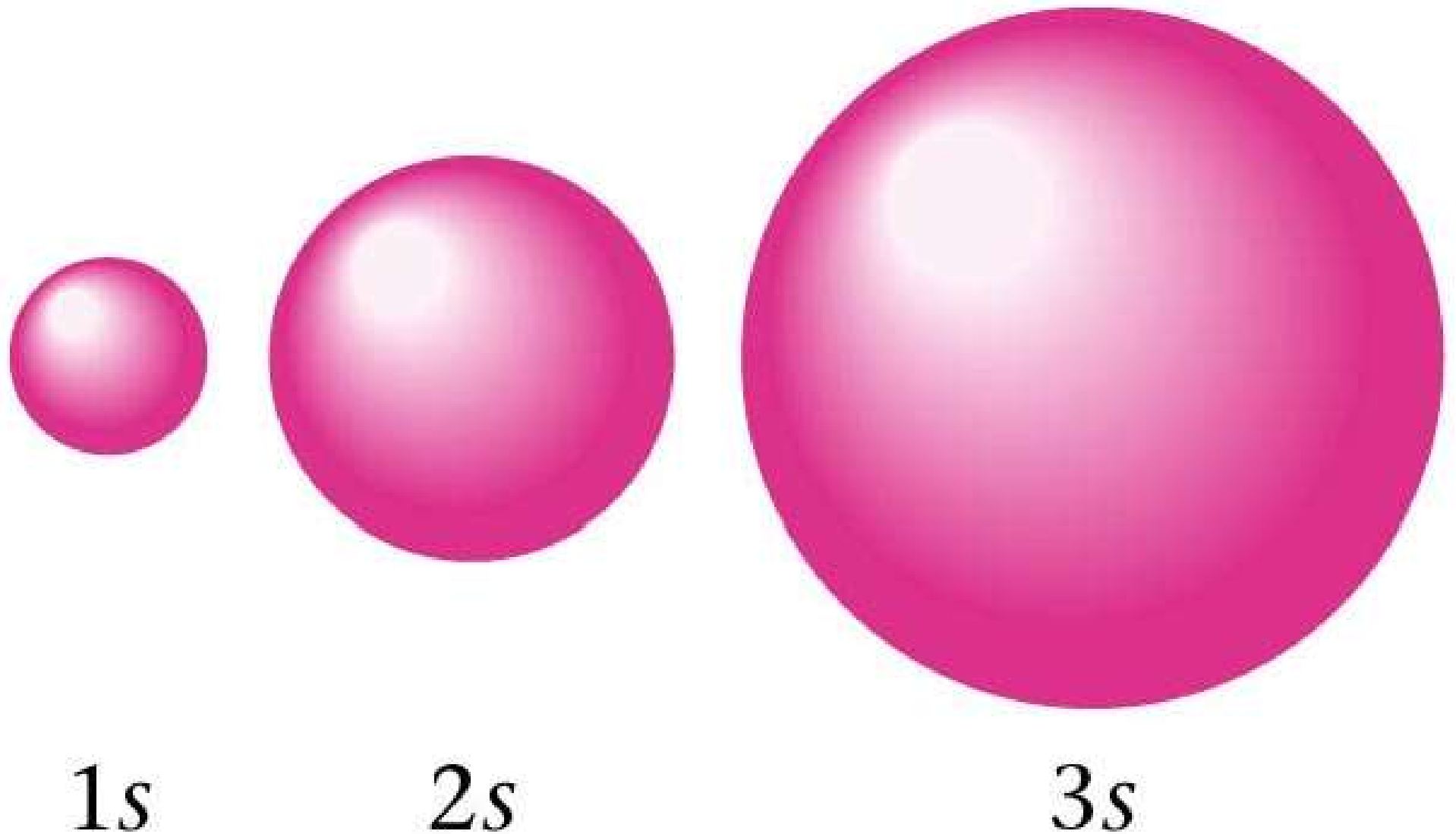


p τροχιακό

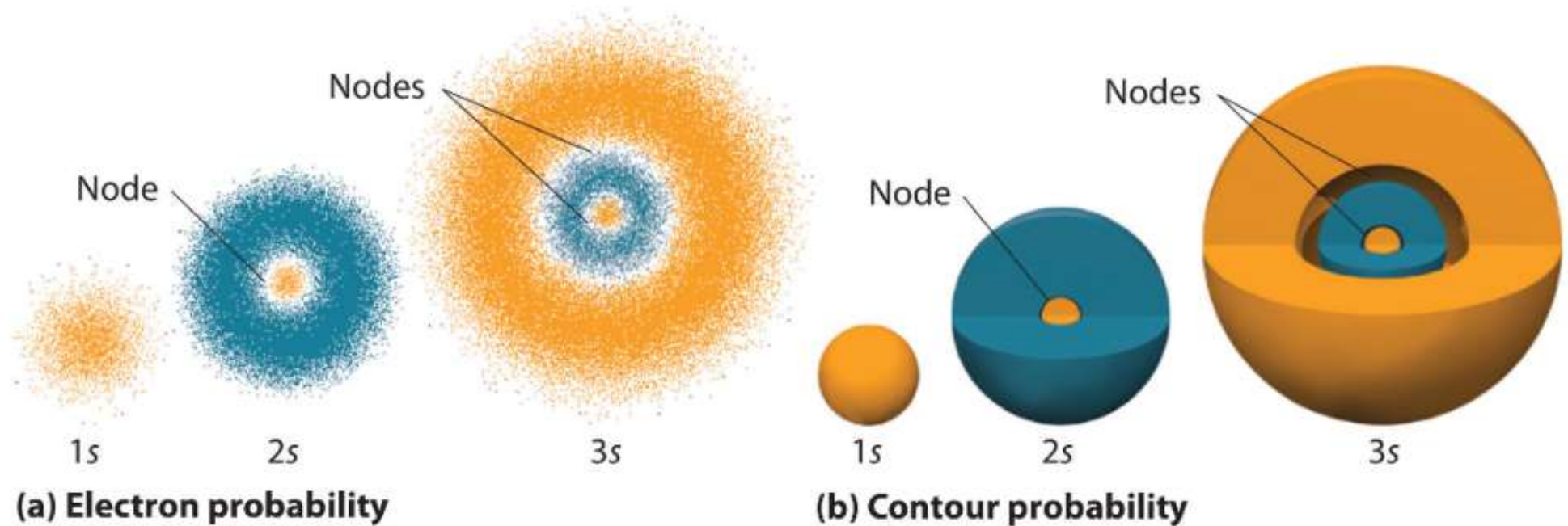


d τροχιακό

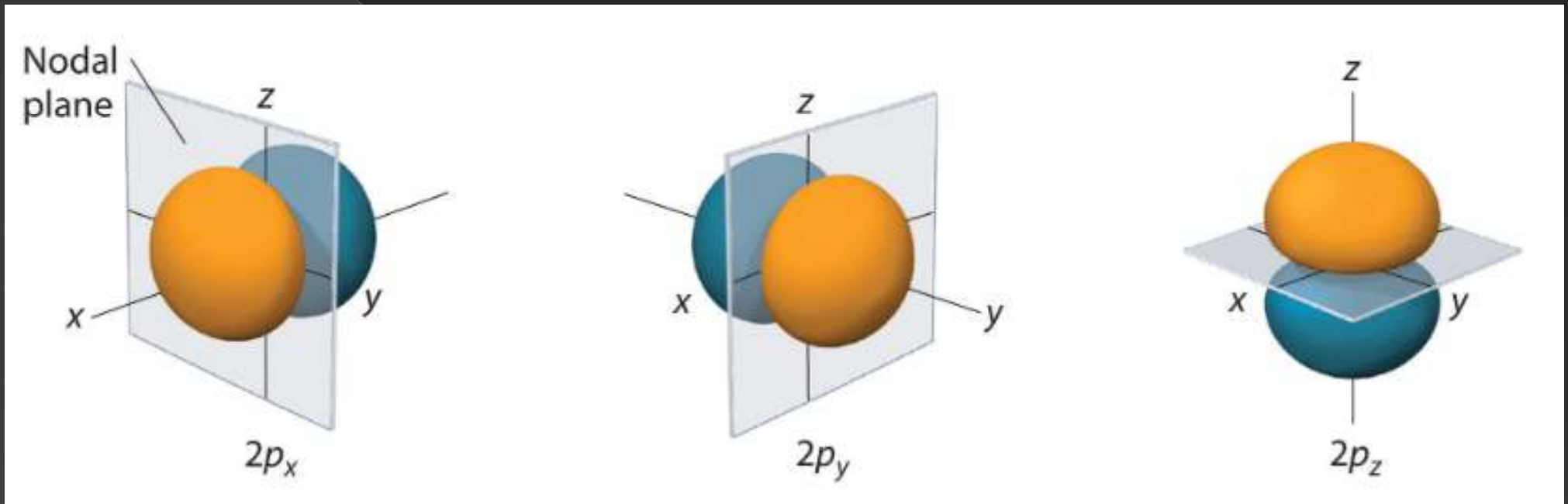
Σχετικά μεγέθη των σφαιρικών τροχιακών
 $1s$, $2s$, and $3s$ του Υδρογόνου.



Σχετικά μεγέθη των σφαιρικών s τροχιακών $1s$, $2s$, and $3s$. Η s υποστιβάδα έχει ένα τροχιακό

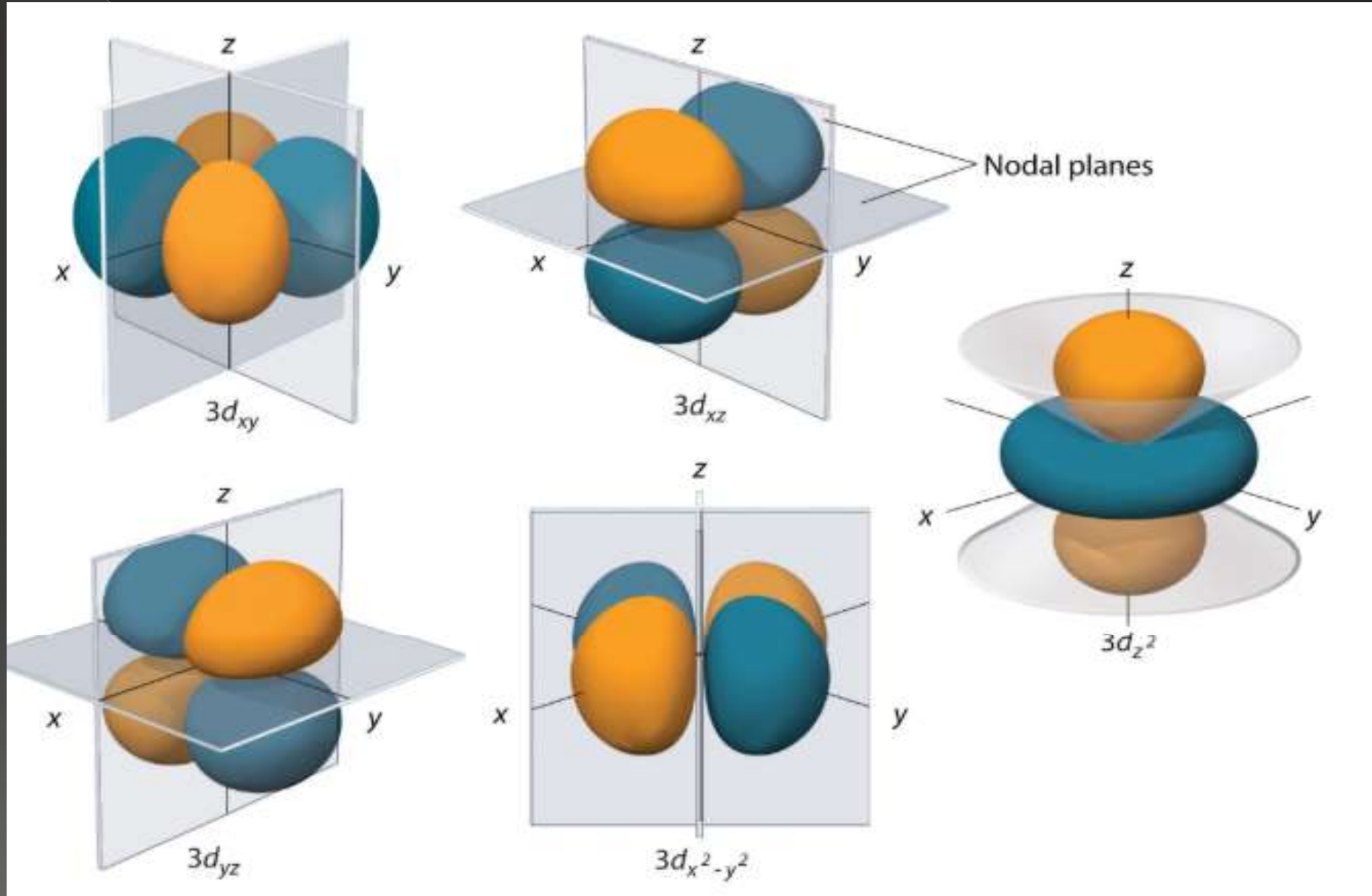


ρ Τροχιακά Η ρ υποστιβάδα έχει 3 τροχιακά

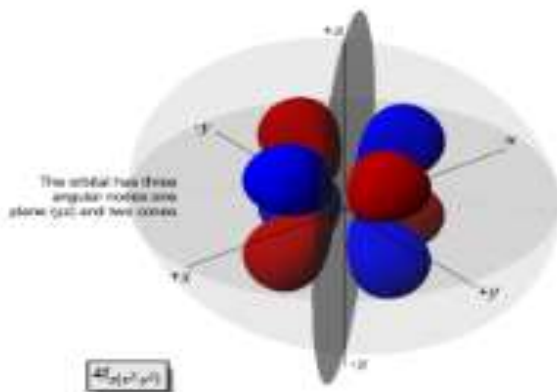
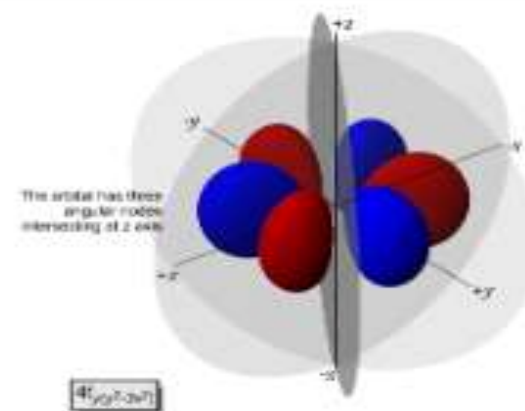
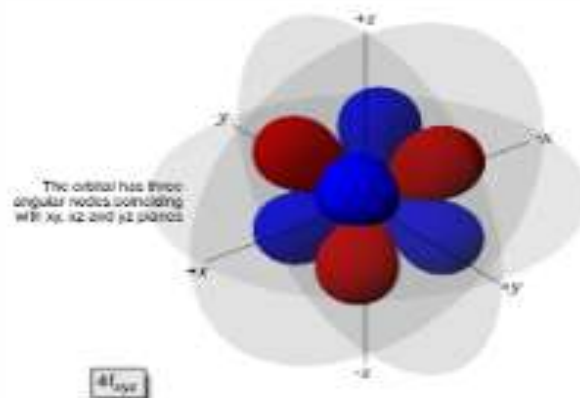
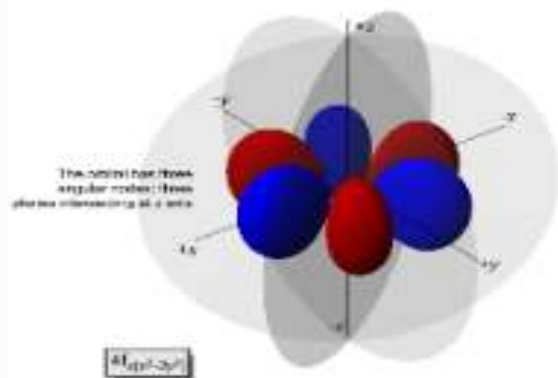
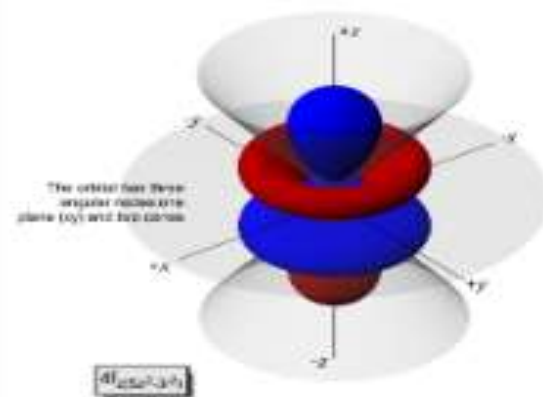
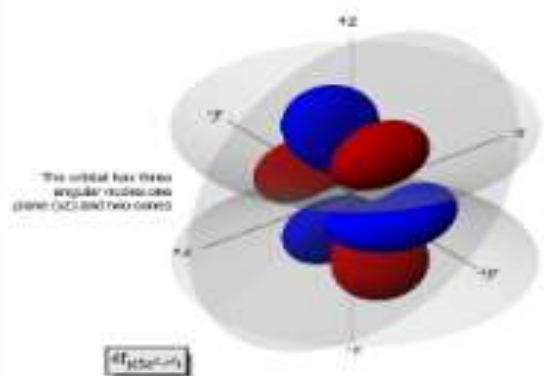
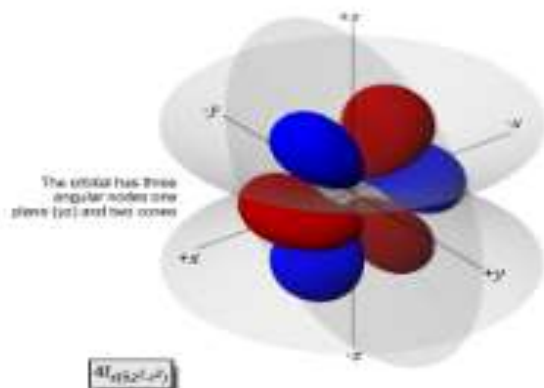


Υπάρχει ένας **ΕΠΙΠΕΔΟΣ ΚΟΜΒΟΣ** διάμεσος του πυρήνα, που είναι η περιοχή μηδενικής πιθανότητας ύπαρξης ηλεκτρονίων.

d Τροχιακά Η d υποστιβάδα έχει 5 τροχιακά



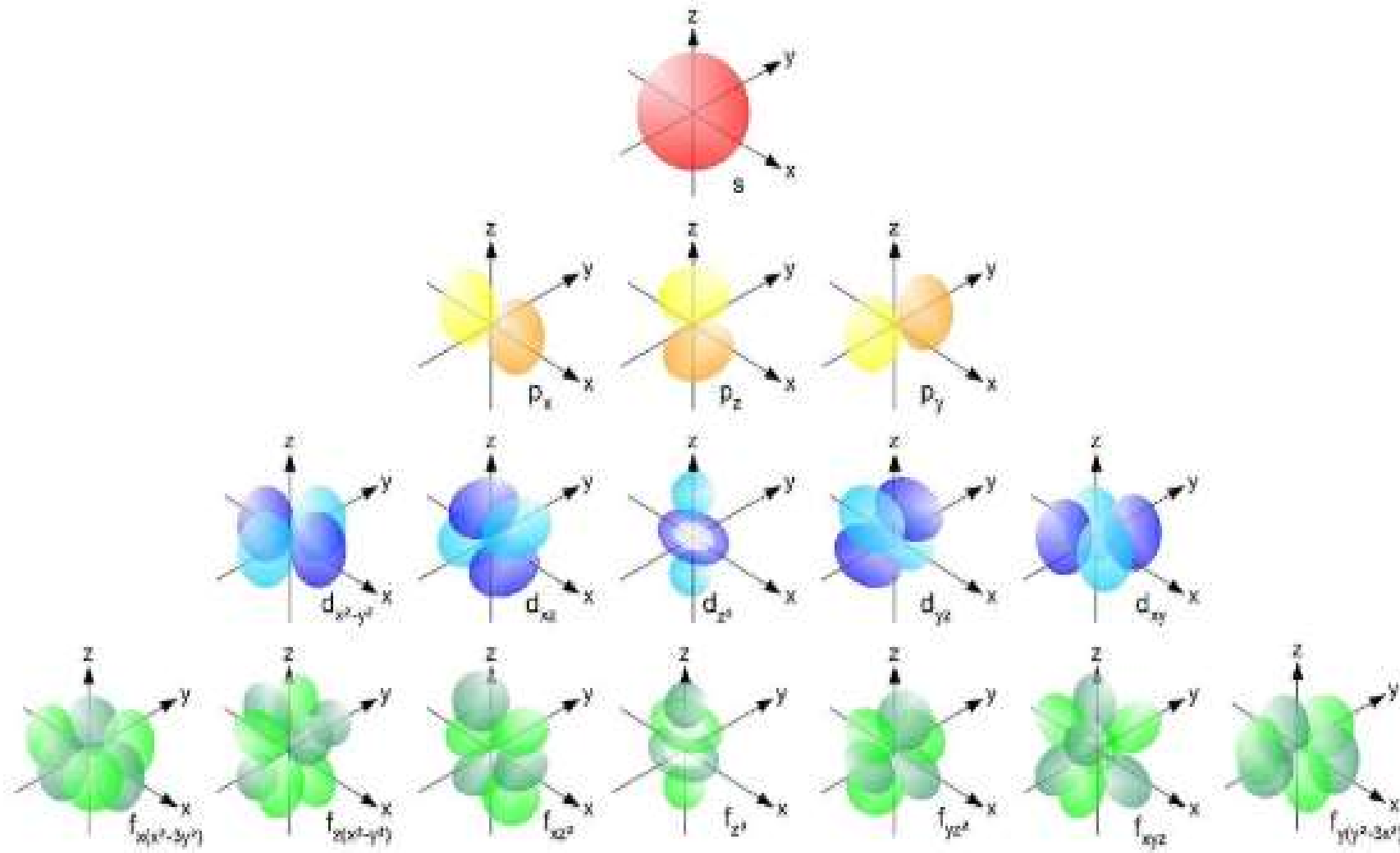
Υπάρχει ένας ΕΠΙΠΕΔΟΣ ΚΟΜΒΟΣ διάμεσος του πυρήνα, που είναι η περιοχή μηδενικής πιθανότητας ύπαρξης ηλεκτρονίων.



f Τροχιακά

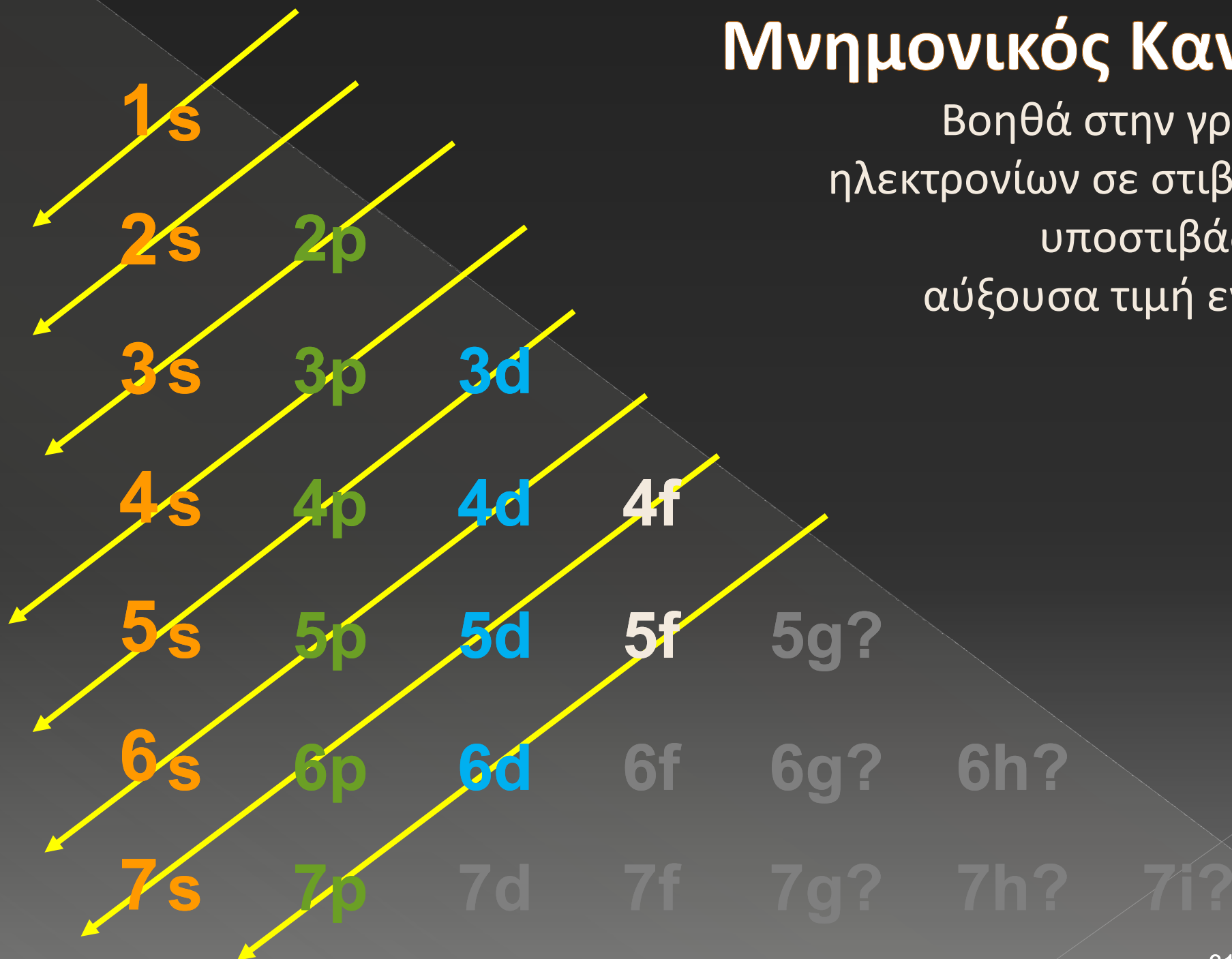
Η υποστιβάδα f έχει 7 τροχιακά

Τύποι Τροχιακών για σύγκριση



Μνημονικός Κανόνας

Βοηθά στην γραφή των
ηλεκτρονίων σε στιβάδες και
υποστιβάδες κατά
αύξουσα τιμή ενέργειας



Πόσα ηλεκτρόνια χωρούν σε κάθε υποστιβάδα ;

ΥΠΕΝΘΙΜΗΣΗ: Δύο το πολύ ηλεκτρόνια χωρούν σε οποιοδήποτε τροχιακό.

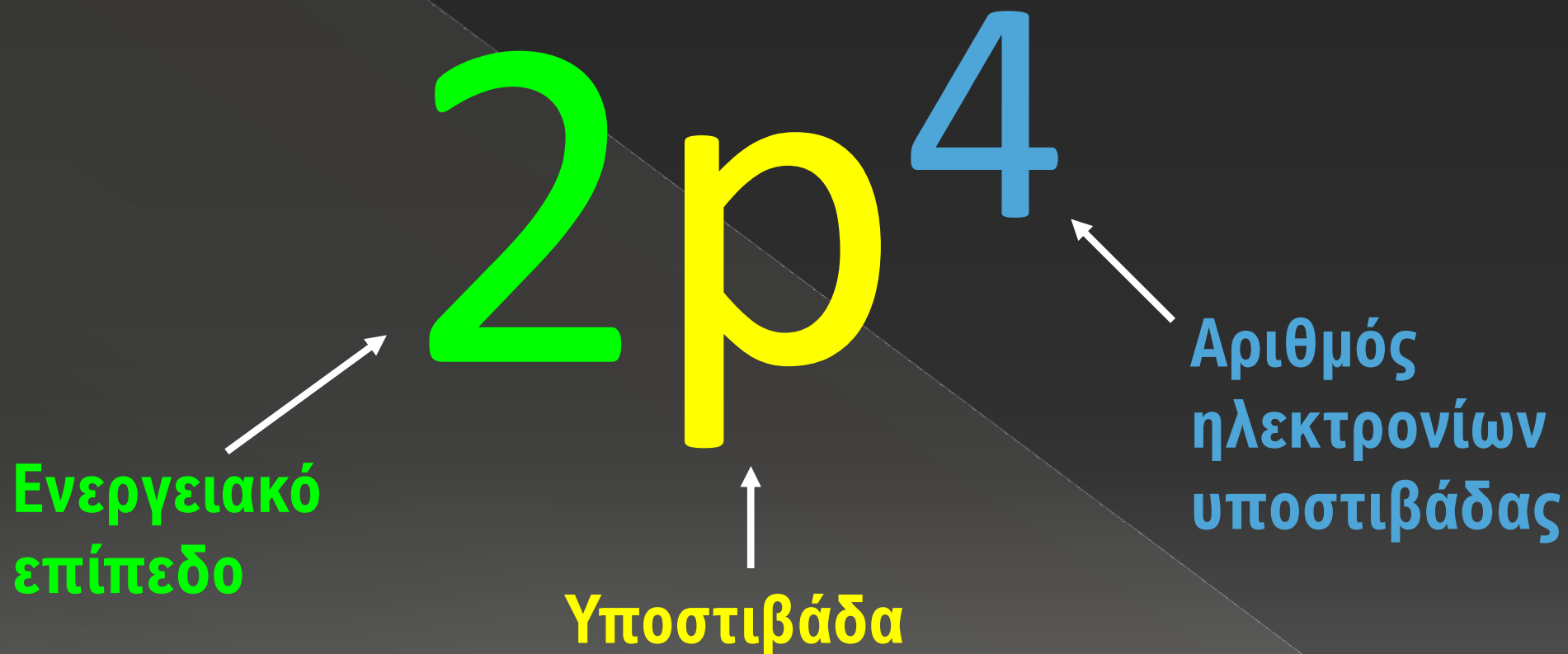
	s τροχιακά	p τροχιακά	d τροχιακά	f τροχιακά
Αριθμ. τροχιακών	1	3	5	7
Αριθμ. ηλεκτρονίων	2	6	10	14

Κατανομή Ηλεκτρονίων σε πολυηλεκτρονιακό άτομο ή ιόν

- ⦿ Κατά σειρά αυξανόμενης ενέργειας (**Aufbau**)
- ⦿ 2 ηλεκτρόνια ανά τροχιακό
- ⦿ Με την σωστή κατανομή, βρίσκουμε το πλήθος των εξωτερικών ηλεκτρονίων. Τα επονομαζόμενα **ηλεκτρόνια σθένους**.
- ⦿ Τα ηλεκτρόνια σθένους καθορίζουν την χημική συμπεριφορά των ατόμων (ιόντων)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} \dots$

Κατανομή Ηλεκτρονίων σε πολυηλεκτρονιακό άτομο ή ιόν



$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} \dots$

Η Αρχή Ηλεκτρονιακής Δόμησης (Aufbau)

- Ακολουθείται η αρχή ελάχιστης ενέργειας
τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τροχιακά με την μικρότερη ενέργεια, αποκτώντας μέγιστη σταθερότητα
- Εφαρμόζεται η απαγορευτική αρχή του Pauli
δύο ηλεκτρόνια στο ίδιο άτομο, δεν μπορεί να έχουν την ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών → δηλ. ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων σε ένα τροχιακό είναι ΔΥΟ.
- και ο κανόνας του Hund
ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τροχιακά ίδιας ενέργειας έχουν παράλληλα spin

Εξαιρέσεις στον κανόνα Aufbau

- Η d^4 είναι παρά ένα ηλεκτρόνιο «ημισυμπληρωμένη»
- Για να είναι ενεργειακά πιο σταθερή, ένα από τα πλησιέστερα s ηλεκτρόνια θα μεταβεί στην d , καθιστώντας την d^5 ημισυμπληρωμένη και πιο σταθερή.
- Παράδειγμα: Το Cr: $[Ar] 4s^2 3d^4$, ανήκει στις εξαιρέσεις. Έτσι, το Cr θα είναι $[Ar] 4s^1 3d^5$.
- Διαδικασία: Βρίσκουμε το πλησιέστερο s τροχιακό. «κλέβουμε» από αυτό ένα ηλεκτρόνιο και το προσθέτουμε στο d .

Εξαιρέσεις στον κανόνα Aufbau - 2

- Η d^9 υπολείπεται κατά ένα ηλεκτρόνιο για να είναι πλήρως συμπληρωμένη.
- Όπως και στην d^4 προηγουμένως, ένα από τα πλησιέστερα s ηλεκτρόνια θα μεταπηδήσει στην d^9 , γεμίζοντας την, οπότε έχουμε d^{10} αντί d^9 . Πιο σταθερή δομή!
- Παράδειγμα: Ο Au θα έπρεπε να είναι $[Xe] 6s^2 4f^{14} 5d^9$, αλλά εφόσον η d^9 είναι παρά ένα e^- πλήρης, ο Au θα αποτελεί εξαίρεση οπότε είναι $[Xe] 6s^1 4f^{14} 5d^{10}$.