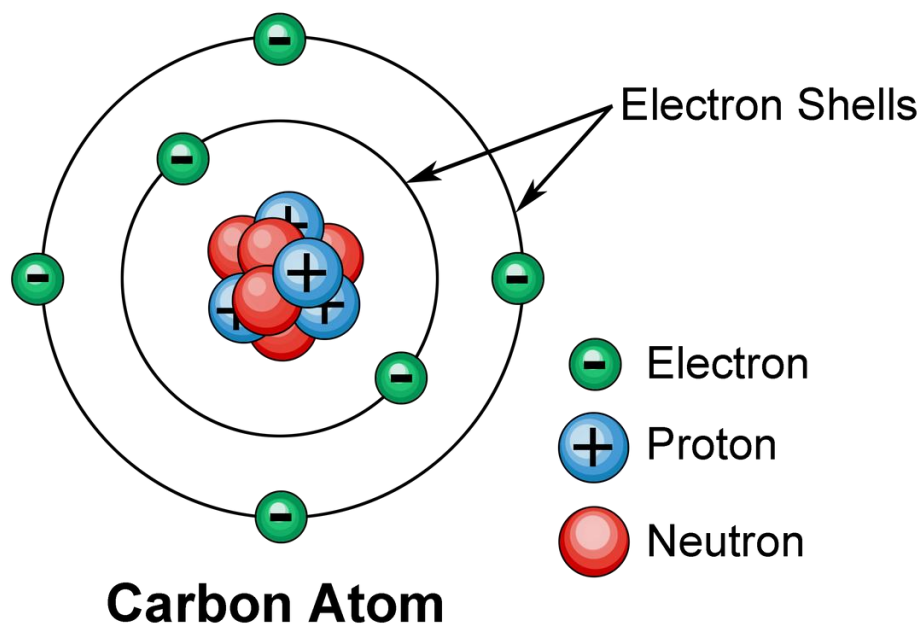


## Μάθημα 6.2

Αρχές δόμησης  
πολυηλεκτρονικών ατόμων

Η συμπλήρωση των τροχιακών με ηλεκτρόνια, ακολουθεί ορισμένους κανόνες (αρχές).

Η ηλεκτρονιακή δόμηση έχει θεμελιώδη σημασία, γιατί με βάση αυτή διαμορφώνεται η ηλεκτρονιακή δομή των ατόμων και κατ' επέκταση η χημική συμπεριφορά τους.



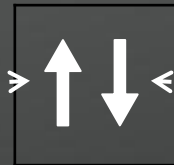
# Απαγορευτική αρχή του Pauli

Είναι αδύνατο να υπάρχουν στο ίδιο άτομο δύο ηλεκτρόνια με ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών ( $n, \ell, m_\ell, m_s$ ). Συνεπώς, **δεν μπορεί ένα τροχιακό να χωρέσει πάνω από δύο ηλεκτρόνια.**

Π.χ. στιβάδα K ( $n=1$ ),  
υποστιβάδα s ( $\ell=0$ ),  
τροχιακό s ( $m_\ell=0$ )



$m_s = +1/2$   
(1,0,0,+1/2)



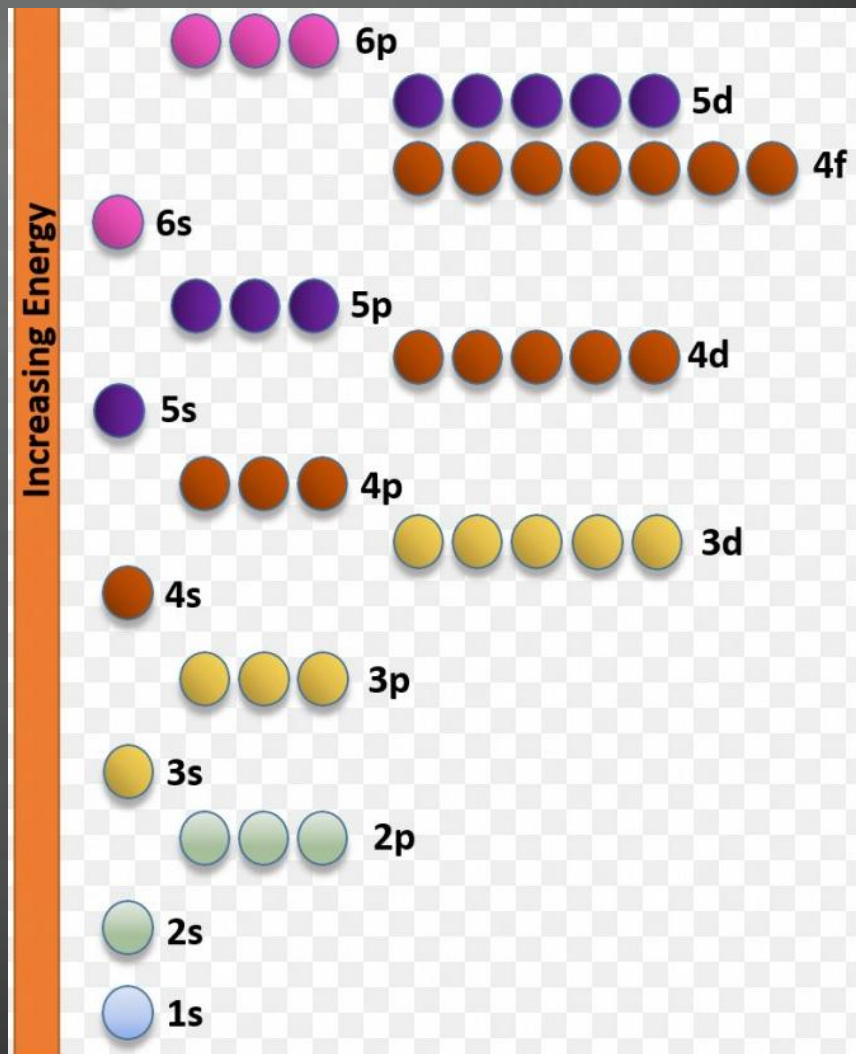
$m_s = -1/2$   
(1,0,0,-1/2)

# Πλήρωση στιβάδων, υποστιβάδων και τροχιακών

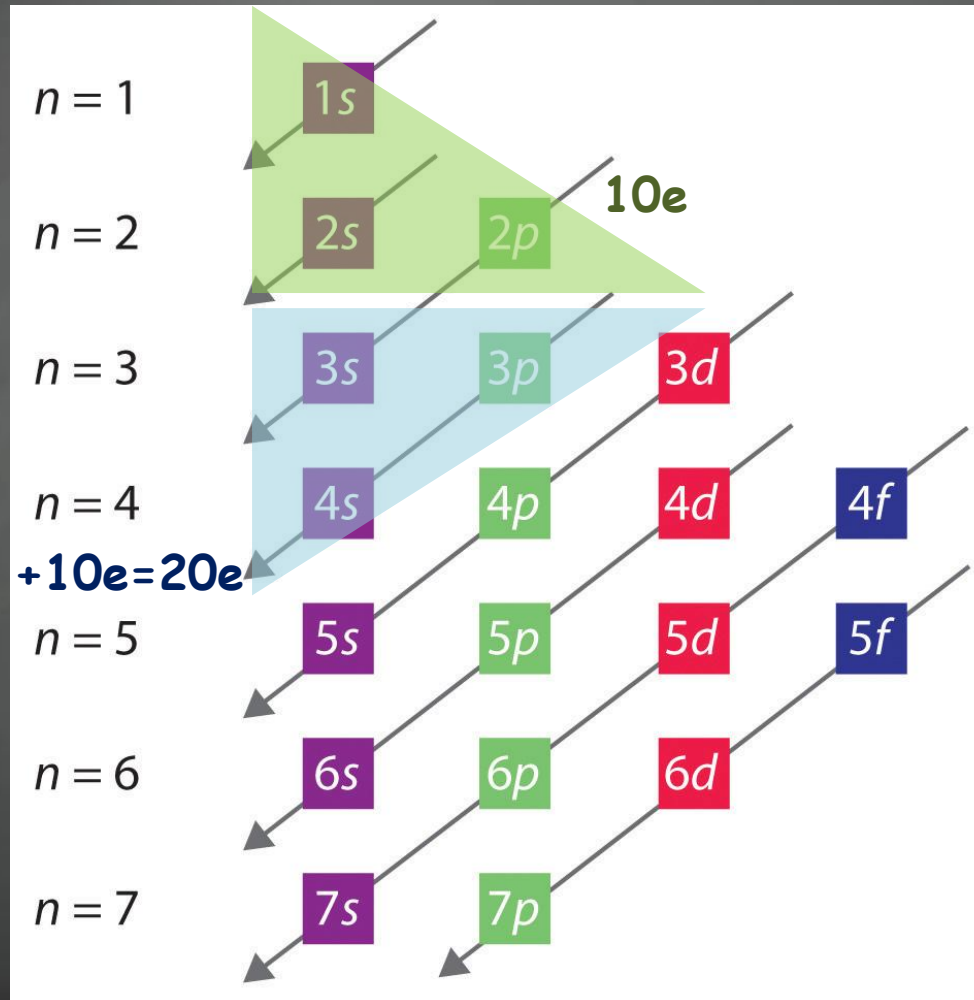
|   | $n$ | $l$ | $m_l$ | $m_s$      |                                           |
|---|-----|-----|-------|------------|-------------------------------------------|
| K | 1   | 0   | 0     | +1/2, -1/2 | 1s                                        |
| L | 2   | 0   | 0     | +1/2 -1/2  | 2s                                        |
|   |     | 1   | -1    | +1/2, -1/2 | 2p <sub>y</sub>                           |
|   |     |     | 0     | +1/2, -1/2 | 2p <sub>z</sub>                           |
|   |     |     | +1    | +1/2, -1/2 | 2p <sub>x</sub>                           |
| M | 3   | 0   | 0     | +1/2 -1/2  | 3s                                        |
|   |     | 1   | -1    | +1/2, -1/2 | 3p <sub>y</sub>                           |
|   |     |     | 0     | +1/2, -1/2 | 3p <sub>z</sub>                           |
|   |     |     | +1    | +1/2, -1/2 | 3p <sub>x</sub>                           |
|   |     | 2   | -2    | +1/2, -1/2 | 3d <sub>xy</sub>                          |
|   |     |     | -1    | +1/2, -1/2 | 3d <sub>yz</sub>                          |
|   |     |     | 0     | +1/2, -1/2 | 3d <sub>xz</sub>                          |
|   |     |     | +1    | +1/2, -1/2 | 3d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> |
|   |     |     | +2    | +1/2, -1/2 | 3d <sub>z<sup>2</sup></sub>               |

# Αρχή ελάχιστης ενέργειας

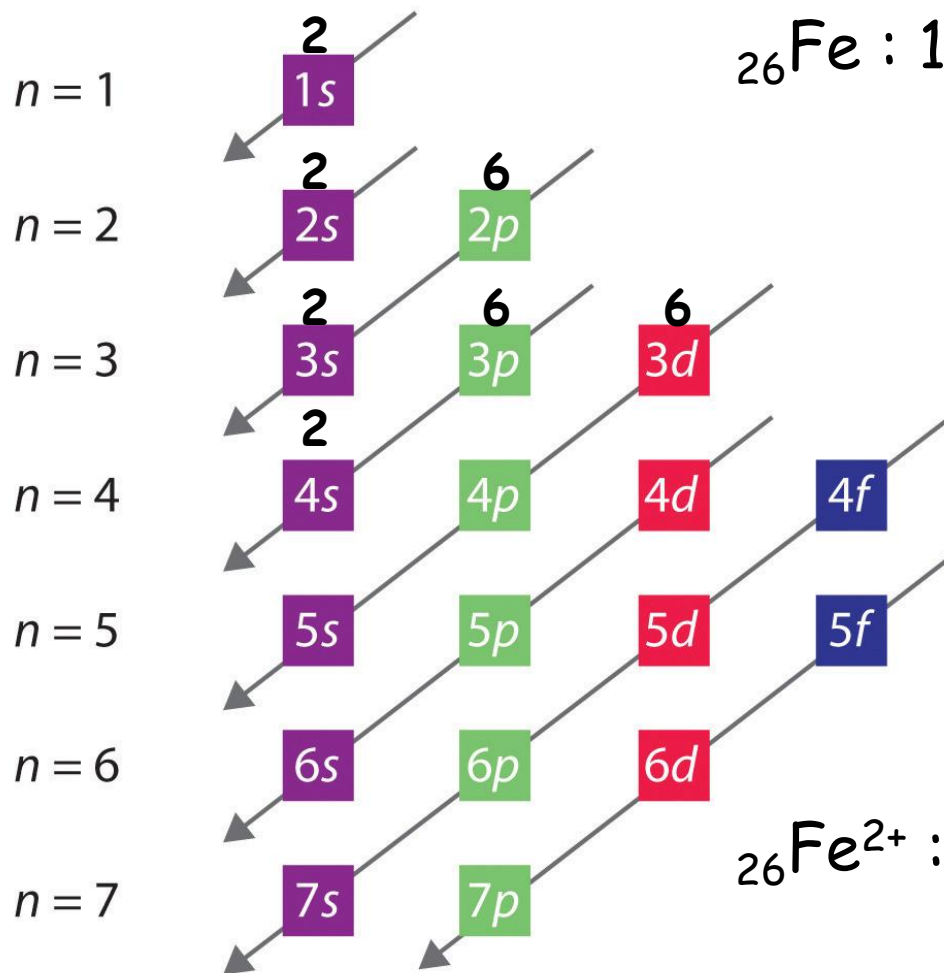
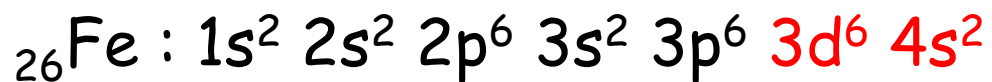
Κατά την ηλεκτρονιακή δόμηση ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου, τα ηλεκτρόνια οφείλουν να καταλάβουν τροχιακά με τη **μικρότερη ενέργεια**, ώστε να αποκτήσουν τη **μέγιστη σταθερότητα** στη θεμελιώδη κατάσταση.



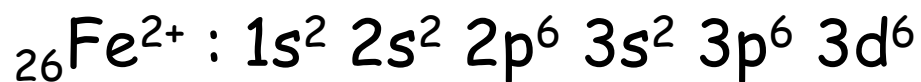
# Μνημονικός κανόνας για συμπλήρωση ατομικών τροχιακών



# Π.χ. κατανομή ηλεκτρονίων $_{26}\text{Fe}$



Μετά την εισαγωγή  $e$  η  $3d$   
αποκτά χαμηλότερη ενέργεια



# Κανόνας του Hund

Ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας (της ίδιας υποστιβάδας), έχουν **κατά προτίμηση παράλληλα spin**, ώστε τα ηλεκτρόνια να αποκτήσουν το μέγιστο άθροισμα των κβαντικών αριθμών spin.

Π.χ.  ${}^7\text{N}$ :  $1s^2 2s^2 2p^3$

|      | $2p_x$ | $2p_y$ | $2p_z$ |
|------|--------|--------|--------|
|      | ↑      | ↑      | ↑      |
| $2s$ |        | ↑↓     |        |
| $1s$ |        | ↑↓     |        |

