

Αρχές ηλεκτρονιακής δόμησης (aufbau)

* Απαγορευτική αρχή του Pauli



Wolfgang
Pauli

“δεν είναι δυνατόν να υπάρχουν στο ίδιο άτομο δύο ηλεκτρόνια με την ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών,
με άλλα λόγια σε κάθε τροχιακό χωρούν το πολύ δύο ηλεκτρόνια”

Σε κάθε τροχιακό μπορούν να υπάρξουν το πολύ δύο ηλεκτρόνια, τα οποία θα έχουν αντίθετο spin.

αζιμουθιακός αριθμός (ℓ)	τύπος τροχιακού	αριθμός τροχιακών ($2\ell + 1$)	αριθμός ηλεκτρονίων $2(2\ell + 1)$
0	s	1	2
1	p	3	6
2	d	5	10
3	f	7	14

Ενεργειακή στάθμη (n)	Τύπος τροχιακού	Αριθμός τροχιακών	Αριθμός ηλεκτρονίων	Αριθμός ηλεκτρονίων ενεργειακής στάθμης ($2n^2$)
1	s	1	2	2
2	s p	1 3	2 6	8
3	s p d	1 3 5	2 6 10	18
4	s p d f	1 3 5 7	2 6 10 14	32

Αρχές ηλεκτρονιακής δόμησης



Αρχή της ελάχιστης ενέργειας.

Στα **πολυηλεκτρονιακά** άτομα η ενέργεια των υποστιβάδων καθορίζεται από δύο παράγοντες: την έλξη μεταξύ πυρήνα και ηλεκτρονίου, και την άπωση μεταξύ των ηλεκτρονίων.

Η έλξη καθορίζεται από τον κύριο κβαντικό αριθμό n .

Όσο μικρότερος είναι, τόσο μεγαλύτερη είναι η έλξη και η ενέργεια είναι χαμηλότερη.

Η άπωση καθορίζεται από τον αζιμουθιακό κβαντικό αριθμό ℓ .

Όσο μικρότερος είναι τόσο μεγαλύτερη είναι η άπωση, και η ενέργεια είναι χαμηλότερη.

Αρχές ηλεκτρονιακής δόμησης



Αρχή της ελάχιστης ενέργειας.

“Σύμφωνα με την αρχή της ελάχιστης ενέργειας, στα πολυηλεκτρονιακά άτομα τα ηλεκτρόνια τοποθετούνται στις υποστιβάδες με τέτοιο τρόπο ώστε το άτομο να αποκτήσει τη μικρότερη συνολική ενέργεια και τη μεγαλύτερη σταθερότητα”.

Μεταξύ δύο υποστιβάδων, χαμηλότερη ενέργεια έχει εκείνη που έχει μικρότερο άθροισμα $n + \ell$.

Αν το άθροισμα είναι ίδιο, μικρότερη ενέργεια έχει εκείνη με τον μικρότερο n .

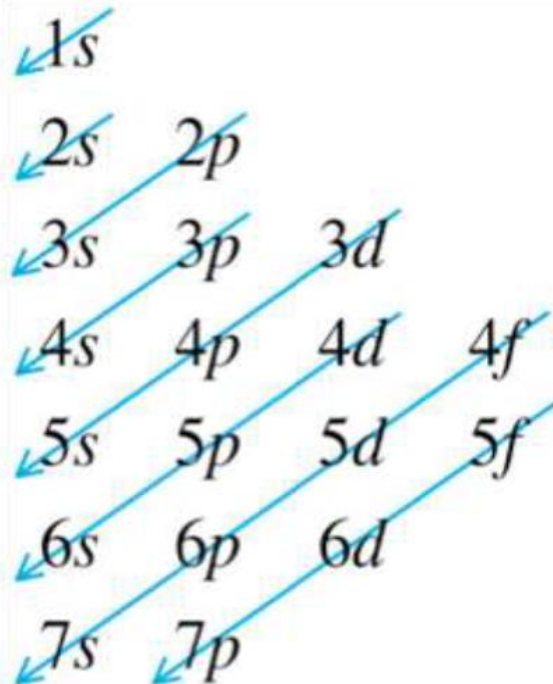
Στο άτομο του **υδρογόνου** όλες οι υποστιβάδες της ίδιας στιβάδας έχουν την ίδια ενέργεια, διότι δεν υπάρχουν απώσεις μεταξύ ηλεκτρονίων και η ενέργεια καθορίζεται μόνο από τον κύριο κβαντικό αριθμό.

Το ίδιο συμβαίνει και στα υδρογονοειδή ιόντα όπως το He^+ .

Δευτερεύων ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός

“καθορίζει την άπωση μεταξύ των ηλεκτρονίων και το σχήμα του ατομικού τροχιακού”

Μνημονικός κανόνας



- 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.

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

Παραδείγματα:



1s 2s 2p 3s 3p 4s

το άτομο του ασβεστίου ${}_{20}\text{Ca}$ έχει ηλεκτρονιακή δομή:

$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2$

το κατιόν του ασβεστίου ${}_{20}\text{Ca}^{2+}$ έχει ηλεκτρονιακή δομή:

$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6$

$_{26}\text{Fe}$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$

το άτομο του σιδήρου $_{26}\text{Fe}$ έχει ηλεκτρονιακή δομή

$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^6, 4s^2$

το κατιόν του σιδήρου $_{26}\text{Fe}^{2+}$ έχει ηλεκτρονιακή δομή

$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^6$

Δομή Fe: K(2) L(8) M(14) N(2)

Δομή Fe^{2+} : K(2) L(8) M(14)

Γράφουμε πρώτα την υποστιβάδα 3d παρόλο που συμπληρώνεται μετά την 4s. Αυτό γίνεται διότι όταν αρχίζει να συμπληρώνεται η 3d αποκτά μικρότερη ενέργεια από την 4s.

Όταν σχηματίζεται ένα **κατιόν** αποβάλλονται ηλεκτρόνια της υποστιβάδας που έχει τη μεγαλύτερη ενέργεια



Κανόνας του Hund.

Ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας (της ίδιας υποστιβάδας), έχουν κατά προτίμηση παράλληλα spin,

«σε μια ελλιπτή υποστιβάδα τα ηλεκτρόνια κατανέμονται κατά προτίμηση στα τροχιακά έχοντας παράλληλο spin (με άλλα λόγια πιο σταθερή δομή σε ελλιπτή υποστιβάδα είναι εκείνη που δίνει το μέγιστο αριθμό μονήρων ηλεκτρονίων)»

π.χ.

στο άτομο του οξυγόνου ($Z = 8$) έχουμε την εξής κατανομή:

$1s^2$

$2s^2$

$2p^4$

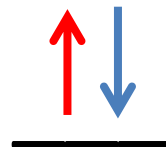
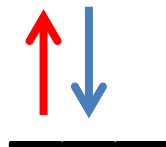
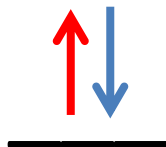
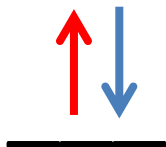
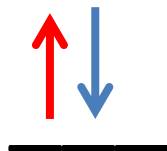
$(\uparrow\downarrow)$

$(\uparrow\downarrow)$

$(\uparrow\downarrow)$

$(\uparrow)$

$(\uparrow)$



Στοιχείο	Ηλεκτρονιακή δομή	Ηλεκτρονιακή δομή σε τροχιακά				Δομή με βάση το προηγούμενο ευγενές αέριο
${}_3\text{Li}$	$1s^2 2s^1$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 1s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow \\ \hline 2s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c c c } \hline \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \hline & 2p & \end{array}$		$[\text{He}]2s^1$
${}_4\text{Be}$	$1s^2 2s^2$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 1s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 2s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c c c } \hline \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \hline & 2p & \end{array}$		$[\text{He}]2s^2$
${}_5\text{B}$	$1s^2 2s^2 2p^1$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 1s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 2s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c c c } \hline \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \hline & 2p & \end{array}$	$[\text{He}]2s^2 2p^1$
${}_6\text{C}$	$1s^2 2s^2 2p^2$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 1s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 2s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow \\ \hline \end{array}$	$[\text{He}]2s^2 2p^2$
${}_7\text{N}$	$1s^2 2s^2 2p^3$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 1s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 2s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow \\ \hline \end{array}$	$[\text{He}]2s^2 2p^3$
${}_8\text{O}$	$1s^2 2s^2 2p^4$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 1s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 2s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow \\ \hline \end{array}$	$[\text{He}]2s^2 2p^4$
${}_9\text{F}$	$1s^2 2s^2 2p^5$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 1s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 2s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array}$	$[\text{He}]2s^2 2p^5$
${}_{10}\text{Ne}$	$1s^2 2s^2 2p^6$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 1s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline 2s \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array}$	$\begin{array}{ c } \hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array}$	$[\text{He}]2s^2 2p^6$