

ΧΗΜΕΙΑ ΘΕΤΙΚΗΣ ΚΑΤΕΥΘΥΝΣΗΣ Γ' ΛΥΚΕΙΟΥ

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Το 1900 ο Μαξ Πλανκ επινοεί τη θεωρία των κβάντα (από την λέξη quantum: στοιχειώδης ποσότητα, πακέτο) σύμφωνα με την οποία η ακτινοβολία (μορφή ενέργειας) εκπέμπεται όχι με συνεχή τρόπο, αλλά σε μικρά πακέτα (κβάντα). Τα κβάντα (στοιχειώδεις ποσότητες) του φωτός, ή γενικότερα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας λέγονται φωτόνια.[Ο όρος επινοήθηκε από τον Αϊνστάιν στην προσπάθειά του να ερμηνεύσει το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο(?) και σημαίνει «σωματίδια» φωτός!]

Σύμφωνα με τη θεωρία του Πλανκ κάθε φωτόνιο έχει ενέργεια $E=h \cdot f$ την οποία μεταδίδει σε ένα (1) μόνο ηλεκτρόνιο κατά την αλληλεπίδρασή του με αυτό [όπου E : το στοιχειώδες ποσό ενέργειας μιας ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, f : η συχνότητα (το 'χρώμα') της και h : μια σταθερά που ονομάζεται σταθερά του Πλάνκ και ισούται $6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$].

Η κβαντική θεωρία του Πλανκ εφαρμόστηκε στο ατομικό πρότυπο του Μπορ (Bohr), το οποίο περιγράφεται συνοπτικά με τις παρακάτω δύο συνθήκες του συγκεκριμένου μοντέλου (μοντέλο Μπορ):

1) Πρώτη (μηχανική) συνθήκη: Τα e περιστρέφονται γύρω από τον πυρήνα σε κυκλικές καθορισμένες τροχιές, με καθορισμένα (άρα κβαντισμένα) ενέργεια. Στο άτομο του υδρογόνου βρέθηκε ότι η ενέργεια ενός ηλεκτρονίου είναι $E=-2,18 \cdot 10^{-18} / n^2$ (σε Joule) όπου ' n ' σταθερά που λέγεται κύριος (βασικός) κβαντικός αριθμός και παίρνει τιμές $n = 1, 2, 3 \dots$ και καθορίζει την κυκλική τροχιά, άρα και την ενεργειακή στάθμη ενός ηλεκτρονίου.

Η μικρότερη (δηλαδή πιο 'φυσιολογική') ενέργεια ενός ηλεκτρονίου είναι για $n=1$, όπου το ηλεκτρόνιο βρίσκεται όσο το δυνατό πιο κοντά στον πυρήνα (θεμελιώδης κατάσταση), και το αρνητικό (-) πρόσημο δείχνει ότι πρέπει να προσφερθεί ενέργεια ώστε το ηλεκτρόνιο να αποσπαστεί από το πεδίο του πυρήνα (ιοντισμός). Όσο απομακρύνεται από τον πυρήνα το ηλεκτρόνιο (σε πιο 'έξωτερική' στιβάδα) τόσο μικρότερη η ενέργειά του, καθώς τόσο μικρότερη είναι η έλξη του πυρήνα άρα και τόσο μικρότερη είναι η ενέργεια που πρέπει να προσφέρουμε ώστε να αποσπαστεί από το πεδίο του πυρήνα.

******Η θεωρία Μπορ (Bohr) αποτελεί υβρίδιο δυο διαφορετικών τρόπων σκέψης, καθώς συνδυάζει τις βασικές αρχές της κλασικής

φυσικής και τις αρχές της κβαντικής θεωρίας. Αποτελεί τη βάση ανάπτυξης των σύγχρονων αντιλήψεων περί ατόμου (κβαντομηχανικό πρότυπο ατόμου) παρά το γεγονός ότι η παραδοχή του για κυκλικές τροχιές των ηλεκτρονίων αποδείχθηκε λαθεμένη. **

Όταν ηλεκτρόνια έχουν μεταπηδήσει σε υψηλότερες ενεργειακές στάθμες (δηλαδή μακρύτερα από τον πυρήνα) λέμε ότι το άτομο είναι διεγερμένο.

ΠΡΟΣΟΧΗ στους ορισμούς:

«άτομο σε θεμελιώδη κατάσταση» vs «διεγερμένο άτομο» και

«ιοντισμένο ή φορτισμένο άτομο» vs «ουδέτερο άτομο»

2) Δεύτερη (οπτική) συνθήκη του Μπορ :όταν το ηλεκτρόνιο απορροφά ενέργεια υπό μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (υπό μορφή φωτονίου κατάλληλης συχνότητας) μεταπηδά σε στιβάδα υψηλότερης ενέργειας (διέγερση), ενώ όταν μεταπηδά σε στιβάδα (πιο σωστά ενεργειακή στάθμη) χαμηλότερης ενέργειας εκπέμπει ακτινοβολία (αποδιέγερση).

Συνδυάζοντας τις ιδέες του Πλανκ ο Μπορ οδηγείται στην εξίσωση $\Delta E = |E_f - E_i| = h \cdot f$. Βασική επιτυχία της θεωρίας Μπορ, είναι η ερμηνεία του γραμμικού φάσματος εκπομπής του υδρογόνου. [τι είναι το φάσμα;], μα υστερεί ως προς το ότι δεν κατάφερε να ερμηνεύσει το χημικό δεσμό και το φάσμα ατόμων πολυπλοκότερων του υδρογόνου.

Ωθηση στην εξέλιξη των αντιλήψεων γύρω από το άτομο δίνει η «Κυματική» θεωρία της ύλης του De Broglie. Κατά αυτήν: το φως, αποτελείται από φωτόνια που, όπως κάθε άλλο κινούμενο σωματίδιο (για παράδειγμα ηλεκτρόνιο) , παρουσιάζουν διπλή (διτή) φύση. Δηλαδή φύση σωματιδίου (κβάντα) και ταυτόχρονα φύση (ηλεκτρομαγνητικού) κύματος. Η φύση του φωτός είναι μία και δεν μεταβάλλεται. Απλώς ανάλογα με το πείραμα που εφαρμόζουμε άλλοτε εμφανίζεται ο 'σωματιδιακός' και άλλοτε ο 'κυματικός' χαρακτήρας του. Ισχύει ότι $\lambda = h/(m \cdot v)$.

Την ίδια περίπου εποχή ο Χάιζενμπεργκ διατυπώνει την αρχή της αβεβαιότητας (ή απροσδιοριστίας) σύμφωνα με την οποία:

«είναι αδύνατο να προσδιορίσουμε ταυτόχρονα τη θέση και την ορμή (άρα την ταχύτητα) ενός κινούμενου σωματιδίου».

Με την αποδοχή της αρχής της αβεβαιότητας, καταρρίπτεται το πλανητικό πρότυπο (στο πρότυπο Μπορ η παραδοχή της κίνησης του ηλεκτρονίου σε καθορισμένη κυκλική τροχιά, προϋποθέτει ακριβή γνώση θέσης και ταχύτητας ταυτόχρονα με βάση τους νόμους της κυκλικής κίνησης).

Είναι η σειρά του Σρέντινγκερ και της διάσημης «κυματικής εξίσωσής» του να ανοίξει το δρόμο της Κβαντομηχανικής (δηλ. μηχανικής που μπορεί να εφαρμοστεί στο μικρόκοσμο του ατόμου). Η εξίσωση προσδιορίζει την πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου σε ορισμένο χώρο - σε αντίθεση με τις καθορισμένες κυκλικές τροχιές του Μπορ - και υπολογίζεται η ενέργεια σε πλήρη ταύτιση με εκείνη που προσδιόρισε ο Μπορ. Η επίλυση της εξίσωσης Σρέντινγκερ εισάγει την έννοια του τροχιακού (ονομασία προς τιμήν της προσφοράς που Μπορ) όπου τροχιακό είναι ο χώρος στον οποίο με μεγάλη πιθανότητα 90 έως 99% μπορεί να βρεθεί το ηλεκτρόνιο. Η «στιβάδα» πλέον του Μπορ γίνεται «ενεργειακή στάθμη», ή «χώρος όπου βρίσκεται το ηλεκτρόνιο έχοντας ορισμένη ενέργεια». Αντί για ηλεκτρόνιο έχουμε «ηλεκτρονι(α)κό νέφος» που είναι το σύνολο των στιγμών (κουκίδων) που αντιστοιχεί στη θέση του ηλεκτρονίου κάποια χρονική στιγμή. Το περίγραμμα της καμπύλης που περικλείει το 90 μέχρι 99% των στιγμών (κουκίδων), είναι η γραφική παράσταση μιας μαθηματικής συνάρτησης που λέγεται ατομικό τροχιακό.

Συνοψίζοντας λοιπόν έχουμε.....

Planck: $E=h\nu$ Η ακτινοβολία εκπέμπεται όχι με συνεχή τρόπο, μα σε μικρά πακέτα(κβάντα). Φωτόνια=κβάντα φωτός-ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας

Bohr: $\Delta E = |E_{τελ} - E_{αρχ}| = h\nu$ όπου $E = -2,18 \cdot 10^{-18} / n^2$ (Joules)

De Broglie: $\lambda = h/mu$ Κάθε κινούμενο σωματίδιο παρουσιάζει διττή φύση δηλ. φύση σωματιδίου(κβάντα) και κύματος (ηλεκτρομαγνητικού) [κυματοδ्विकός δυϊσμός]

Heisenberg: Είναι αδύνατο να προσδιορίσουμε ταυτόχρονα ορμή (άρα και ταχύτητα) και θέση ενός e!

Schrödinger: Κυματοσυνάρτηση

Τροχιακό – 3 πρώτοι κβαντικοί αριθμοί

Pauli: Δεν είναι δυνατό στο ίδιο άτομο να υπάρχουν 2 ή περισσότερα e με την ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών.

**Τις παραπάνω θεωρίες, ονόματα και τύπους οφείλεις να τα γνωρίζεις για τις εξετάσεις!!

Η λύση της εξίσωσης Σρέντινγκερ, (μέχρι κάποιο βαθμό... που όσο «περισσότερο» γίνεται, τόσο πλησιάζουμε στην - απόλυτη - αλήθεια.... πράγμα μάλλον ανέφικτο και γι αυτό συναρπαστικό !!) δίνει κατ' αρχήν τρεις αριθμούς:

- Τον n που ονομάζεται **κύριος κβαντικός αριθμός**
- Τον l που ονομάζεται **αζιμουθιακός ή δευτερεύον κβαντικός αριθμός** και
- Τον m_l που ονομάζεται **μαγνητικός κβαντικός αριθμός**.

Ας αφήσουμε όμως για λίγο την κβαντομηχανική, και ας έρθουμε στον κόσμο μας, έτσι όπως τον αντιλαμβανόμαστε. Είναι γνωστό στους μαθητές, που είχα και έχω, ότι είμαι φανατικός οπαδός της σοκολάτας (συγκεκριμένης εταιρίας, με γέμιση Μους Σοκολάτας). Ας φανταστούμε τώρα, ένα 'εικονικό' Σούπερ Μάρκετ το οποίο πουλά μόνο γλυκίσματα, καθώς και τις προαναφερθείσες σοκολάτες, κι ας του δώσουμε μία τυχαία ονομασία (έστω για παράδειγμα...Σούπερ Μάρκετ Καππάτος). Αυτό το 'εικονικό' Σούπερ Μάρκετ έχει την εξής ιδιομορφία:

Στο διάδρομο 1 έχει μία (1) ραφιέρα, με ένα (1) ράφι συγκεκριμένου σχήματος, για παράδειγμα κυκλικό. Την ονομάζω 1α !(ιδιοκτήτης δεν είμαι, ό,τι θέλω κάνω...).

Στο διάδρομο 2 έχει δύο (2) ραφιέρες. Τη 2α και τη 2β. Η 2α έχει ίδιο σχήμα με την 1α αλλά πιο μεγάλο μέγεθος, ενώ η 2β έχει διαφορετικό σχήμα –από τις τύπου «α» ραφιέρες - και πιο πολλά (3)[τρία] ράφια.

Στον διάδρομο 3 τώρα, υπάρχουν 3 ραφιέρες. Η 3α η 3β και η 3γ. Η 3α έχει ίδιο σχήμα με τις 1α, 2α μα είναι πιο μεγάλη, ενώ η 3β έχει ίδιο σχήμα και αριθμό ραφιών με τη 2β μα είναι μεγαλύτερη, ενώ η 3γ έχει διαφορετικό σχήμα και πιο πολλά (5)[πέντε] ράφια.

Παρομοίως, όπως καταλαβαίνετε, στο διάδρομο 4 βρίσκονται τέσσερις ραφιέρες. Η 4α, 4β, 4γ και 4δ. Η 4α, ναι, ναι, ναι το βρήκατε..., έχει ίδιο σχήμα και αριθμό ραφιών με τις 1α, 2α, 3α μα είναι μεγαλύτερη, αντίστοιχα η 4β με τις 2β και 3β και η 4γ με την 3γ (διαφέρουν μόνο στο μέγεθος και όχι στο σχήμα και τον αριθμό των ραφιών). Η 4δ έχει καινούργιο σχήμα και 7 ράφια κ.ο.κ.

Στο 'εικονικό' αυτό σουπερμάρκετ, στέλνω ένα μαθητή μου, να με προμηθεύσει με το αγαπημένο μου γλυκό (εν τάξει... λόγω ανταγωνισμού και 'επιβίωσης' ,στο σουπερμάρκετ μου

τοποθέτησα και άλλες λιχουδιές, για παράδειγμα παστέλι Κέας, λουκούμια Σύρου, σουφλέ σοκολάτας από το Βαράδι του Μυλοποτάμου Κέας και άλλα...). Θα πρέπει λοιπόν, να δώσω οδηγίες στο μαθητή για το πως θα γίνει αυτό! Πρέπει να του δώσω τις απαραίτητες πληροφορίες ώστε να ολοκληρώσει τη αποστολή του γρήγορα – να μην ψάχνεται για ώρα στον ‘περίεργο’ αυτό χώρο.

Για παράδειγμα :

μου τηλεφωνεί η Άννα - Μαρία:

- Καλημέρα κύριε Σταμάτη.
- Καλημέρα Άννα-Μαρία.
- Που θα βρω το σουφλέ που μου ζητήσετε;
- Μα στο Σούπερ Μάρκετ «Καππάτος» εννοείται....
- ...Χμ...Το ξέρω αυτό... Δεν έχω χρόνο όμως και με περιμένει η Μαρία...Έχουμε (σ.σ. και καλά!) να διαβάσουμε χημεία!!
- Όλα καλά λοιπόν! Πήγαινε στο 4^ο διάδρομο!
- Τι τρελό σουπερμάρκετ είναι αυτό (μονολογεί)...Κάθε διάδρομος, είναι μεγαλύτερος από τον προηγούμενό του κατά μια ραφιάρα όσο απομακρύνομαι από την είσοδο, και οι ραφιέρες του κάθε διαδρόμου έχουν διαφορετικά σχήματα. Όλες οι πρώτες ραφιέρες όμως έχουν ίδιο σχήμα μα διαφορετικό μέγεθος, όλες οι δεύτερες –όπου υπάρχουν –το ίδιο κ.ο.κ. Θα το λέω στη Μαρία και δε θα με πιστεύει...
- Άσε τα σχόλια. Έφτασες στον τέταρτο διαδρόμο;
- Τώρα μόλις!
- Κοίτα την 3 ραφιάρα δηλαδή την 4γ. Τι σχήμα έχει;
- Είναι σα μαργαρίτα με πέντε τεράστια ράφια που το καθένα κοιτά και σε διαφορετική κατεύθυνση.!
- Κοίτα στο τρίτο ράφι μετρώντας από κάτω.
- Τίς βρήκα!!
- Μη βιάζεσαι!!.. Πόσες σοκολάτες έχει το ράφι;
- Δύο μόνο! Όλα τα ράφια, έχουν ό,τι έχουν πάνω, μα σε ποσότητα όλα τα ράφια έχουν δύο (2) πράγματα.
- Δεν είναι πράγματα! Λιχουδιές είναι είπαμε !!..Για πες μου τώρα...Προς τα που κοιτά η καθεμία από τις σοκολάτες που βρήκες;
- Η μία προς τα μέσα και η άλλη προς τα μέσα στο ράφι!!
- Πάρε αυτή που κοιτά εσένα!
- Ο-κεί (Αμερικανιά) κλείνω!!

- Όχι ακόμα..Καλή όρεξη!! Δεν θα προλάβουμε να τα πούμε από κοντά. Πες στην ταμιά ότι είναι κερασμένη η σοκολάτα από μένα, και φάτε τη με τη Μαρία στο πλοίο προς Τζια στην υγειά μου..
 - ΟΚ (Αμερικανιά 2)
- Κλικ!!! [το τηλέφωνο κλείνει!!!]

Παρατηρήσαμε πως έδωσα συγκεκριμένες οδηγίες – «συντεταγμένες», ώστε ο μαθητής να βρει το κατάλληλο είδος, άμεσα, μέσα στο (χαστικό αν και πρωτότυπο) ‘εικονικό’ Σούπερ Μάρκετ. Κι όχι μόνο αυτό! Αλλά πήρε και συγκεκριμένο προϊόν, αυτό που «κοίταζε» προς αυτήν. Ας το κρατήσουμε αυτό στο μυαλό μας για λίγο...

Επιστρέφοντας στην κβαντομηχανική τώρα, μετά από αυτό το -όχι μικρό- διάλειμμα...ας κάνουμε μερικές αντιστοιχίσεις:

- Το άτομο είναι το Σούπερ Μάρκετ. (Να θυμηθούμε ότι η λύση της εξίσωσης Σρέντιγκερ δίνει τους τρεις κβαντικούς αριθμούς n, ℓ, m_l).
- Το n αντιστοιχεί στη στιβάδα (βλ.στο διάδρομο),
- το ℓ στην υποστιβάδα (βλ. ραφιέρα -θυμηθείτε ότι οι ραφιέρες τύπου «α» έχουν άλλο σχήμα και αριθμό ραφιών από τις τύπου «β» και αυτές από τις τύπου «γ» κ.ο.κ.)
- και το m_l στο τροχιακό (βλ.στο ράφι -το οποίο μάλιστα έχει το δικό του προσανατολισμό στο χώρο)...

Συνοψίζοντας (Πάλι), λοιπόν, έχουμε:

1^η πληροφορία 2^η πληροφορία

n	⇒ στιβάδα	⇒ διάδρομος
n, ℓ	⇒ υποστιβάδα	⇒ ραφιέρα
n, ℓ, m_l	⇒ τροχιακό	⇒ ράφι
n, ℓ, m_l, m_s	⇒ ηλεκτρόνιο	⇒ σοκολάτα..

Κβαντικοί Αριθμοί

Προέρχονται από λύση εξίσωσης **Schroedinger**: ο οποίος μίλησε για την Κυματοσυνάρτηση.

Ορίζουμε ως

Ηλεκτρονι(α)κό νέφος: σύνολο στιγμών* που δείχνουν τη θέση του e σε κάθε χρονική στιγμή.

Τροχιακό: (Συνάρτηση της οποίας γραφική παράσταση είναι)ο χώρος που μεγάλη πιθανότητα (90-95%) βρίσκεται το e.

i. **n**: Κύριος κβαντικός αριθμός

Στοιβάδες – ενεργειακές στάθμες

K, L, M, N, O, P, Q αντιστοιχούν σε τιμές του

n: 1 2 3 4 5 6 7

Όπου το n εκτιμά:

1. μέση απόσταση από πυρήνα του ηλεκτρονιακού νέφους-"e"
2. ενέργεια $E = -(2,18 \cdot 10^{-18})/n^2$ σε J για το "e" του ατόμου του H
3. "Μέγεθος"τροχιακού
4. αριθμός υποστιβάδων(άρα και τροχιακών)
5. μέγιστο αριθμό e σε στοιβάδα
 $\max e(\text{στιβ}) = 2n^2$

Εφαρμογή: $\max (K) = 2 \cdot n_K^2 = 2 \cdot 1^2 = 2$

$$\max (L) = 2 \cdot 2^2 = 2 \cdot 4 = 8$$

$$\max (M) = 2 \cdot 3^2 = 2 \cdot 9 = 18$$

$$\max (N) = 2 \cdot 4^2 = 2 \cdot 16 = 32$$

***κουκκίδων**

ii. ℓ : Δευτερεύων ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός.

ℓ : $\left\{ \begin{array}{l} \text{Δείχνει την υποστιβάδα (υποφλοιό)} \\ \text{εκτιμά τη διηλεκτρονιακή απώση (απώση μεταξύ των e)} \\ \text{εκτιμά το «σχήμα» του τροχιακού} \end{array} \right.$

Τι τιμές παίρνει;

-Εξαρτάται από την τιμή του n : για κάθε τιμή του n ,

το ℓ : $0, 1, 2, 3, 4, \dots, n-1$.

Υποστιβάδες s^2 p^6 d^{10} f^{14} αντιστοιχούν σε τιμές του

ℓ : 0 1 2 3

Εφαρμογή: Ποιες υποστιβάδες έχει η στοιβάδα L, M, N και η K;

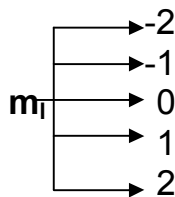
«Τροχιακό»: χώρος στο άτομο όπου μπορούν να βρίσκονται 2 το πολύ e!

Υποστοιβάδες	Αριθμός Τροχιακών
s ²	1
p ⁶	3
d ¹⁰	5
f ¹⁴	7

- iii. m_l : μαγνητικός κβαντικός αριθμός
περιγράφει "προσανατολισμό" τροχιακού

Για κάθε τιμή του ℓ το m_l : $-\ell \dots 0 \dots \ell$

π.χ. υποστιβάδα d η οποία έχει $\ell_d = 2$



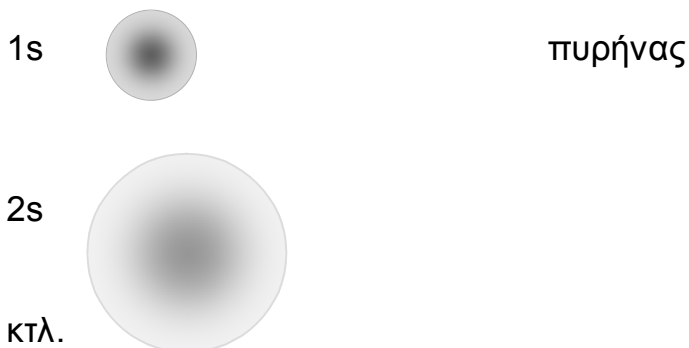
Εφαρμογή: Βρείτε τις τριάδες των τροχιακών της στοιβάδας M.

- iv. m_s : $\pm \frac{1}{2}$ κβ. αρ. του spin
Εκφράζει τη φορά ιδιοπεριστροφής του e!

Εφαρμογή: Βρείτε τις τετράδες των e της στοιβάδας 1.

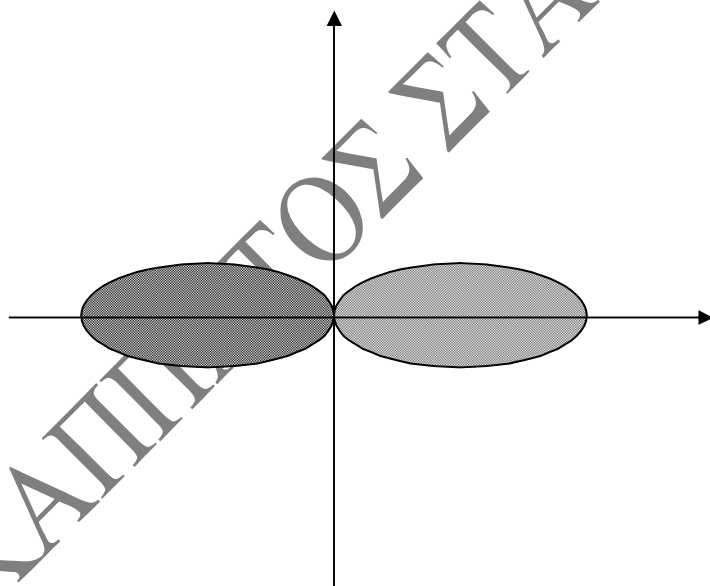
Σχήμα τροχιακών

- Τροχιακό τύπου “s”: σφαιρική συμμετρία



- Τροχιακό τύπου “p”: $\ell(p) = 1$

m_l	→	-1	ρ_ψ
	→	0	ρ_z
	→	1	ρ_x



Σχήμα «διπλού λοβού»! Φανταστείτε 2 μπαλόνια που τα έχουμε δέσει από τη ‘μύτη’ τους και τα τραβάμε ελαφρά.

ΑΡΧΗ ΕΛΑΧΙΣΤΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ

Είναι γεγονός, ότι μπορούμε να συγκρίνουμε ως προς το ύψος πολυκατοικίες μπορούμε όμως να πούμε ότι κάθε όροφος της μιας πολυκατοικίας (Α) αλλά θα είναι ψηλότερα από κάθε όροφο της πολυκατοικίας (Β)?
Η απάντηση είναι σαφώς **όχι!**

Ερώτηση: (δώρο ένα σουφλέ σοκολάτας αν απαντήσετε!):

Έχουμε στο δρόμο εικοσιέξι (26) κατοίκους και η χωρητικότητα των δύο πολυκατοικιών είναι τριάντα (30) κάτοικοι. Από που θα ξεκινήσουμε να τοποθετούμε κατοίκους αν θέλουμε να κουραστούμε λιγότερο; Από τα χαμηλά ή τα ψηλά διαμερίσματα; Και από ποια πολυκατοικία; Η χωρητικότητα κάθε διαμερίσματος είναι 5 κάτοικοι / διαμέρισμα!

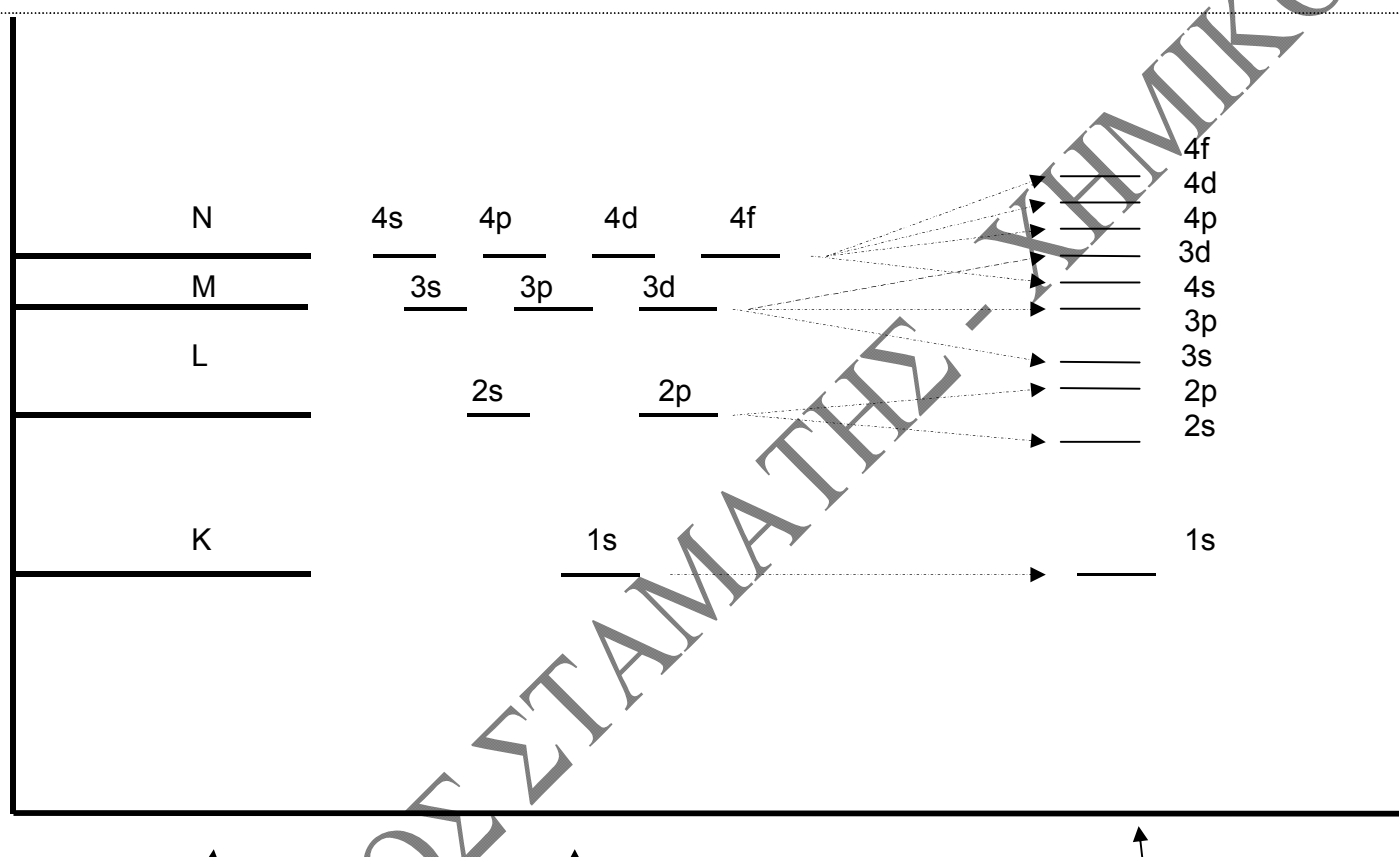
		(B)	
(A)		B4	
A3		B3	
A2		B2	
A1		B1	

Η απάντηση είναι ότι θα ξεκινήσουμε από τα χαμηλά (από το χαμηλότερο διαμέρισμα), γιατί θα ξοδέψουμε λιγότερη (δυναμική λόγω βάρους) ενέργεια, ανεξαρτήτως από το σε ποια πολυκατοικία βρίσκεται κάθε φορά το πιο χαμηλό διαμέρισμα. Έτσι η σειρά πλήρωσης (συμπλήρωσης) των διαμερισμάτων, αν δεχτούμε ότι χωρούν για παράδειγμα πέντε άτομα ανά διαμέρισμα θα είναι πέντε(5) στο A1, πέντε(5) στο B1 ενώ μετά πέντε(5) στο A2, μετά πέντε στο B2, πέντε(5) στο B3, πέντε(5) στο A3 και συνεχίζεται όπως βλέπετε και στο σχήμα, με την ίδια λογική....

Μπορούμε λοιπόν, να συγκρίνουμε στιβάδες, αλλά όχι και υποστιβάδες, μόνο με βάση το σε ποιά στιβάδα, βρίσκονται αυτές. Ξεκινάμε λοιπόν, και συμπληρώνουμε με ηλεκτρόνια, τις υποστιβάδες που βρίσκονται κοντά στον πυρήνα (καθώς τα ηλεκτρόνια έλκονται από αυτόν !) και 'απομακρυνόμαστε'.

Η ενέργεια μιας υποστιβάδας εξαρτάται από το άθροισμα του n (που δείχνει τη μέση απόσταση από τον πυρήνα) και του ℓ (που εκτιμά τη διηλεκτρονική άπωση).

Αν δούμε ένα διάγραμμα ενέργειας (άξονας των 'ψ') των στιβάδων για ένα υδρογονοειδές άτομο (για παράδειγμα ${}^1_1\text{H}$, ${}^2_2\text{He}^{+1}$, ${}^3_3\text{Li}^{+2}$) δηλαδή άτομα με ένα ηλεκτρόνιο γύρω από τον πυρήνα έχουμε τα παρακάτω:



Στιβάδες

Υποστιβάδες για
το άτομο του H και H-ειδή
Άτομα(υπάρχει μόνο 1e άρα
Όχι δι-ηλεκτρονική άπωση)

«Διάσχιση»-δια-
φοροποίηση της E
των υποστιβάδων
σε πολυηλεκτρονια-
κά άτομα, λόγω της
διηλεκτρονικής
άπωσης.

**Θυμηθείτε τα ΣουπερΜάρκετ Καππάτος. Θα πρέπει να περπατήσετε περισσότερο για μια υποστιβάδα 4α απ' ότι μια 1α καθώς είναι μακρύτερα από την είσοδο. Άρα θα δαπανήσετε περισσότερη ενέργεια.(καλά...Το δέχομαι...Δεν είναι και το καλύτερο παράδειγμα..!)

ΚΑΠΠΑΤΟΣ ΣΤΑΜΑΤΗΣ - ΧΗΜΙΚΟΣ

Ηλεκτρονιακή Δόμηση Ατόμων

- Αρχή **Pauli**: Δεν είναι δυνατό στο ίδιο άτομο να υπάρχουν 2 ή περισσότερα e με την ίδια τετράδα κβαντικού αριθμού. Η διαφορετικά... σε κάθε τροχιακό περιέχονται ΤΟ ΠΟΛΥ 2 ηλεκτρόνια με αντιπαράλληλο (αναγκαστικά) spin
- Αρχή **ελάχιστης ενέργειας** : " Τοποθετώ e σε στιβάδες ξεκινώντας από στιβάδες χαμηλής E (κοντά στον πυρήνα – φυσιολογικό..) και συνεχίζοντας προς στιβάδες υψηλότερης E ."

Δραστικό ($\leftrightarrow$ ασταθές) περιέχει υψηλό ποσό E

Αδρανές ($\leftrightarrow$ σταθερό) βρίσκεται σε χαμηλή ενεργειακή στάθμη

Μεταξύ δύο υποστιβάδων χαμηλότερη ενέργεια έχει:

1) εκείνη με το μικρότερο $(n + \ell)$.

2) Αν $(n + \ell)$ είναι το ίδιο για δυο υποστιβάδες, μικρότερη ενέργεια έχει, εκείνη με το μικρότερο n .

π.χ.	n	ℓ	$n + \ell$
2s	2	0	2
3s	3	0	3
2p	2	1	3
3d	3	2	5
4s	4	0	4
5p	5	1	6
6s	6	0	6
4f	4	3	7
3p	3	1	4
4p	4	1	5

δηλ $3d > 4s$

Ετσι έχουμε:

$2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5p < 6s < 4f$

ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΟΠΟΘΕΤΗΣΗΣ ΤΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ ΣΕ ΥΠΟΣΤΙΒΑΔΕΣ

Ένας απλός συμβολικός κανόνας βρέθηκε τυχαία από ένα καθηγητή Λυκείου, καθώς κατασκεύασε, θέλωντας να εξασκήσει τους μαθητές του στη σειρά συμπλήρωσης των υποστιβάδων των στοιχείων, το παρακάτω σχήμα (το γνωστό..«δεντράκι» μας)

*πρέπει να μπορείς να το κατασκευάζεις μόνος σου στο πρόχειρο και να μην το θυμάσαι απ'έξω!

Στιβάδα

K	$1s^2$			
L	$2s^2$	$2p^6$		
M	$3s^2$	$3p^6$	$3d^{10}$	
N	$4s^2$	$4p^6$	$4d^{10}$	$4f^{14}$
O	$5s^2$	$5p^6$	$5d^{10}$	$5f^{14}$
P	$6s^2$	$6p^6$	$6d^{10}$	$6f^{14}$

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

Διαβάζουμε τα βέλη από πάνω προς τα κάτω και από δεξιά προς τ' αριστερά!

ΕΦΑΡΜΟΓΗ

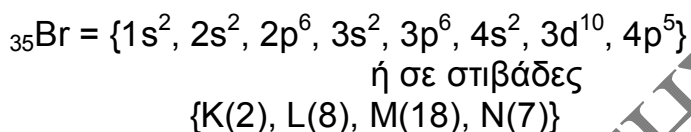
⇒ Βρείτε την ηλεκτρονιακή δομή σε υποστιβάδες στο άτομο ^{20}Ca (σε θεμελιώδη κατάσταση).

* το 20 είναι ο αριθμός p (πυρήνα) = αρ. e (σε ηλ. ουδέτερη κατάσταση για το άτομο του ασβεστίου)

$^{20}\text{Ca} = \{1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2\}$
ή σε στιβάδες
 $\{K(2), L(8), M(8), N(2)\}$

Ο Περιοδικός Πίνακας (Π.Π.) είναι το ανάλογο ενός «χάρτη» γεωγραφίας, ο οποίος περιέχει τα χημικά στοιχεία (φυσικά και τεχνητά). Τα στοιχεία είναι έτσι τοποθετημένα ώστε οι ιδιότητές τους, να είναι περιοδική συνάρτηση του ατομικού τους αριθμού (νόμος της περιοδικότητας). Αποτελείται από τέσσερις τομείς («ηπείρους» όπως θα λέγαμε στο γεωγραφικό χάρτη), που είναι οι s,p,d & f. Πιο συγκεκριμένα από επτά (7) οριζόντιες γραμμές (όσες είναι και οι πιθανές στιβάδες) που λέγονται περίοδοι, και δεκαοχτώ (18) κατακόρυφες στήλες που λέγονται ομάδες. Τα στοιχεία της ίδιας ομάδας έχουν παρόμοιες χημικές ιδιότητες.

Ας πούμε όμως μερικά πράγματα πιο αναλυτικά. Από το «δεντράκι» μας βρίσκουμε την ηλεκτρονι(α)κή (οικο-) **δομήση!** Για παράδειγμα για το ^{35}Br έχουμε:



-Τι πληροφορίες μπορείς να δώσεις για το ^{35}Br ;

Από την τελευταία υποστιβάδα αυτής, βρίσκουμε σε ποιο τομέα του περιοδικού πίνακα βρίσκεται το στοιχείο (δηλαδή το βρώμιο βρίσκεται στον «p» τομέα).

Στη συνέχεια γράφουμε την ηλεκτρονική δομή . Δηλαδή ενώ το Mn (οκο-) δομείται ως εξής :

$$\text{Mn} = \{1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^5\}$$

η ηλεκτρονική **δομή** του είναι :

$$\text{Mn} = \{1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^5, 4s^2\} .$$

Η ηλεκτρονική δομή σε στιβάδες είναι : {K(2), L(8), M(13), N(2)}

Ο αριθμός των στιβάδων, που περιέχουν ηλεκτρόνια, δείχνει σε ποια περίοδο βρίσκεται το στοιχείο (το βρώμιο λοιπόν και το μαγγάνιο βρίσκονται στην τέταρτη ($4^{\text{η}}$) περίοδο.

Οι τομείς “s” και “p” λέγονται **κύριοι** τομείς και περιλαμβάνουν τις Α υπο-ομάδες. Καθώς η “s” υποστιβάδα περιέχει ένα ή δύο ηλεκτρόνια, το πολύ, έτσι έχει και δύο ομάδες: την s^1 και την s^2 . Αντίστοιχα η “p” υποστιβάδα έχει μέχρι έξι ηλεκτρόνια οπότε, περιέχει έξι (6) ομάδες (από p^1 έως και p^6). Αυτές είναι οι κύριες ομάδες και συμβολίζονται με το παλαιό

(Ευρωπαϊκό) σύστημα ως $I_A, II_A, III_A, IV_A, V_A, VI_A, VII_A$ & $VIII_A$. Στο σύγχρονο, δυτικό-ευρωπαϊκό – αμερικανικό σύστημα οι αντίστοιχοι συμβολισμοί είναι $1(I_A), 2(II_A), 13(III_A), 14(IV_A), 15(V_A), 16(VI_A), 17(VII_A), 18(VIII_A)$ για τις προαναφερθείσες ομάδες αντίστοιχα.

Οι τομείς “d” και “f” (δευτερεύοντες), περιέχουν τις B-υποομάδες (δευτερεύουσες).

Πιο συγκεκριμένα, στοιχεία που βρίσκονται στον τομέα “d” λέγονται στοιχεία μετάπτωσης. Βρίσκω τον (αραβικό: 1,2,3...) αριθμό της ομάδας προσθέτοντας τον αριθμό ηλεκτρονίων των δύο τελευταίων υποστιβάδων της δόμησης. (Για παράδειγμα το μαγγάνιο βρίσκεται στην 7η { 5 (της υποστιβάδας d) + 2 (της προηγούμενης στη δόμηση 4s υποστιβάδας) }, ομάδα του περιοδικού πίνακα). [Πράγμα το οποίο δε ζητείται γενικώς για τα στοιχεία μετάπτωσης]. Ο τομέας “d” περιέχει δέκα ομάδες (από d^1 μέχρι d^{10}) και ο τομέας “f” έως δεκατέσσερις (από f^1 μέχρι f^{14}). Ο τομέας f γράφεται συνήθως ‘κάτω’ από τον Π.Π. και τα στοιχεία που τον αποτελούν έχουν - εκπληκτικά - παρόμοιες ιδιότητες.

Η πρώτη σειρά αποτελεί τις Λανθανίδες (όχι λαχανίδες!) και η 2η σειρά τις Ακτινίδες (καμμία σχέση με τα ακτινίδια..Θεέ μου τι ακούμε μέσα σε τάξεις!)

Έτσι για το Βρώμιο μπορούμε συνολικά να πούμε ότι:

- ♦ Βρίσκεται στην 35^η θέση του Π.Π.
- ♦ Βρίσκεται στην 4^η περίοδο (έχει 4 στιβάδες με e)
- ♦ Βρίσκεται στην VII_A υποομάδα (7e στην εξωτερική)
- ♦ Βρίσκεται στον p τομέα του Π.Π.
- ♦ Είναι αμέταλλο.

**Γενικά

-Αν ομάδα>περίοδος= αμέταλλο

-Αν ομάδα<περίοδος= μέταλλο

-Αν ομάδα=περίοδος= μεταλλοειδές ή επαμφοτερίζον **

Εφαρμογή: Δώστε όσο το δυνατόν περισσότερες πληροφορίες για τα : $1H, 19K, 17Cl, 8O, 6C, 56Ba, 53I$

ΚΑΝΟΝΑΣ Hund: Όταν μια στιβάδα είναι όχι πλήρως συμπληρωμένη, τα e τοποθετούνται έτσι ώστε να έχουν το max συνολικό spin (αυτό γίνεται, ημισυμπληρώνοντας αρχικά τη στιβάδα)! Αφού τα ηλεκτρόνια απωθούνται, το καθένα θα καταλάβει το δικό του χώρο (τροχιακό) αν αυτό είναι δυνατόν (έχοντας όλα το ίδιο spin, δηλαδή τη μέγιστη άπωση). Αν όχι τότε καταλαμβάνουν το ίδιο τροχιακό με αντιπαράλληλο spin (λόγω ανάγκης... ώστε η άπωση που προκύπτει από τα ηλεκτρομαγνητικά πεδία λόγω ιδιοπεριστροφής να μειωθεί!). Τα τροχιακά σε μία υποστιβάδα έχουν όλα την ίδια ενέργεια, δηλαδή είναι όπως λέμε εκφυλισμένα (δεν είναι διακριτά από ενεργειακής άποψης) αφού η ενέργεια καθορίζεται από το $n + \ell$, το οποίο καθορίζει με τη σειρά του την ενέργεια μιας υποστιβάδας, άρα και των τροχιακών που αυτή περιλαμβάνει.

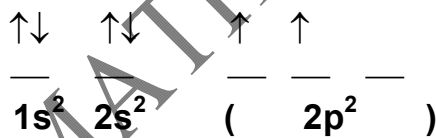
Πχ. Για το άτομο του ${}_6\text{C} = \{1s^2, 2s^2, 2p^2\}$ δομή σε υποστιβάδες

Συμβολισμοί:

— : τροχιακό

↑ : $m_s = +1/2$

↓ : $m_s = -1/2$



Κάνε το ίδιο για το άτομο του ${}_8\text{O} = \{1s^2, 2s^2, 2p^4\}$

****Τελευταία = εξωτερική στιβάδα: μέχρι 8 e ή [2 e αν K]**

Προτελευταία = μέχρι 18 e [ή 2 e αν K, 8 e αν L]**

Ιδιότητες για τα (Μέταλλα) Στοιχεία μετάπτωσης [τομέας d]

Ιδιότητες:

- Σχηματίζουν σύμπλοκα ιόντα και άλατα, π.χ. $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{-4}$
- Οι ενώσεις τους είναι έγχρωμες
- Είναι παραμαγνητικά υλικά – έχουν μαγνητικές ιδιότητες (δηλ. Έχουν μονήρη ηλεκτρόνια)
- Έχουν μεταβλητό Α.Ο., π.χ. Fe^{+2} , Fe^{+3}

****Προσοχή στην ηλεκτρονιακή δόμηση σε υποστιβάδες στα στοιχεία μετάπτωσης και στα ιόντα τους!!!**

Εχω μεγαλύτερη σταθερότητα αν:

$-(n-1)d^5, ns^1$ αντί $(n-1)d^4, ns^2$

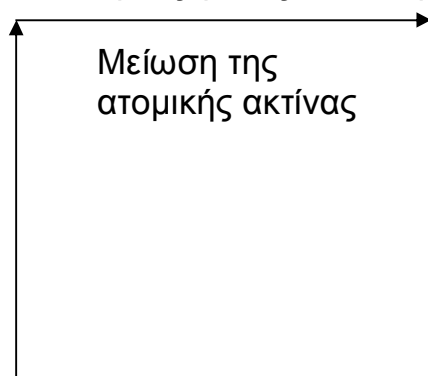
$-(n-1)d^{10}, ns^1$ αντί $(n-1)d^9, ns^2$ δηλ. Προσοχή σε Cr, Cu**

ΚΑΠΠΑΤΟΣ ΣΤΑΜΑΤΗΣ - ΧΗΜΙΚΟΣ

****Π.Π. – περιοδικότητα – ιδιότητες****

1) Ατομική Ακτίνα: εκτιμά το μέγεθος του ατόμου

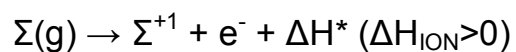
****Ισχύουν κυρίως για τις A υποομάδες.****



I. Όταν «κατεβαίνουμε» σε μια ομάδα «προσθέτουμε» στοιβάδες, άρα απομακρυνόμαστε από τον πυρήνα, άρα αυξάνεται η Ατομική Ακτίνα (χοντρικά η απόσταση πυρήνα και τελευταίας στιβάδας). Το αντίθετο συμβαίνει όταν «ανεβαίνουμε».

II. Στην ίδια περίοδο, «προχωρώντας» από αριστερά προς τα δεξιά στον Π.Π., έχουμε τοποθέτηση e στην ΙΔΙΑ στιβάδα (δηλαδή, χοντρικά στην ίδια περιοχή του χώρου γύρω από τον πυρήνα), αλλά με ταυτόχρονη αύξηση του (δραστικού – βλ. ορισμό βιβλίου) πυρηνικού φορτίου. Αποτέλεσμα είναι η ισχυρότερη έλξη των e αυτής της περιοχής του χώρου, με συνέπεια τη μείωση της Ατομικής Ακτίνας!!!

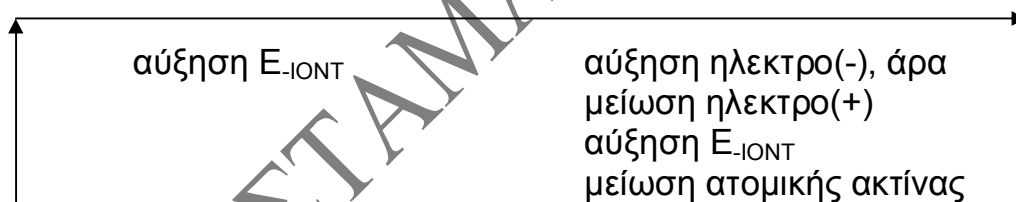
2) Ενέργεια ιοντισμού: σε kJ / mole είναι το ποσό ενέργειας που πρέπει να προσφέρω σε 1 mole ατόμων του στοιχείου σε αέρια κατάσταση ώστε να αποσπαστεί το χαλαρότερα συνδεδεμένο e.



* ΔH είναι η ενέργεια 1^{ου} ιοντισμού!

γενικά: $E_{\beta\text{-IONT}} > E_{\alpha\text{-IONT}}$

Μικρή $E_{\alpha\text{-IONT}} \Rightarrow$ εύκολη απόσπαση $e^{-} \Rightarrow$ ήλεκτρο (+)
στοιχεία [Κυρίως μέταλλα –s τομέας– αλκάλια (ΠΡΟΣΟΧΗ: όχι το He!)].



Ηλεκτρονιακοί Τύποι

ΘΕΩΡΙΑ ΤΟΥ Lewis:

1. Άτομα

- Ηλεκτρο (+): τάση να αποβάλλουν (γενικά να «μην έλκουν») e.
- Ηλεκτρο (-): τάση πρόσληψης (γενικά «έλκουν») e.
- Ευγενή-αδρανή αέρια

2. Μόνο τα e της εξώτατης στοιβάδας (στιβάδα σθένους) παίζουν σημαντικό ή γενικά το βασικότερο ρόλο στο σχηματισμό χημικού δεσμού.

Ενεργειακή σταθερότητα όταν είναι “συμπληρωμένη η εξωτερική στοιβάδα” = “8 e ή 2 στην K” = “δομή ευγενούς αερίου”.

Αιτία δημιουργίας δεσμού!

3. Ετεροπολικός δεσμός – Ιοντικός

Ηλεκτρο (+) Ηλεκτρο (-)
άτομα άτομα
 μεταφορά e



4. Ομοιοπολικός δεσμός Αμοιβαία συνεισφορά e **Μεταξύ ηλεκτρο (-) ατόμων**

5. Μετά το δεσμό: ενεργειακά σταθερότατη κατάσταση (Βασικές αρχές ηλεκτρονιακής θεωρίας του σθένους).

⇒ π.χ-1. Μ.Τ. NH_3 – τύπος Lewis?

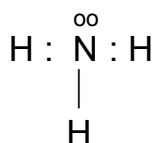
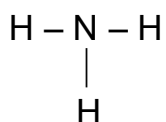
${}_7\text{N} = \{1s^2, 2s^2, 2p^3\} = \{K(2), L(5)\}$ - 5 e σθένους

${}_1\text{H} = \{1s^1\} = \{K(1)\}$

$3 \bullet 1 = 3$ e σθένους



Αρα συνολικά 8"e" σθένους

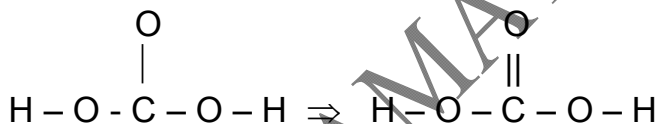


⇒ π.χ-2. Μ.Τ. H_2CO_3 τύπος Lewis?

$${}_1\text{H} = \{\text{K}(1)\} \quad 2 \cdot 1 = 2$$

$${}_6\text{C} = \{\text{K}(2), \text{L}(4)\} \quad 1 \cdot 4 = 4$$

$${}_8\text{O} = \{\text{K}(2), \text{L}(6)\} \quad \frac{3 \cdot 6 = 18}{\text{σύνολο} \quad 24 \text{ e}}$$



Συμπληρώστε τα ηλεκτρόνια που λείπουν στις δύο παραπάνω ηλεκτρονιακές δομές καθώς και ποια ηλεκτρόνια και από ποιο άτομο 'Ο' έγιναν διπλός δεσμός $\text{C}=\text{O}$!!