

Ατομική Δομή και Δεσμοί μεταξύ Ατόμων

Η ατομική δομή και το είδος των δεσμών μεταξύ των ατόμων σχετίζεται με τις ιδιότητες των υλικών.

Κάθε άτομο αποτελείται από ένα πολύ μικρό πυρήνα που περιέχει πρωτόνια και νετρόνια και περιστοιχίζεται από κινούμενα ηλεκτρόνια.

Τόσο τα ηλεκτρόνια όσο και τα πρωτόνια είναι ηλεκτρικά φορτισμένα, με φορτίο 1.60×10^{-19} C το οποίο έχει αρνητικό πρόσημο για τα ηλεκτρόνια και θετικό για τα πρωτόνια.

Τα νετρόνια είναι ηλεκτρικά ουδέτερα.

Οι μάζες αυτών των υποατομικών σωματιδίων είναι απειροελάχιστες. Τα πρωτόνια και τα νετρόνια έχουν περίπου την ίδια μάζα, 1.66×10^{-27} kg, η οποία είναι σημαντικά μεγαλύτερη από εκείνη των ηλεκτρονίων, 9.11×10^{-31} kg.

Κάθε χημικό στοιχείο χαρακτηρίζεται από τον αριθμό των πρωτονίων που περιέχει ο πυρήνας, ή αλλιώς, τον **ατομικό αριθμό (Z)**. Σε ένα ηλεκτρικά ουδέτερο ή συμπληρωμένο άτομο ο ατομικός αριθμός συμπίπτει με τον αριθμό των ηλεκτρονίων. Ο ατομικός αριθμός κυμαίνεται σε ακέραιες μονάδες από το 1 για το υδρογόνο έως το 94 για το πλουτώνιο, τον υψηλότερο ατομικό αριθμό στοιχείου που υπάρχει στη φύση.

Η **ατομική μάζα (A)** ενός συγκεκριμένου ατόμου μπορεί να εκφραστεί ως το άθροισμα των μαζών των πρωτονίων και των νετρονίων του πυρήνα του. Αν και ο αριθμός των πρωτονίων είναι ο ίδιος για όλα τα άτομα ενός δεδομένου στοιχείου, ο αριθμός νετρονίων (N) μπορεί να ποικίλλει. Συνεπώς, άτομα του ίδιου στοιχείου έχουν δύο ή περισσότερες διαφορετικές μάζες και ονομάζονται **ισότοπα**.

Το **ατομικό βάρος** ενός στοιχείου αντιστοιχεί στο σταθμισμένο μέσο όρο των ατομικών μαζών των ισοτόπων που υπάρχουν στη φύση. Η **μονάδα ατομικής μάζας** (atomic mass unit, **amu**) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για υπολογισμούς του ατομικού βάρους. Έχει καθιερωθεί μία κλίμακα όπου μία amu ορίζεται ως το 1/12 της ατομικής μάζας του κοινότερου ισοτόπου του άνθρακα 12 (^{12}C) ($A = 12.000000$). Μέσα στα πλαίσια αυτού του ορισμού, οι μάζες των πρωτονίων και νετρονίων είναι ελαφρά μεγαλύτερες της μονάδας και ισχύει ότι

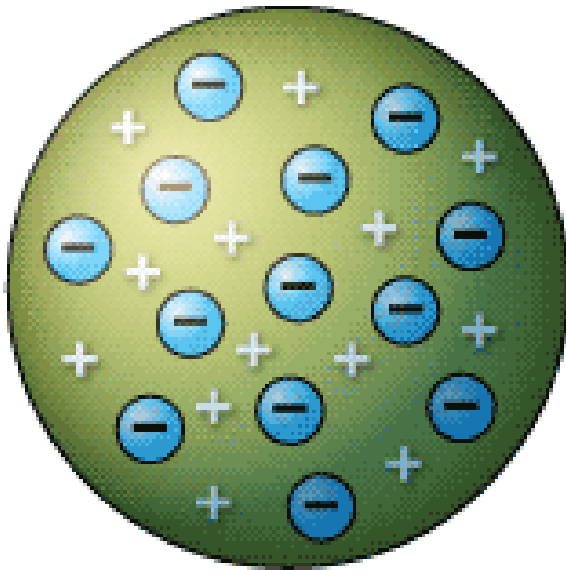
$$A \cong Z + N$$

Σε ένα **mole** μιας ουσίας περιέχονται $6,023 \times 10^{23}$ (αριθμός Avogadro) άτομα ή μόρια.

Άτομα και Ηλεκτρόνια-Ατομικά Πρότυπα

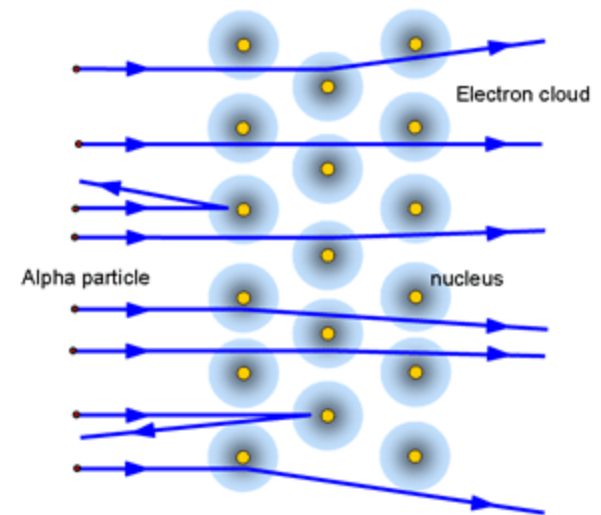
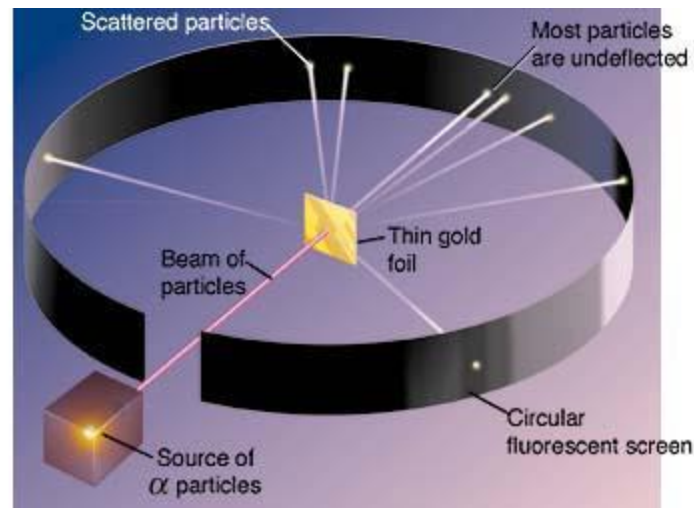
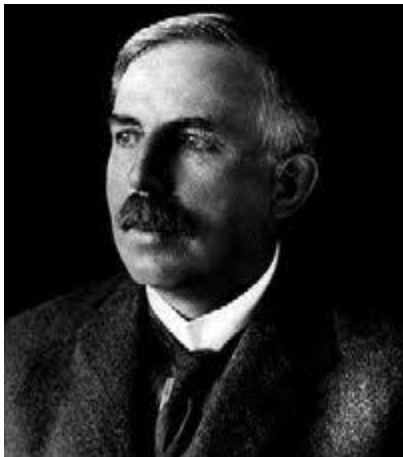
Το πρότυπο του Thomson:

Σύμφωνα με αυτό το θετικό φορτίο ηλεκτρικό φορτίο του ατόμου είναι ομοιόμορφα κατανεμημένο μέσα σε μία ιδεατή σφαίρα ακτίνας 10^{-8}cm και τα ηλεκτρόνια είναι διεσπαρμένα μέσα στο θετικό ηλεκτρικό νέφος και βρίσκονται σε θέσεις ευσταθούς ισορροπίας (ελάχιστη τιμή της ολικής ενέργειας του συστήματος).



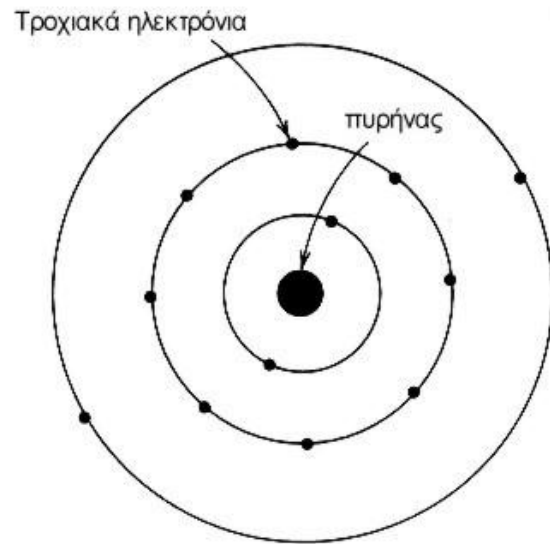
Το πρότυπο του Rutherford:

Σύμφωνα με αυτό ένα άτομο συνίσταται από ένα ισχυρό κεντρικό πυρήνα που είναι φορτισμένος θετικά και έχει μάζα. Η μάζα και το ποσό του φορτίου εξαρτώνται από το είδος του ατόμου. Ο πυρήνας εκτείνεται σε απόσταση περίπου 10^{-13} cm και περιβάλλεται από ηλεκτρόνια που κινούνται σε τροχιές γύρω από αυτόν.



Το πρότυπο του Bohr:

Σύμφωνα με το απλοποιημένο **ατομικό πρότυπο του Bohr** τα ηλεκτρόνια θεωρούνται ότι περιστρέφονται γύρω από τον πυρήνα σε διακριτές τροχιές, ενώ η θέση κάποιου συγκεκριμένου ηλεκτρονίου είναι λίγο ή πολύ καλά καθορισμένη σε συνάρτηση με την τροχιά του.



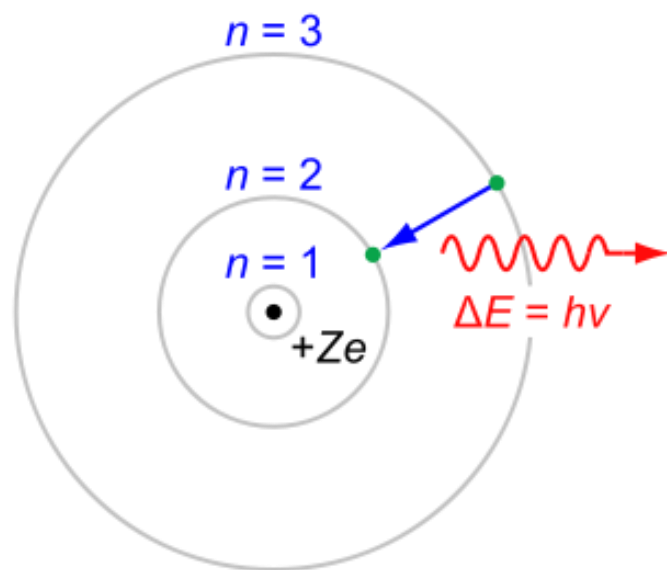
Παραδοχές του προτύπου του Bohr:

1. Ένα ηλεκτρόνιο σε ένα άτομο κινείται σε ορισμένες επιτρεπτές κυκλικές τροχιές γύρω από τον πυρήνα με ορισμένη επιτρεπτή τιμή ολικής ενέργειας.
2. Οι επιτρεπτές τροχιές του ηλεκτρονίου, για τις οποίες η ενέργειά του παραμένει σταθερή, είναι εκείνες για τις οποίες η στροφορμή του ηλεκτρονίου είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της σταθεράς h και ονομάζονται στάσιμες τροχιές.
3. Ηλεκτρομαγνητική ενέργεια εκπέμπεται ή απορροφάται μόνον όταν η κινητική κατάσταση του ηλεκτρονίου μεταβάλλεται μεταβαίνοντας από μία επιτρεπτή στάσιμη τροχιά σε άλλη. Η συχνότητα της ακτινοβολίας (ν) ισούται με την διαφορά των ολικών ενεργειών διαιρεμένη δια της σταθεράς του Planck.

Μία σημαντική αρχή της κβαντομηχανικής προϋποθέτει ότι οι ενέργειες των ηλεκτρονίων είναι κβαντισμένες.

Τα ηλεκτρόνια, δηλαδή, επιτρέπεται να έχουν μόνο ορισμένες τιμές ενέργειας. Ένα ηλεκτρόνιο μπορεί να αλλάξει ενέργεια αλλά για να γίνει αυτό πρέπει να μεταπηδήσει κβαντικά είτε σε μία υψηλότερη επιτρεπόμενη ενέργεια (απορροφώντας ενέργεια) είτε σε μία χαμηλότερη (εκπέμποντας ενέργεια).

Είναι συχνά ευκολότερο να θεωρεί κανείς αυτές τις επιτρεπόμενες ηλεκτρονιακές ενέργειες ότι σχετίζονται με *ενεργειακά επίπεδα ή καταστάσεις*. Οι καταστάσεις αυτές δεν μεταβάλλονται με συνεχή τρόπο συναρτήσει της ενέργειας. Δηλαδή, οι γειτονικές στιβάδες χωρίζονται μεταξύ τους με πεπερασμένες ενέργειες.



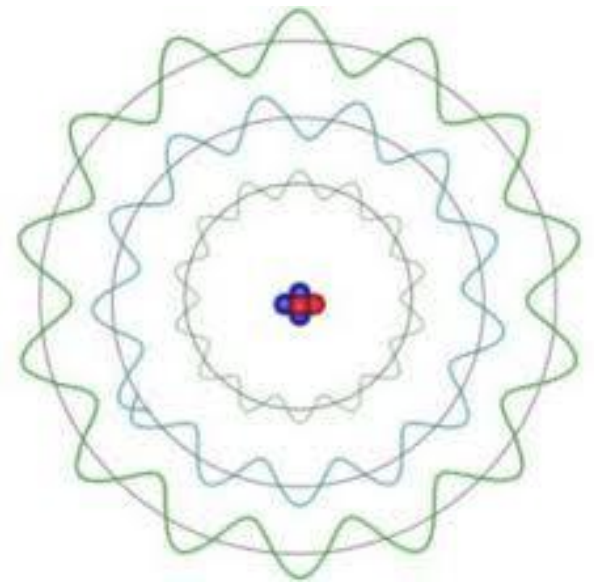
Τελικά διαπιστώθηκε ότι το πρότυπο του Bohr είχε κάποιους σημαντικούς περιορισμούς εξαιτίας της αδυναμίας του να εξηγήσει αρκετά φαινόμενα σχετιζόμενα με ηλεκτρόνια.

Μία λύση προσφέρθηκε από το **πρότυπο της κυματομηχανικής** κατά το οποίο το ηλεκτρόνιο εμφανίζει χαρακτηριστικά κύματος, αλλά και σωματιδίου. Σύμφωνα με αυτό το πρότυπο το ηλεκτρόνιο δεν αντιμετωπίζεται πλέον ως σωματίδιο κινούμενο σε διακριτό τροχιακό, αλλά αντίθετα, η θέση του περιγράφεται από την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε διάφορες περιοχές γύρω από τον πυρήνα. Με άλλα λόγια, η ηλεκτρονιακή θέση περιγράφεται ως η κατανομή πιθανότητας ή ως ηλεκτρονιακό νέφος.

Louis DeBroglie



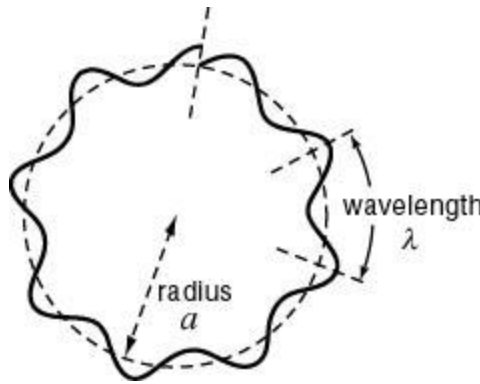
$$\lambda = \frac{h}{mv}$$



Πως κατανέμονται (διευθετούνται) τα ηλεκτρόνια σε ένα άτομο;

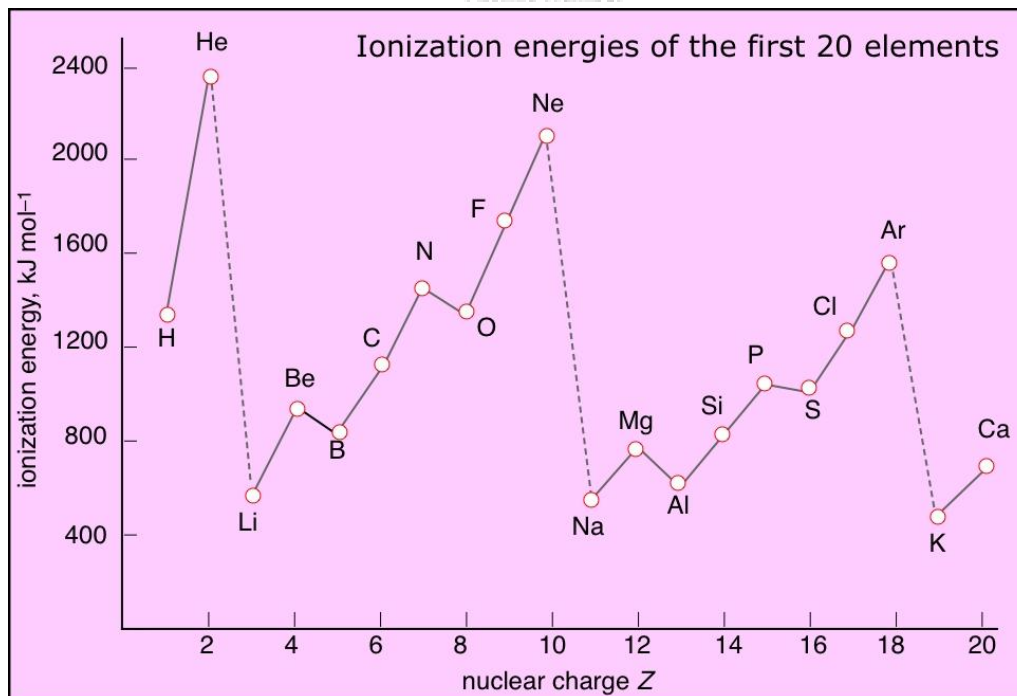
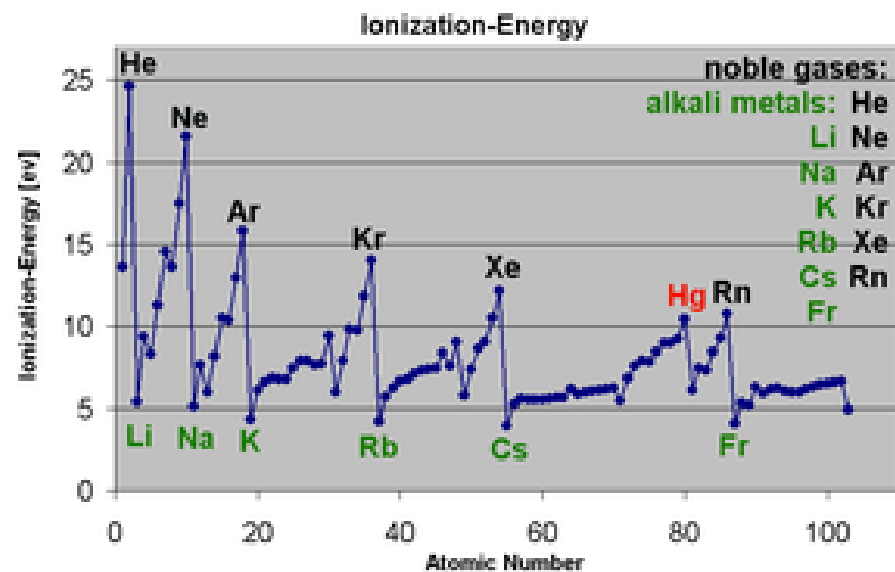
Τα ηλεκτρόνια διευθετούνται σε μία σειρά από στιβάδες και υποστιβάδες, κάθε μία από τις οποίες χαρακτηρίζεται από ορισμένη τιμή ενέργειας, ενώ υφίστανται συγκεκριμένοι περιορισμοί στον αριθμό των ηλεκτρονίων που επιτρέπονται σε κάθε υποστιβάδα.

Η ενέργεια ιονισμού είναι το ποσό της ενέργειας που απαιτείται για να απομακρυνθεί ένα ηλεκτρόνιο από ένα άτομο, οπότε το άτομο μετατρέπεται σε θετικό ιόν.



Το άτομο του Υδρογόνου

Μεταβολή της Ενέργειας Ιονισμού με τον Ατομικό Αριθμό



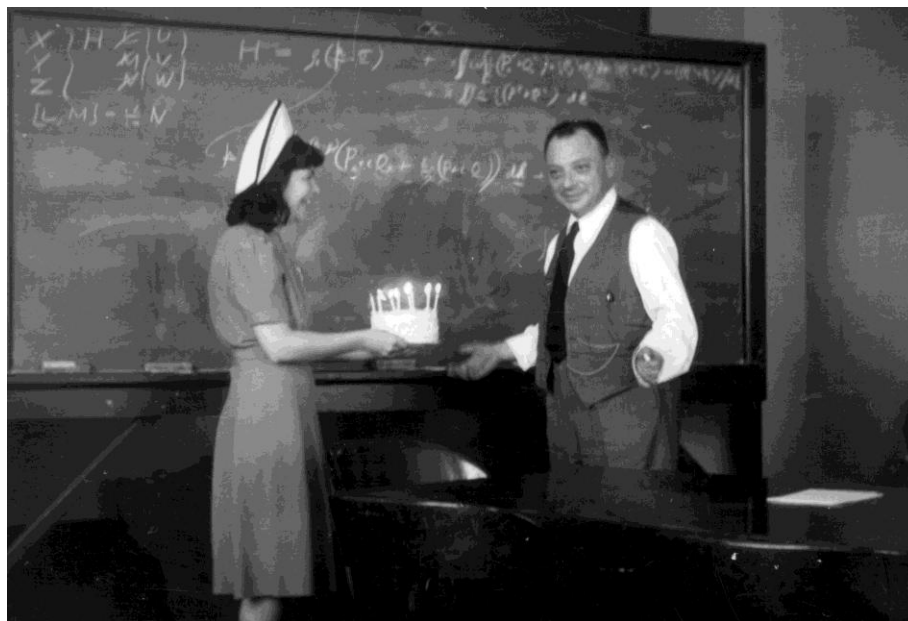
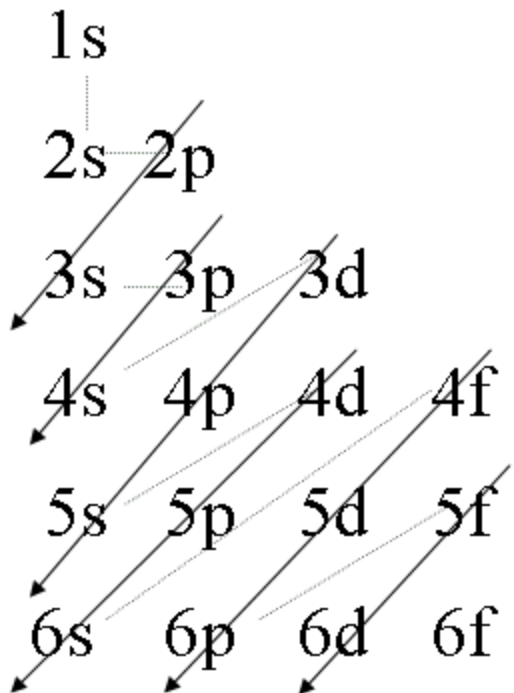
Κβαντικοί Αριθμοί

- ο κύριος κβαντικός αριθμός (n), παίρνει τιμές από 1 έως το ∞
- ο δευτερεύων κβαντικός αριθμός (l) ή τροχιακός κβαντικός αριθμός, παίρνει τιμές από το 0 έως το $n-1$
- ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός της τροχιακής στροφορμής (m_l) ή μαγνητικός τροχιακός κβαντικός αριθμός, παίρνει τιμές από $-l$ έως $+l$
- ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός του σπιν (m_s), παίρνει τις τιμές $-1/2$ $+1/2$.

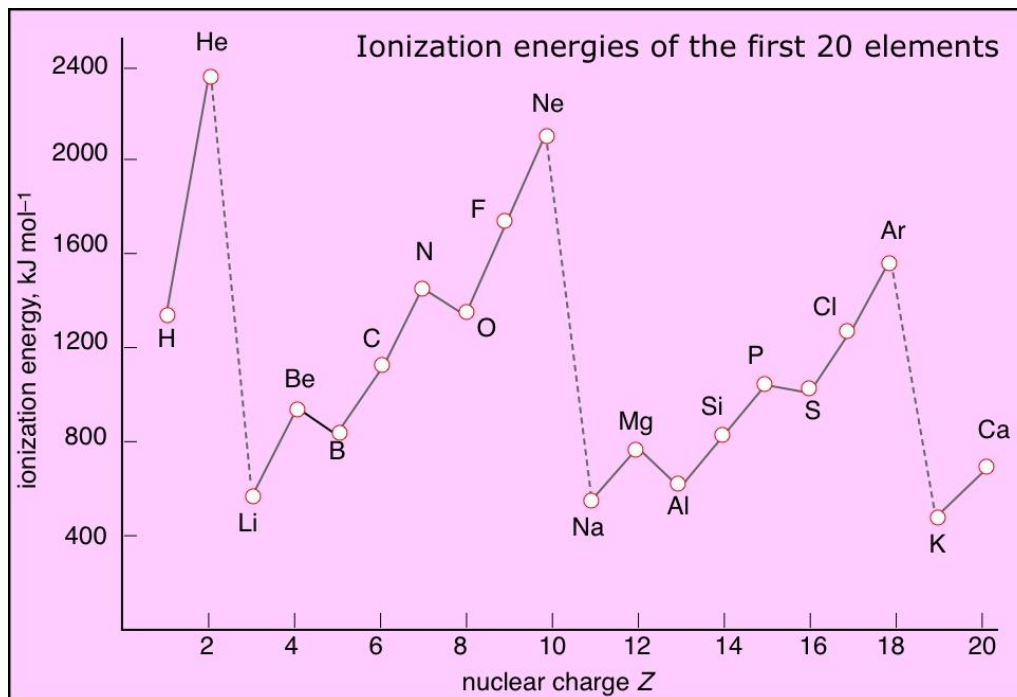
Η Απαγορευτική Αρχή του Pauli

Σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή κάθε ηλεκτρόνιο σε ένα άτομο πρέπει να έχει (χαρακτηρίζεται από) ένα διαφορετικό σύνολο κβαντικών αριθμών.

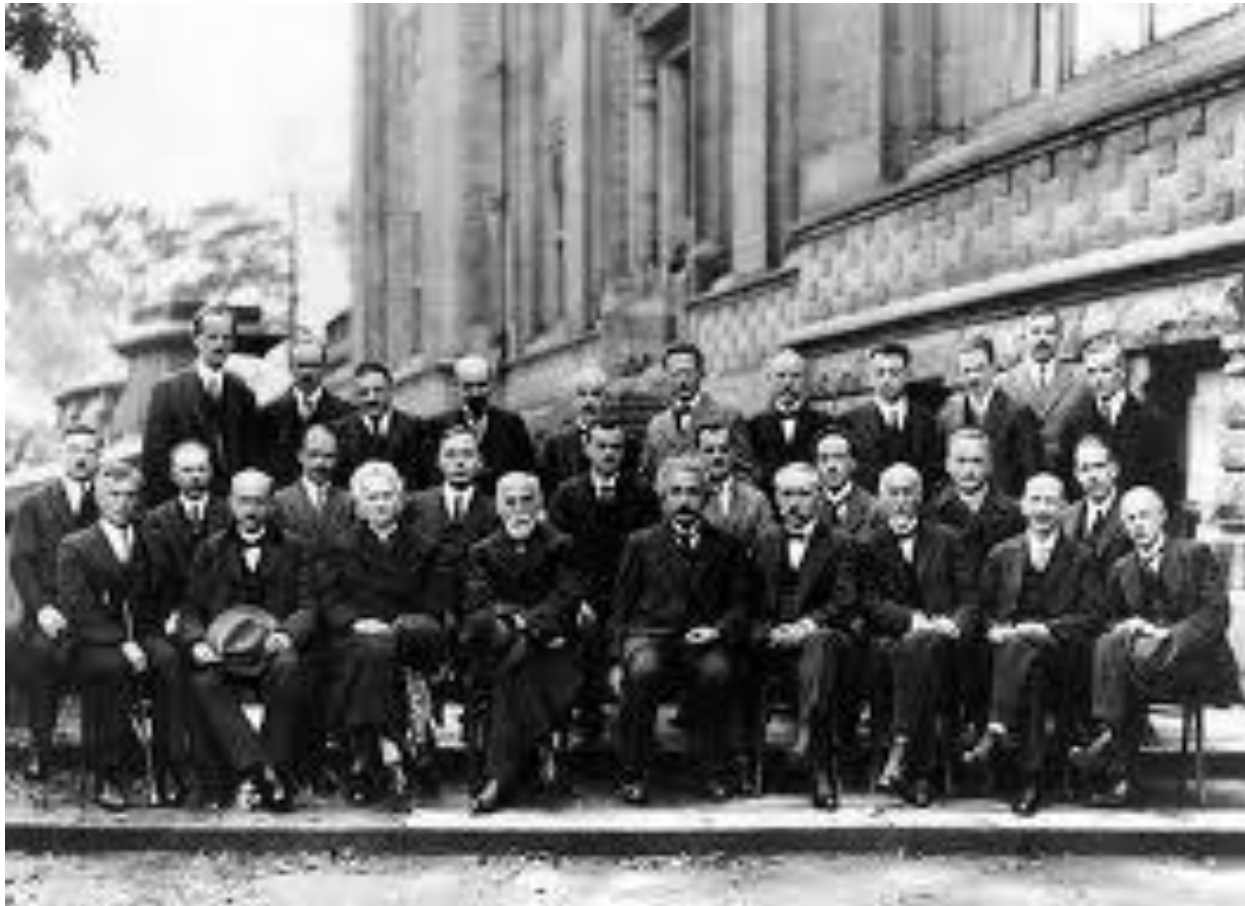
Τα ηλεκτρόνια συμπληρώνουν τα τροχιακά με την ελάχιστη ενέργεια (αρχή Aufblau).



n	l	m _l	m _s	Συνολικός αριθμός ηλεκτρονίων
1 (K)	0	0	-1/2	2
			+1/2	
	0	0	-1/2	
			+1/2	
		-1	-1/2	
2 (L)	1		+1/2	
		0	-1/2	8
			+1/2	
		+1	-1/2	
			+1/2	



Το άτομο του Ηλίου έχει δύο ηλεκτρόνια, δηλαδή συμπληρωμένη την πρώτη στιβάδα. Το άτομο του Λιθίου έχει τρία ηλεκτρόνια, το τρίτο ηλεκτρόνιο βρίσκεται στην δεύτερη στιβάδα. Το ποσό της ενέργειας που απαιτείται για να αφαιρεθεί ένα ηλεκτρόνιο από εξωτερική στιβάδα είναι σημαντικά χαμηλότερο από το αντίστοιχο ποσό από εσωτερική στιβάδα. Κι αυτό για δύο λόγους: (α) η απόσταση από τον πυρήνα μειώνει την δύναμη αλληλεπίδραση και (β) τα ηλεκτρόνια των εσωτερικών στιβάδων «ακυρώνουν» ένα μέρος του φορτίου του πυρήνα.



Το συνέδριο του Solvay 1927