

Σειρά Ασκήσεων 3: Κβαντικοί αριθμοί – Ηλεκτρονιακή δομή πολυηλεκτρονιακών ατόμων

1. Εξηγήστε γιατί δεν υπάρχουν τροχιακά $2d$ και $3f$.

Λύση

Γνωρίζουμε ότι η τιμή του κβαντικού αριθμού της στροφορμή l μπορεί να πάρει τιμές από 0 έως $n - 1$, όπου n η τιμή του κύριο κβαντικού αριθμού. Συνεπώς, όταν $n = 2$, η μέγιστη τιμή που μπορεί να λάβει ο $l = 2 - 1 = 1$.

Επομένως για την περίπτωση $n = 2$, οι μόνες επιτρεπόμενες τιμές του l είναι 0 ή 1. Αυτές αντιστοιχούν στα τροχιακά $2s$ ($n = 2, l = 0$) και $2p$ ($n = 2, l = 1$).

Για να υπήρχαν $2d$ τροχιακά θα έπρεπε ο l να μπορεί λάβει και την τιμή 2, που είναι αδύνατο όταν $n = 2$.

Με παρόμοια λογική δεν μπορούμε να έχουμε $3f$ τροχιακά. Η μέγιστη τιμή του l για $n = 3$ είναι $l = 3 - 1 = 2$. Για να υπήρχαν $3f$ τροχιακά θα έπρεπε ο l να μπορεί να πάρει τιμή $l = 3$ που είναι αδύνατο για $n = 3$.

2. Να καταγράψτε όλες τις επιτρεπόμενες τιμές των κβαντικών αριθμών l και m_l για τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού $n=5$ και να δώσετε τις ονομασίες των αντίστοιχων τροχιακών.

Λύση

Η τιμή του κβαντικού αριθμού της στροφορμή l μπορεί να πάρει τιμές από 0 έως $n - 1$, όπου n η τιμή του κύριο κβαντικού αριθμού. Συνεπώς, όταν $n = 5$, η μέγιστη τιμή που μπορεί να λάβει ο $l = 5 - 1 = 4$ και οι επιτρεπόμενες τιμές του είναι: 0, 1, 2, 3, 4.

Ο μαγνητικός κβαντικός m_l αριθμός μπορεί να πάρει τιμές από $-l$ έως $+l$. Συνεπώς, οι τιμές του για $n = 5$ θα είναι από -4 έως 4, δηλαδή $\{-4, -3 \dots 0 \dots +3, +4\}$

Με βάση αυτές τις σχέσεις, οι τιμές μπορεί να λάβει ο l και ο m_l για $n = 5$ και τα αντίστοιχα τροχιακά φαίνονται στον παρακάτω πίνακα.

(n)	(l)	(m_l)	Τροχιακό	Αριθμός τροχιακών
5	0	0	($5s$)	1
	1	+1, 0, -1	($5p$)	3
	2	+2, +1, 0, -1, -2	($5d$)	5
	3	+3, +2, +1, 0, -1, -2, -3	($5f$)	7
	4	+4, +3, +2, +1, 0, -1, -2, -3, -4	($5g$)	9

3. Ποιοι από τους ακόλουθους συνδυασμούς κβαντικών αριθμών (n, l, m_l, m_s) δεν επιτρέπονται για ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται δεσμευμένο σε ένα άτομο.

$$(4, 2, 2, +\frac{1}{2}) \quad (4, 1, 0, -\frac{1}{2}) \quad (4, 2, 3, +\frac{1}{2})$$

Λύση

Για κάθε συνδυασμό πρέπει να εξετάσουμε αν οι τιμές των n, l, m_l και spin βρίσκονται εντός των επιτρεπόμενων τιμών.

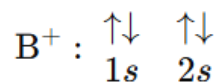
Ξεκινώντας αντίστροφα, ο αριθμός του spin και στους τρεις συνδυασμούς είναι εντός των επιτρεπόμενων τιμών για το ηλεκτρόνιο, δηλαδή είτε $+\frac{1}{2}$, είτε $-\frac{1}{2}$.

Όλοι οι συνδυασμοί έχουν τιμή κύριου κβαντικού αριθμού $n = 4$. Αντίστοιχα, οι επιτρεπόμενες τιμές του l είναι 0, 1, 2, 3. Συνεπώς, όλοι οι συνδυασμοί έχουν επιτρεπόμενους συνδυασμούς n και l .

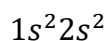
- Για τον πρώτο συνδυασμό, επειδή $l = 2$, ο m_l παίρνει τιμές $\{-2 \dots 0 \dots +2\}$. Άρα ο πρώτος συνδυασμός επιτρέπεται για ένα ηλεκτρόνιο.
 - Για τον δεύτερο συνδυασμό, επειδή $l = 1$, ο m_l παίρνει τιμές $\{-1, 0, +1\}$. Άρα και ο δεύτερος συνδυασμός επιτρέπεται για ένα ηλεκτρόνιο.
 - Για τον τρίτο συνδυασμό, επειδή $l = 2$, ο m_l παίρνει τιμές $\{-2 \dots 0 \dots +2\}$. Η τιμή $m_l = 3$, δεν επιτρέπεται. Συνεπώς, ο τρίτος συνδυασμός κβαντικών αριθμών είναι αδύνατος για ένα ηλεκτρόνιο.
4. Η ηλεκτρονιακή δομή των ιόντων στη θεμελιώδη κατάσταση μπορεί να περιγραφεί ακριβώς όπως και των ατόμων. Γράψτε την ηλεκτρονική δομή των ιόντων B^+ και F^- .

Λύση

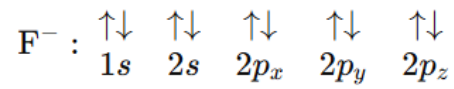
Ένα ουδέτερο άτομο B έχει πέντε ηλεκτρόνια ($Z = 5$), ενώ το ιόν B^+ έχει ένα ηλεκτρόνιο λιγότερο από το ουδέτερο άτομο. Επομένως, το ιόν B^+ έχει τέσσερα (4) ηλεκτρόνια. Η θεμελιώδης ηλεκτρονιακή κατάσταση προκύπτει τοποθετώντας δύο από αυτά τα ηλεκτρόνια στο τροχιακό $1s$ και δύο στο τροχιακό $2s$:



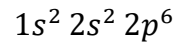
ή συνοπτικά:



Με παρόμοια συλλογιστική, ένα ουδέτερο άτομο F έχει εννέα ηλεκτρόνια ($Z=9$) και συνεπώς το ιόν F^- θα έχει ένα επιπλέον, δηλαδή 10 ηλεκτρόνια. Η αντίστοιχη θεμελιώδης ηλεκτρονιακή του κατάσταση θα είναι:



ή συνοπτικά:



Έτσι, το F^- έχει την ίδια ηλεκτρονιακή δομή με το ευγενές αέριο Ne.