

Κβαντομηχανική ή κυματομηχανική

Κβαντομηχανική ή κυματομηχανική: ο κλάδος της Φυσικής που περιγράφει μαθηματικά τις κυματικές ιδιότητες των στοιχειωδών σωματιδίων.

Η κβαντομηχανική, ένα από τα σημαντικότερα επιτεύγματα του 20ου αιώνα, στηρίχθηκε κυρίως στις ιδέες των:

- De Broglie (Εξίσωση του de Broglie) $\lambda = \frac{h}{mv}$
Τα ηλεκτρόνια, μπορούν να συμπεριφέρονται ως κύματα
- Heisenberg (Αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg) και
- Schrödinger (Κυματική εξίσωση του Schrödinger)

Κβαντομηχανική: Η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg

Πώς μπορεί να είναι ορισμένη η «θέση» ενός κύματος;
Μπορούμε να καθορίσουμε την ακριβή θέση ενός κύματος, αφού ένα κύμα απλώνεται στο χώρο;



Werner Heisenberg
(1901-1976) N.P. 1932

Τι λέει η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg:

Είναι αδύνατο να γνωρίζουμε ταυτόχρονα και με ακρίβεια τη θέση x και την ορμή p ($= mu$) ενός τόσο μικρού σωματιδίου, όπως είναι το ηλεκτρόνιο.

Πώς διατυπώνεται η αρχή της αβεβαιότητας μαθηματικά;

$$(\Delta x)(m\Delta v) \geq \frac{h}{4\pi}$$

$\Delta x, \Delta v$ = αβεβαιότητες ως προς τη θέση και την ταχύτητα, αντίστοιχα

Κβαντομηχανική: Η εξίσωση του Schrödinger

Η εξίσωση του Schrödinger είναι, μια πολύπλοκη διαφορική εξίσωση η οποία εμπεριέχει τη **μάζα m** του ηλεκτρονίου (σωματιδιακός χαρακτήρας) και μια **κυματική συνάρτηση ψ** (κυματικός χαρακτήρας).

Δηλαδή, μια εξίσωση που ενσωματώνει το σωματιδιακό και τον κυματικό χαρακτήρα του ηλεκτρονίου.

Το ηλεκτρόνιο ως κύμα δεν διαδίδεται στο χώρο (όπως π.χ. ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα) αλλά είναι **στάσιμο**, δηλαδή περιορισμένο στο άτομο.

Άτομο H (ηλεκτρόνιο): οι επιτρεπτές μορφές των στάσιμων ηλεκτρονικών κυμάτων περιγράφονται από την εξίσωση του Schrödinger.

Ο Schrödinger και η εξίσωσή του

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi = E\Psi$$

$$\nabla = \text{τελεστής Laplace} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

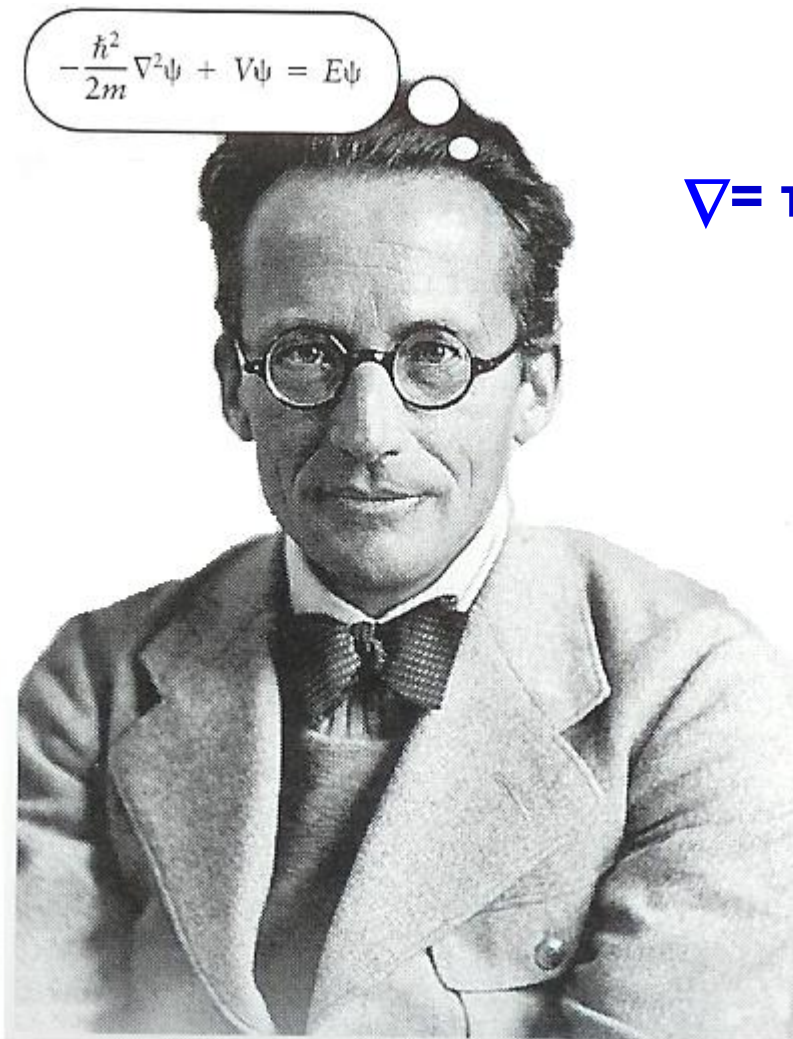
Γνωστά μεγέθη: m και V (μάζα και δυναμική ενέργεια e)

Άγνωστα που μπορούν να προσδιορισθούν:

Ψ και E (ολική ενέργεια e)

Από τις **άπειρες λύσεις Ψ** , μόνο μερικές έχουν φυσική σημασία και θεωρούνται παραδεκτές \Rightarrow **ορισμένες οι τιμές της E .**

Ακριβείς λύσεις μόνο για το H και τα υδρογονοειδή ιόντα (δηλ. He^+ , Li^{2+}) !!!



Erwin Schrödinger (1887-1961)
Αυστριακός, Ν.Ρ. 1933 στη Φυσική

Το τετράγωνο της κυματικής συνάρτησης, Ψ^2

Πώς ονομάζονται οι αποδεκτές λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger;

Κυματικές συναρτήσεις Ψ ή ατομικά τροχιακά.

Ποια σημασία έχει η κυματική συνάρτηση Ψ ;

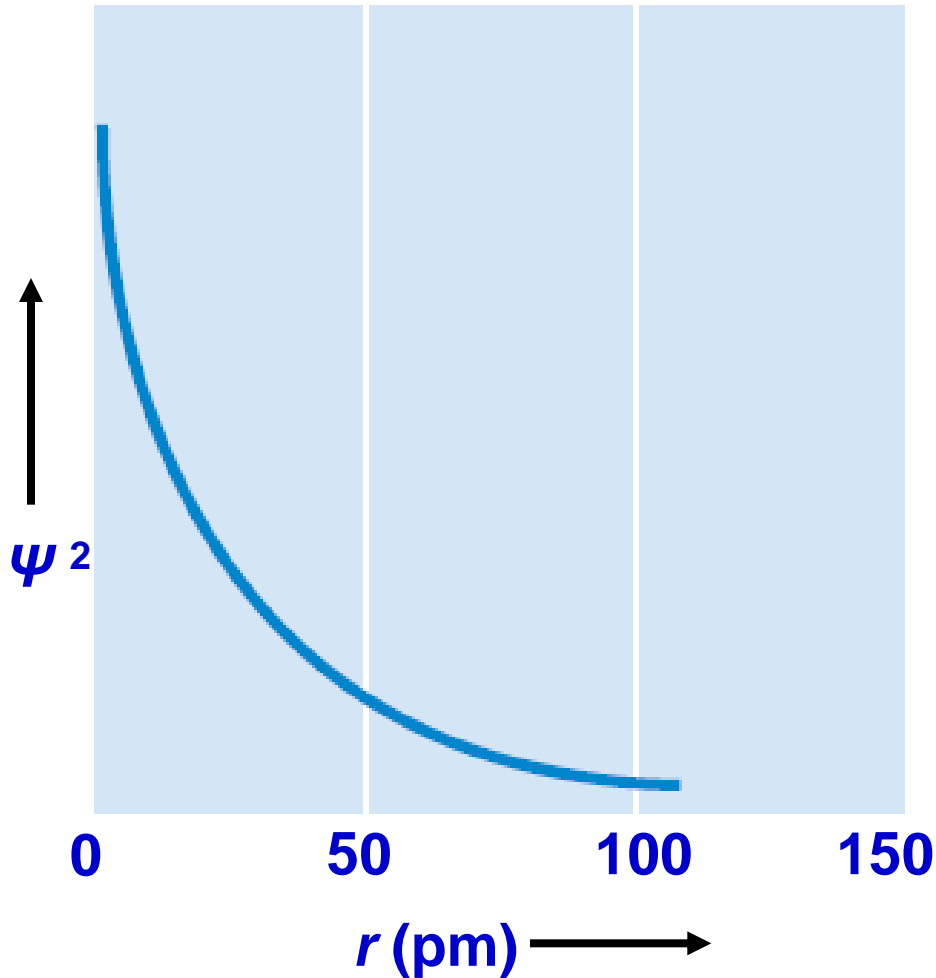
Η κυματική συνάρτηση Ψ δεν έχει καμία φυσική σημασία!

Όμως:

(α) Θεωρώντας το e ως κύμα: το Ψ^2 δίνει την ηλεκτρονική πυκνότητα στα διάφορα σημεία γύρω από τον πυρήνα του ατόμου.

(β) Θεωρώντας το e ως σωματίδιο: το Ψ^2 είναι ανάλογο της πιθανότητας εύρεσης του e σε κάποιο συγκεκριμένο σημείο του ατόμου.

Ένα άτομο δεν έχει καθορισμένα όρια !

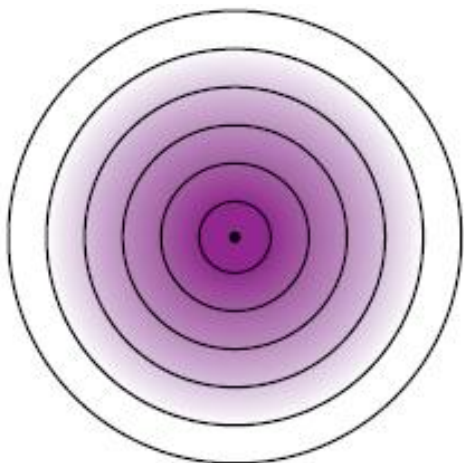


Γραφική παράσταση του ψ^2
για το χαμηλότερο ενεργειακό
επίπεδο του ατόμου H

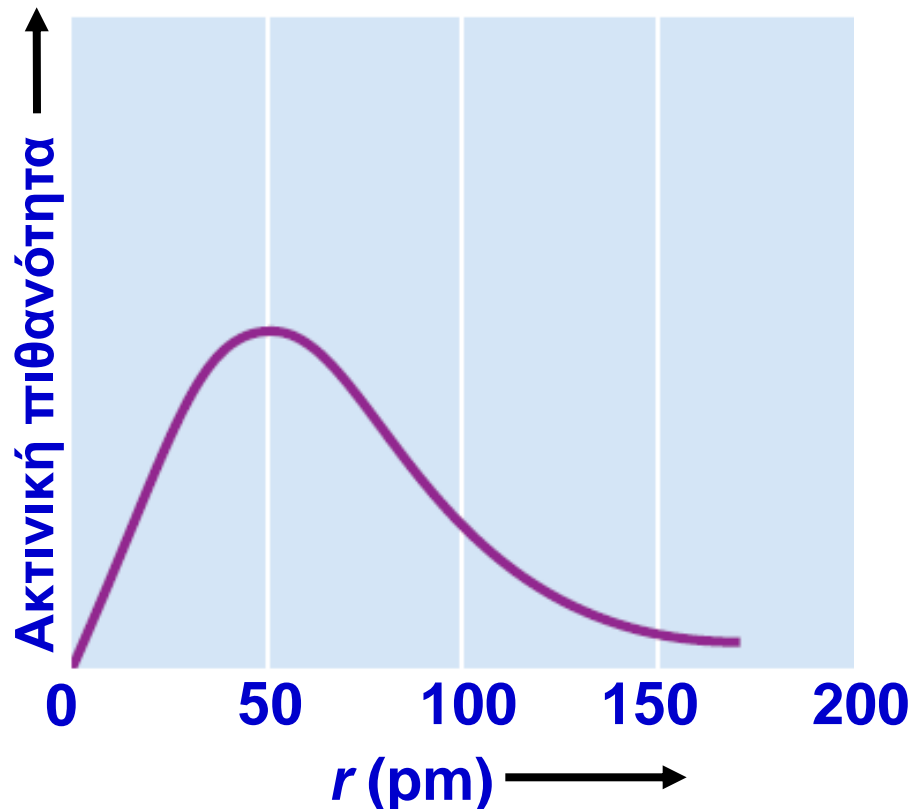
Η τιμή του ψ^2 ελαττώνεται
γρήγορα καθώς η απόσταση r
από τον πυρήνα μεγαλώνει,
όμως το ψ^2 δεν γίνεται ποτέ
μηδέν, παρόλο που η
πιθανότητα γίνεται εξαιρετικά
μικρή σε μεγάλες αποστάσεις
από τον πυρήνα.

➤ Αυτό σημαίνει ότι ένα
άτομο δεν έχει καθορισμένα
όρια, αντίθετα με το ατομικό
μοντέλο του Bohr.

Πιθανότητα εύρεσης ενός ηλεκτρονίου σε σφαιρικό φλοιό γύρω από τον πυρήνα



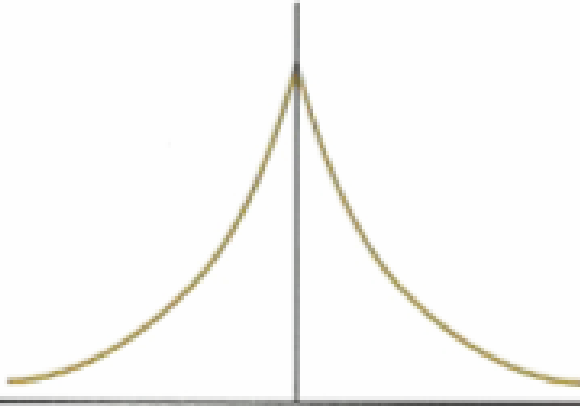
Η περιοχή γύρω από τον πυρήνα χωρισμένη σε φλοιούς (πυκνότητα πιθανότητας).



- Η γραφική παράσταση δείχνει την πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου μέσα σε φλοιούς που απέχουν διάφορες αποστάσεις από τον πυρήνα (ακτινική πιθανότητα). Η καμπύλη παρουσιάζει ένα μέγιστο, το οποίο σημαίνει ότι η ακτινική πιθανότητα είναι μέγιστη για μια δεδομένη απόσταση από τον πυρήνα.

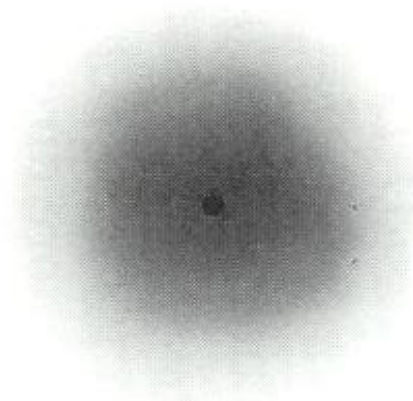
Τρεις τρόποι παρουσίασης του Ψ^2 για το απλούστερο τροχιακό $1s$

Ψ^2



r Απόσταση από τον πυρήνα

Η ηλεκτρονική πυκνότητα είναι μέγιστη σε σημεία πλησίον του πυρήνα



Το ηλεκτρονικό νέφος είναι πολύ πυκνό κοντά στον πυρήνα και αραιό μακριά από αυτόν.



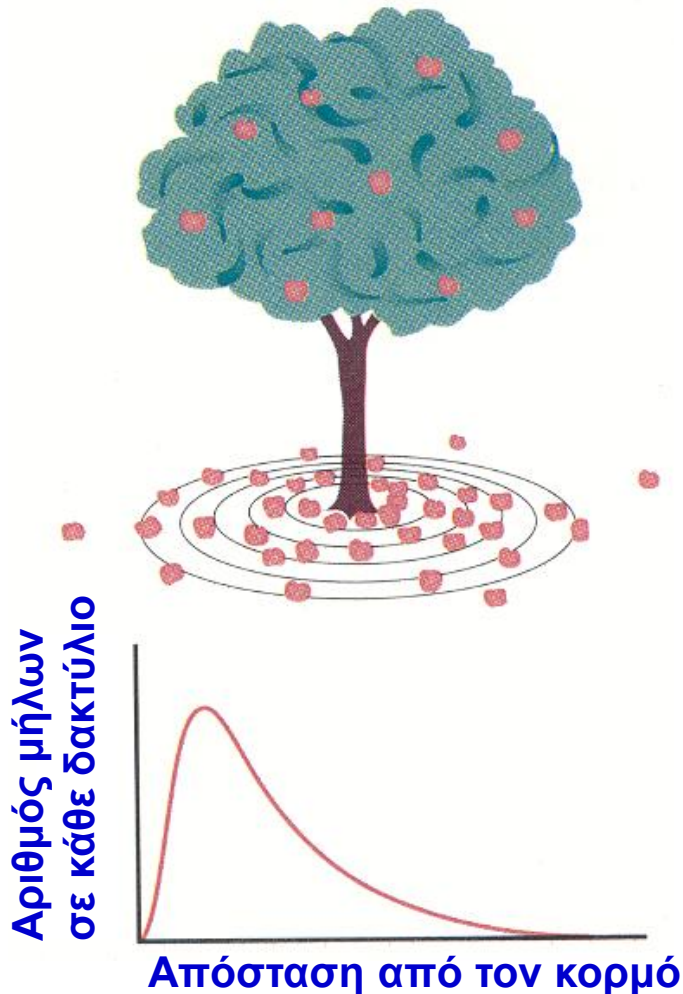
Στο χώρο που περικλείεται από μια οριακή επιφάνεια η πιθανότητα εύρεσης του e είναι περίπου 90%.

Η ηλεκτρονική πυκνότητα για το 1s τροχιακό είναι μέγιστη στον πυρήνα.

.... Αυτό σημαίνει ότι πιθανόν το ηλεκτρόνιο βρίσκεται **πάνω** στον ίδιο τον πυρήνα;

Η πυκνότητα των μήλων είναι μεν μέγιστη στον πρώτο δακτύλιο, όμως το εμβαδόν του δεύτερου δακτυλίου είναι μεγαλύτερο και έτσι αυτός περιέχει **συνολικά περισσότερα** μήλα.

Σε αναλογία, το ηλεκτρονικό νέφος μπορεί να είναι πυκνότερο στον πυρήνα, όμως το **μεγαλύτερο μέρος** του νέφους βρίσκεται σε κάποια απόσταση από αυτόν.



Κβαντικοί αριθμοί

Κβαντικοί αριθμοί (Κ.Α.): τέσσερις διαφορετικοί αριθμοί οι οποίοι, σύμφωνα με την Κβαντομηχανική, απαιτούνται για την περιγραφή κάθε e σε ένα άτομο.

Οι τρεις από αυτούς (οι n , l και m_l) προκύπτουν από τη μαθηματική επίλυση της εξίσωσης του Schrödinger. (άμεση συνέπεια απαιτήσεων που ικανοποιούν κάθε παραδεκτή λύση της εξίσωσης για H)

👉 Πώς χαρακτηρίζονται οι Κ.Α.;

① Κύριος κβαντικός αριθμός (n)

② Δευτερεύων (ή αζιμουθιακός) κβαντικός αριθμός (l)

③ Μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l)

④ Κβαντικός αριθμός του spin (m_s) .

(Η ύπαρξη του spin του ηλεκτρονίου διαπιστώθηκε το 1921 με το περίφημο πείραμα των Otto Stern και Walter Gerlach)

Ποια είναι η σημασία των Κ.Α.

① Κύριος κβαντικός αριθμός (n)

- Επιτρεπτές τιμές: $1, 2, 3, \dots - \infty$
- Καθορίζει την **ενέργεια** του e και το **μέγεθος** του τροχιακού.
- Φλοιός ή στιβάδα: τροχιακά με τον ίδιο n .

② Δευτερεύων (ή αζιμουθιακός) κβαντικός αριθμός (ℓ)

- Επιτρεπτές τιμές: $0, 1, 2, \dots - (n - 1)$
- Καθορίζει το **σχήμα** του τροχιακού.
- (Υποφλοιός ή υποστιβάδα): τροχιακά με τον ίδιο ℓ .
- Χαρακτηρισμός υποφλοιών:

τιμή του ℓ : $0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$
χαρακτηρισμός υποφλοιού : s, p, d, f, g, h, \dots

③ Μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_ℓ)

- Επιτρεπτές τιμές: από $-\ell$ έως $+\ell$
- Καθορίζει τον **προσανατολισμό** του τροχιακού στο χώρο.

④ Κβαντικός αριθμός του spin (m_s)

- Δίνει τους δύο δυνατούς **προσανατολισμούς** του άξονα **αυτοστροφής** (spin) ενός ηλεκτρονίου.
- Επιτρεπτές τιμές: $+1/2$ και $-1/2$

Επιτρεπτές τιμές κβαντικών αριθμών και ατομικά τροχιακά

n	ℓ	Υποφλοιός	m	Αριθμός τροχιακών σε έναν υποφλοιό	Συνολικός αριθμός τροχιακών σε έναν φλοιό
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	
2	1	2p	-1, 0, +1	3	4
3	0	3s	0	1	
3	1	3p	-1, 0, +1	3	
3	2	3d	-2, -1, 0, +1, +2	5	9
4	0	4s	0	1	
4	1	4p	-1, 0, +1	3	
4	2	4d	-2, -1, 0, +1, +2	5	
4	3	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7	16

Άσκηση 7.5α

Σχέση μεταξύ των τιμών των κβαντικών αριθμών

Εξακριβώστε ποιες από τις παρακάτω τριάδες κβαντικών αριθμών θα ήταν επιτρεπτές και ποιες όχι για ένα ηλεκτρόνιο ατόμου.

(α) $n = 0, \ell = 0, m_\ell = 0$ (β) $n = 1, \ell = 1, m_\ell = 0$

(γ) $n = 1, \ell = 0, m_\ell = 0$ (δ) $n = 2, \ell = 1, m_\ell = -1$

Άσκηση 7.7

Εφαρμογή των κανόνων για τους κβαντικούς αριθμούς

Εξηγήστε γιατί καθεμιά από τις παρακάτω τετράδες κβαντικών αριθμών δεν είναι επιτρεπτή για ένα τροχιακό.

(α) $n = 0,$ $\ell = 1,$ $m_\ell = 0,$ $m_s = +1/2$

(β) $n = 2,$ $\ell = 3,$ $m_\ell = 0,$ $m_s = -1/2$

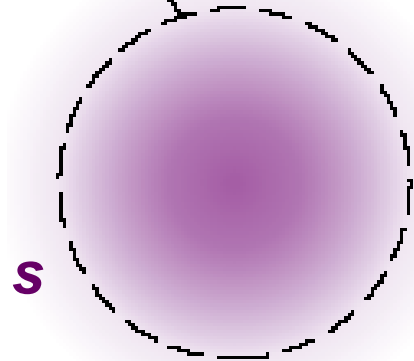
(γ) $n = 3,$ $\ell = 2,$ $m_\ell = +3,$ $m_s = +1/2$

(δ) $n = 3,$ $\ell = 2,$ $m_\ell = +2,$ $m_s = 0$

Τα σχήματα των ατομικών τροχιακών

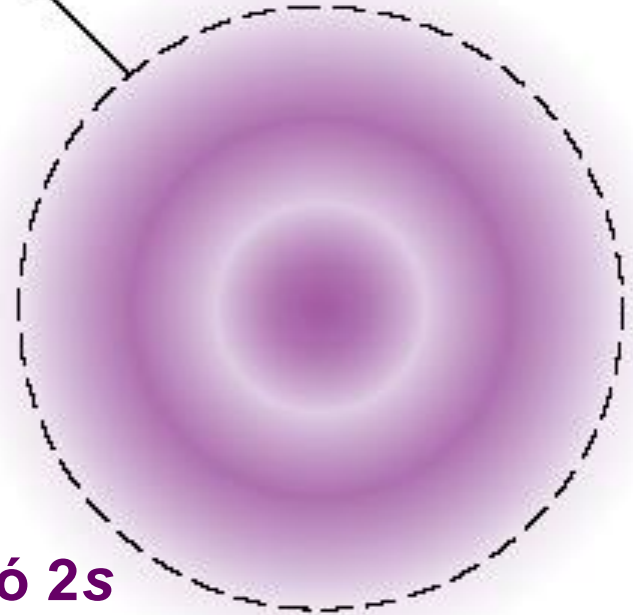
Διατομές της κατανομής ηλεκτρονικής πιθανότητας για s τροχιακά

Περίγραμμα
99%



Τροχιακό $1s$

Περίγραμμα
99%



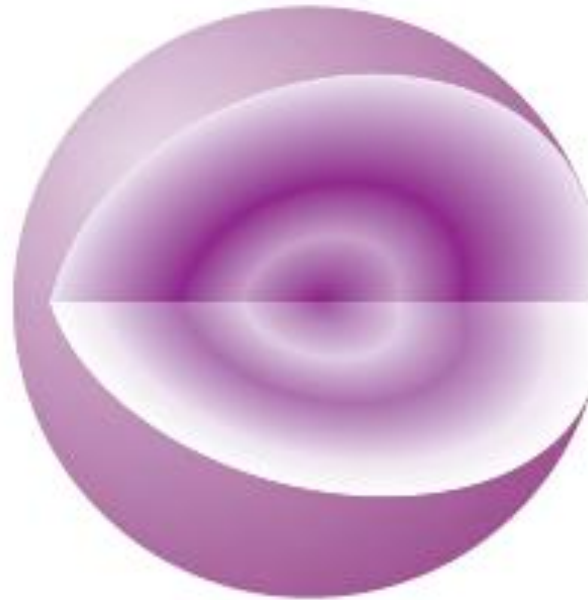
Τροχιακό $2s$

Σε ένα τροχιακό $1s$ η κατανομή ηλεκτρονικής πιθανότητα είναι μέγιστη κοντά στον πυρήνα. Σε ένα τροχιακό $2s$, η εν λόγω κατανομή είναι μέγιστη σε έναν σφαιρικό φλοιό γύρω από τον πυρήνα. Επιπλέον, στο $2s$ υπάρχει και περιοχή μηδενικής πιθανότητας (λευκός κύκλος). Παρατηρούμε το σχετικό "μέγεθος" των τροχιακών, το οποίο οριοθετείται από τα περιγράμματα 99%.

Διαγράμματα αποκοπής που δείχνουν το σφαιρικό σχήμα των τροχιακών s



τροχιακό $1s$



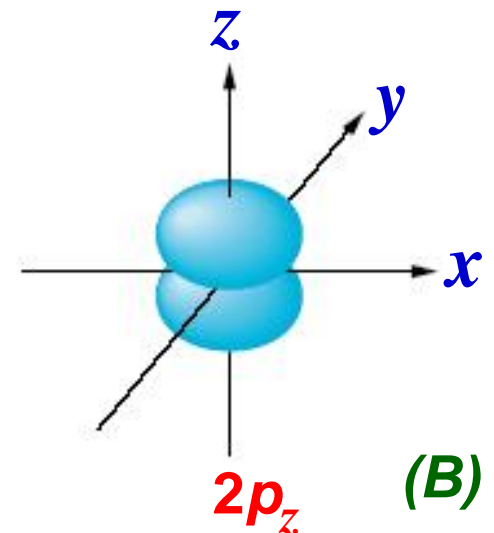
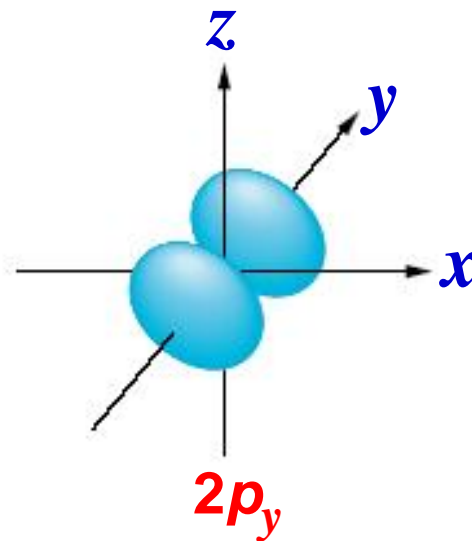
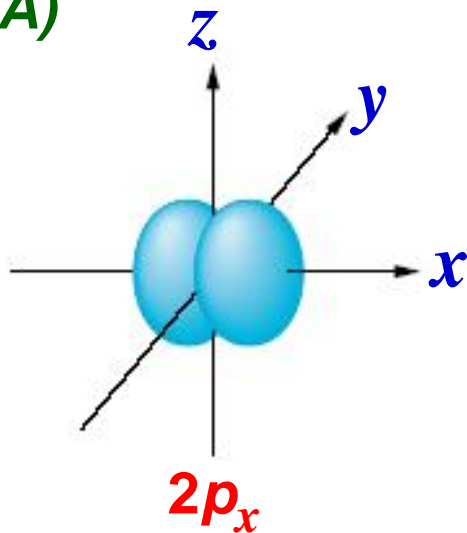
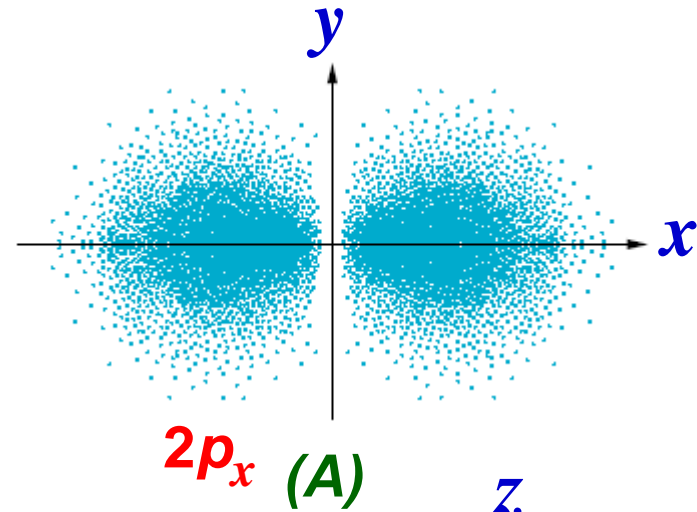
τροχιακό $2s$

Τόσο από τη μία όσο και από την άλλη σφαίρα, οι οποίες παριστάνουν τα τροχιακά $1s$ και $2s$, έχει αποκοπεί ένα τμήμα για να αποκαλυφθεί η ηλεκτρονική κατανομή του καθενός τροχιακού στο χώρο.

Τα τροχιακά $2p$

(A) Ηλεκτρονική κατανομή στο τροχιακό $2p_x$

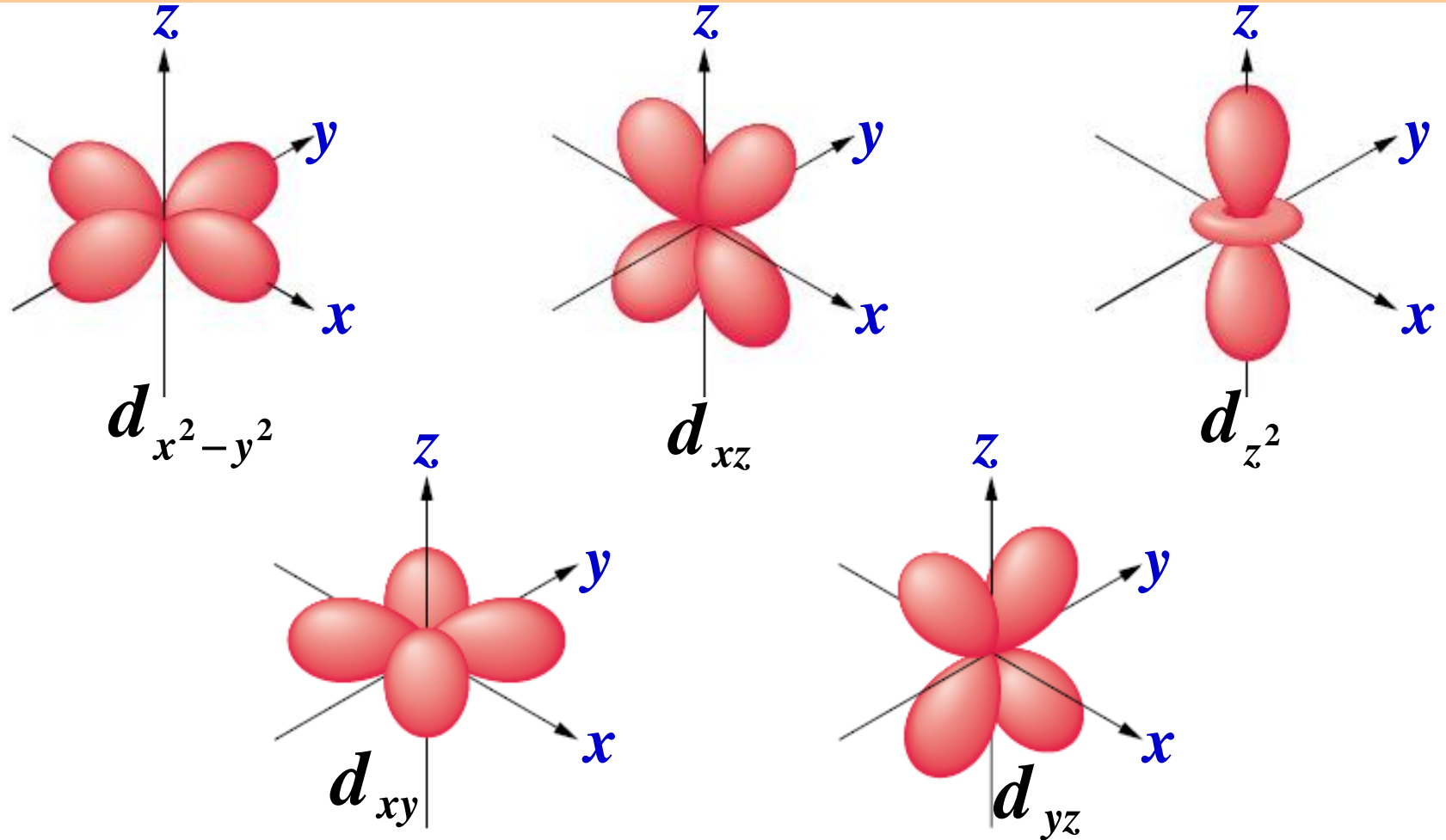
Η κατανομή αυτή αποτελείται από δύο λοβούς προσανατολισμένους κατά μήκος του άξονα x .



(B) Προσανατολισμοί των τριών τροχιακών $2p$

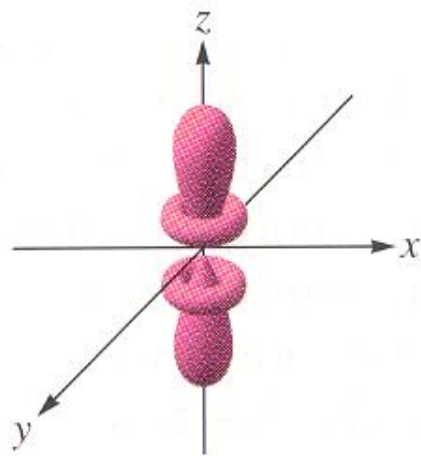
Τα σχήματα δίνουν τη γενική εικόνα και τον προσανατολισμό των τροχιακών, όχι όμως τη λεπτομερή ηλεκτρονική κατανομή που δίνει το (A).

Τα πέντε τροχιακά 3d

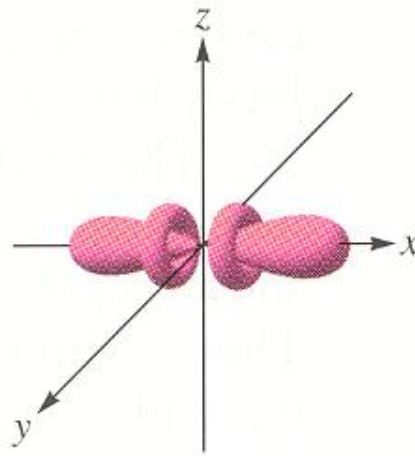


Οι χαρακτηρισμοί xy , xz , yz ... των d τροχιακών σχετίζονται με τις τιμές του κβαντικού αριθμού m_ℓ . Το τροχιακό d_{z^2} , παρόλο που δείχνει διαφορετικό, είναι ισοδύναμο με τα υπόλοιπα d τροχιακά. Τα τροχιακά $4d$, $5d$, ... έχουν παρόμοια σχήματα.

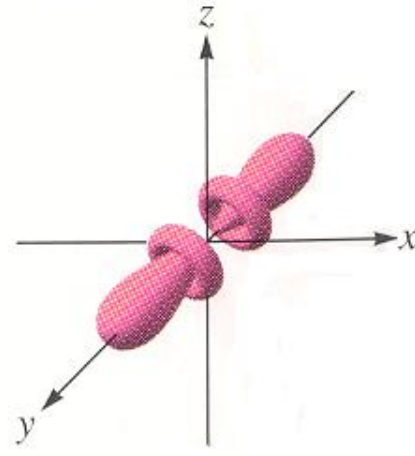
Τα επτά τροχιακά $4f$



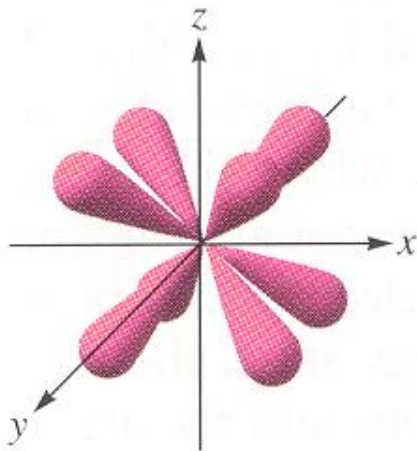
$$f_{z^3 - \frac{3}{5}zr^2}$$



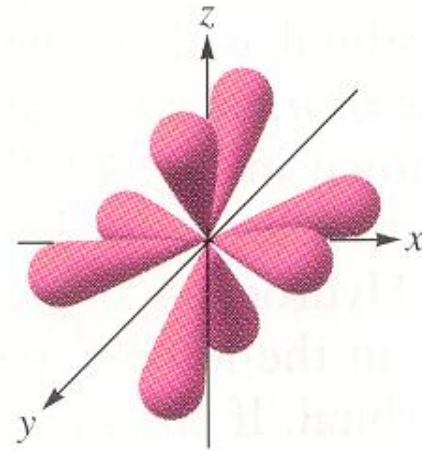
$$f_{x^3 - \frac{3}{5}xr^2}$$



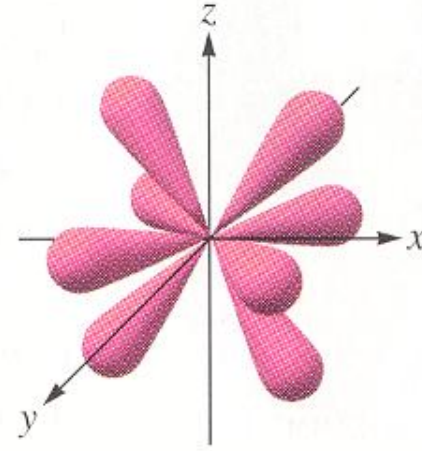
$$f_{y^3 - \frac{3}{5}yr^2}$$



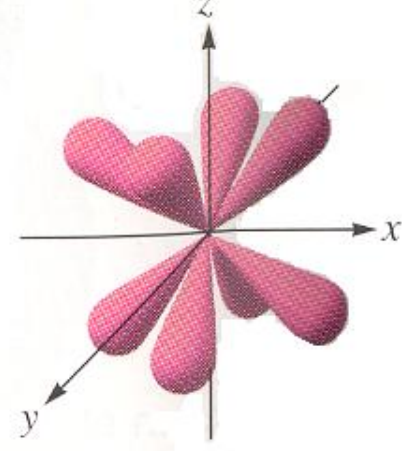
$$f_{xyz}$$



$$f_{y(x^2 - z^2)}$$



$$f_{x(z^2 - y^2)}$$



$$f_{z(x^2 - y^2)}$$

Άσκηση 7.5α

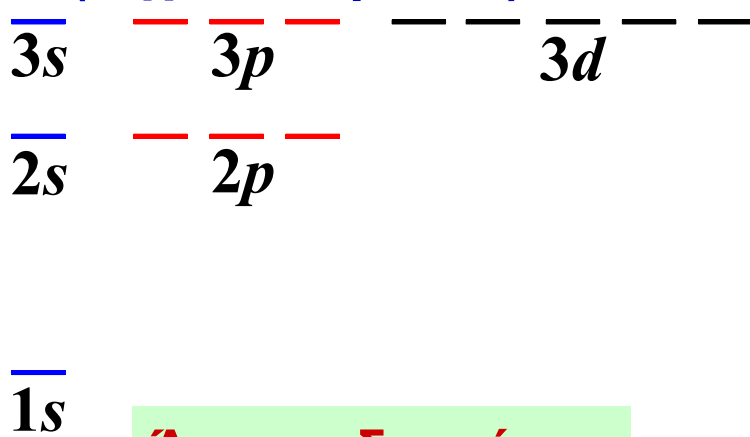
Συσχέτιση χαρακτηρισμού τροχιακών με κβαντικούς αριθμούς

- (α) Πώς χαρακτηρίζεται το τροχιακό με τους κβαντικούς αριθμούς $n = 4$, $\ell = 2$ και $m_\ell = 0$;
- (β) Ποιοι είναι οι τρεις κβαντικοί αριθμοί που αντιστοιχούν στο τροχιακό $5p$;
- (γ) Πόσα τροχιακά έχουν τις τιμές $n = 5$ και $\ell = 2$;

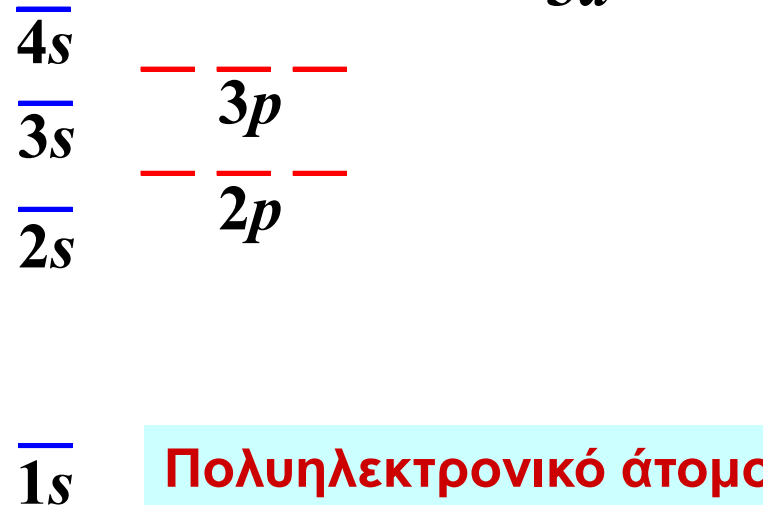
Πολυηλεκτρονικά άτομα

- Πώς αυξάνονται οι ενέργειες των τροχιακών στο άτομο H;
Η ενέργεια του ηλεκτρονίου στο άτομο H εξαρτάται μόνο από τον $n \Rightarrow 1s < 2s = 2p < 3s = 3p = 3d < 4s \dots$ (τροχιακά ενεργειακώς εκφυλισμένα)
- Τι ισχύει για τα πολυηλεκτρονικά άτομα;
Εδώ η ενέργεια ενός ηλεκτρονίου εξαρτάται όχι μόνο από τον n , αλλά και από τον $\ell \Rightarrow$ διαχωρισμός των επιπέδων ενέργειας των υποφλοιών καθενός φλοιού = άρση εκφυλισμού (π.χ. $3s < 3p < 3d$)

Ενέργεια



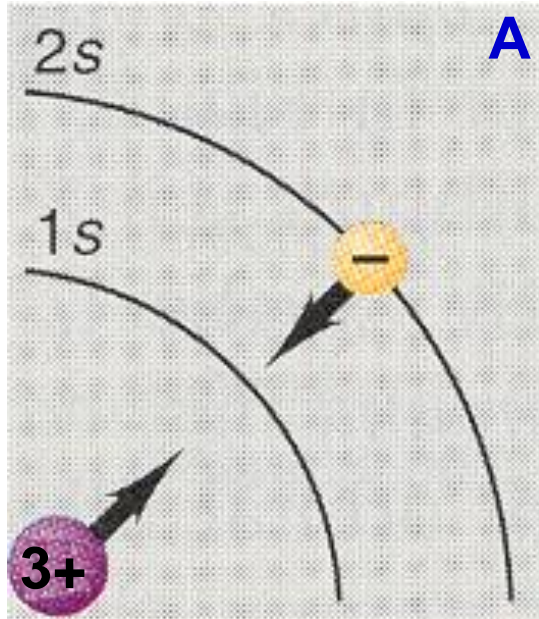
Άτομο υδρογόνου



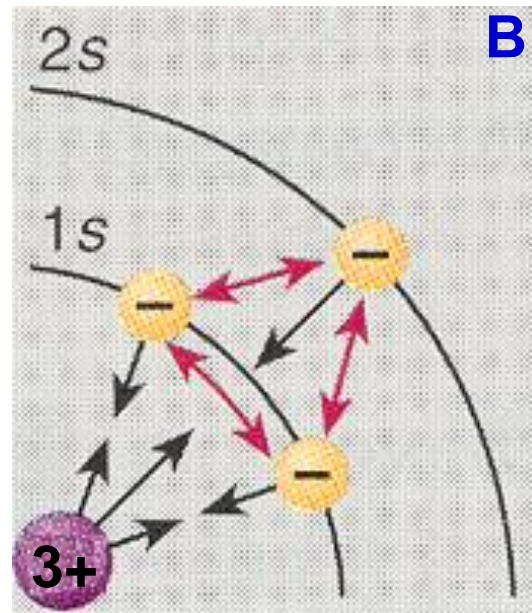
Πολυηλεκτρονικό άτομο

Δραστικό πυρηνικό φορτίο (Z_{eff}) και Ενέργειες τροχιακών

Τι ονομάζουμε φαινόμενο θωράκισης ή προάσπισης;



A. Το μοναδικό e του Li^{2+} «αισθάνεται» επάνω του **όλη** την έλξη του φορτίου +3 του πυρήνα.



Το **καθαρό** πυρηνικό φορτίο που έλκει τελικά ένα **προστατευμένο** ή **θωρακισμένο** e (όπως το 2s) ονομάζεται **δραστικό πυρηνικό φορτίο (Z_{eff})**.

B. Τα δύο e 1s που παρεμβάλλονται μεταξύ πυρήνα και e 2s στο άτομο Li μειώνουν αισθητά την ελκτική δράση του πυρηνικού φορτίου πάνω στο 2s e.

$$Z_{eff} = Z - S$$

Σταθερά προασπίσεως ή θωρακίσεως

Ηλεκτρονικές δομές

Ηλεκτρονική δομή (ή αλλιώς ηλεκτρονική διάταξη ή ηλεκτρονική διαμόρφωση) ατόμου: μια **συγκεκριμένη κατανομή των e στους υποφλοιούς των ατόμων**

☞ Γιατί πρέπει να γνωρίζουμε τις ηλεκτρονικές δομές των ατόμων;

☞ Ποιους κανόνες πρέπει να γνωρίζουμε για την αναγραφή της ηλεκτρονικής δομής ενός ατόμου;

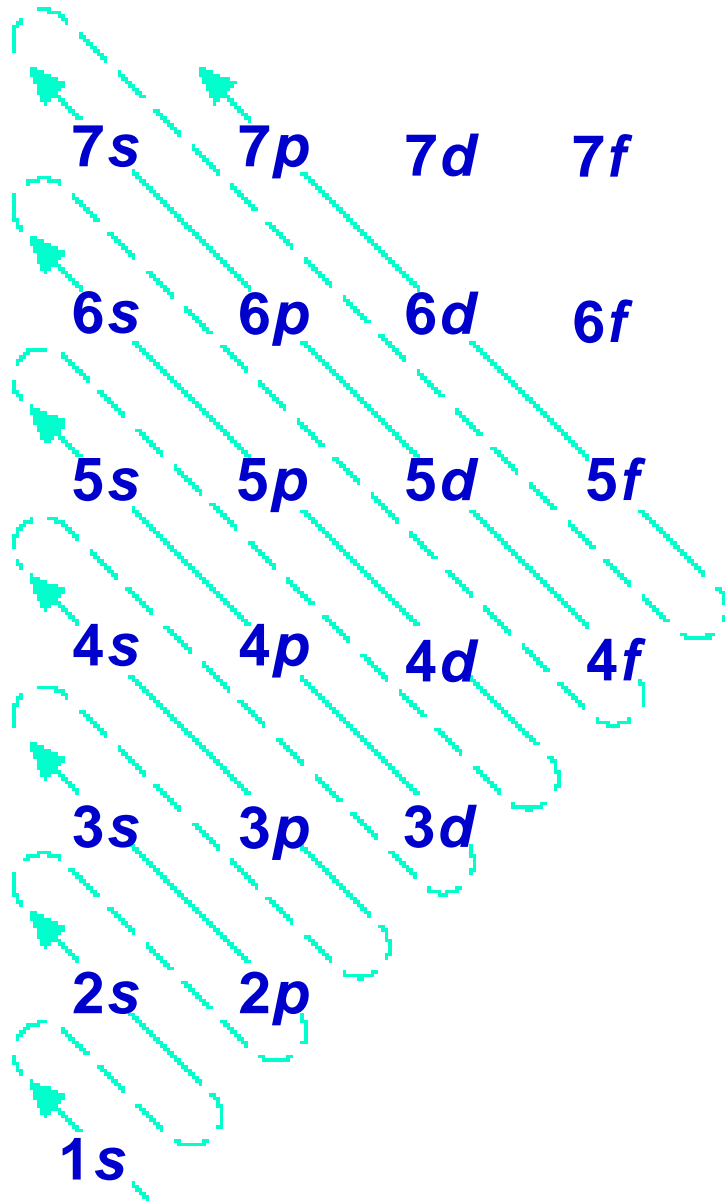
☞ Ποια είναι η Αρχή της Δομήσεως (Pauli);

☞ Τι λέει η Αρχή της ελάχιστης ενέργειας, η απαγορευτική Αρχή του Pauli και ο κανόνας του Hund;

☞ Η σειρά κατάληψης των τροχιακών βάσει φασματοσκοπικών και μαγνητικών ερευνών:

$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p$

Μνημονικό διάγραμμα για τη σειρά δόμησης



(α) Γράφουμε τους υποφλοιούς σε οριζόντιες σειρές, με κάθε σειρά να έχει υποφλοιούς του ίδιου n .

(β) Μέσα σε κάθε σειρά τοποθετούμε τους υποφλοιούς κατά αυξανόμενο l .

(γ) Ξεκινώντας με τον υποφλοιό $1s$, κατασκευάζουμε μια σειρά διαγωνίων, όπως δείχνει το σχήμα.

(δ) Η σειρά δόμησης είναι η σειρά κατά την οποία αυτές οι διαγώνιες συναντούν τους υποφλοιούς.

Η Αρχή της Δομήςσεως

- Τι είναι η αρχή της δομήςσεως;
- Είναι μια υποθετική μέθοδος που μας βοηθά να τοποθετήσουμε σωστά τα ηλεκτρόνια ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου και να σχηματίσουμε έτσι την ηλεκτρονική δομή του ατόμου.



- Η Αρχή της Δομήςσεως αποτελεί συνδυασμό:
 - (α) της αρχής της ελάχιστης ενέργειας,
 - (β) της απαγορευτικής αρχής του Pauli και
 - (γ) του κανόνα του Hund.

Η απαγορευτική αρχή του Pauli

➤ Ποια αρχή διατύπωσε ο Pauli, προκειμένου να εξηγήσει τα φάσματα εκπομπής πολυηλεκτρονικών ατόμων εντός μαγνητικού πεδίου;

Δύο ηλεκτρόνια σε ένα άτομο δεν μπορούν να έχουν και τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς ίδιους (Απαγορευτική αρχή του Pauli)

➤ Ποια είναι η σημαντικότερη συνέπεια της παραπάνω αρχής;

Επειδή οι δυνατές τιμές του m_s είναι δύο (+1/2 και -1/2), ένα τροχιακό μπορεί να χωρέσει το πολύ δύο ηλεκτρόνια, τα οποία όμως θα πρέπει να έχουν αντίθετα spin.

➤ Ποιο συμπέρασμα συνάγεται, ως προς τη χωρητικότητα των υποφλοιών με ηλεκτρόνια, από μια τέτοια διατύπωση;

Ο μέγιστος αριθμός των e που μπορεί να χωρέσει ένας υποφλοιός είναι διπλάσιος από τον αριθμό των τροχιακών που διαθέτει ⇒

<u>Υποφλοιός</u>	<u>Αριθμός τροχιακών</u>	<u>Μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων</u>
$s (l = 0)$	1	2
$p (l = 1)$	3	6
$d (l = 2)$	5	10
$f (l = 3)$	7	14

Ο κανόνας του Hund

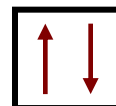
(ή της μέγιστης πολλαπλότητας του spin)

Ποιον εμπειρικό κανόνα διατύπωσε ο Hund (1927), βάσει του οποίου λαμβάνουμε την ενεργειακά χαμηλότερη δομή των ηλεκτρονίων ενός υποφλοιού;

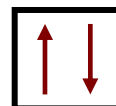
Όταν ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας, **σταθερότερη** είναι εκείνη η ηλεκτρονική δομή που δίνει το **μέγιστο συνολικό spin**.

Για το άτομο C ($Z = 6$), με δομή θεμελιώδους κατάστασης $1s^2 2s^2 2p^2$, ποιο διάγραμμα εκφράζει τη σταθερότερη κατάσταση του ατόμου C;

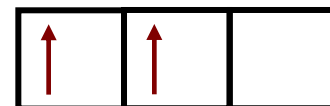
Διάγραμμα 1



1s

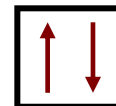


2s

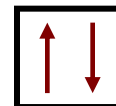


2p

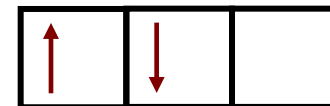
Διάγραμμα 2



1s

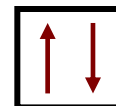


2s

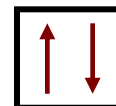


2p

Διάγραμμα 3



1s



2s



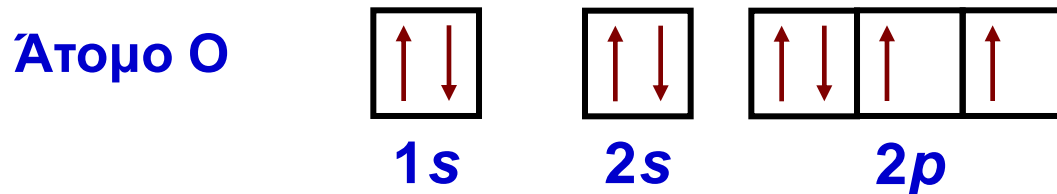
2p



Hund Fr., (1896-1997)
γερμανός φυσικός

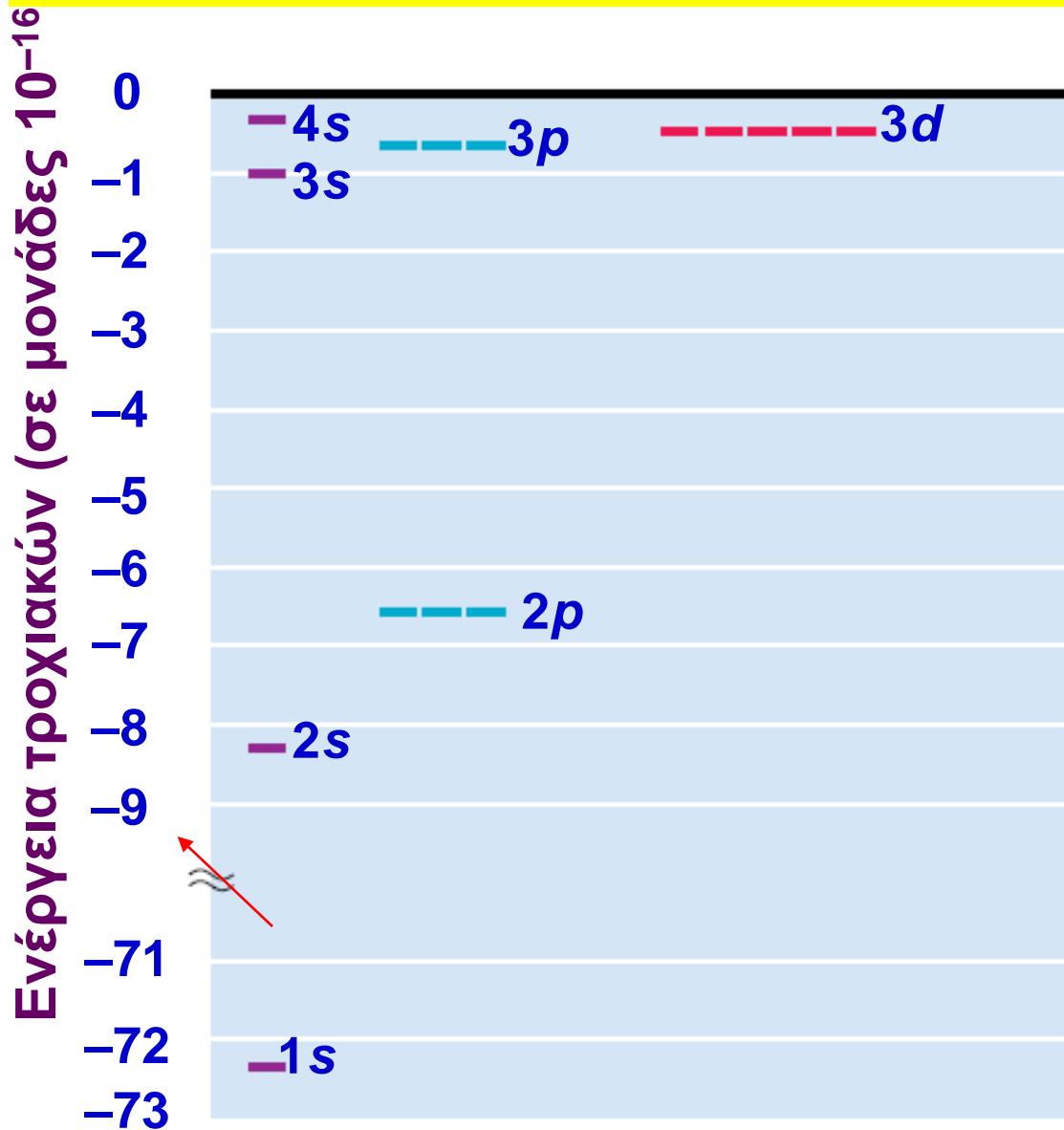
Συμβολισμοί ηλεκτρονικών δομών

- Με ποιους τρόπους μπορούμε να συμβολίσουμε την ηλεκτρονική δομή ενός ατόμου (π.χ. του O);
- 1. Συμβολισμός *spdf* συμπυκνωμένος: O: $1s^2 2s^2 2p^4$
- 2. Συμβολισμός *spdf* εκτενής: O: $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$
- 3. Συμβολισμός με διαγράμματα τροχιακών:



- Ποια είναι τα «υπέρ» και τα «κατά» του κάθε συμβολισμού;
- Ποια ηλεκτρόνια ονομάζουμε συζευγμένα και ποια ασύζευκτα ή μονήρη;

Γνωρίζοντας την αρχή της δομήσεως, πώς θα σχηματίσω την ηλεκτρονική δομή ενός στοιχείου;



Διάγραμμα τροχιακών του πολυηλεκτρονικού ατόμου του σκανδίου (Sc, $Z = 21$)

Αρχίζουμε με το H ($Z = 1$) και συνεχίζουμε με τα επόμενα στοιχεία συμπληρώνοντας σταδιακά τους υποφλοιούς με ε. π.χ. Li: $1s^2 2s^1$ ή $[\text{He}] 2s^1$

!!! Γενικά: Η ηλεκτρονική δομή ενός στοιχείου προκύπτει από τη δομή του προηγούμενου στοιχείου με την προσθήκη ενός e στο αμέσως επόμενο διαθέσιμο τροχιακό.

Ηλεκτρονικές δομές της θεμελιώδους κατάστασης των ατόμων με $Z = 1$ έως 24

Z	Στοιχείο	Ηλεκτρονική δομή	Z	Στοιχείο	Ηλεκτρονική δομή
1	H	$1s^1$	11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
2	He	$1s^2$	12	Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
3	Li	$1s^2 2s^1$	13	Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
4	Be	$1s^2 2s^2$	14	Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
5	Li	$1s^2 2s^2 2p^1$	15	P	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	16	S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	17	Cl	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	18	Ar	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	19	K	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	20	Ca	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
			21	Sc	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$
			22	Ti	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$
			23	V	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$
			24	Cr	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$
				
			29	Cu	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$

Άσκηση 8.1

Εφαρμογή της απαγορευτικής αρχής του Pauli

Κοιτάξτε τα παρακάτω διαγράμματα τροχιακών και τις ηλεκτρονικές δομές. Ποια από αυτά είναι επιτρεπτά και ποια όχι, σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli; Εξηγήστε.

