



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ  
ΠΑΤΡΩΝ  
UNIVERSITY OF PATRAS

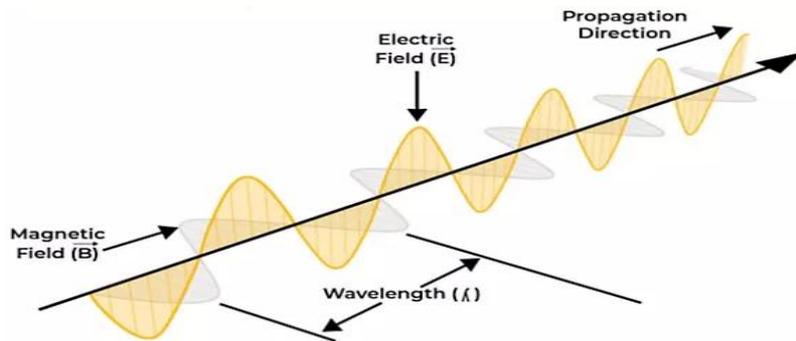
Τμήμα Δειφορικής Γεωργίας  
Γεωπονική Σχολή

## ΓΕΝΙΚΗ – ΑΝΟΡΓΑΝΗ ΧΗΜΕΙΑ

- ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ ΑΝΤΙΛΗΨΕΙΣ ΓΙΑ ΤΗ ΔΟΜΗ ΤΟΥ ΑΤΟΜΟΥ:  
Κβαντική Θεωρία του Ατόμου, Κβαντικοί αριθμοί και ατομικά τροχιακά
- ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΕΣ ΔΟΜΕΣ ΚΑΙ ΠΕΡΙΟΔΙΚΟΤΗΤΑ: Spin ηλεκτρονίου, Απαγορευτική αρχή Pauli, Αρχή δόμησης και Περιοδικός Πίνακας, Κανόνας Hund, Περιοδικές ιδιότητες στοιχείων

# Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία

- Είναι η εκπομπή στο χώρο ηλεκτρομαγνητικής ενέργειας με τη μορφή κυμάτων, που ονομάζονται ηλεκτρομαγνητικά κύματα.



Κύμα: συνεχώς επαναλαμβανόμενη μεταβολή ή ταλάντωση μέσα είτε σε ύλη είτε σε φυσικό πεδίο.

- Πρόκειται για συγχρονισμένα ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία που ταλαντώνονται σε επίπεδα κάθετα μεταξύ τους και προς τη διεύθυνση που μεταδίδονται.
- Παραδείγματα μορφών ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, αποτελούν τα ραδιοκύματα, το υπεριώδες φως, το ορατό φως και άλλα.

## Το κύμα χαρακτηρίζεται:

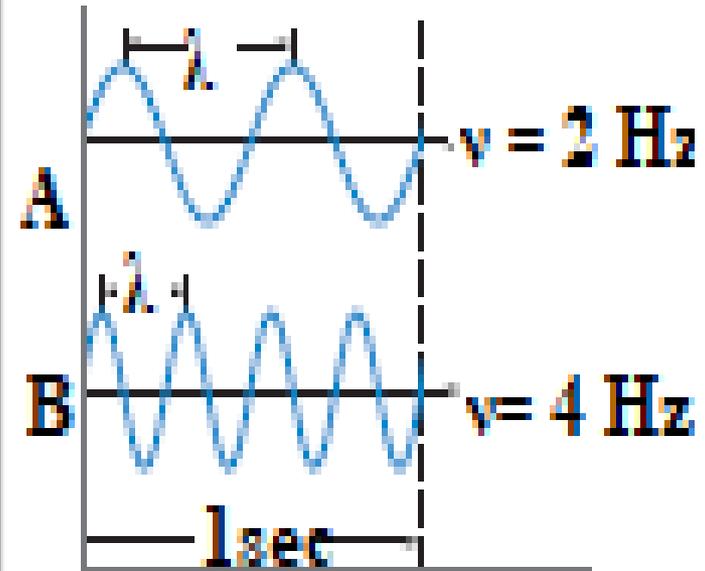
- Από το μήκος κύματος  $\lambda$  ( η απόσταση ανάμεσα σε δύο οποιαδήποτε όμοια διαδοχικά σημεία ενός κύματος, π.χ. δυο γειτονικές κορυφές του κύματος ).

$\nu$  σε sec

- Από τη συχνότητα  $\nu$ , ( ο αριθμός των μηκών κύματος που περνούν από ένα σταθερό σημείο στη μονάδα του χρόνου, συνήθως σε ένα δευτερόλεπτο).

Ισχύει ότι  $c = \nu\lambda$ , όπου  $c$  η ταχύτητα των φωτεινών κυμάτων που εξαρτάται από το μέσο και στο κενό θα τη θεωρούμε  $3,00 \times 10^8$  m/s.

$\lambda$  σε m ή  
nm

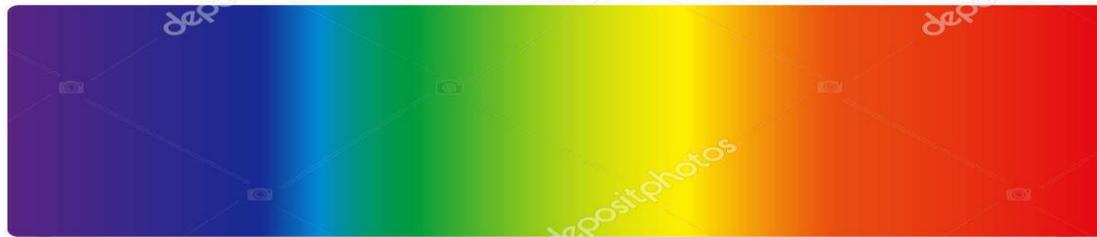


Αφειρηγία Χρόνος

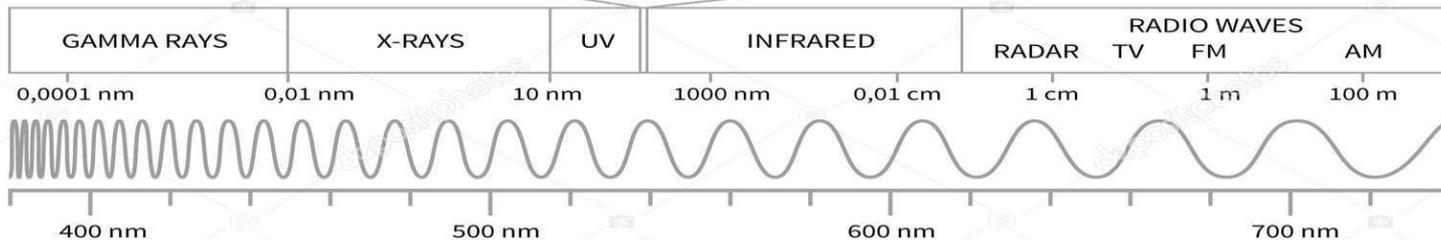
Ονομάζουμε ηλεκτρομαγνητικό φάσμα, την περιοχή συχνοτήτων ή μηκών κύματος της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.

## Ορατό φάσμα

### VISIBLE SPECTRUM



VISIBLE LIGHT



**Ο Einstein** υποστήριξε πως όταν ένα δονούμενο άτομο ελαττώνει την ενέργειά του έστω από  $3h\nu$  σε  $2h\nu$ , αυτή εκπέμπεται ως ένα κβάντο, δηλαδή κομματάκι φωτεινής ενέργειας. Έκανε έτσι την παραδοχή ότι το φως αποτελείται από κβάντα τα οποία αργότερα ονομάστηκαν φωτόνια.

$$E = h\nu$$

Οι ενέργειες δόνησης των ατόμων είναι κβαντισμένες, δηλαδή περιορίζονται σε ορισμένες τιμές.

Σωματίδια ηλεκτρομαγνητικής ενέργειας με ενέργεια  $E$  ανάλογη με την παρατηρούμενη συχνότητα του φωτός.

# Θεωρία Bohr για το άτομο του υδρογόνου

- Ο Bohr διατύπωσε αξιώματα για να εξηγήσει:
- τη σταθερότητα του υδρογονοατόμου, δηλαδή ότι το ηλεκτρόνιο δεν ακτινοβολεί συνεχώς ενέργεια και άρα δεν πέφτει στον πυρήνα του.
    - το γραμμικό φάσμα του ατόμου του υδρογόνου.

## Σύμφωνα με τη θεωρία του Bohr

- Εκπομπή φωτός πραγματοποιείται από ένα άτομο, εάν ένα ηλεκτρόνιο μεταπηδήσει από υψηλότερη σε χαμηλότερη τροχιά. Στην περίπτωση αυτή εκπέμπεται ενέργεια με τη μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, (ΗΜ ακτινοβολία) συγκεκριμένου μήκους κύματος.
- Η θεωρία του Bohr εξηγεί και την απορρόφηση φωτός. Εάν άτομο υδρογόνου απορροφήσει ενέργεια ηλεκτρόνιο μεταπηδά από τροχιά χαμηλότερης σε τροχιά υψηλότερης ενέργειας. Για παράδειγμα αν άτομο υδρογόνου σε κατάσταση  $n=2$  φωτιστεί με κόκκινο φως ( $\lambda = 656 \text{ nm}$ ) είναι δυνατόν να απορροφήσει ένα φωτόνιο και στην περίπτωση που αυτό συμβεί το ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου κερδίζει ενέργεια και μεταπίπτει σε  $n=3$ .

**Θεμελιώδης κατάσταση: Μικρότερη ενέργεια.**

**Διεγερμένη κατάσταση: Κάθε μια μεγαλύτερης ενέργειας από αυτή της θεμελιώδους.**

**Κάθε ηλεκτρόνιο προτιμά να βρίσκεται στη θεμελιώδη και όχι στη διεγερμένη κατάσταση.**

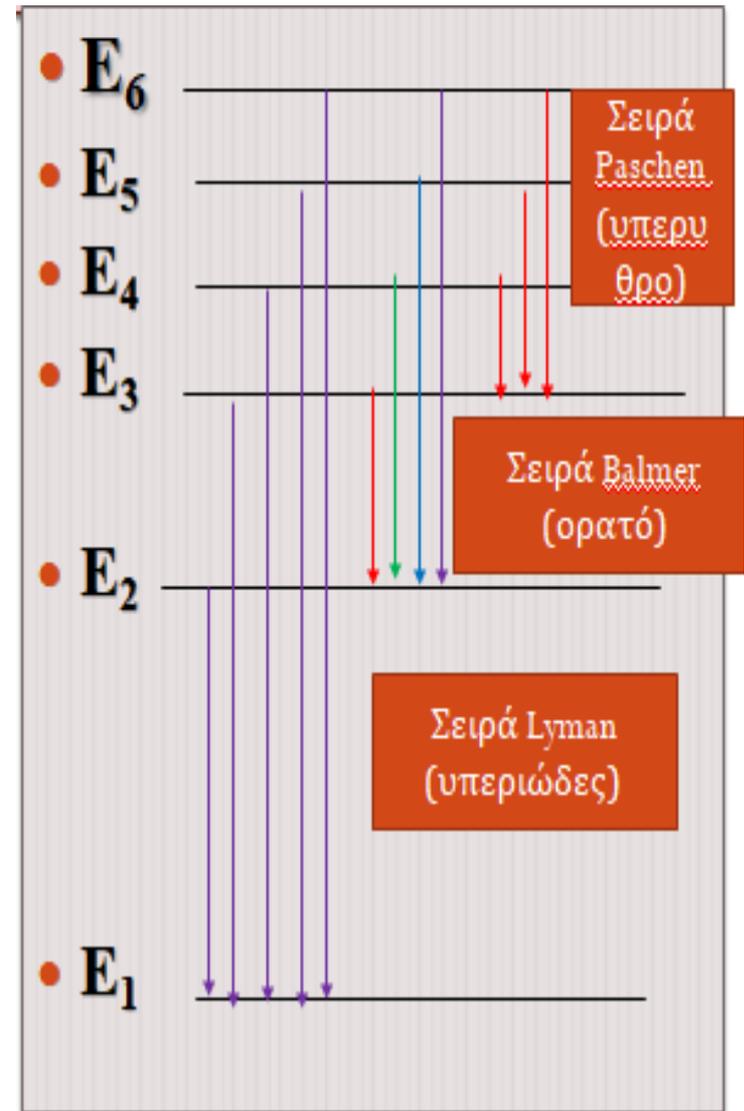
# Φάσματα εκπομπής

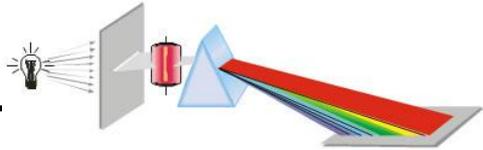
- Σε περίπτωση που για τον οποιοδήποτε λόγο το ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε διεγερμένη κατάσταση μέσα σε ελάχιστο χρόνο αποδιεγείρεται και εκπέμπεται φωτόνιο.

Η ενέργεια του εκπεμπόμενου φωτονίου είναι ίση και αντίθετη σε πρόσημο με την ενέργεια που έχασε το άτομο.

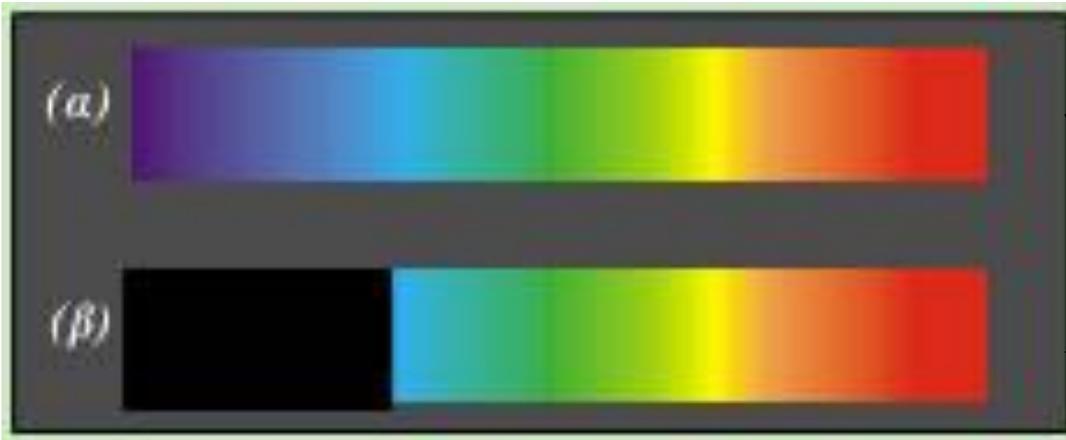
$$h\nu = -\Delta E = -(E_f - E_i)$$

- Αν ένα άτομο διεγερθεί με προσφορά ενέργειας από φωτόνια προερχόμενα από πηγή ακτινοβολίας, θα απορροφηθούν μόνο τα φωτόνια που είναι ικανά να προκαλέσουν διεγέρσεις.



<b>Φάσματα εκπομπής</b>	<b>Συνεχή</b>	<b>Στερεά ή υγρά Διάπυρα</b>	<b>Έγχρωμη ταινία</b> 
	<b>Γραμμικά</b>	<b>Θερμά αέρια Ατμοί μετάλλων</b>	<b>Φωτεινές χαρακτηριστικές γραμμές</b> 
<b>Φάσματα απορρόφησης</b>	<b>Συνεχή</b>	<b>Στερεά ή υγρά Διαφανή σώματα</b>	<b>Αποκοπή τμήματος του φάσματος</b> 
	<b>Γραμμικά</b>	<b>Αέρια και ατμοί</b>	<b>μαύρες χαρακτηριστικές γραμμές</b> 

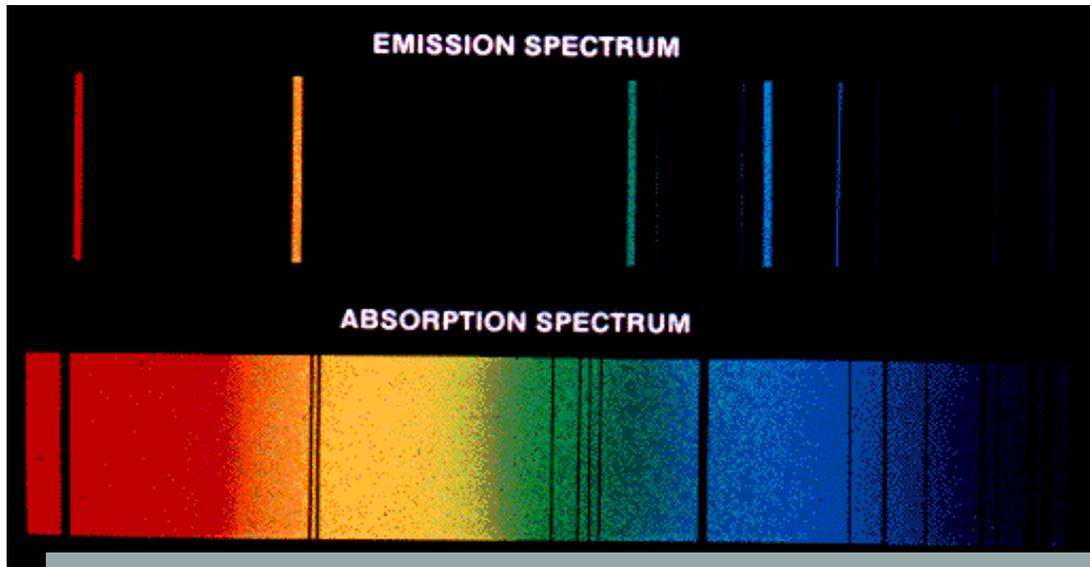




Emission spectrum

Συνεχή φάσματα

absorption spectrum



Γραμμικά φάσματα

<http://ircamera.as.arizona.edu/NatSci102/NatSci102/lectures/spectroscopy.htm>

# Κβαντομηχανική

## Κβαντικοί αριθμοί

- Η κβαντομηχανική είναι μια θεωρία η οποία εφαρμόζεται σε εξαιρετικά μικρά σωματίδια ύλης όπως τα ηλεκτρόνια. Πιο συγκεκριμένα η κβαντομηχανική ή αλλιώς κυματομηχανική, είναι κλάδος της φυσικής που περιγράφει μαθηματικά τις κυματικές ιδιότητες στοιχειωδών σωματιδίων.
- Στην κβαντομηχανική στηρίζονται οι σύγχρονες απόψεις για την ατομική δομή.

## Σωματίδιο υλόκυμα De Broglie

Το ηλεκτρόνιο δεν είναι μόνο σωματίδιο, είναι και κύμα.

Το μήκος κύματος υλικού σωματιδίου μάζας  $m$  που κινείται με ταχύτητα  $v$ , δίνεται από τη σχέση:

$$\lambda = h/mv$$

## Αρχή Αβεβαιότητας του Heisenberg

Δεν είναι δυνατός ο ταυτόχρονος προσδιορισμός της ακριβούς θέσης και της ταχύτητας ενός σωματιδίου.

Πάντα υπάρχει μια αβεβαιότητα  $\Delta v$  ως προς την ταχύτητα και μια αβεβαιότητα  $\Delta x$  ως προς τη θέση. Το γινόμενο τους δεν μπορεί να είναι μικρότερο από ένα κατώτατο όριο.

$$\Delta x \times \Delta v \geq h / 2\pi m$$

όπου

$h$ : η σταθερά του Planck

$m$ : η μάζα του σωματιδίου

# Κυματική εξίσωση Schrödinger

Ο Schrödinger, κατάφερε να περιγράψει με ακρίβεια την κίνηση και την πραγματική συμπεριφορά του ηλεκτρονίου, γιατί έλαβε υπόψη του τη διττή του φύση, (σωματίδιο, κύμα). Έτσι κατέληξε σε εξίσωση που αναφέρεται στις τρεις διαστάσεις  $x, y, z$

$$H\psi = E\psi$$

όπου

$H$  : Χαμιλτώνειος τελεστής

$E$  : Η αριθμητική τιμή της ολικής ενέργειας

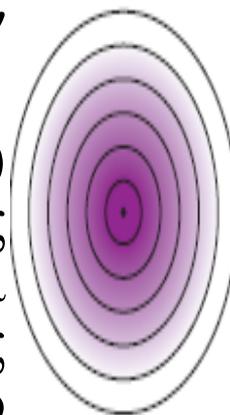
# ΑΤΟΜΙΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

Είναι οι μαθηματικές συναρτήσεις  $\psi$ , οι οποίες προκύπτουν από την εξίσωση Schrödinger

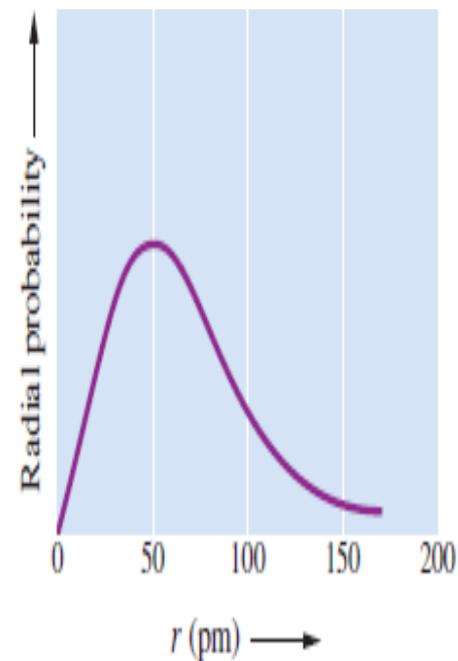
Το τροχιακό είναι αφηρημένη έννοια χωρίς άμεση φυσική σημασία. Φυσική σημασία έχει μόνο το  $\psi^2$ , που όταν υπάρχει ηλεκτρόνιο, περιγράφει την κατανομή του ηλεκτρονικού νέφους, (στην περίπτωση που δεν υπάρχει ηλεκτρόνιο, τα τροχιακά υπάρχουν δυνητικά).

# Πιθανότητα εύρεσης ηλεκτρονίου σε σφαιρικό φλοιό γύρω από τον πυρήνα

- Η εικόνα, (A), δείχνει την πυκνότητα της πιθανότητας για ένα ηλεκτρόνιο σε άτομο υδρογόνου. Όπως φαίνεται η περιοχή είναι χωρισμένη σε φλοιούς γύρω από τον πυρήνα.
- Η γραφική παράσταση (B) αναπαριστά την πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου μέσα σε φλοιούς οι οποίοι απέχουν διάφορες αποστάσεις από τον πυρήνα. Το μέγιστο που παρουσιάζει η καμπύλη δείχνει ότι η ακτινική πιθανότητα είναι μέγιστη σε δεδομένη απόσταση από τον πυρήνα.



A



B

- Κύριος κβαντικός αριθμός n. Μπορεί να πάρει όλες τις θετικές ακέραιες τιμές, (1,2....κ.ο.κ.). Από αυτόν εξαρτάται κυρίως η ενέργεια ενός ηλεκτρονίου σε ένα άτομο. Όσο μικρότερη η τιμή του n, τόσο μικρότερη και η ενέργεια του ηλεκτρονίου σε κάποιο άτομο. Για την περίπτωση υδρογονοατόμου ή μονοηλεκτρονικών ιόντων, π.χ.  $\text{Li}^{2+}$ , ο n είναι ο μοναδικός κβαντικός που καθορίζει την ενέργεια. Για τα άλλα άτομα η ενέργεια σε μικρό βαθμό εξαρτάται και από τον κβαντικό αριθμό l. Τέλος από τον κβαντικό αριθμό n εξαρτάται και το μέγεθος ενός τροχιακού. Όσο μεγαλύτερο το n τόσο μεγαλύτερο και το μέγεθος.

Τροχιακά ίδιου n ανήκουν στην ίδια στιβάδα ή φλοιό

Φλοιός : K L M N

n: 1 2 3 4...

- Κβαντικός αριθμός της Στροφορμής  $l$  ή αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός. Διακρίνει τροχιακά δεδομένου  $n$  τα οποία έχουν διαφορετικά σχήματα. Για δεδομένο  $n$  παίρνει τιμές  $0, 1, 2, \dots$  έως  $(n-1)$ . Μέσα σε κάθε φλοιό  $n$  κβαντικού αριθμού, υπάρχουν  $n$  διαφορετικών ειδών τροχιακά με ξεχωριστό δικό του σχήμα το κάθε ένα, που υποδηλώνεται από έναν κβαντικό αριθμό  $l$ . Για  $n=2$ , οι δυνατές τιμές του  $l$  είναι  $0$  και  $1$ . Άρα στο φλοιό  $L(n=2)$  υπάρχουν  $2$  είδη τροχιακών, διαφορετικού σχήματος το κάθε ένα για τη περιοχή όπου το ηλεκτρόνιο έχει τη μεγαλύτερη πιθανότητα να βρεθεί. Η ενέργεια ενός τροχιακού εξαρτάται από τον  $n$ , αλλά σε κάποιο βαθμό και από τον  $l$ , (εξαιρουμένου του ατόμου του υδρογόνου). Για δεδομένο  $n$ , η ενέργεια αυξάνεται με το  $l$ .

Τροχιακά ίδιου  $n$  ανήκουν στην ίδια στιβάδα ή φλοιό.

Τροχιακά ίδιου  $l$  ανήκουν στον ίδιο υποφλοιό δεδομένου φλοιού.

Σύμβολο:      s   p   d   f   g...  
 l:            0   1   2   3   4   ..

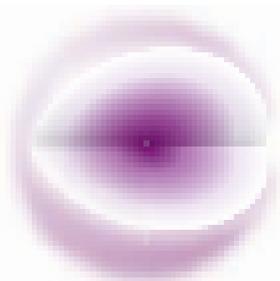
Π.χ. το  $3p$  συμβολίζει υποφλοιό με κβαντικούς αριθμούς  $n=3$  και  $l=1$

- Μαγνητικός κβαντικός αριθμός  $m_l$ . Ο  $m_l$  διακρίνει τροχιακά δεδομένου  $n$  και  $l$ . Με άλλα λόγια διακρίνει τροχιακά δεδομένης ενέργειας μεγέθους και σχήματος και τα διακρίνει ως προς τον προσανατολισμό τους στο χώρο. Παίρνει την τιμή 0 καθώς επίσης και όλες τις ακέραιες τιμές από +1 ως -1. Για παράδειγμα για  $l=3$ , υποφλοιός  $f$ ,  $m_l = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$ . Αυτό σημαίνει ότι στον ίδιο υποφλοιό  $f$  υπάρχουν 7 διαφορετικά τροχιακά, ίδιου σχήματος αλλά διαφορετικού προσανατολισμού. **Εύκολα παρατηρεί κανείς πως σε κάθε υποφλοιό κβαντικού αριθμού  $l$  υπάρχουν  $2l+1$  τροχιακά.**
- Ο κβαντικός αριθμός  $m_s$  του spin. Αντιστοιχεί στους δύο δυνατούς προσανατολισμούς του άξονα αυτοπεριστροφής, (spin) ενός ηλεκτρονίου, και μπορεί να πάρει μόνο τις τιμές +1/2 και -1/2. Το ηλεκτρόνιο συμπεριφέρεται σαν να περιστρέφεται γύρω από τον άξονά του όπως η Γη. Η αυτοπεριστροφή, (spin) του ηλεκτρονίου είναι ισοδύναμη με κυκλικά κινούμενο ηλεκτρικό φορτίο που δημιουργεί μαγνητικό πεδίο. Έτσι ένα ηλεκτρόνιο συμπεριφέρεται ως ραβδόμορφος μαγνήτης, με βόριο και νότιο πόλο.

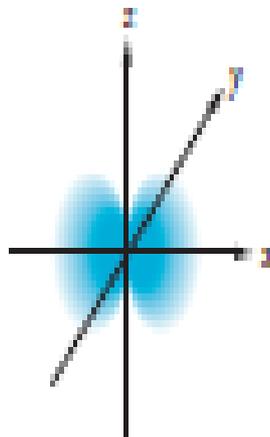
n	l	$m_l$	Συμβολισμός υποφλοιού	Αριθμός τροχιακών στον υποφλοιό
1	0	0	1s	1
2	0	0	2s	1
2	1	+1, 0, -1	2p	3
3	0	0	3s	1
3	1	+1, 0, -1	3p	3
3	2	+2,+1,0,-1,-2	3d	5
4	0	0	4s	1
4	1	+1, 0, -1	4p	3
4	2	+2,+1,0,-1,-2	4d	5
4	3	+3,+2,+1,0,-1,-2,-3	4f	7
5	0	0	5s	1
5	1	+1, 0, -1	5p	3
5	2	+2,+1,0,-1,-2	5d	5
5	3	+3,+2,+1,0,-1,-2,-3	5f	7
5	4	+4,+3,+2,+1,0,-1,-2,-3,-4	5g	14

# Σχήματα ατομικών τροχιακών

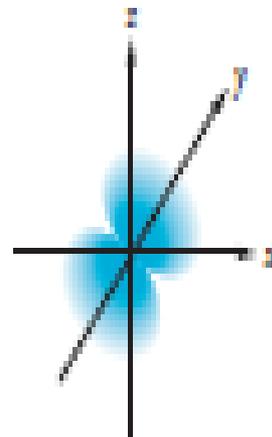
GENERAL CHEMISTRY EBBING GAMMON , NINTH EDITION



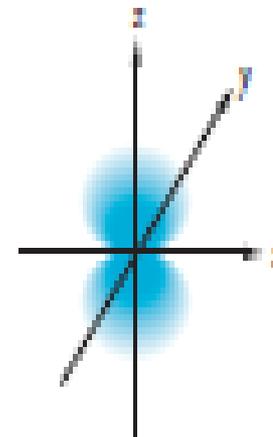
1s orbital



2p<sub>x</sub> orbital

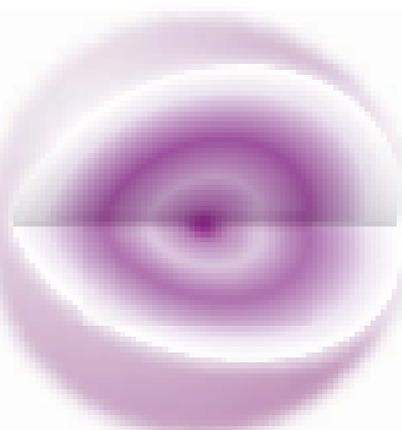
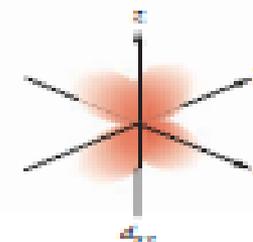
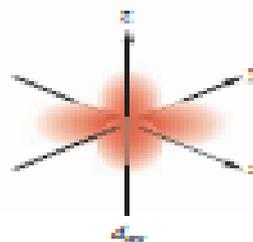
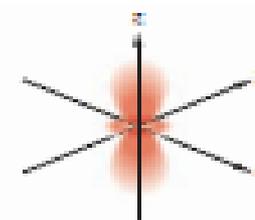
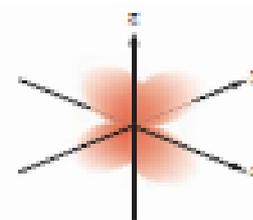
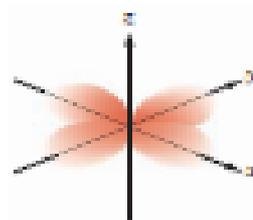


2p<sub>y</sub> orbital



2p<sub>z</sub> orbital

B



2s orbital

# Ηλεκτρονική δομή ατόμων

- Τα ηλεκτρόνια σε κάποιο άτομο περιγράφονται από την ηλεκτρονική του δομή. Ορίζουμε ως ηλεκτρονική δομή ενός ατόμου την ιδιαίτερη κατανομή των ηλεκτρονίων του στους υποφλοιούς που είναι διαθέσιμοι.

**Υποφλοιός:** Ομάδα τροχιακών με ίδιους κβαντικούς  $n$  και  $l$  όμως διαφορετικές τιμές  $m_l$ .

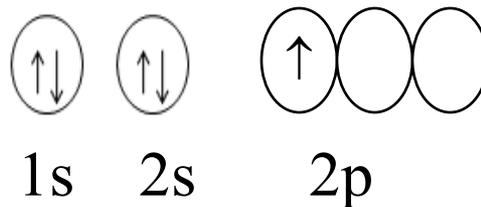
**Κάθε υποφλοιός συμβολίζεται από τον κύριο κβαντικό του αριθμό  $n$ , που ακολουθείται από γράμμα, ( $s, p, d, f, g$  κ.ο.κ.) που δηλώνει τον κβαντικό αριθμό  $l$ .**

## Συμβολισμός ηλεκτρονικής δομής

- Ο συμβολισμός μιας ηλεκτρονικής δομής, δείχνει τον αριθμό ηλεκτρονίων που υπάρχουν σε κάθε υποφλοιό.
- Το διάγραμμα τροχιακών, δείχνει πως καταλαμβάνονται τα τροχιακά κάποιου υποφλοιού με ηλεκτρόνια.

- Το κάθε τροχιακό παριστάνεται με ένα κύκλο
- Κάθε ομάδα τροχιακών υποφλοιού συμβολίζεται με ίδιο σύμβολο, αυτό του υποφλοιού
- Το ηλεκτρόνιο στο τροχιακό συμβολίζεται με βέλος, κατευθυνόμενο προς τα πάνω όταν  $m_s=+1/2$  και προς τα κάτω όταν  $m_s=-1/2$

- Το διάγραμμα τροχιακών



δείχνει την ηλεκτρονική δομή ατόμου που έχει από 2 ηλεκτρόνια στους υποφλοιούς ή αλλιώς τροχιακά 1s και 2s, (ένα με  $m_s=+1/2$  και ένα με  $m_s=-1/2$  στο κάθε ένα) και ένα ηλεκτρόνιο στον υποφλοιό 2p ( $m_s=+1/2$ ).

**Η ηλεκτρονική δομή είναι:  $1s^2 2s^2 2p^1$ .**

- Τα στοιχεία που ανήκουν στις κύριες ομάδες του Π.Π. έχουν δομές φλοιού σθένους τύπου  $ns^a$  ή  $ns^a nr^b$ 
  - των δύο πρώτων κύριων ομάδων  $ns^a$
  - των 6 επόμενων κύριων ομάδων  $ns^a nr^b$

όπου:  
 $n$  = είναι ο αριθμός περιόδου και  
 $a=1$  ή  $2$  και  $b=1$  έως και  $6$
- Τα μεταβατικά στοιχεία, (ή στοιχεία μεταπτώσεως), συμπληρώνουν και τον υποφλοιό  $d$ , άρα έχουν δομή φλοιού σθένους τύπου  $(n-1)d^c ns^a$  όπου  $c=1$  έως  $10$ .
- Τα μεταβατικά στοιχεία του τομέα  $f$ , (δηλαδή τα εσωτερικά μεταβατικά μέταλλα), συμπληρώνουν και  $f$  υποφλοιό.

GENERAL CHEMISTRY EBBING GAMMON, NINTH EDITION

Main-Group Elements  
*s* subshell fills

Main-Group Elements  
*p* subshell fills

		<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">                 1 H 1s<sup>1</sup> </div> Atomic number Symbol Valence-shell configuration																	
Period	1	IA 1 H 1s <sup>1</sup>											VIII A 2 He 1s <sup>2</sup>						
	2	3 Li 2s <sup>1</sup>	4 Be 2s <sup>2</sup>	Transition Metals <i>d</i> subshell fills										5 B 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	6 C 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	7 N 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	8 O 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	9 F 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	10 Ne 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>
	3	11 Na 3s <sup>1</sup>	12 Mg 3s <sup>2</sup>	VIII B										13 Al 3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	14 Si 3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	15 P 3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	16 S 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	17 Cl 3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	18 Ar 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>
	4	19 K 4s <sup>1</sup>	20 Ca 4s <sup>2</sup>	21 Sc 3d <sup>1</sup> 4s <sup>2</sup>	22 Ti 3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	23 V 3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	24 Cr 3d <sup>5</sup> 4s <sup>1</sup>	25 Mn 3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	26 Fe 3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	27 Co 3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	28 Ni 3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	29 Cu 3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>	30 Zn 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	31 Ga 4s <sup>2</sup> 4p <sup>1</sup>	32 Ge 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	33 As 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	34 Se 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>	35 Br 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	36 Kr 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>
	5	37 Rb 5s <sup>1</sup>	38 Sr 5s <sup>2</sup>	39 Y 4d <sup>1</sup> 5s <sup>2</sup>	40 Zr 4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>	41 Nb 4d <sup>4</sup> 5s <sup>1</sup>	42 Mo 4d <sup>5</sup> 5s <sup>1</sup>	43 Tc 4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup>	44 Ru 4d <sup>7</sup> 5s <sup>1</sup>	45 Rh 4d <sup>8</sup> 5s <sup>1</sup>	46 Pd 4d <sup>10</sup>	47 Ag 4d <sup>10</sup> 5s <sup>1</sup>	48 Cd 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>	49 In 5s <sup>2</sup> 5p <sup>1</sup>	50 Sn 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	51 Sb 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>	52 Te 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>	53 I 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup>	54 Xe 5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup>
	6	55 Cs 6s <sup>1</sup>	56 Ba 6s <sup>2</sup>	71 Lu 4f <sup>14</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	72 Hf 5d <sup>2</sup> 6s <sup>2</sup>	73 Ta 5d <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	74 W 5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	75 Re 5d <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	76 Os 5d <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	77 Ir 5d <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	78 Pt 5d <sup>9</sup> 6s <sup>1</sup>	79 Au 5d <sup>10</sup> 6s <sup>1</sup>	80 Hg 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	81 Tl 6s <sup>2</sup> 6p <sup>1</sup>	82 Pb 6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	83 Bi 6s <sup>2</sup> 6p <sup>3</sup>	84 Po 6s <sup>2</sup> 6p <sup>4</sup>	85 At 6s <sup>2</sup> 6p <sup>5</sup>	86 Rn 6s <sup>2</sup> 6p <sup>6</sup>
	7	87 Fr 7s <sup>1</sup>	88 Ra 7s <sup>2</sup>	105 Lr 5f <sup>14</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	104 Rf 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	105 Db 6d <sup>3</sup> 7s <sup>2</sup>	106 Sg 6d <sup>4</sup> 7s <sup>2</sup>	107 Bh 6d <sup>5</sup> 7s <sup>2</sup>	108 Hs 6d <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup>	109 Mt 6d <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	110 Uub 6d <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup>	111 Rg 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup>	112 Uub 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup>	113 Uut 7s <sup>2</sup> 7p <sup>1</sup>	114 Uuq 7s <sup>2</sup> 7p <sup>2</sup>	115 Uup 7s <sup>2</sup> 7p <sup>3</sup>	116 Uub 7s <sup>2</sup> 7p <sup>4</sup>	118 Uuo 7s <sup>2</sup> 7p <sup>6</sup>	

Inner Transition Metals  
*f* subshell fills

Lanthanides  
Actinides

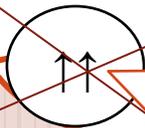
57 La 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	58 Ce 4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	59 Pr 4f <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	60 Nd 4f <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	61 Pm 4f <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	62 Sm 4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	63 Eu 4f <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	64 Gd 4f <sup>7</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	65 Tb 4f <sup>9</sup> 6s <sup>2</sup>	66 Dy 4f <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	67 Ho 4f <sup>11</sup> 6s <sup>2</sup>	68 Er 4f <sup>12</sup> 6s <sup>2</sup>	69 Tm 4f <sup>13</sup> 6s <sup>2</sup>	70 Yb 4f <sup>14</sup> 6s <sup>2</sup>
89 Ac 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	90 Th 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	91 Pa 5f <sup>2</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	92 U 5f <sup>3</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	93 Np 5f <sup>4</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	94 Pu 5f <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup>	95 Am 5f <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	96 Cm 5f <sup>7</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	97 Bk 5f <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup>	98 Cf 5f <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup>	99 Es 5f <sup>11</sup> 7s <sup>2</sup>	100 Fm 5f <sup>12</sup> 7s <sup>2</sup>	101 Md 5f <sup>13</sup> 7s <sup>2</sup>	102 No 5f <sup>14</sup> 7s <sup>2</sup>

Main-group elements      Transition metals      Inner transition metals

# Απαγορευτική αρχή του Pauli

- Σε δεδομένο άτομο είναι αδύνατον να υπάρχουν 2 ηλεκτρόνια που να έχουν και τους 4 κβαντικούς αριθμούς ίδιους.

Δεν είναι δυνατόν να τοποθετηθούν στο ίδιο τροχιακό δυο ηλεκτρόνια με την ίδια τιμή  $m_s$



Μη επιτρεπτή διάταξη



Επιτρεπτή διάταξη

Υπο-φλοιός	Αριθμός τροχιακών	Μέγιστος αριθμός $e^-$
S ( $l=0$ )	1	2
p( $l=1$ )	3	6
d( $l=2$ )	5	10
f( $l=3$ )	7	14

# Αρχή Δόμησης και Περιοδικός Πίνακας

Η ηλεκτρονική δομή η οποία συνδέεται με τη χαμηλότερη στάθμη ενέργειας ενός ατόμου, ονομάζεται θεμελιώδης κατάσταση, ενώ κάθε άλλη ονομάζεται διεγερμένη.

Οι χημικές ιδιότητες ενός ατόμου, είναι κατά κύριο λόγο συνάρτηση της ηλεκτρονικής δομής της θεμελιώδους του κατάστασης.

Η θεμελιώδης κατάσταση του ατόμου του νατρίου είναι η  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ , ενώ μια διεγερμένη είναι η  $1s^2 2s^2 2p^6 3p^1$

Η μετάπτωση από τη διεγερμένη κατάσταση του ατόμου του νατρίου στη θεμελιώδη, συνοδεύεται από εκπομπή κίτρινου φωτός στα  $589 \text{ nm}$

Οι διεγερμένες καταστάσεις, είναι απαραίτητες για την περιγραφή του φάσματος

## Η σειρά δόμησης κατά το μεγαλύτερο μέρος είναι αντίστοιχη της αυξανόμενης ενέργειας των υποφλοιών

- Τροχιακά με ίδιους  $n$ ,  $l$  αλλά διαφορετικούς  $m_l$  (διαφορετικά τροχιακά ίδιου υποφλοιού), έχουν ίδια ενέργεια.
- Η σειρά αυξανόμενης ενέργειας είναι αυτή που προκύπτει από το διπλανό διάγραμμα για τα  $1s$  έως τα  $3p$ .
- Όταν όμως οι υποφλοιοί έχουν περίπου ίδια ενέργεια η σειρά δόμησης δεν καθορίζεται μόνο από τη σειρά των ενεργειών τους αλλά από τις συνολικές ενέργειες των ατόμων. Αυτό σημαίνει ότι καθορίζεται εκτός από τις ενέργειες των υποφλοιών και από τις ενέργειες αλληλεπίδρασης των υποφλοιών μεταξύ τους. Έτσι προκύπτουν οι εξαιρέσεις του διπλανού μνημονικού κανόνα.

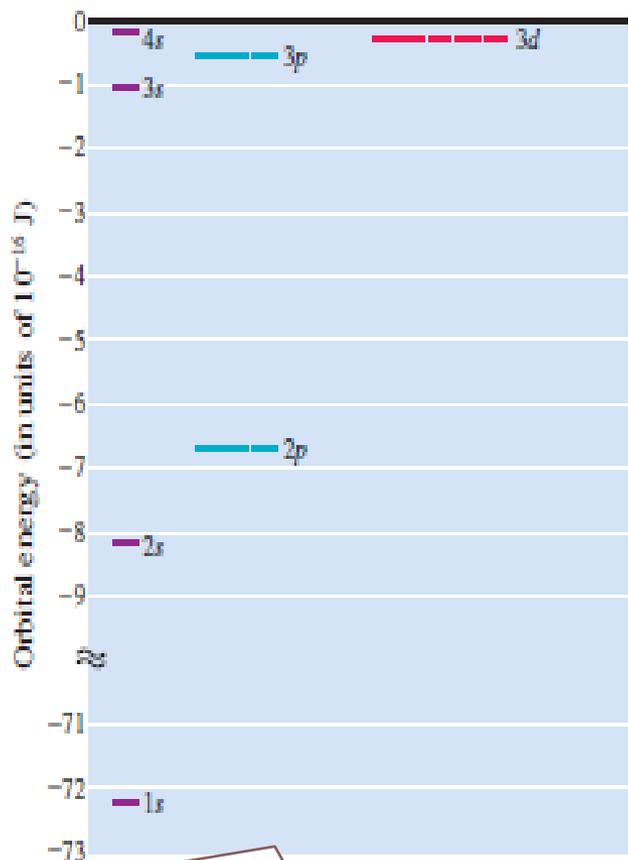
## Μνημονικό διάγραμμα σειράς δόμησης

	$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$
$n=1$	<del><math>1s^2</math></del>			
$n=2$	<del><math>2s^2</math></del>	<del><math>2p^6</math></del>		
$n=3$	<del><math>3s^2</math></del>	<del><math>3p^6</math></del>	<del><math>3d^{10}</math></del>	
$n=4$	<del><math>4s^2</math></del>	<del><math>4p^6</math></del>	<del><math>4d^{10}</math></del>	<del><math>4f^{14}</math></del>
$n=5$	<del><math>5s^2</math></del>	<del><math>5p^6</math></del>	<del><math>5d^{10}</math></del>	<del><math>5f^{14}</math></del>
$n=6$	<del><math>6s^2</math></del>	<del><math>6p^6</math></del>	<del><math>6d^{10}</math></del>	<del><math>6f^{14}</math></del>
$n=7$	<del><math>7s^2</math></del>	<del><math>7p^6</math></del>	<del><math>7d^{10}</math></del>	<del><math>7f^{14}</math></del>

<https://chem.libretexts.org/>

# Εξαιρέσεις του μνημονικού διαγράμματος για τη σειρά δόμησης

GENERAL CHEMISTRY EBBING  
GAMMON, NINTH EDITION



Ενέργειες τροχιακών για  
το άτομο Sc με  $Z=21$

- Μετά τα 20e πρώτα τα 3d (η ενέργεια του υποφλοιού 3d είναι χαμηλότερη από αυτή του 4s).
- Μετά τα 58e πρώτα τα 4f.
- Μετά τα 90e πρώτα τα 5f (η ενέργεια του υποφλοιού 5f είναι χαμηλότερη από αυτή του 6d) (ΠΡΟΣΟΧΗ: Συμπληρώνουμε κανονικά σύμφωνα με κανόνα και στη συνέχεια αντιστρέφουμε).
- Οι συμπληρωμένες ( $d^{10}$ ), και ημισυμπληρωμένες, ( $d^5$ ) d υποστιβάδες παρουσιάζουν αυξημένη σταθερότητα.

# Εξαιρέσεις της αρχής δόμησης των στοιχείων του Περιοδικού Πίνακα

**Χρόμιο  $Z = 24$**

- Η αρχή δόμησης προβλέπει τη δομή:  $[\text{Ar}] 3d^4 4s^2$
- Η σωστή δομή που βρίσκουμε πειραματικά είναι:  $[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$

**Χαλκός  $Z = 29$**

- Η αρχή δόμησης προβλέπει τη δομή:  $[\text{Ar}] 3d^9 4s^2$
- Η σωστή δομή που βρίσκουμε πειραματικά είναι:  $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$

# Ηλεκτρονική δομή ευγενών αερίων

Μονοατομικά  
σχετικά,  
χημικά  
αδρανή  
(σύμφωνα με  
νεώτερες  
απόψεις)

Ευγενές Αέριο	Ατομικός Αριθμός	Ηλεκτρονική δομή
Ήλιο (He)	2	$1s^2$
Νέο (Ne)	10	$1s^2 2s^2 2p^6$
Αργό (Ar)	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
Κρυπτό (Kr)	36	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$
Χένο (Xe)	54	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6$
Ραδόνιο (Rn)	86	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$

# Ηλεκτρόνια σθένους

Ηλεκτρόνια τα οποία δεν βρίσκονται στον κορμό ευγενούς ή ψευδοευγενούς αερίου, ονομάζονται ηλεκτρόνια σθένους.

Ο κορμός ευγενούς αερίου μαζί με τα  $(n-1)d^{10}$  ηλεκτρόνια είναι γνωστός ως κορμός ψευδοευγενούς αερίου, διότι τα ηλεκτρόνια που βρίσκονται σε αυτόν δε λαμβάνουν μέρος σε χημικές αντιδράσεις.

- Χρησιμοποιήστε την αρχή δόμησης για να βρείτε την ηλεκτρονική δομή του γαλλίου ( $Z = 31$ ). Ποια τα ηλεκτρόνια σθένους;

Αρχικά συμπληρώνουμε με βάση το μνημονικό διάγραμμα σειράς δόμησης



Στη συνέχεια κάνουμε την αναδιάταξη, αφού γνωρίζουμε ότι μετά τα 20 συμπληρώνουμε πρώτα τα 3d



Τέλος γνωρίζοντας το ότι η δομή του προηγούμενου ευγενούς αερίου, του Ar ( $Z = 18$ ), είναι:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

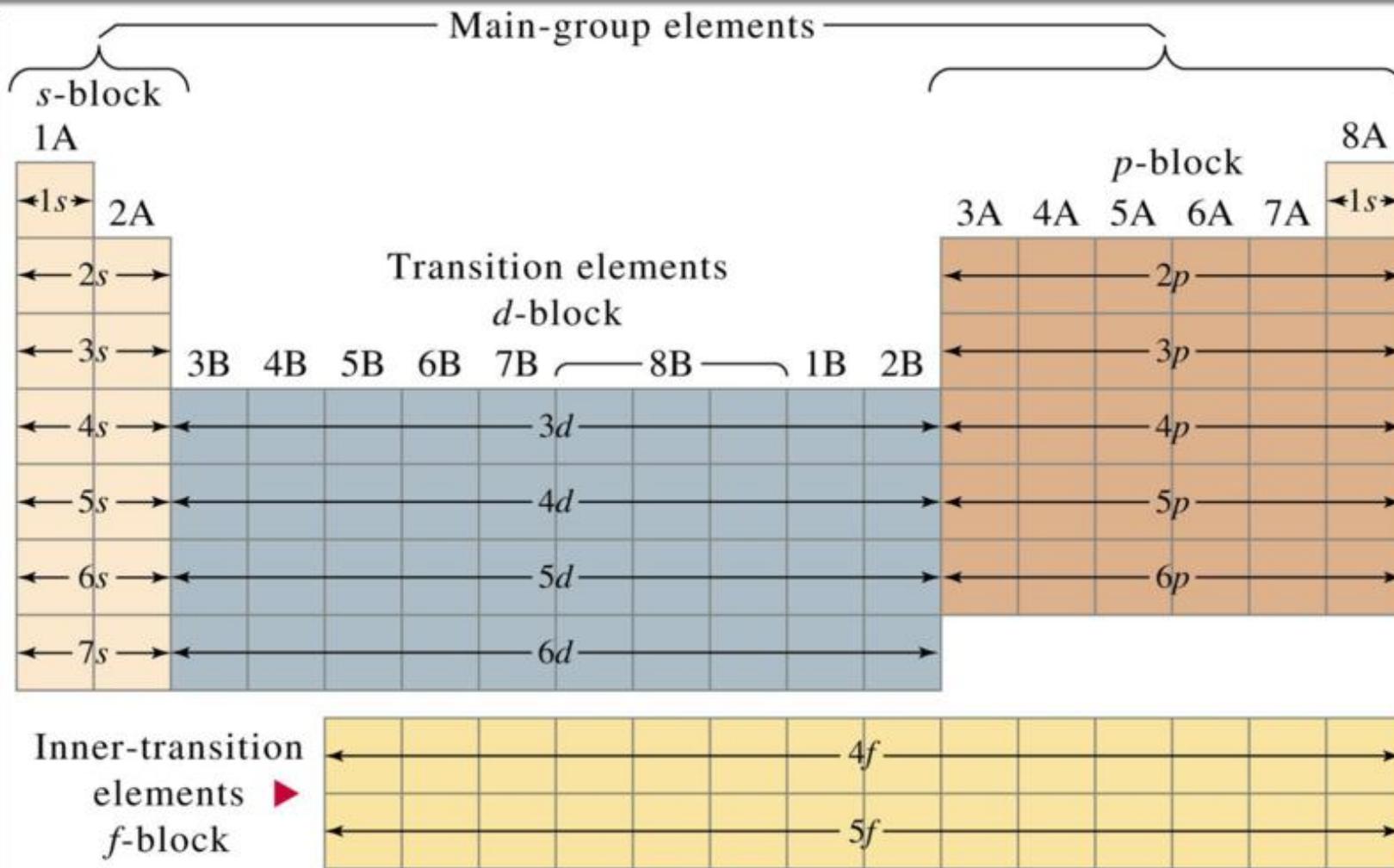
Γράφουμε την ηλεκτρονική δομή του γαλλίου με τη μορφή:



και εξαιρώντας και τα πλήρως συμπληρωμένα d, έχουμε τελικά ηλεκτρονική δομή φλοιού σθένους για το γάλλιο:



# Χρήση του Π.Π. για την αναγραφή των ηλεκτρονικών δομών



<https://commons.wikimedia.org>

Δεν συνιστάται η αναπαραγωγή της συνειδητά εικόνας. Όποιος το αρνηθεί να έχει μετανωμισθεί, με τον ορισμό ή διαγραφή, να δείξει ότι η σύνταξη είναι σωστή.

## Παραδείγματα

Βρείτε την ηλεκτρονική δομή για τη θεμελιώδη κατάσταση των ατόμων του (α) τελλουρίου  $Z=52$  και β) του νικελίου,  $Z=28$ . Ποια είναι η ηλεκτρονική δομή του φλοιού σθένους και για τα δύο;

## ΑΠΑΝΤΗΣΗ

Θα χρησιμοποιήσουμε το μοντέλο σύμφωνα με το οποίο συμπληρώνονται οι υποφλοιοί όταν διατρέχουμε τον Π.Π., (διαφάνεια 41).

Ξεκινάμε από το υδρογόνο και γράφουμε τους υποφλοιούς διαδοχικά έως ότου φθάσουμε στο ζητούμενο

(α) τελλούριο  $Z=52$ :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^4$

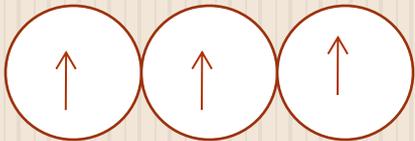
Άρα:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^4$  η δομή του φλοιού σθένους εφόσον το τελλούριο ανήκει στον p υποφλοιό είναι:  $5s^2 5p^4$

(β) νικέλιο,  $Z=28$ :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^8$  Άρα:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$

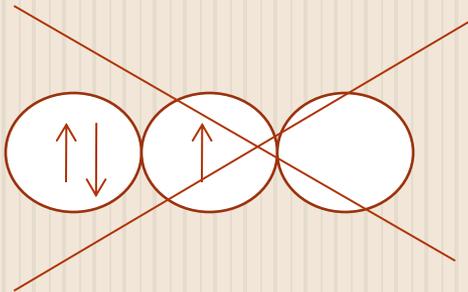
Η δομή του φλοιού σθένους εφόσον το νικέλιο ανήκει στα μεταβατικά στοιχεία είναι:  $3d^8 4s^2$

# Κανόνας του Hund – Μέγιστης πολλαπλότητας

- Όταν ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν εκφυλισμένα τροχιακά, (τροχιακά ίδιας ενέργειας), η διάταξη που προτιμάται είναι αυτή που δίνει το μέγιστο συνολικό spin.



Διάταξη με spin παράλληλα  $s = 3/2$

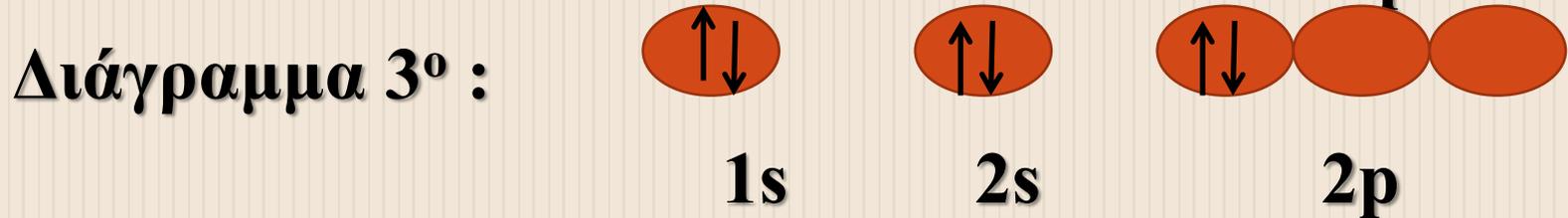
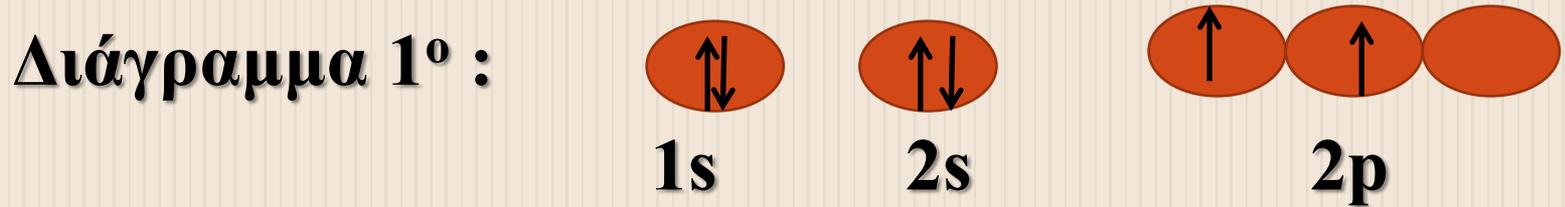


Διάταξη με spin αντιπαράλληλα  $s = 1/2$

- Για ένα άτομο με δύο ηλεκτρόνια τα spin μπορεί να είναι παράλληλα ή αντίθετα.
- Όταν είναι αντίθετα, οι μαγνητικές ροπές αλληλοεξουδετερώνονται και τα δύο ηλεκτρόνια χαρακτηρίζονται ως συζευγμένα.
- Άτομα με μόνο συζευγμένα ηλεκτρόνια, απωθούνται ελαφρά όταν τοποθετηθούν σε μαγνητικό πεδίο και ονομάζονται διαμαγνητικά.
- Άτομα που έχουν ένα ή περισσότερα ασύζευκτα ηλεκτρόνια, έλκονται ισχυρά από μαγνητικό πεδίο και ονομάζονται παραμαγνητικά.

# ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ

- Ο άνθρακας, έχει ατομικό αριθμό  $Z=6$ . Ποιο από τα διαγράμματα τροχιακών που ακολουθούν είναι το σωστό για αυτόν;



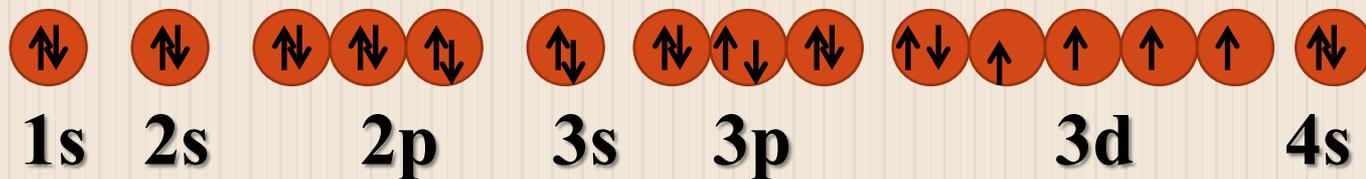
Απάντηση το 1<sup>ο</sup> σύμφωνα με τον κανόνα Hund

- Να γραφεί το διάγραμμα τροχιακών για τη θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου του σιδήρου.  $Z= 26$

Πρώτα βρίσκουμε την ηλεκτρονική δομή η οποία είναι



Διάγραμμα:

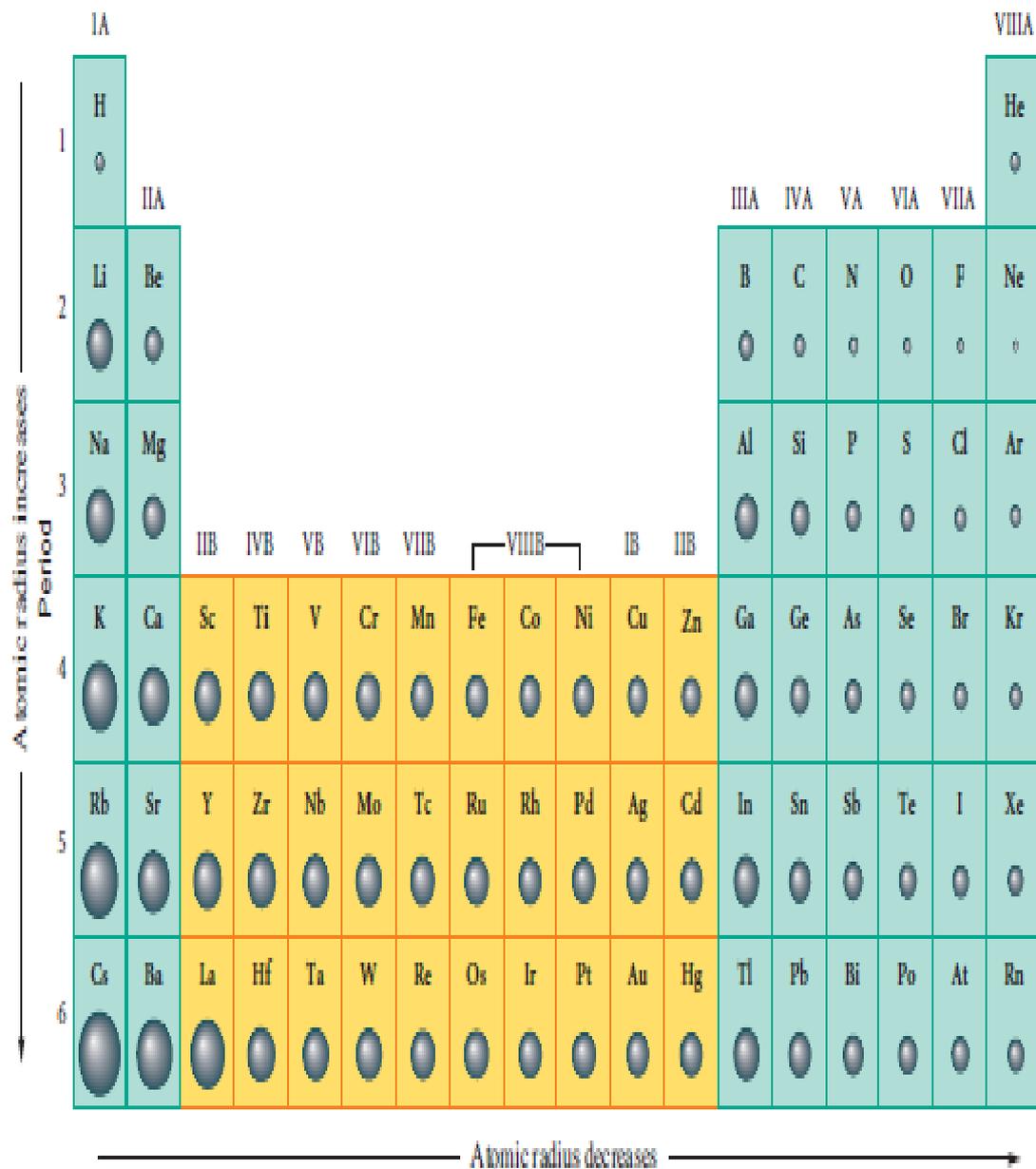


# Ορισμένες Περιοδικές ιδιότητες των στοιχείων του Περιοδικού Πίνακα

- Ατομικό μέγεθος: Ένα άτομο δεν έχει καθορισμένο μέγεθος με δεδομένο πως η στατιστική κατανομή των ηλεκτρονίων απλά ελαττώνεται σε πολύ μικρές τιμές με την αύξηση της απόστασης από τον πυρήνα. Το ατομικό άρα μέγεθος ορίζεται κατά κάποιο τρόπο αυθαίρετα και μετράται με διάφορους τρόπους.
- Ατομικές ακτίνες: Ουσιαστικά πρόκειται για ομοιοπολικές ακτίνες που τις παίρνουμε με μετρήσεις αποστάσεων μεταξύ πυρήνων ατόμων ενωμένων με χημικό δεσμό σε μοριακές ενώσεις. Η γενικότερη τάση που παρουσιάζεται για τις ατομικές ακτίνες είναι:
  - Σε κάθε περίοδο ελάττωση με την αύξηση του ατομικού αριθμού, (πυρηνικού φορτίου).
  - Μέσα σε μια ομάδα αύξηση με την αύξηση της περιόδου.

- 1<sup>ος</sup> παράγοντας ο κύριος κβαντικός αριθμός  $n$ . Όσο μεγαλύτερο  $n$  τόσο μεγαλύτερο το μέγεθος του τροχιακού.

- 2<sup>ος</sup> παράγοντας το δραστικό πυρηνικό φορτίο. Είναι το θετικό φορτίο που δρα από τον πυρήνα σε ένα ηλεκτρόνιο. Είναι μειωμένο σε σχέση με το πραγματικό πυρηνικό φορτίο, λόγω της δημιουργούμενης προάσπισης από κάθε ηλεκτρόνιο που παρεμβάλλεται ανάμεσα στον πυρήνα και στο εξεταζόμενο ηλεκτρόνιο



# Ενέργεια ιοντισμού

Atomic number,  $Z$

The periodic table illustrates the trend of ionization energy across the elements. The size of the grey spheres representing atoms increases from top-left to bottom-right, indicating that atoms further in this direction have lower ionization energies. The d-block elements (transition metals) are highlighted in yellow.

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

GENERAL CHEMISTRY EBBING GAMMON , NINTH EDITION

# ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- ΣΥΓΧΡΟΝΗ ΓΕΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ (10η Διεθνής Έκδοση), 1η/2014, Συγγραφείς: Darrell Ebbing, Steven Gammon, Τύπος: Σύγγραμμα, Διαθέτης (Εκδότης): ΤΡΑΥΛΟΣ & ΣΙΑ ΟΕ
- Εισαγωγή στην Ανόργανη και Γενική Χημεία, Έκδοση: 2<sup>η</sup> έκδοση/2014, Συγγραφείς: Νικόλαος Χατζηλιάδης, Τύπος: Σύγγραμμα, Διαθέτης (Εκδότης): UNIBOOKS, ΙΚΕ.
- Γενική Χημεία, 13<sup>η</sup> έκδοση, Έκδοση: 13<sup>η</sup>/2015, Συγγραφείς: Brown T. - LeMay E. - Burste B. - Murphy C. - Woodward P. - Stoltzfus M., Τύπος: Σύγγραμμα, Διαθέτης (Εκδότης): ΕΚΔΟΣΕΙΣ Α. ΤΖΙΟΛΑ & ΥΙΟΙ Α.Ε.
- Γενική και Ανόργανη Χημεία, Έκδοση: 1<sup>η</sup> έκδ./2012, Συγγραφείς: Λάλια - Καντούρη Μαρία, Παπαστεφάνου Στέργιος, Τύπος: Σύγγραμμα, Διαθέτης (Εκδότης): Ζήτη Πελαγία & Σια Ι.Κ.Ε.
- Αρχές Περιβαλλοντικής Γεωχημείας G. NELSON EBY, Μετάφραση Νίκος Λυδάκης Σημαντήρης, Δέσποινα Πεντάρη
- <https://www.ansys.com/blog/saving-chips-from-electromagnetic-coupling>
- <http://el.wikipedia.org/>
- <https://www.britannica.com/science/>