

# ΣΥΓΧΡΟΝΗ ΦΥΣΙΚΗ

## ΕΝΟΤΗΤΑ 7

Τα Πολυ-ηλεκτρονιακά άτομα στα πλαίσια  
της σύγχρονης Κβαντομηχανικής

Έκδοση 2023

© ΔΗΜΗΤΡΙΟΣ ΣΚΑΡΛΑΤΟΣ

## I. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

► **Μονοηλεκτρονιακό άτομο:** Ο πυρήνας θεωρείται πρακτικά ακίνητος με το ηλεκτρόνιο γύρω από αυτόν.

• Η δύναμη Coulomb που ασκεί ο πυρήνας στο ηλεκτρόνιο είναι η μοναδική δύναμη που δρά σε αυτό και θεωρείται ως κεντρομόλος.

Φορτίο του πυρήνα:

$$Q = Zq_p = Z|q_e|$$

Δυναμικό (Coulomb) του πυρήνα:

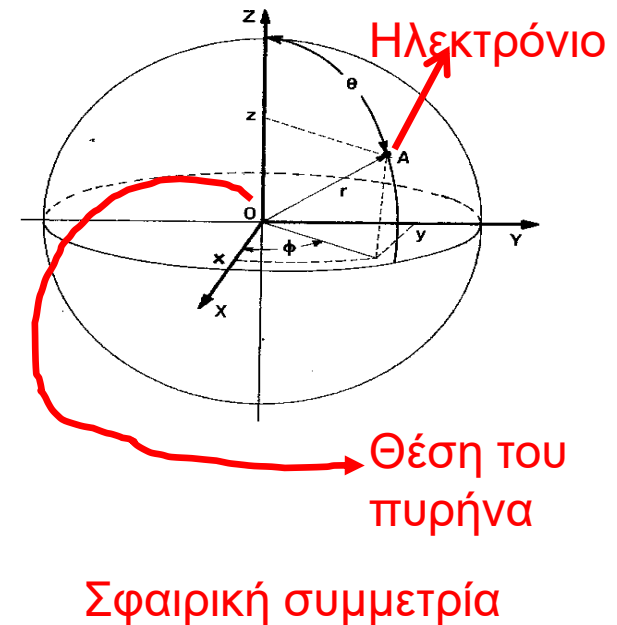
$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z|q_e|}{r}$$

Δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου :

$$U(r) = V(r)q_e = -V(r)|q_e| = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r}$$

• Χρονικά ανεξάρτητη Εξίσωση Schrödinger:

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi(r, \theta, \varphi) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} \right) \psi(r, \theta, \varphi) = 0$$



- Ενέργεια του ηλεκτρονίου:

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 q_e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Μέση Δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου :

$$\langle U \rangle = -\frac{m_e Z^2 q_e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

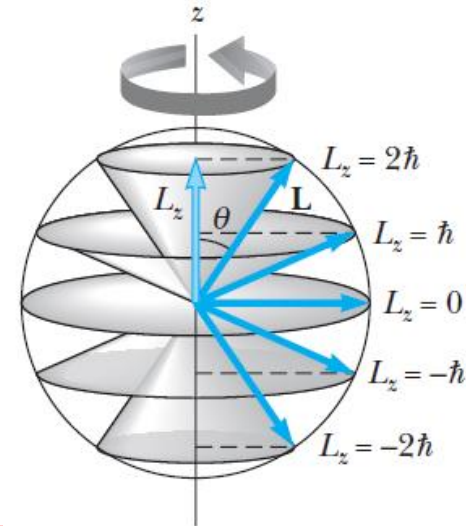
Η ενέργεια εξαρτάται αποκλειστικά από τον **κβαντικό αριθμό n (κύριος κβαντικός αριθμός)**

- Στροφορμή του ηλεκτρονίου:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \qquad L_z = m_l \hbar$$

Για κάθε δεδομένη τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού n

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$$



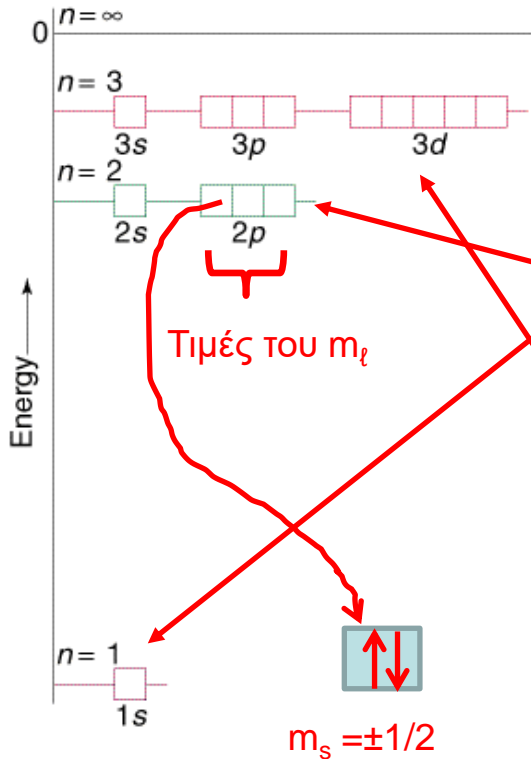
$$s(l=0), p(l=1), d(l=2), f(l=3), g(l=4), h(l=5), i(l=6), k(l=6)$$

Για κάθε δεδομένη τιμή του :

$$m_l = -l, -(l-1), \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, (l-1), l$$



- **Βασικό αποτέλεσμα:** Ύπαρξη εκφυλισμού που οφείλεται στη συμμετρία του προβλήματος. Σε κάθε τιμή ενέργειας (του  $n$ ) αντιστοιχούν περισσότερες από μία τιμές στροφορμής του ηλεκτρονίου (χονδρικά «τρόπων περιστροφής του»).



$n$	$l$	$m_l$	$m_s$	Καταστάσεις για κάθε $l$	Συνολικές Καταστάσεις σε φλοιό
1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	2 (K)
			$\pm \frac{1}{2}$		
2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	8 (L)
			$\pm \frac{1}{2}$		
			$\pm \frac{1}{2}$		
	1	-1, 0, 1	$\pm \frac{1}{2}$	6	
			$\pm \frac{1}{2}$		
			$\pm \frac{1}{2}$		
3	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	18 (M)
			$\pm \frac{1}{2}$		
	1	-1, 0, 1	$\pm \frac{1}{2}$	6	
			$\pm \frac{1}{2}$		
			$\pm \frac{1}{2}$		
			$\pm \frac{1}{2}$		
			$\pm \frac{1}{2}$		
			$\pm \frac{1}{2}$		
	2	-2, -1, 0, 1, 2	$\pm \frac{1}{2}$	10	
			$\pm \frac{1}{2}$		
$\pm \frac{1}{2}$					
$\pm \frac{1}{2}$					

Η ύπαρξη του spin αυξάνει το πλήθος των εκφυλισμένων καταστάσεων του ηλεκτρονίου σε κάθε ενέργειά του στο μονοηλεκτρονιακό άτομο.

- Η συνολική στροφορμή του ηλεκτρονίου – Σύνθεση Στροφορμών:

Το spin παρουσιάζει όλα τα χαρακτηριστικά στροφορμής (χωρίς να δεχόμαστε ως πειστική εξήγηση κάποια ιδιοπεριστροφή του ηλεκτρονίου). Το γεγονός αυτό, όμως, μας επιτρέπει να ορίσουμε «ολική στροφορμή» για το ηλεκτρόνιο συνθέτοντας την γνωστή τροχιακή στροφορμή του με το spin. Αποδεικνύεται ότι η ολική στροφορμή του ηλεκτρονίου ενός μονοηλεκτρονιακού ατόμου δίνεται από την έκφραση:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

με:

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad J_z = m_j \hbar$$

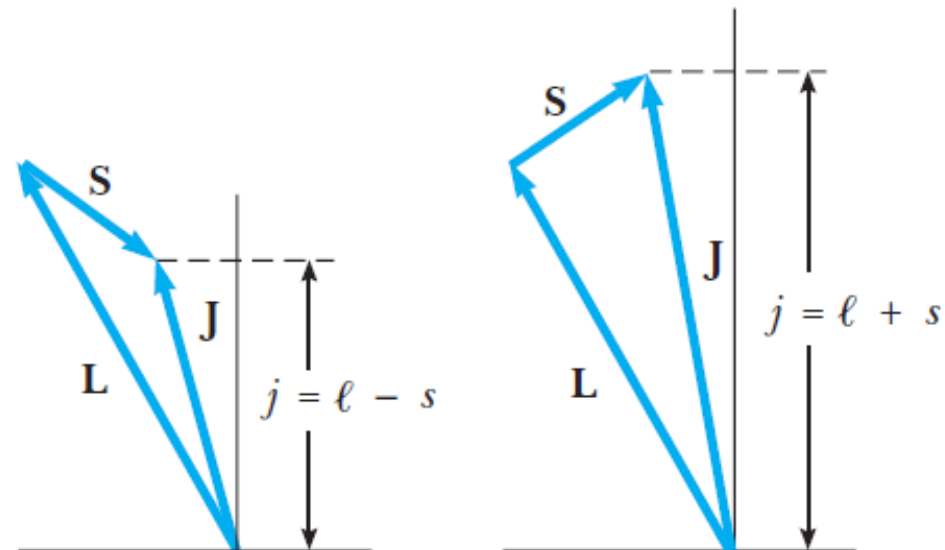
$$j = \ell + s, \ell + s - 1, \dots, |\ell - s|$$

(Κβαντικός αριθμός της ολικής στροφορμής)

$$m_j = -j, -(j-1), \dots, 0, \dots, (j-1), j$$

(Μαγνητικός κβαντικός αριθμός της ολικής στροφορμής)

Θεωρώντας κατ' αρχήν ανεξάρτητη τροχιακή περιστροφή και «ιδιοπεριστροφή» του ηλεκτρονίου έχουμε τα διπλανά αντιπροσωπευτικά διανυσματικά διαγράμματα με τη συνολική στροφορμή να διαγράφει κώνο περί τον άξονα Z.

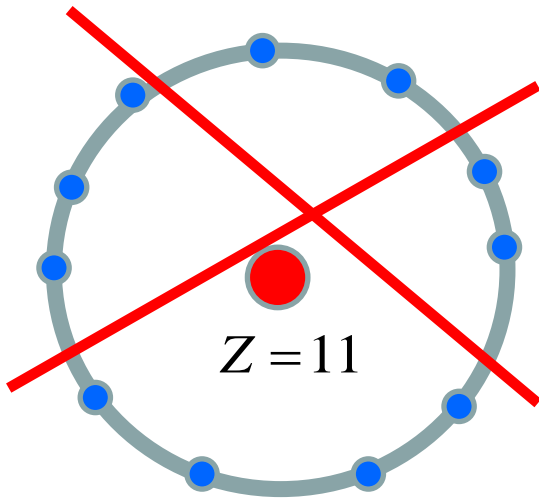


► Σε ένα Πολύ-ηλεκτρονιακό άτομο:

- Κάθε ηλεκτρόνιο υφίσταται ελκτική δύναμη Coulomb από τον πυρήνα. Παράλληλα όμως υφίσταται και την ηλεκτροστατική άπωση από τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια του ατόμου. Σε κάθε περίπτωση για να συγκροτείται ένα άτομο θα πρέπει η δύναμη από τον πυρήνα να υπερισχύει.
- Κατά συνέπεια η δυναμική ενέργεια κάθε ηλεκτρονίου στο άτομο θα είναι τύπου Coulomb και επομένως αναμένουμε η κατάσταση κάθε ηλεκτρονίου να περιγράφεται από τους κβαντικούς αριθμούς  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  και  $m_s$  και κυματοσυναρτήσεις της μορφής:

$$\psi_{n\ell m_\ell}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)\Phi_{m_\ell}(\varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)$$

- Ας θεωρήσουμε το Νάτριο ( $Z=11$ ), το οποίο έχει συνολικά 11 ηλεκτρόνια. Βιαστικά σκεπτόμενοι, η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας (θεμελιώδης) του ατόμου θα πρέπει να είναι αυτή όπου και τα 11 ηλεκτρόνια βρίσκονται στον φλοιό με  $n=1$  (K) όπως στο Σχήμα και είναι ηλεκτρόνια  $1s$ .



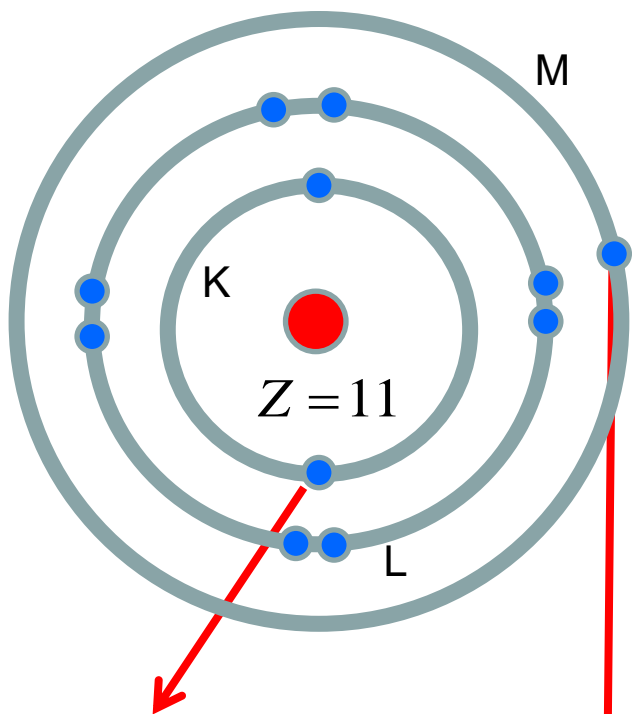
Κάτι τέτοιο όμως απαγορεύεται από την απαγορευτική αρχή του Pauli σύμφωνα με την οποία σε ένα άτομο δεν μπορεί να υπάρχουν δύο ηλεκτρόνια με τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς τους ίδιους.



Wolfgang Pauli (1900-1958)



- Κατά συνέπεια για το Νάτριο η διαμόρφωση της θεμελιώδους κατάστασής του θέλει τα ηλεκτρόνια κατανομημένα σε διαδοχικούς φλοιούς όπως στο Σχήμα.



Στον φλοιό K ( $n=1, \ell=0, m_\ell=0, m_s = \pm 1/2$ ) τοποθετούνται **2** ηλεκτρόνια με αντιπαράλληλα spin. **[Κατάσταση 1s]**

Στον φλοιό L

( $n=2, \ell=0, m_\ell=0, m_s = \pm 1/2$ ) **[Κατάσταση 2s]**

( $n=2, \ell=1, m_\ell=-1, m_s = \pm 1/2$ ) **[Κατάσταση 2p]**

( $n=2, \ell=1, m_\ell=0, m_s = \pm 1/2$ ) **[Κατάσταση 2p]**

( $n=2, \ell=1, m_\ell=1, m_s = \pm 1/2$ ) **[Κατάσταση 2p]**

τοποθετούνται **8** ηλεκτρόνια.

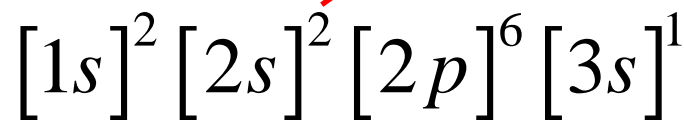
Στον φλοιό M τοποθετείται το τελευταίο ηλεκτρόνιο ( $n=3, \ell=0$ ) **[Κατάσταση 3s]**.

Έτσι η διαμόρφωση της θεμελιώδους κατάστασης του Νατρίου γράφεται:

Τα ηλεκτρόνια 1s «βλέπουν»  
όλο το πυρηνικό φορτίο  
(ισχυρά δέσμια)

Το εξωτερικό ηλεκτρόνιο 3s «βλέπει»  
μέρος του πυρηνικού φορτίου (χαλαρά δέσμιο) αφού  
παρεμβάλλονται 10 αρνητικά φορτισμένα ηλεκτρόνια  
**[Φαινόμενο της Θωράκισης (Screening)]**

Πλήθος ηλεκτρονίων



Κατάσταση



### III. ΤΟ ΑΤΟΜΟ ΤΟΥ ΗΛΙΟΥ (Z=2)

► Δύο ηλεκτρόνια. Ο πυρήνας θεωρείται πρακτικά ακίνητος με τα δύο (!) ηλεκτρόνια κάπου γύρω από αυτόν.

- Θα πρέπει να γνωρίζουμε ταυτόχρονα την πιθανή θέση στο χώρο γύρω από τον πυρήνα και των δύο ηλεκτρονίων !
- Η λύση της ανεξάρτητης από το χρόνο εξίσωσης του Schrödinger θα είναι πλέον της μορφής:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$$

(α) Έστω ότι τα δύο ηλεκτρόνια δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Τότε η κίνηση του ενός είναι ανεξάρτητη από την ύπαρξη του άλλου, και εξαρτάται μόνο από την αλληλεπίδρασή του με τον πυρήνα. Η εύρεση του ενός ηλεκτρονίου και του άλλου ηλεκτρονίου κάπου γύρω από τον πυρήνα Συνιστούν ανεξάρτητα ενδεχόμενα και έτσι μπορούμε να πούμε ότι:

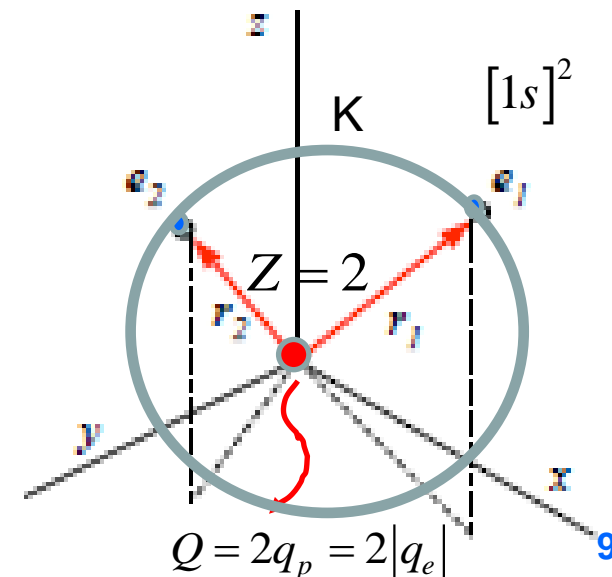
$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1)\psi(\vec{r}_2)$$

Άρα μπορούμε να λύσουμε τις ανεξάρτητες εξισώσεις:

$$\nabla_1^2 \psi_1(\vec{r}_1) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E_1 - U_1(r_1)] \psi_1(\vec{r}_1) = 0$$

$$\nabla_2^2 \psi_2(\vec{r}_2) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E_2 - U_2(r_2)] \psi_2(\vec{r}_2) = 0$$

$$U_i(r_i) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2q_e^2}{r_i}, i = 1, 2$$



που είναι εξισώσεις μονοηλεκτρονιακών ατόμων με  $Z=2$  και να αθροίσουμε τις δύο ενέργειες.

Η ολική ενέργεια του συστήματος θα είναι τότε:

$$E = E_1 + E_2 = -\frac{13,6Z^2}{n_1^2} - \frac{13,6Z^2}{n_2^2}, n_1 \text{ και } n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

Π.χ η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης θα είναι:

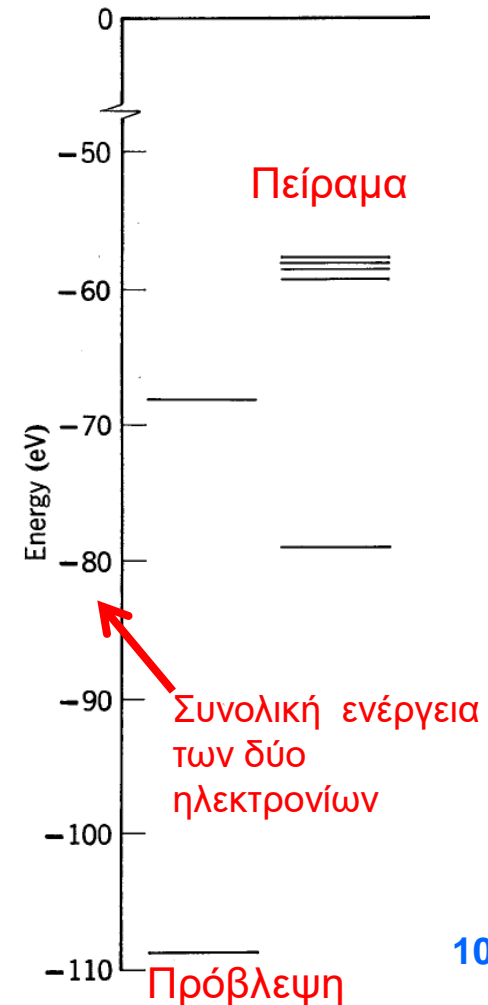
$$E = E_1(n=1) + E_2(n=1) = -109eV$$

Η ενέργεια της πρώτης διεγερμένης κατάστασης θα είναι:

$$E = E_1(n_1=1) + E_2(n_2=2) = -\frac{13,6Z^2}{1^2} - \frac{13,6Z^2}{2^2} = -68eV$$

Πλήρης αποτυχία !!

Δεν μπορεί να αγνοηθεί η αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων !!



**(β) Αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων.**

1. Θεμελιώδης Κατάσταση:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2q_e^2}{r_1} \right) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2q_e^2}{r_2} \right) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e^2}{r_{12}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Αδιατάρακτο Πρόβλημα μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων.  
Λύθηκε πριν και δίνει έναν όρο ενέργειας :

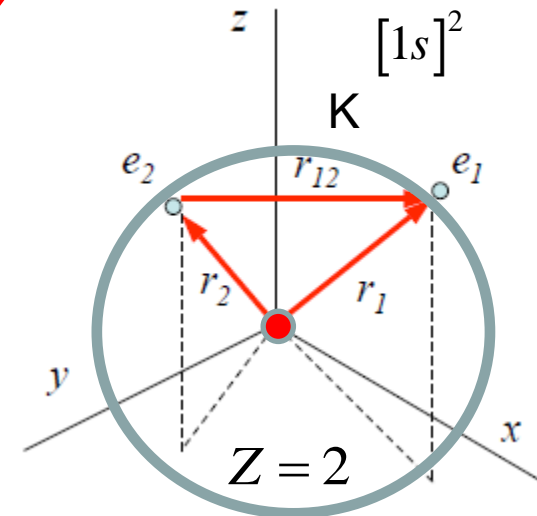
$$E_1^{Αδιατ.} = -109eV$$

«Διαταραχή» στο πρόβλημα. Κάνοντας χρήση θεωρίας διαταραχών προσθέτει έναν όρο ενέργειας :

$$E_1^{\Deltaιατ.} = \frac{5}{8} \frac{q_e^2}{(4\pi\epsilon_0)\alpha_0} Z(=2) = +34,17eV$$

Άρα:

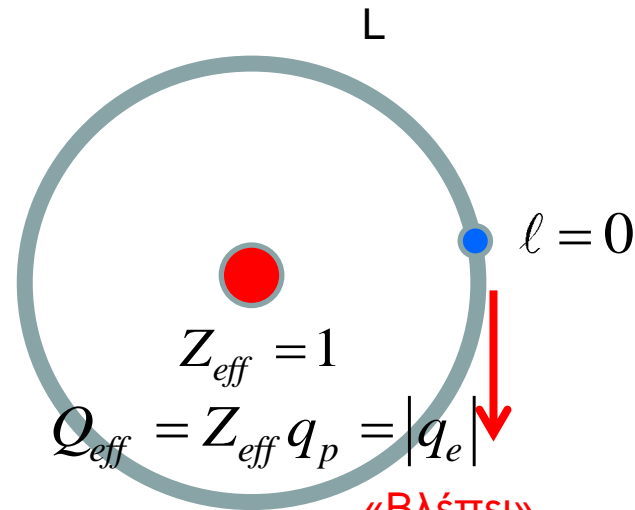
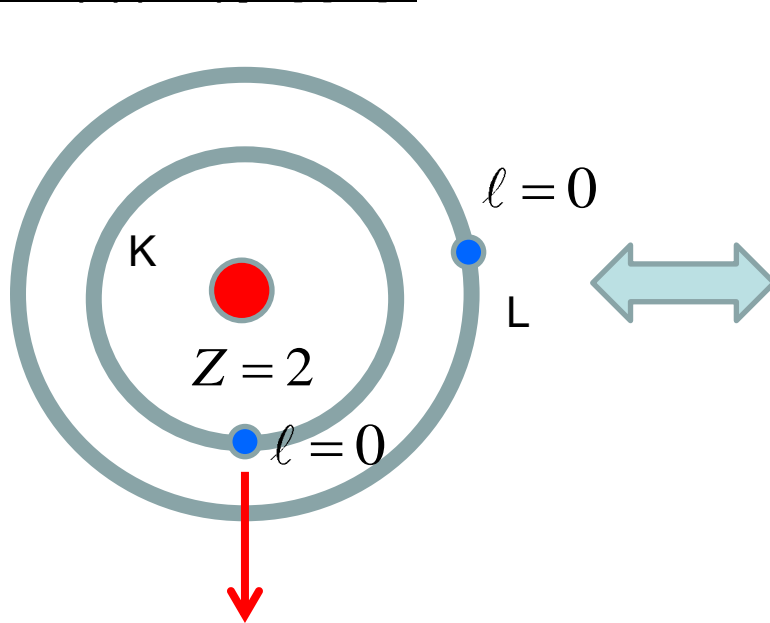
$$E_1 = E_1^{Αδιατ.} + E_1^{\Deltaιατ.} = -109eV + 34,17eV = -74,83eV$$



$$Q = Zq_p = 2|q_e|$$

2. Διεγερμένες Καταστάσεις (Χονδρικοί Υπολογισμοί λαμβάνοντας υπόψιν τη θωράκιση):

(α) Διεγερμένη  $[1s]^1[2s]^1$ :



«Βλέπει»  
όλο το πυρηνικό φορτίο  $Q = Zq_p = 2|q_e|$

$$E_1 = -\frac{13,6Z^2}{n_1^2} = -54,4eV$$

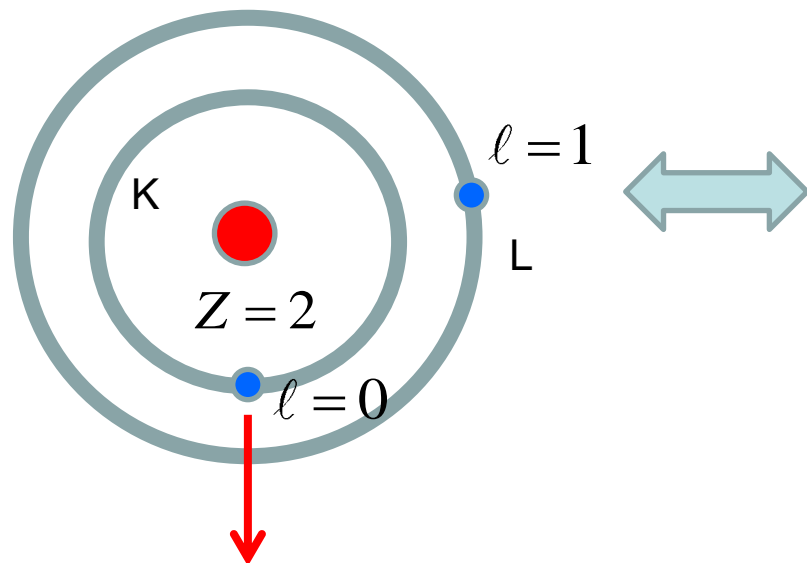
Αρα:  $E = -57,8eV$  (Πείραμα  $-58,4eV$ )

«Βλέπει»  
τον πυρήνα «θωρακισμένο»  
από το πρώτο ηλεκτρόνιο.  
Σαν να έχουμε  
μονοηλεκτρονιακό άτομο στην  
 $n=2$ .

$$E_2 = -\frac{13,6Z_{eff}^2}{n_2^2} = -3,4eV$$

(Πείραμα  $-4eV$ )

(β) Διεγερμένη [1s]¹[2p]¹:



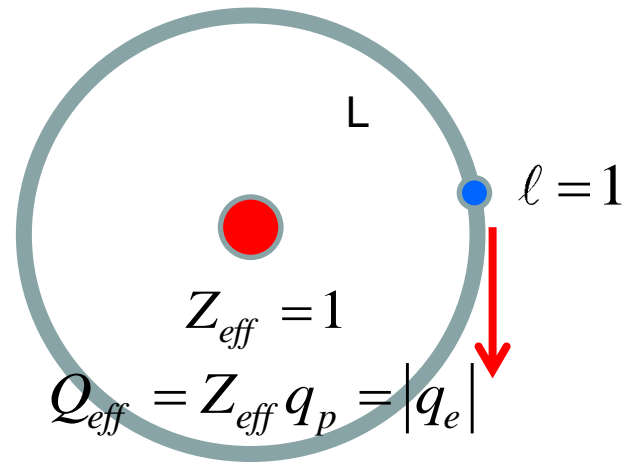
«Βλέπει»  
όλο το πυρηνικό φορτίο

$$Q = Zq_p = 2|q_e|$$

$$E_1 = -\frac{13,6Z^2}{n_1^2} = -54,4eV$$

Άρα: (Πείραμα -57,8eV)

$$E = -57,8eV$$



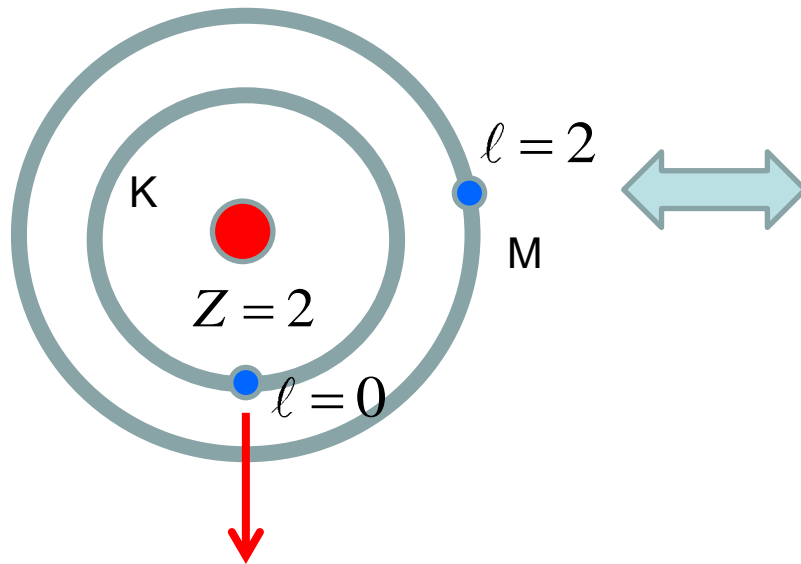
«Βλέπει»  
τον πυρήνα «θωρακισμένο»  
από το πρώτο ηλεκτρόνιο.  
Σαν να έχουμε  
μονοηλεκτρονιακό άτομο στην  
n=2.

$$E_2 = -\frac{13,6Z_{eff}^2}{n_2^2} = -3,4eV$$

(Πείραμα -3,4eV)

Ίδια με πριν! Το πείραμα δείχνει όμως διαφορά 0,6eV. Γιατί;  
Μήπως στα πολυηλεκτρονιακά άτομα η ενέργεια εξαρτάται  
και από το  $\ell$ ; Εάν ναι με ποιον τρόπο?

(γ) Διεγερμένη  $[1s]^1[3d]^1$ :



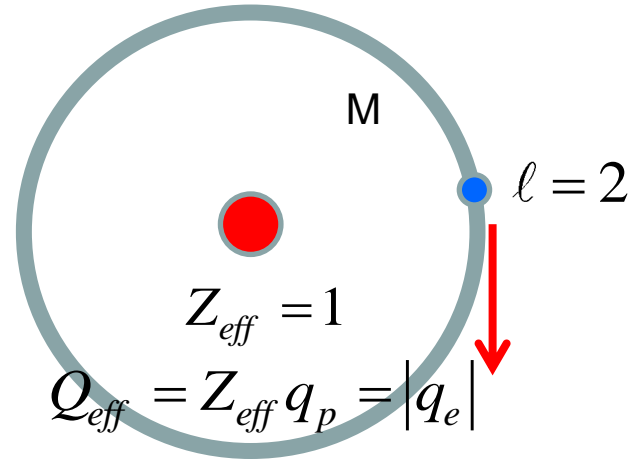
«Βλέπει»  
όλο το πυρηνικό φορτίο

$$Q = Zq_p = 2|q_e|$$

$$E_1 = -\frac{13,6Z^2}{n_1^2} = -54,4eV$$

Άρα:

$$E = -55,9eV$$



«Βλέπει»  
τον πυρήνα «θωρακισμένο»  
από το πρώτο ηλεκτρόνιο.  
Σαν να έχουμε  
μονοηλεκτρονιακό άτομο στην  
 $n=3$ .

$$E_2 = -\frac{13,6Z_{eff}^2}{n_2^2} = -1,5eV$$

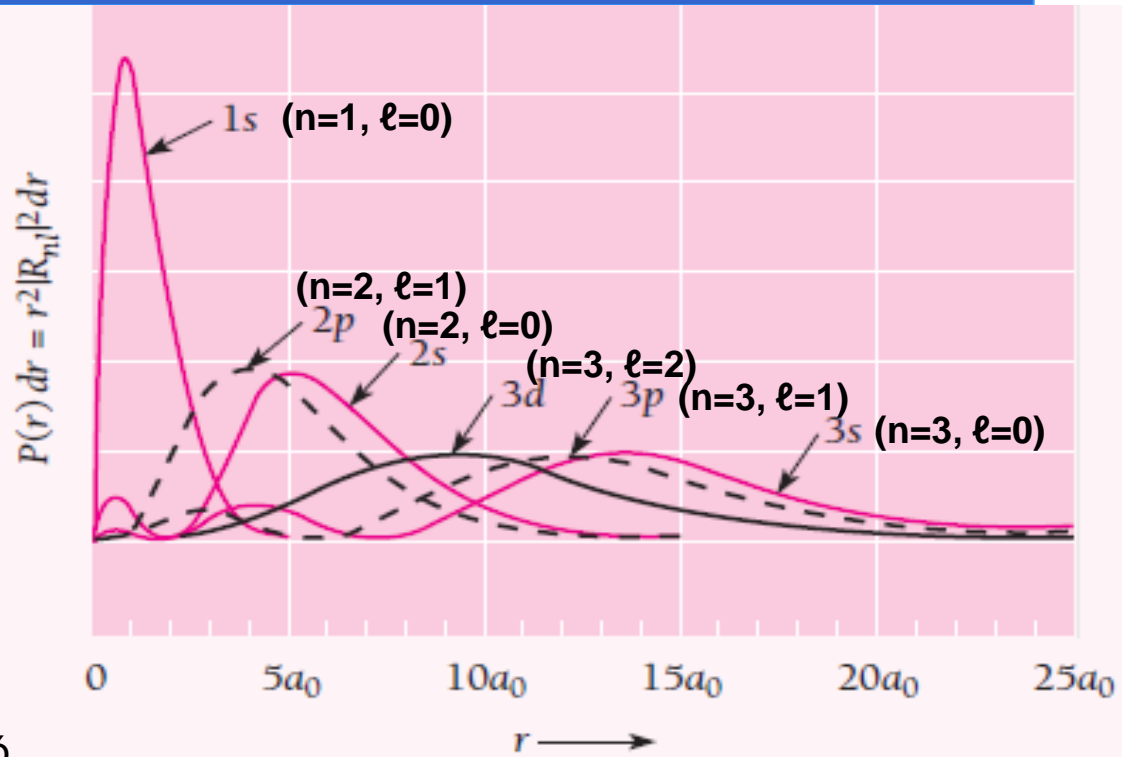
(Πείραμα  $-1,5eV$ )

Πολύ καλή σύμπτωση με το πείραμα !  
Εδώ γιατί;

Ας ξαναθυμηθούμε την ακτινική πυκνότητα πιθανότητας Μονοηλεκτρονιακού ατόμου.

• Διεγερμένες καταστάσεις για το He:

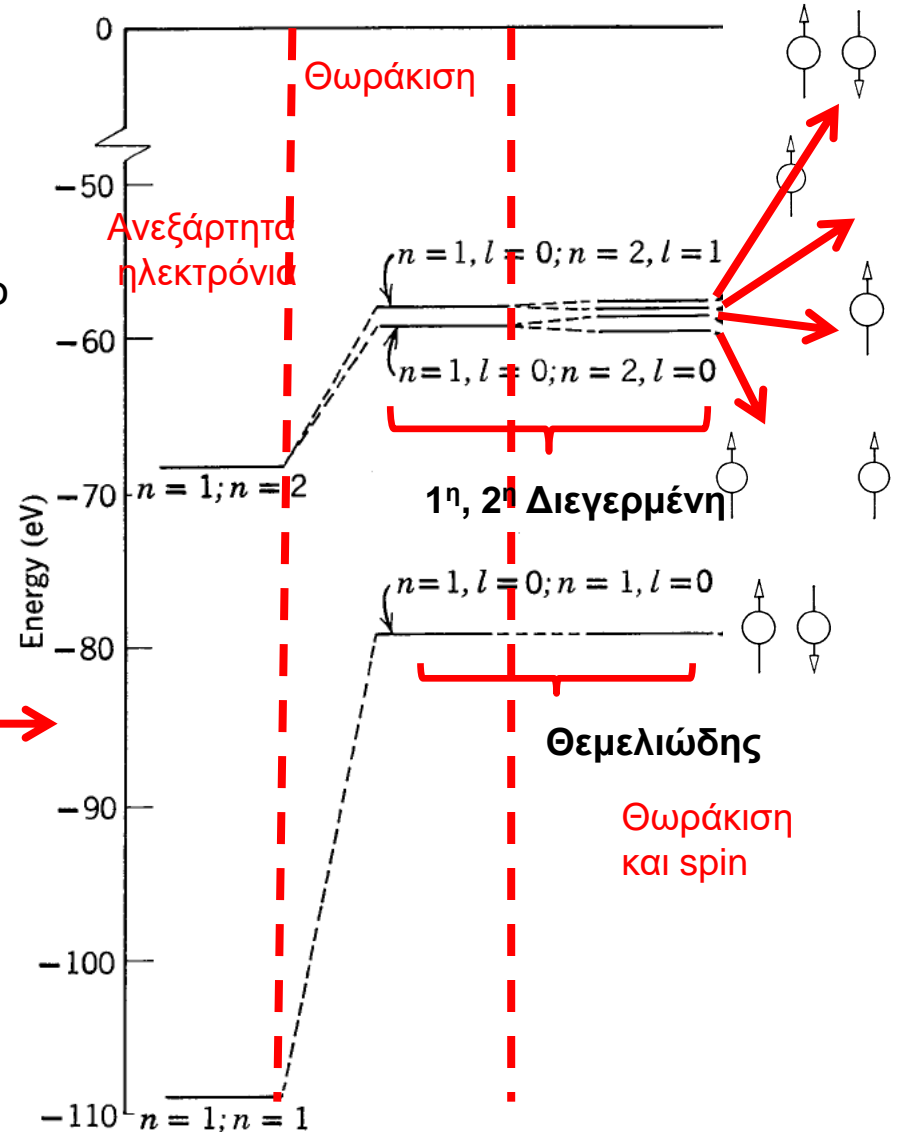
Το 1<sup>ο</sup> e<sup>-</sup> στην 1s θωρακίζει τον πυρήνα για το 2<sup>ο</sup> που μπορεί να βρίσκεται σε άλλο φλοιό. Το 2<sup>ο</sup> e<sup>-</sup> «βλέπει» ένα μονοηλεκτρονιακό άτομο λόγω της θωράκισης. Η κυματοσυνάρτηση 2s είναι πιο «διδυσδική» από την 2p διαπερνώντας την θωράκιση. Άρα το 2<sup>ο</sup> e<sup>-</sup> στην 2s βλέπει για κάποιο χρονικό διάστημα το πλήρες πυρηνικό φορτίο και υφίσταται ισχυρότερη έλξη από ότι εάν βρισκόνταν στην κατάσταση 2p. Για το λόγο αυτό η διεγερμένη κατάσταση  $[1s]^1[2s]^1$  έχει συνολικά χαμηλότερη μετρούμενη ενέργεια (-58,4eV) από την διεγερμένη κατάσταση  $[1s]^1[2p]^1$  (-57,8eV). Ο χονδροειδής υπολογισμός που κάναμε δεν μπορεί να προβλέψει αυτή τη διαφορά **(Άρση του εκφυλισμού)**.



Στη διεγερμένη κατάσταση  $[1s]^1[3d]^1$  το 1<sup>ο</sup> e<sup>-</sup> στην 1s θωρακίζει αποτελεσματικά τον πυρήνα τον πυρήνα για το 2<sup>ο</sup> που βρίσκεται στην 3d (η οποία δεν έχει καθόλου «διδυσδική» κυματοσυνάρτηση) και ο υπολογισμός είναι ακριβής. Εάν το 2<sup>ο</sup> e<sup>-</sup> ήταν στην 3s θα είχε χαμηλότερη ενέργεια λόγω πιο διδυσδικής κυματοσυνάρτησης. **(Άρση του εκφυλισμού)**.

Οι χονδροειδείς υπολογισμοί που κάναμε στις διεγερμένες λαμβάνουν υπόψιν μόνο τη θωράκιση του πυρήνα για το 2<sup>ο</sup> ηλεκτρόνιο. Δεν λαμβάνουν υπόψιν άλλες σοβαρές παραμέτρους, όπως τις ακριβείς ιδιότητες των κυματοσυναρτήσεων δύο ηλεκτρονίων και τον ρόλο του spin.

Συνολική ενέργεια των δύο ηλεκτρονίων →





### III. Η ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΤΟΥ ΜΕΣΟΥ (ΕΝΕΡΓΟΥ) ΠΕΔΙΟΥ

- Οι χονδροειδείς υπολογισμοί που προηγήθηκαν δεν αποδίδουν σε πιο σύνθετα πολυηλεκτρονιακά άτομα. Για τον υπολογισμό της συνολικής ενέργειας της θεμελιώδους κατάστασης χρησιμοποιούμε θεωρία διαταραχών. Για τις διεγερμένες καταστάσεις χονδροειδείς υπολογισμούς. Απαιτείται εννιαία συνολική αντιμετώπιση.

- Η γενική αντιμετώπιση ακολουθεί το εξής σκεπτικό.

(α) Αναζητείται μία συνάρτηση που δίνει την έκφραση του δυναμικού (και κατά συνέπεια της δυναμικής ενέργειας) κάθε ηλεκτρονίου ενός πολυηλεκτρονιακού ατόμου. Αυτή πρέπει να συνυπολογίζει την έλξη από τον πυρήνα και τις απώσεις που δέχεται από τα άλλα ηλεκτρόνια. Ουσιαστικά να αντικατοπτρίζει το φαινόμενο της θωράκισης. Με βάση αυτή κατασκευάζουμε το μονοδιάστατο διάγραμμα E-r για ένα πολυηλεκτρονιακό άτομο, όπως ακριβώς κάναμε και στο μονοηλεκτρονιακό.

(β) Η συνάρτηση αυτή είναι της γενικής μορφής:

$$V_{eff}(r) = \frac{Q_{eff}(r)}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{Z_{eff}(r)|q_e|}{4\pi\epsilon_0 r} \Rightarrow U_{eff}(r) = \frac{Z_{eff}(r)q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Φαινόμενη δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου συναρτήσει της απόστασής του από τον πυρήνα.

Φαινόμενο δυναμικό του πυρήνα συναρτήσει της απόστασης του ηλεκτρονίου από αυτόν.

Φαινόμενο φορτίο του πυρήνα συναρτήσει της απόστασης του ηλεκτρονίου από αυτόν.

Φαινόμενος ατομικός αριθμός του πυρήνα συναρτήσει της απόστασης του ηλεκτρονίου από αυτόν.

Δεδομένου ότι ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται πολύ κοντά στον πυρήνα «βλέπει» το πυρηνικό φορτίο σχεδόν αθωράκιστο, γιατί ουσιαστικά έχει «πίσω» του τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια, θα πρέπει:

$$Q_{eff}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Zq_p = Z|q_e| \quad Z_{eff}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Z$$

Δεδομένου ότι το πιο απομακρυσμένο από τον πυρήνα ηλεκτρόνιο «βλέπει» το πυρηνικό φορτίο θωρακισμένο από τα υπόλοιπα  $Z-1$  ηλεκτρόνια θα πρέπει:

$$Q_{eff}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} q_p = |q_e| \quad Z_{eff}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 1$$

**Η παραπάνω προσέγγιση είναι γνωστή ως προσέγγιση μέσου πεδίου.**

(γ) Χαρακτηριστικοί τύποι θωράκισης

$$Z_{eff}(r) = 1 + \frac{b}{r}$$

Ιδανική για τα αλκάλια

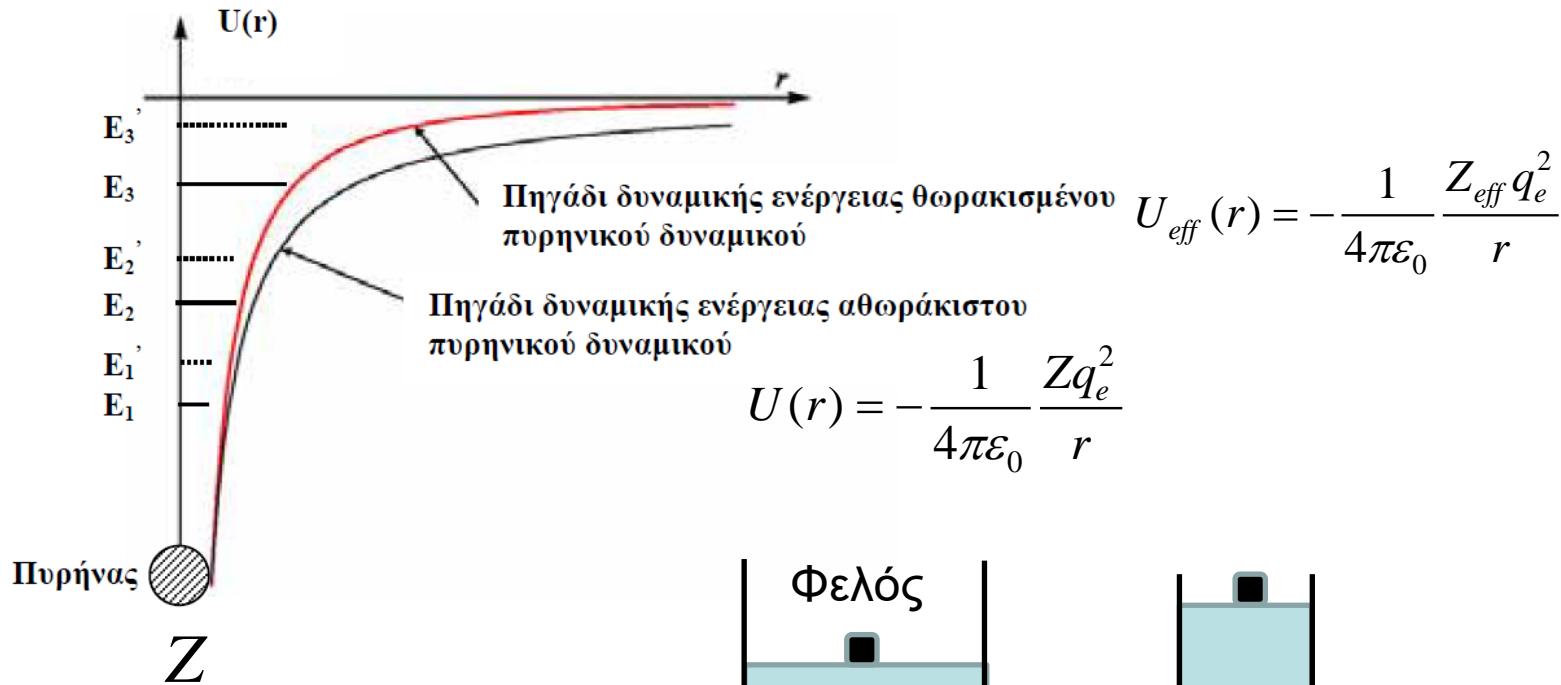
⇒ Μήκος Θωράκισης (Screening Length)

$$Z_{eff}(r) = Ze^{-\frac{r}{\alpha_{TF}}}$$

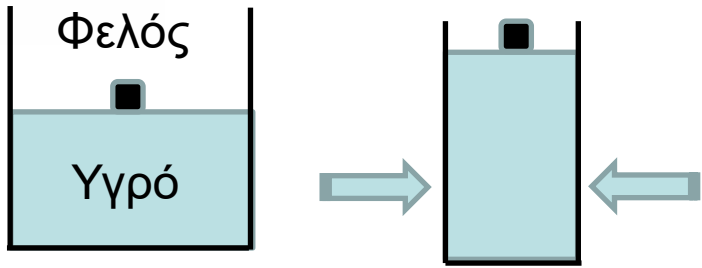
Θωράκιση Thomas-Fermi



(δ) Το πηγάδι δυναμικής ενέργειας θωρακισμένου δυναμικού είναι στενότερο και «ψηλότερο» από αυτό ενός αθωράκιστου πυρήνα.



Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την ανύψωση των ενεργειακών σταθμών στο πηγάδι του θωρακισμένου δυναμικού.



Μηχανικό Ανάλογο

## Χαρακτηριστική Εφαρμογή: Τα Αλκάλια.

• Li (Z=3):  $[1s]^2 [2s]^1$

Na (Z=11):  $[1s]^2 [2s]^2 [2p]^6 [3s]^1$

K (Z=19):  $[1s]^2 [2s]^2 [2p]^6 [3s]^2 [3p]^6 [4s]^1$

Rb (Z=37):

Cs (Z=55):

Fr (Z=87):

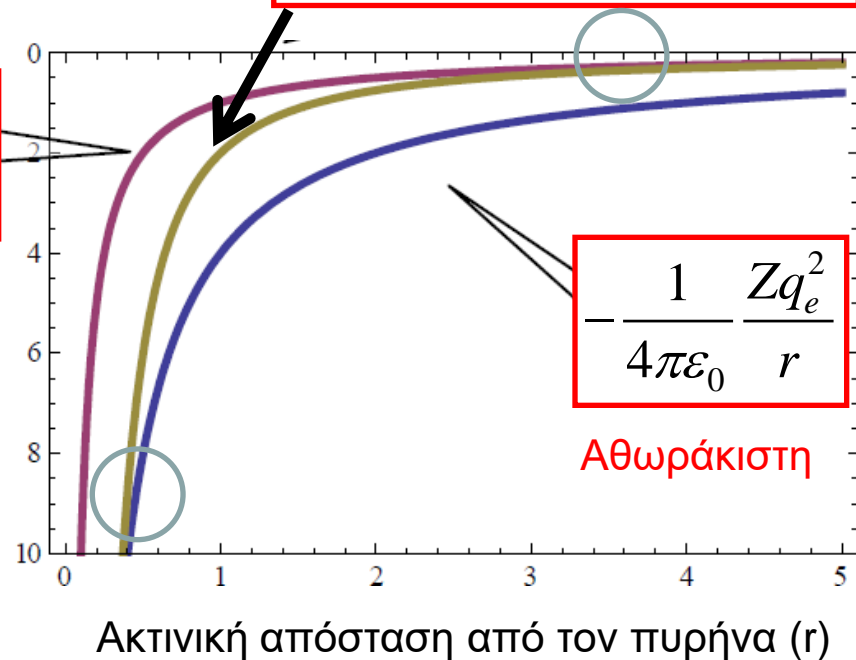
$$Z_{eff}(r) = 1 + \frac{b}{r}$$

Που είναι η 3d;

$$-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e^2}{r}$$

Δυναμική  
Ενέργεια  
[x(-1)]

$$U_{eff}(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e^2}{r} \left(1 + \frac{b}{r}\right)$$



- Χρονικά ανεξάρτητη Εξίσωση Schrödinger για κάθε ηλεκτρόνιο:

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi(r, \theta, \varphi) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[ E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e^2}{r} \left( 1 + \frac{b}{r} \right) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = 0$$

$$\psi_{n\ell m_\ell}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) \Theta_{\ell m_\ell}(\theta) \Phi_{m_\ell}(\varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)$$

$$E_{n\ell} = - \frac{q_e^2}{(4\pi\epsilon_0)2\alpha_0 [n - D(\ell)]^2}$$

Για το Νάτριο

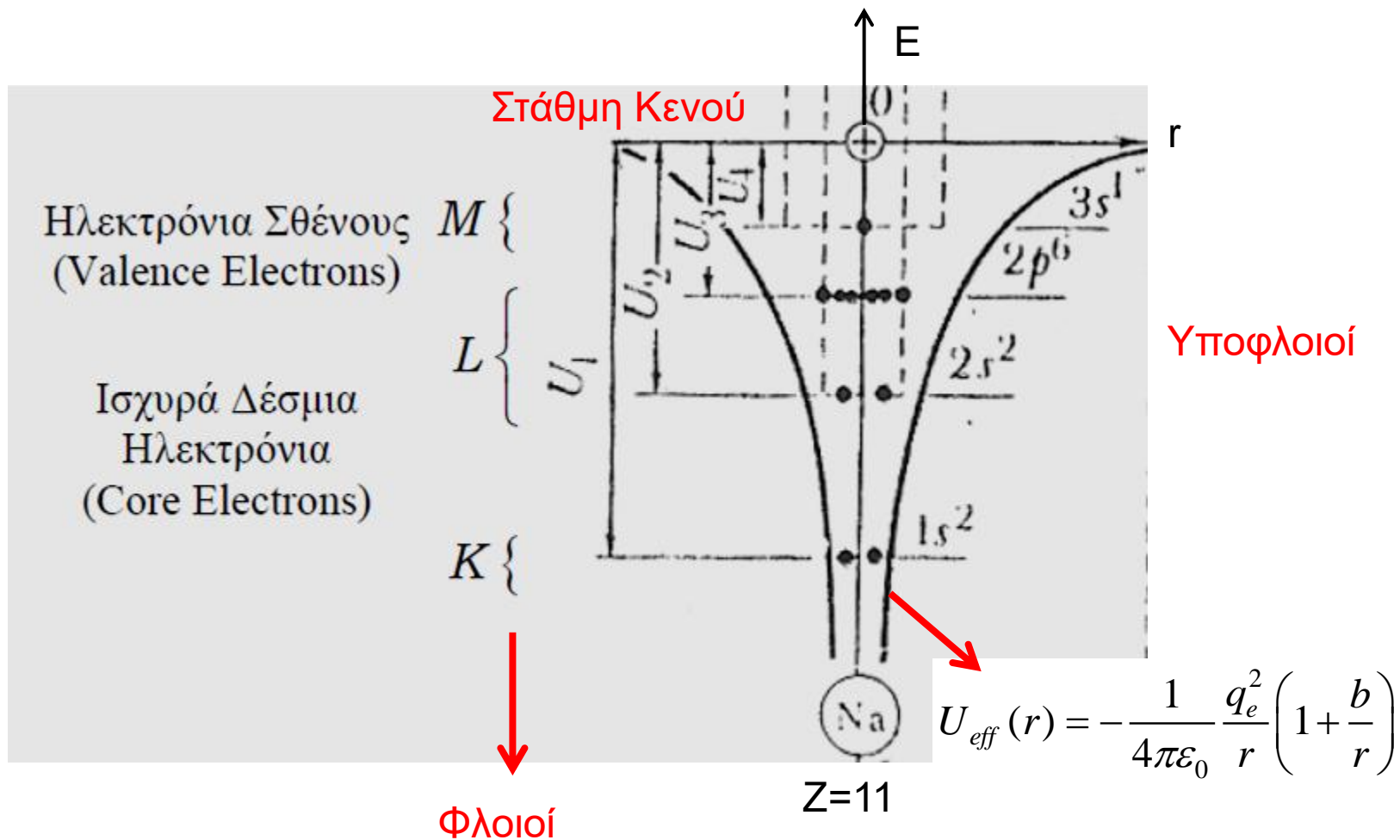
Κατάσταση	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>
<b><i>D</i>(<i>ℓ</i>)</b>	1.35	0.86	0.01	~0

Εξαρτάται και από το *ℓ* !!!

Κβαντική Ατέλεια (Quantum Defect)

Αναμένεται άρση του εκφυλισμού που παρατηρήθηκε στα Μονοηλεκτρονιακά Άτομα !!!

Από πού προκύπτει η εξάρτηση από το *ℓ*; Αιτία είναι πάλι οι «δισιδυτικές» ακτινικές κυματοσυναρτήσεις.



Το μονοδιάστατο διάγραμμα E-r για το Νάτριο

## IV. ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΛΟ ΤΩΝ ΦΛΟΙΩΝ (ΓΕΝΙΚΗ ΑΝΤΙΜΕΤΩΠΙΣΗ ΠΟΛΥ-ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΩΝ ΑΤΟΜΩΝ)

1. Η ενεργειακή κατάσταση κάθε ηλεκτρονίου ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου χαρακτηρίζεται από τέσσερις κβαντικούς αριθμούς, τους γνωστούς μας από τα μονοηλεκτρονιακά άτομα  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  και  $m_s$ . Οι μεταξύ τους σχέσεις είναι οι ίδιες όπως στην περίπτωση των μονοηλεκτρονικών ατόμων. Δηλαδή σε κάθε τιμή του  $n$  αντιστοιχούν  $n$  τιμές του  $l$ . Για κάθε τιμή του  $l$  υπάρχουν  $(2l + 1)$  δυνατές τιμές του  $m_l$ . Ο κβαντικός αριθμός  $m_s$  παίρνει πάντα τις δύο δυνατές τιμές  $\pm 1/2$ .

2. Ο κύριος κβαντικός αριθμός  $n$  καθορίζει και έναν ενεργειακό φλοιό (ή στοιβάδα). Ένα πολυηλεκτρονικό άτομο μπορεί να έχει μέχρι 7 ενεργειακούς φλοιούς (στοιβάδες) που συμβολίζονται ως :

**K (n=1), L(n=2), M(n=3), N(n=4), O(n=5), P(n=6), Q(n=7)**

3. Δεδομένου ότι ο παρατηρούμενος στα μονοηλεκτρονιακά άτομα εκφυλισμός αίρεται, **κάθε ενεργειακός φλοιός συνίσταται από  $n$  υποφλοιούς, όσες και οι τιμές του  $l$  που αντιστοιχούν στην τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού που χαρακτηρίζει τον φλοιό.** Οι υποφλοιοί συμβολίζονται ως

**s( $l = 0$ ), p( $l = 1$ ), d( $l = 2$ ), f( $l = 3$ ), g( $l = 4$ ), h( $l = 5$ ), i( $l = 6$ ), k( $l = 7$ )**

4. Η συμπλήρωση των φλοιών και υποφλοιών με ηλεκτρόνια στην θεμελιώδη κατάσταση ελάχιστης ενέργειας του πολυηλεκτρονιακού ατόμου γίνεται με βάση τους ακόλουθους κανόνες:

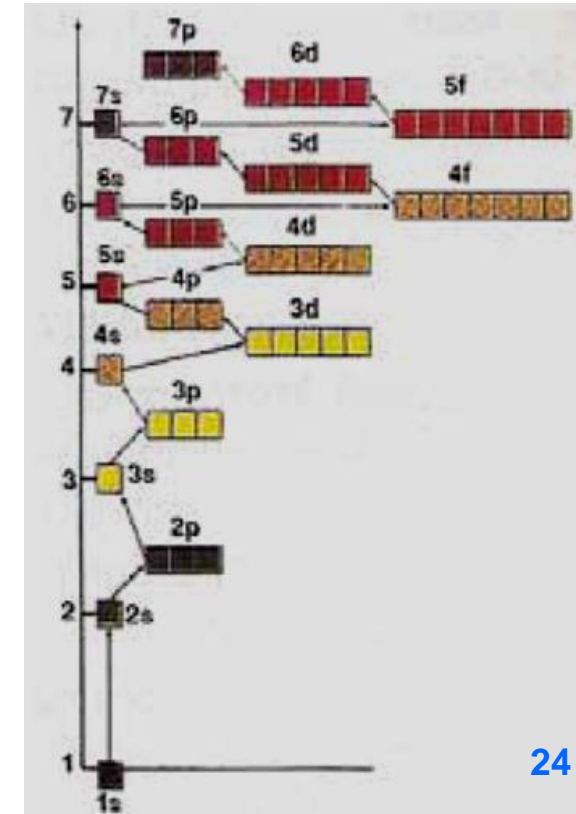
(α) Ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων που μπορεί να έχει κάθε φλοιός (στοιβάδα) έχει ως εξής

**K (2e-), L(8e-), M(18e-), N(32e-), O(32e-), P(18e-), Q(8e-)**

- Ο μέγιστος αυτός αριθμός για τις τέσσερις πρώτες στοιβάδες ισούται με  $4n^2$ .
- Το άτομο στη φυσική του κατάσταση παρουσιάζει μεγαλύτερη σταθερότητα εάν η τελευταία στοιβάδα του έχει συνολικά (κατανεμημένα σε όλους τους υποφλοιούς)  $8e^-$ .
- Η προτελευταία στοιβάδα ενός ατόμου δεν μπορεί να έχει περισσότερα από  $18e^-$ .

(β) Απαγορευτική αρχή του Pauli. Σε ένα άτομο δεν είναι δυνατόν να υπάρχουν δύο ηλεκτρόνια που να έχουν και τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς τους ίδιους.

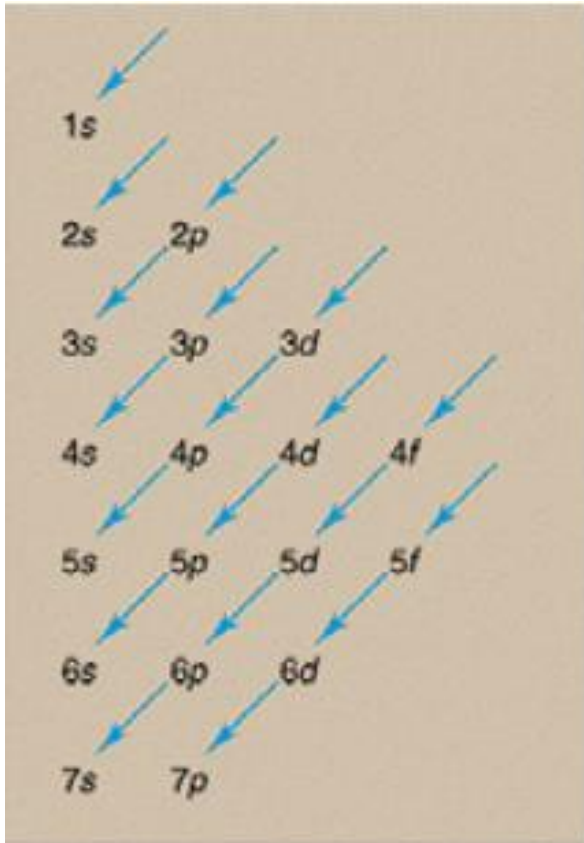
(γ) Ο εποικισμός των ενεργειακών σταθμών με ηλεκτρόνια **στη θεμελιώδη κατάσταση** γίνεται έτσι ώστε το άτομο να βρίσκεται στη χαμηλότερη δυνατή συνολική του ενεργειακή κατάσταση. Πρώτα δηλαδή συμπληρώνονται με ηλεκτρόνια οι στάθμες χαμηλότερης ενέργειας και μετά οι **υψηλότερης**. Η συμπλήρωση των υποφλοιών της θεμελιώδους κατάστασης γίνεται με βάση το διπλανό Γενικό Σχήμα.







Κανόνας εποικισμού των ενεργειακών σταθμών με ηλεκτρόνια στη θεμελιώδη κατάσταση πολυηλεκτρονιακού ατόμου.

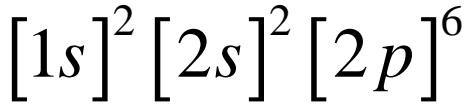


Χωρητικότητα υποφλοιών σε ηλεκτρόνια.

$n$	$l$	Subshell	Capacity $2(2l+1)$
1	0	1s	2
2	0	2s	2
2	1	2p	6
3	0	3s	2
3	1	3p	6
4	0	4s	2
3	2	3d	10
4	1	4p	6
5	0	5s	2
4	2	4d	10
5	1	5p	6
6	0	6s	2
4	3	4f	14
5	2	5d	10
6	1	6p	6
7	0	7s	2
5	3	5f	14
6	2	6d	10



Το άτομο του Νέον (Ne, Z=10)



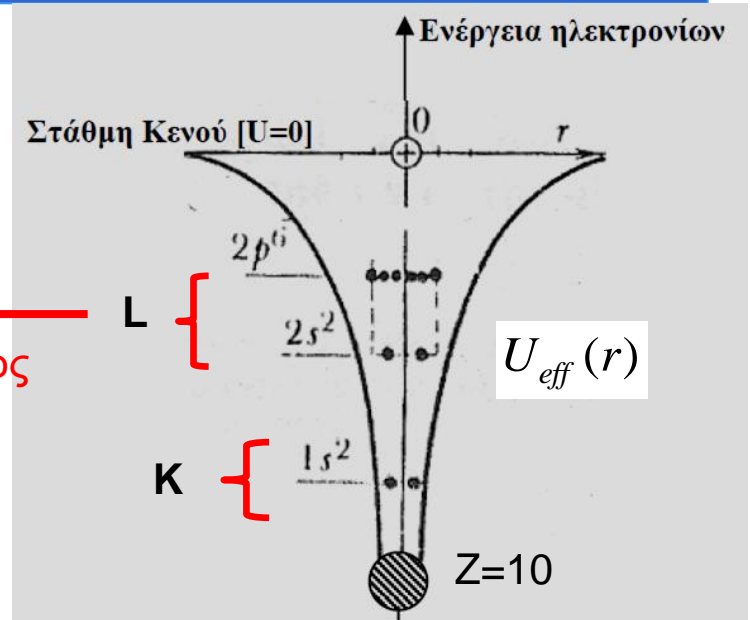
Κ

Λ

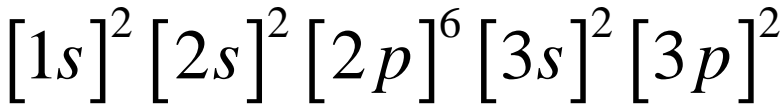
1 Υποφλοιός

2 Υποφλοιοί

Πλήρως συμπληρωμένος με 8 e<sup>-</sup>



Το άτομο του Πυριτίου (Si, Z=14)

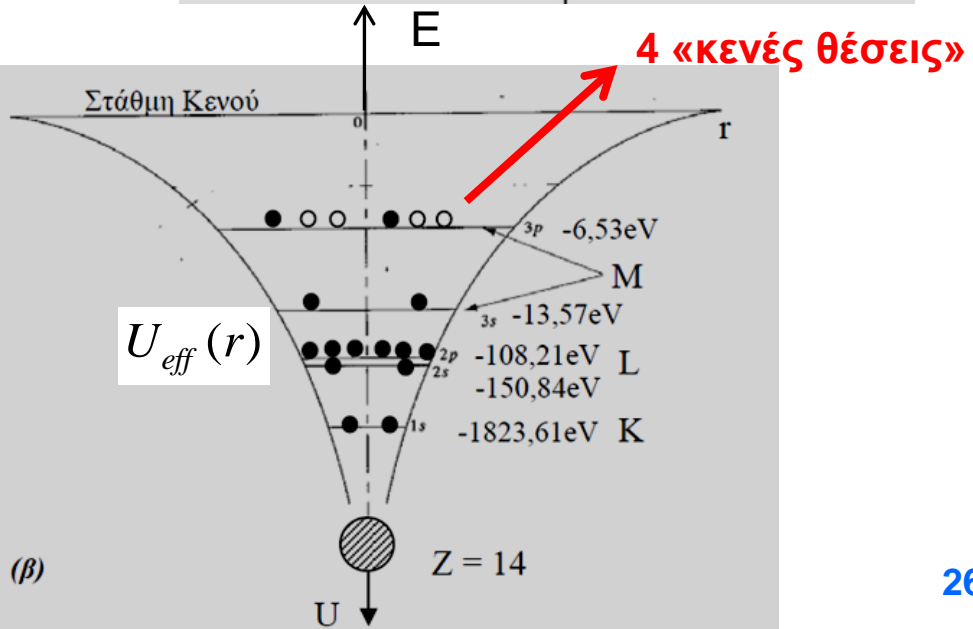
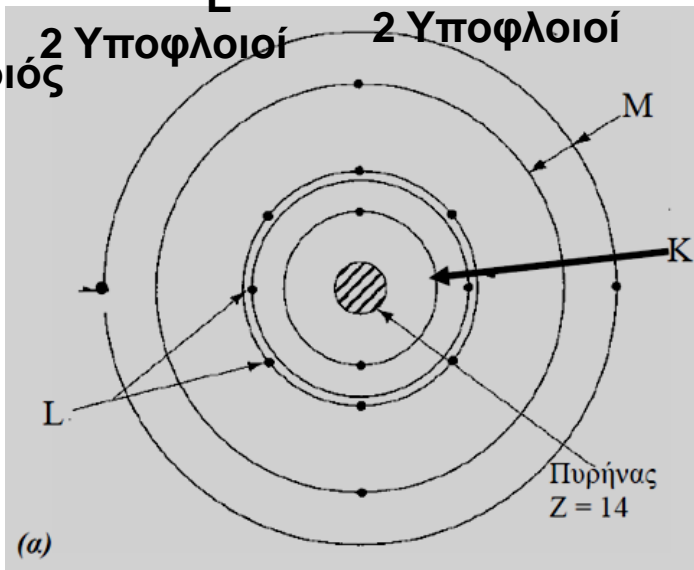


Κ

2 Υποφλοιοί

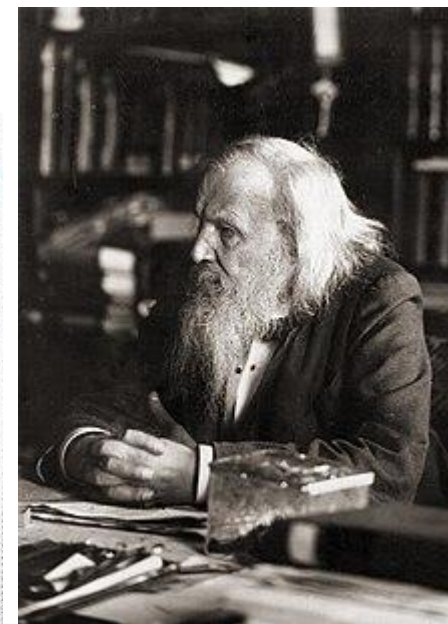
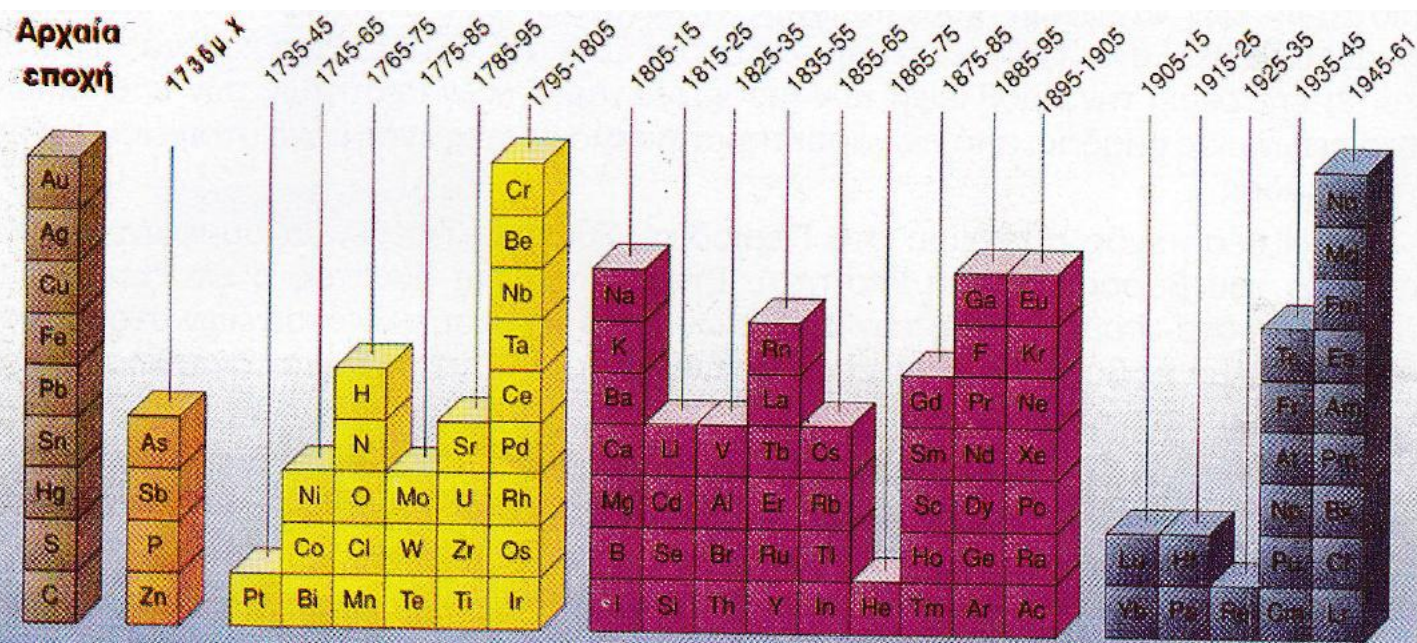
2 Υποφλοιοί

1 Υποφλοιός



## V. Ο ΠΕΡΙΟΔΙΚΟΣ ΠΙΝΑΚΑΣ ΤΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

- Χρονολογική ανακάλυψη των στοιχείων



Dmitri Ivanovich  
Mendeleev  
(1834-1907)

- Οι φυσικές και χημικές ιδιότητες των στοιχείων παρουσιάζουν περιοδικότητα με βάση τον ατομικό αριθμό Z.



# Periodic Table of the Elements

Group 1 1a																	18 0		
Period 1	1 1.01 <b>H</b> Hydrogen 1s <sup>1</sup>																	2 4.00 <b>He</b> Helium 1s <sup>2</sup>	
2	3 6.94 <b>Li</b> Lithium 1s <sup>2</sup> 2s <sup>1</sup>	4 9.01 <b>Be</b> Beryllium 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>																	10 20.18 <b>Ne</b> Neon 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>
3	11 22.99 <b>Na</b> Sodium [Ne]3s <sup>1</sup>	12 24.31 <b>Mg</b> Magnesium [Ne]3s <sup>2</sup>	3 IIIb	4 IVb	5 Vb	6 VIb	7 VIIb	8 VIIIb	9	10	11 1b	12 IIb	13 26.98 <b>Al</b> Aluminum [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	14 28.09 <b>Si</b> Silicon [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	15 30.97 <b>P</b> Phosphorus [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	16 32.07 <b>S</b> Sulfur [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	17 35.45 <b>Cl</b> Chlorine [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	18 39.95 <b>Ar</b> Argon [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	
4	19 39.10 <b>K</b> Potassium [Ar]4s <sup>1</sup>	20 40.08 <b>Ca</b> Calcium [Ar]4s <sup>2</sup>	21 44.96 <b>Sc</b> Scandium [Ar]3d <sup>1</sup> 4s <sup>2</sup>	22 47.87 <b>Ti</b> Titanium [Ar]3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	23 50.94 <b>V</b> Vanadium [Ar]3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	24 52.00 <b>Cr</b> Chromium [Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>1</sup>	25 54.94 <b>Mn</b> Manganese [Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	26 55.85 <b>Fe</b> Iron [Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	27 58.93 <b>Co</b> Cobalt [Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	28 58.69 <b>Ni</b> Nickel [Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	29 63.55 <b>Cu</b> Copper [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>	30 65.39 <b>Zn</b> Zinc [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	31 69.72 <b>Ga</b> Gallium [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>1</sup>	32 72.61 <b>Ge</b> Germanium [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	33 74.92 <b>As</b> Arsenic [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	34 78.96 <b>Se</b> Selenium [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>	35 79.90 <b>Br</b> Bromine [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	36 83.80 <b>Kr</b> Krypton [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>	
5	37 85.47 <b>Rb</b> Rubidium [Kr]5s <sup>1</sup>	38 87.62 <b>Sr</b> Strontium [Kr]5s <sup>2</sup>	39 88.91 <b>Y</b> Yttrium [Kr]4d <sup>1</sup> 5s <sup>2</sup>	40 91.22 <b>Zr</b> Zirconium [Kr]4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>	41 92.91 <b>Nb</b> Niobium [Kr]4d <sup>4</sup> 5s <sup>1</sup>	42 95.94 <b>Mo</b> Molybdenum [Kr]4d <sup>5</sup> 5s <sup>1</sup>	43 (98) <b>Tc</b> Technetium [Kr]4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup>	44 101.07 <b>Ru</b> Ruthenium [Kr]4d <sup>7</sup> 5s <sup>1</sup>	45 102.91 <b>Rh</b> Rhodium [Kr]4d <sup>8</sup> 5s <sup>1</sup>	46 106.42 <b>Pd</b> Palladium [Kr]4d <sup>10</sup>	47 107.87 <b>Ag</b> Silver [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>1</sup>	48 112.41 <b>Cd</b> Cadmium [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>	49 114.82 <b>In</b> Indium [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>1</sup>	50 118.71 <b>Sn</b> Tin [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	51 121.76 <b>Sb</b> Antimony [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>	52 127.60 <b>Te</b> Tellurium [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>	53 126.90 <b>I</b> Iodine [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup>	54 131.29 <b>Xe</b> Xenon [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup>	
6	55 132.91 <b>Cs</b> Cesium [Xe]6s <sup>1</sup>	56 137.33 <b>Ba</b> Barium [Xe]6s <sup>2</sup>	♦	72 178.49 <b>Hf</b> Hafnium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>2</sup> 6s <sup>2</sup>	73 180.95 <b>Ta</b> Tantalum [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	74 183.84 <b>W</b> Tungsten [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	75 186.21 <b>Re</b> Rhenium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	76 190.23 <b>Os</b> Osmium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	77 192.22 <b>Ir</b> Iridium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	78 195.08 <b>Pt</b> Platinum [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup> 6s <sup>1</sup>	79 196.97 <b>Au</b> Gold [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>1</sup>	80 200.59 <b>Hg</b> Mercury [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	81 204.38 <b>Tl</b> Thallium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>1</sup>	82 207.20 <b>Pb</b> Lead [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	83 208.98 <b>Bi</b> Bismuth [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>3</sup>	84 (209) <b>Po</b> Polonium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>4</sup>	85 (210) <b>At</b> Astatine [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>5</sup>	86 (222) <b>Rn</b> Radon [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>6</sup>	
7	87 (223) <b>Fr</b> Francium [Rn]7s <sup>1</sup>	88 (226) <b>Ra</b> Radium [Rn]7s <sup>2</sup>	★	104 (265) <b>Rf</b> Rutherfordium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	105 (268) <b>Db</b> Dubnium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>3</sup> 7s <sup>2</sup>	106 (271) <b>Sg</b> Seaborgium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>4</sup> 7s <sup>2</sup>	107 (270) <b>Bh</b> Bohrium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>5</sup> 7s <sup>2</sup>	108 (277) <b>Hs</b> Hassium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup>	109 (276) <b>Mt</b> Meitnerium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	110 (281) <b>Ds</b> Darmstadtium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>8</sup> 7s <sup>2</sup>	111 (280) <b>Rg</b> Roentgenium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup>	112 (285) <b>Cn</b> Copernicium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup>	113 (284) <b>Nh</b> Nihonium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>1</sup>	114 (289) <b>Fl</b> Flerovium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>2</sup>	115 (288) <b>Mc</b> Moscovium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>3</sup>	116 (293) <b>Lv</b> Livermorium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>4</sup>	117 (294) <b>Ts</b> Tennessine [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>5</sup>	118 (294) <b>Og</b> Oganesson [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>6</sup>	

Legend for element categories:

- Alkali Metals (Yellow)
- Alkaline Earth Metals (Blue)
- Transition Metals (Green)
- Non-metals (Light Green)
- Lanthanide Series (Pink)
- Actinide Series (Purple)
- Halogens (Light Blue)
- Inert Gases (Orange)
- Other Metals (Grey)

Diagram for Hydrogen (H):

- Atomic Number: 1
- Atomic Weight: 1.01
- Symbol: H
- Name: Hydrogen
- Electron Configuration: 1s<sup>1</sup>

- Aa** -Solid ♦
- Aa** -Gas
- Aa** -Liquid
- Aa** -Synthetically Prepared ★

57 138.91 <b>La</b> Lanthanum [Xe]5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	58 140.12 <b>Ce</b> Cerium [Xe]4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	59 140.91 <b>Pr</b> Praseodymium [Xe]4f <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	60 144.24 <b>Nd</b> Neodymium [Xe]4f <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	61 (145) <b>Pm</b> Promethium [Xe]4f <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	62 150.36 <b>Sm</b> Samarium [Xe]4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	63 151.96 <b>Eu</b> Europium [Xe]4f <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	64 157.25 <b>Gd</b> Gadolinium [Xe]4f <sup>7</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	65 158.93 <b>Tb</b> Terbium [Xe]4f <sup>9</sup> 6s <sup>2</sup>	66 162.50 <b>Dy</b> Dysprosium [Xe]4f <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	67 164.93 <b>Ho</b> Holmium [Xe]4f <sup>11</sup> 6s <sup>2</sup>	68 167.26 <b>Er</b> Erbium [Xe]4f <sup>12</sup> 6s <sup>2</sup>	69 168.93 <b>Tm</b> Thulium [Xe]4f <sup>13</sup> 6s <sup>2</sup>	70 173.04 <b>Yb</b> Ytterbium [Xe]4f <sup>14</sup> 6s <sup>2</sup>	71 174.97 <b>Lu</b> Lutetium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>
89 (227) <b>Ac</b> Actinium [Rn]7s <sup>2</sup>	90 232.04 <b>Th</b> Thorium [Rn]6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	91 231.04 <b>Pa</b> Protactinium [Rn]5f <sup>2</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	92 238.03 <b>U</b> Uranium [Rn]5f <sup>3</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	93 (237) <b>Np</b> Neptunium [Rn]5f <sup>4</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	94 (244) <b>Pu</b> Plutonium [Rn]5f <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup>	95 (243) <b>Am</b> Americium [Rn]5f <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	96 (247) <b>Cm</b> Curium [Rn]5f <sup>8</sup> 7s <sup>2</sup>	97 (247) <b>Bk</b> Berkelium [Rn]5f <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup>	98 (251) <b>Cf</b> Californium [Rn]5f <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup>	99 (252) <b>Es</b> Einsteinium [Rn]5f <sup>11</sup> 7s <sup>2</sup>	100 (257) <b>Fm</b> Fermium [Rn]5f <sup>12</sup> 7s <sup>2</sup>	101 (258) <b>Md</b> Mendelevium [Rn]5f <sup>13</sup> 7s <sup>2</sup>	102 (259) <b>No</b> Nobelium [Rn]5f <sup>14</sup> 7s <sup>2</sup>	103 (262) <b>Lr</b> Lawrencium [Rn]5f <sup>14</sup> 7p <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>

\* Based on Carbon-12. (###) represents most stable or most stable expected isotope.

\*\* Some electron configurations are based on theoretical expected arrangements.



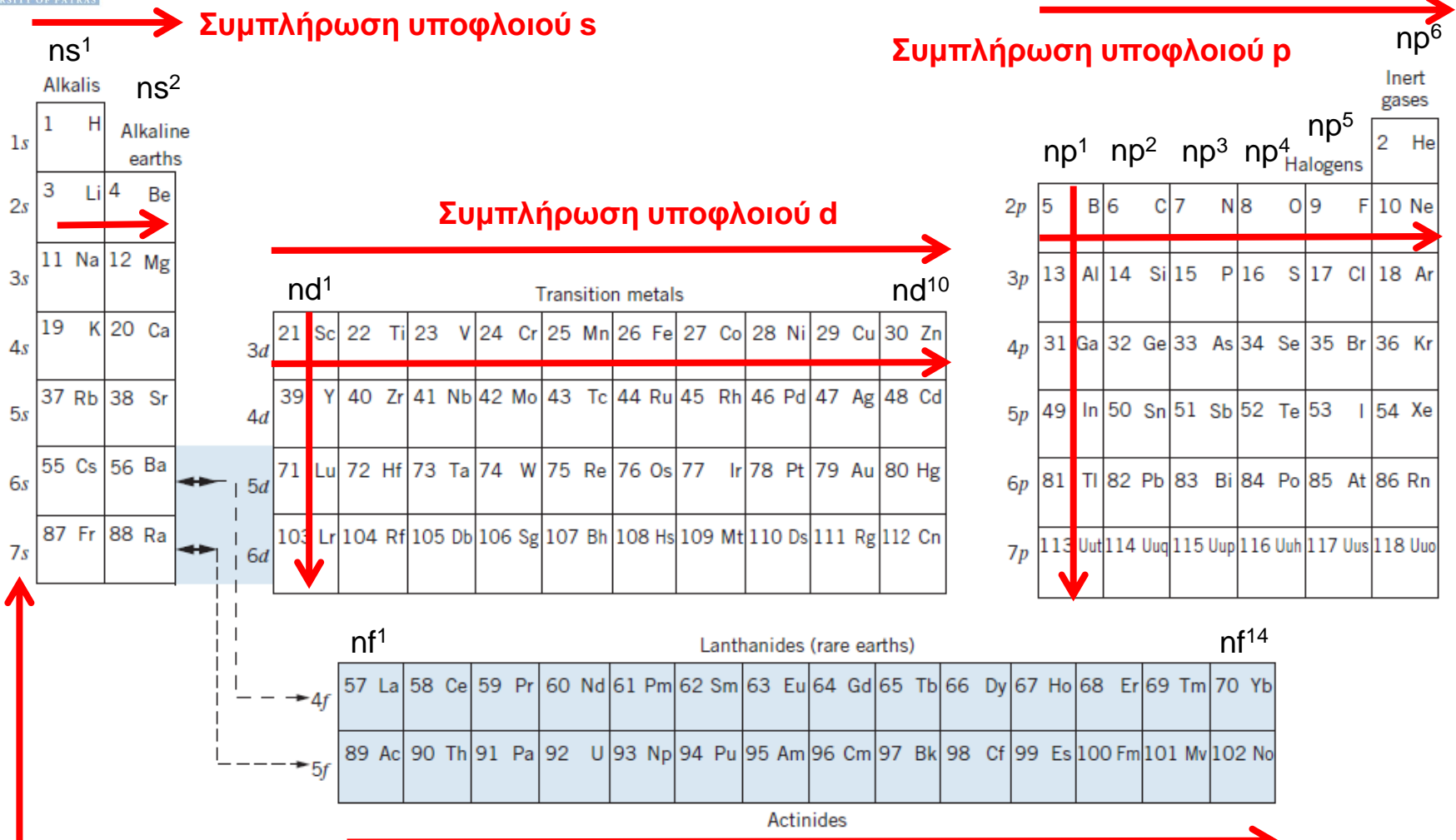


- Η 1<sup>η</sup> σειρά (ή περίοδος) αρχίζει με το Υδρογόνο ( $Z=1, 1s^1$ ) τελειώνει με το Ήλιο ( $Z=2, 1s^2$ ). Το Ήλιο έχει έναν πλήρως συμπληρωμένο υποφλοιό ( $1s$ ) και ταυτόχρονα έναν πλήρη κύριο φλοιό (τον φλοιό K) και είναι ένα εξαιρετικά σταθερό και αδρανές στοιχείο. Είναι η σειρά που ξεκινά από ασυμπλήρωτο και καταλήγει σε πλήρως συμπληρωμένο φλοιό K. υποφλοιό  $1s$ .
- Η 2<sup>η</sup> σειρά (ή περίοδος) αρχίζει με το Λίθιο ( $Z=3, 1s^2 2s^1$ ) και τελειώνει με το Νέον ( $Z = 10, 1s^2 2s^2 2p^6$ ). Ξεκινά με έναν πλήρως συμπληρωμένο φλοιό K και έναν ασυμπλήρωτο φλοιό L και καταλήγει σε δύο πλήρεις φλοιούς K και L. Το Νέον είναι επίσης αδρανές αέριο.
- Η επόμενη 3<sup>η</sup> σειρά (ή περίοδος) αρχίζει με το Νάτριο ( $Z = 11, 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ ) και τελειώνει με το αδρανές αέριο Αργόν ( $Z = 18, 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ ). Ξεκινά με πλήρη τους φλοιούς K και L και ασυμπλήρωτο τον M και καταλήγει σε τρεις πλήρη φλοιούς K,L,M.
- Η 4<sup>η</sup> σειρά (ή περίοδος) αρχίζει με το Κάλιο και τελειώνει στο αδρανές αέριο Κρυπτόν. Στη σειρά αυτή αναμένουμε λογικά να αρχίσει ο εποικισμός του υποφλοιού  $3d$ . Ωστόσο, η πολύ δεισδυτική τροχιά του ηλεκτρονίου  $4s$  προκαλεί την εμφάνιση του επιπέδου  $4s$  σε ελαφρώς χαμηλότερη ενέργεια από το επίπεδο  $3d$ , οπότε ο υποφλοιός  $4s$  εποικίζεται πρώτος. Έτσι έχουμε τις διαμορφώσεις του Καλίου ( $Z = 19, 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ ) του Ασβεστίου ( $Z = 20, 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$ ), Σκανδίου ( $Z = 21, 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^1$ ), Ψευδαργύρου ( $Z = 30, 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10}$ ), Γάλλιο ( $Z=31, 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^1$ ) και τελικά του Κρυπτόν ( $Z=36, 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$ ). Σε αυτές έχουμε διείσδυση του φλοιού N στον M. Το Κρυπτόν έχει πλήρως συμπληρωμένους τους φλοιούς K,L,M ( $18 e^- \text{ max-} 3s^2 3p^6 3d^{10}$ ). Ο τελευταίος του φλοιός είναι ο N με συνολικά  $8 e^-$  ( $4s^2 4p^6$ ) και επομένως το Κρυπτόν είναι αδρανές στοιχείο. **Στο μεσοδιάστημα υπάρχουν μερικές μικρές αποκλίσεις, η σημαντικότερη από τις οποίες είναι αυτή του Χαλκού με  $Z = 29$ . Στην περίπτωση αυτή το επίπεδο  $3d$  βρίσκεται ελαφρώς χαμηλότερα από το επίπεδο  $4s$ , και έτσι ο υποφλοιός  $3d$  εποικίζεται πριν τον  $4s$ , με αποτέλεσμα τη διαμόρφωση  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$ .**

- Η 5<sup>η</sup> σειρά (ή περίοδος) αρχίζει με το Ρουβίδιο ( $Z=37, 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1$ ) και τελειώνει στο αδρανές αέριο Ξένον ( $Z=54, 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6$ ). Σε αυτήν εποικίζεται ο υποφλοιός 5s πριν από τον 4d. Το Ξένον έχει πλήρως συμπληρωμένους τους φλοιούς K, L, M, N (προτελευταίος με 18 e<sup>-</sup> max) και O (τελευταίος με 8 e<sup>-</sup>).

Ένα σύμβολο σε αγκύλες [] σημαίνει ότι το άτομο έχει τη διαμόρφωση του προηγούμενου αδρανούς αερίου συν τα πρόσθετα ηλεκτρόνια που εμφανίζονται.

H	$1s^1$	Mn	$[Ar]4s^2 3d^5$	La	$[Xe]6s^2 5d^1$
He	$1s^2$	Cu	$[Ar]4s^1 3d^{10}$	Ce	$[Xe]6s^2 5d^1 4f^1$
Li	$1s^2 2s^1$	Zn	$[Ar]4s^2 3d^{10}$	Pr	$[Xe]6s^2 4f^3$
Be	$1s^2 2s^2$	Ga	$[Ar]4s^2 3d^{10} 4p^1$	Gd	$[Xe]6s^2 5d^1 4f^7$
B	$1s^2 2s^2 2p^1$	Kr	$[Ar]4s^2 3d^{10} 4p^6$	Dy	$[Xe]6s^2 4f^{10}$
Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	Rb	$[Kr]5s^1$	Yb	$[Xe]6s^2 4f^{14}$
Na	$[Ne]3s^1$	Y	$[Kr]5s^2 4d^1$	Lu	$[Xe]6s^2 5d^1 4f^{14}$
Al	$[Ne]3s^2 3p^1$	Mo	$[Kr]5s^1 4d^5$	Re	$[Xe]6s^2 5d^5 4f^{14}$
Ar	$[Ne]3s^2 3p^6$	Ag	$[Kr]5s^1 4d^{10}$	Au	$[Xe]6s^1 5d^{10} 4f^{14}$
K	$[Ar]4s^1$	In	$[Kr]5s^2 4d^{10} 5p^1$	Hg	$[Xe]6s^2 5d^{10} 4f^{14}$
Sc	$[Ar]4s^2 3d^1$	Xe	$[Kr]5s^2 4d^{10} 5p^6$	Tl	$[Xe]6s^2 5d^{10} 4f^{14} 6p^1$
Cr	$[Ar]4s^1 3d^5$	Cs	$[Xe]6s^1$	Rn	$[Xe]6s^2 5d^{10} 4f^{14} 6p^6$



**Τελευταίος (εξωτερικός) υποφλοιός που έχει ηλεκτρόνια (δεν αναγράφεται το πλήθος τους). Ίδιος για όλα τα στοιχεία της αντίστοιχης Περιόδου**

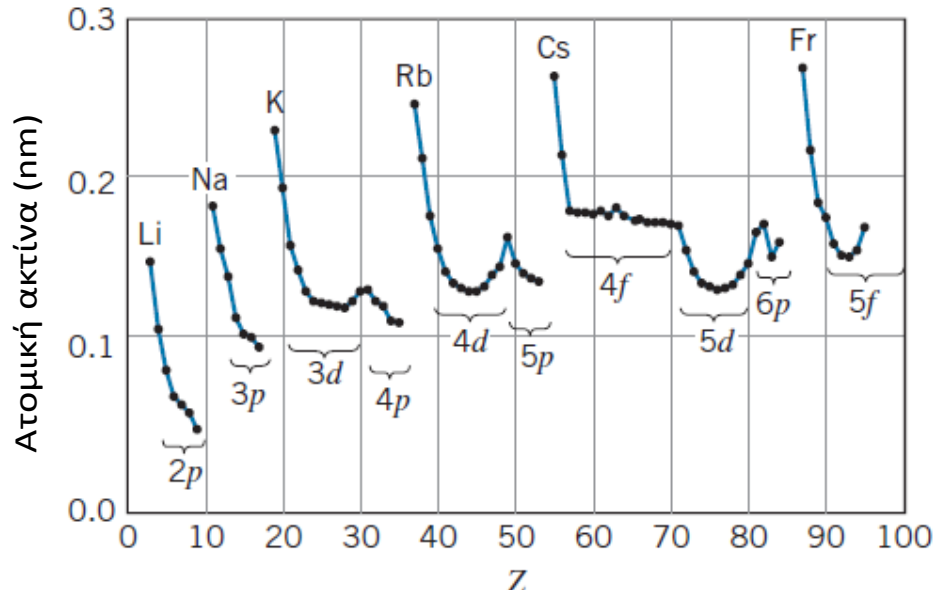
**Τα στοιχεία κάθε Ομάδας (κάθετης στήλης) έχουν κοινές ιδιότητες Έχουν το ίδιο πλήθος ηλεκτρονίων στον τελευταίο υποφλοιό τους.**

- Η 6<sup>η</sup> σειρά (ή περίοδος) αρχίζει με το Καίσιο ( $Z=54, 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6$ ), και το Βάριο εποικίζοντας τον υποφλοιό 6s. Όπως και στην περίπτωση των προηγούμενων περιόδων, τα επίπεδα 5d και 6s βρίσκονται σχεδόν στην ίδια ενέργεια. Ωστόσο, υπάρχει ακόμα ένας υποφλοιός με περίπου την ίδια ενέργεια με τους 6s και 5d – ο υποφλοιός 4f, που τώρα αρχίζει να εποικίζεται από το Λανθάνιο στο Υπέρβιο. Αυτή η σειρά στοιχείων, που ονομάζονται *λανθανίδες* ή *σπάνιες γαίες*, συνήθως γράφεται ξεχωριστά στον περιοδικό πίνακα, καθώς δεν έχουν εμφανιστεί άλλα στοιχεία με υποφλοιό f κάτω από τα οποία να μπορούν να γραφούν. Ο υποφλοιός 4f έχει χωρητικότητα 14 ηλεκτρονίων, και έτσι υπάρχουν 14 στοιχεία της σειράς των λανθανιδών. Μόλις συμπληρωθεί ο υποφλοιός 4f, επανερχόμαστε στον εποικισμό του υποφλοιού 5d, γράφοντας τα αντίστοιχα στοιχεία σε ομάδες κάτω από τα αυτά με εποικισμένους υποφλοιούς 3d και 4d, και στη συνέχεια συμπληρώνουμε την περίοδο με τον εποικισμό του υποφλοιού 6p, που τελειώνει με το αδρανές αέριο ραδόνιο ( $Z = 86$ ).
- Η 7<sup>η</sup> σειρά (ή περίοδος) εποικίζεται παρόμοια με την προηγούμενη, με μια σειρά στοιχείων γνωστή ως ακτινίδες, γραμμένη κάτω από τις λανθανίδες, που αντιστοιχεί στον εποικισμό του υποφλοιού 5f.

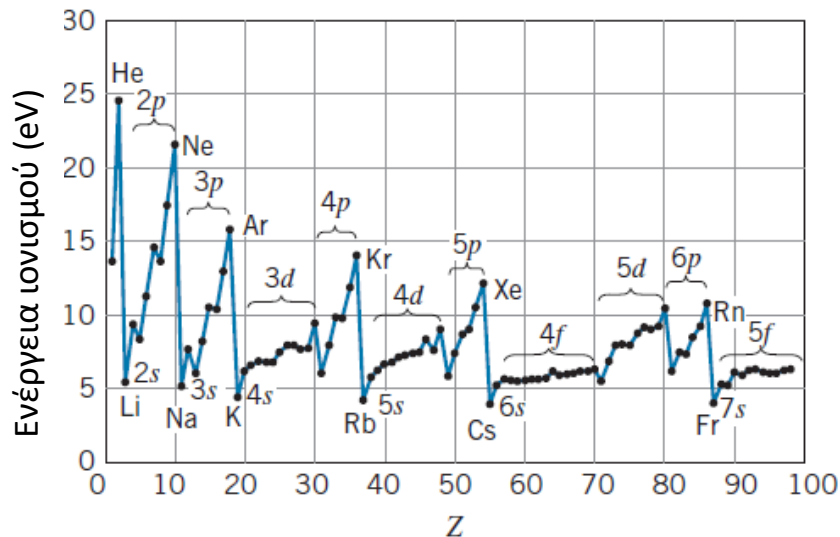




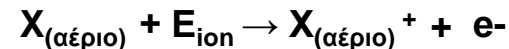
- Οι φυσικές και χημικές ιδιότητες των στοιχείων.



- Αντικατοπτρίζει το μέγεθος του ατόμου, το οποίο είναι συνδυασμός του φορτίου του πυρήνα που «τραβάει» τα ηλεκτρόνια προς το μέρος του και του πλήθους των υποφλοιών που προστίθενται για το σχηματισμό του ατόμου. Καθώς διατρέχουμε μία Ομάδα του Περιοδικού Πίνακα από πάνω προς τα κάτω το μέγεθος του ατόμου αυξάνεται γιατί η διαρκής προσθήκη υποφλοιών υπερिशύει της έλξης του πυρήνα.

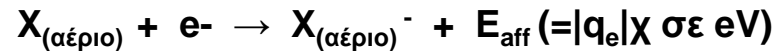


- Ονομάζεται η ελάχιστη ενέργεια που απαιτείται να προσφερθεί στο άτομο του στοιχείου που βρίσκεται σε αέρια κατάσταση για να αποσπαστεί ένα ηλεκτρόνιο από τον τελευταίο υποφλοιό του κατά το σχήμα:



Από αριστερά προς τα δεξιά και από κάτω προς τα πάνω στον Περιοδικό Πίνακα η Ενέργεια Ιονισμού αυξάνεται (ελαττώνεται η ικανότητα του στοιχείου να αποβάλλει ηλεκτρόνια) και το στοιχείο γίνεται λιγότερο **ηλεκτροθετικό**.

- **Ηλεκτροσυνάφεια ή ηλεκτροσυγγένια (electron affinity)** ενός στοιχείου ονομάζεται η ενέργεια που εκλύεται κατά την πρόσληψη ενός ηλεκτρονίου από ένα ουδέτερο άτομο του στοιχείου που βρίσκεται σε αέρια κατάσταση κατά την πρόσληψη ενός ηλεκτρονίου κατά σχήμα:



Όσο μεγαλύτερη είναι η ηλεκτροσυνάφεια τόσο ευκολότερα προσλαμβάνει ένα άτομο ηλεκτρόνια και τόσο περισσότερο **ηλεκτραρνητικό** γίνεται. Από αριστερά προς τα δεξιά και από κάτω προς τα πάνω στον Περιοδικό Πίνακα η Ηλεκτροσυνάφεια αυξάνεται (αυξάνεται η ικανότητα του στοιχείου να προσλαμβάνει ηλεκτρόνια) και το στοιχείο γίνεται περισσότερο **ηλεκτραρνητικό**.

- **Τα αδρανή αέρια** καταλαμβάνουν την τελευταία στήλη (Ομάδα 0) του Περιοδικού Πίνακα. Λόγω του ότι έχουν πλήρως συμπληρωμένους τους υποφλοιούς, τα αδρανή αέρια δεν αντιδρούν γενικά με άλλα στοιχεία για να σχηματίσουν ενώσεις. Τα στοιχεία αυτά είναι πολύ «απρόθυμα» να χάσουν ή να προσλάβουν ηλεκτρόνια. Οι ενέργειες ιονισμού τους είναι πολύ μεγαλύτερες από εκείνες των γειτονικών τους στοιχείων, λόγω της πρόσθετης ενέργειας που απαιτείται για να «σπάσει» ένας πλήρης υποφλοιός.
- **Τα αλογόνα** (F, Cl, Br, I, At) είναι τα στοιχεία της στήλης (Ομάδας 1) δίπλα στα αδρανή αέρια. Αυτά τα άτομα στερούνται ενός ηλεκτρονίου προκειμένου να συμπληρώσουν τον εξωτερικό τους υποφλοιό και έχουν τη διαμόρφωση  $ns^5$ . Ένας πλήρης υποφλοιός  $p$  αποτελεί μια πολύ σταθερή διαμόρφωση. Έτσι αυτά τα στοιχεία εύκολα σχηματίζουν ενώσεις με άλλα άτομα που μπορούν να παράσχουν ένα ηλεκτρόνιο για να συμπληρωθεί ο  $p$  υποφλοιός τους. Τα αλογόνα είναι συνεπώς εξαιρετικά δραστικά χημικά.
- **Τα αλκάλια** είναι τα στοιχεία της Ομάδας 1 του Περιοδικού Πίνακα (διαμόρφωση εξωτερικού υποφλοιού  $ns^1$ ). Το μοναδικό εξωτερικό ηλεκτρόνιο  $s$  κάνει τα αλκάλια αρκετά (χημικά) δραστικά, καθώς εύκολα το «προσφέρουν» σε μία χημική ένωση.

- Οι **αλκαλικές γαίες (Ομάδα 2)** είναι παρόμοια δραστικές, παρά τον πλήρη εξωτερικό υποφλοιό s. Αυτό συμβαίνει επειδή οι κυματοσυναρτήσεις s των ηλεκτρονίων μπορούν να εκτείνονται αρκετά μακριά από τον πυρήνα, όπου τα ηλεκτρόνια θωρακίζονται (από  $Z-2$  άλλα ηλεκτρόνια) από το πυρηνικό φορτίο και συνεπώς δεν είναι ισχυρά δέσμια. (Σημειώστε ότι οι διαμορφώσεις εξωτερικών υποφλοιών  $ns^1$  και  $ns^2$  δίνουν τις μεγαλύτερες ατομικές ακτίνες και ότι εμφανίζουν τις μικρότερες ενέργειες ιονισμού.)

## ΤΙ ΝΑ ΔΙΑΒΑΣΕΤΕ ΠΡΟΣΕΚΤΙΚΑ

Η ύλη της Ενότητας αυτής είναι σεμιναριακής μορφής και δεν αποτελεί εξεταστέα ύλη του μαθήματος.

Θα ξέρετε μόνο το θέμα της θωράκισης στις σελίδες 12-15 της παρούσας Ενότητας του Οδηγού Μελέτης.