

9.α.

# ΙΟΝΤΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ- ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ

# προαπαιτούμενη καλή γνώση: Ηλεκτρονικές δομές

Τα **κατιόντα** λαμβάνονται με απομάκρυνση των ηλεκτρονίων σθένους από τα άτομα των μεταλλικών στοιχείων.

Κάθε  $e$  για να απομακρυνθεί ΑΠΑΙΤΕΙ ενέργεια: την Ενέργεια Ιοντισμού ή EI.

1<sup>η</sup> EI: απομάκρυνση 1  $e$

2<sup>η</sup> EI: απόμάκρυνση του 2ου  $e$  κοκ

Ενέργειες ιοντισμού των Na, Mg και Al (σε  $\text{kJ mol}^{-1}$ )

Διαδοχικές ενέργειες ιοντισμού				
Στοιχείο	Πρώτη	Δεύτερη	Τρίτη	Τετάρτη
Na (ομ.1)	496	4562	6912	9543
Mg (ομ.2)	738	1451	7733	10.540
Al (ομ.3)	578	1817	2745	11.577

Από τις ενέργειες καταλαβαίνουμε πόσα  $e$  σθένους είναι δυνατό να απομακρυνθούν. Οι ενέργειες για την απομάκρυνση των  $e$  στα αριστερά της κόκκινης γραμμής έχουν **τεράστια διαφορά** από την προηγούμενη.

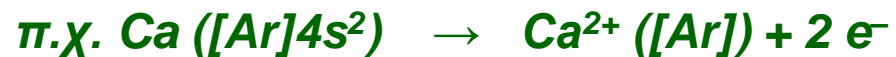
## Ιόντα ΜΕΤΑΛΛΩΝ κυρίων ομάδων

Ιοντικό φορτίο = Αριθμός ομάδας

>0 ή κατιόντα

αφαιρώ e → Δομή ευγενούς αερίου

- Δομή ευγενούς αερίου (ομ. IA, IIA, Al)
- Δομή ψευδοευγενούς αερίου (Ga, In, Tl)

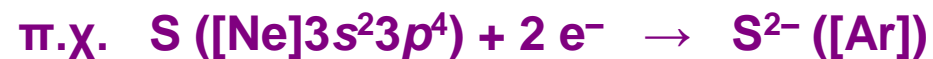


## Ιόντα ΑΜΕΤΑΛΛΩΝ κυρίων ομάδων

Ιοντικό φορτίο = Αριθμός ομάδας - 8

<0 ή ανιόντα

προσθέτω e → Δομή ευγενούς αερίου

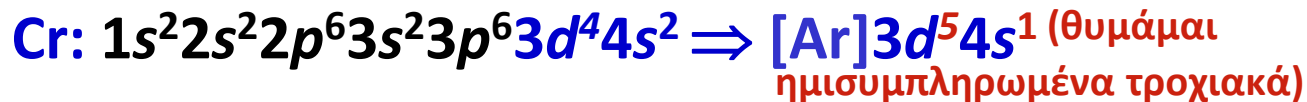


# Ηλεκτρονικές δομές ιόντων

## 3. Κατιόντα μεταβατικών μετάλλων MM

Τα περισσότερα MM σχηματίζουν πάνω από ένα κατιόντα με διαφορετικά φορτία (π.χ.  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ) ( $\text{Cu}^{+1}$ ,  $\text{Cu}^{+2}$ )

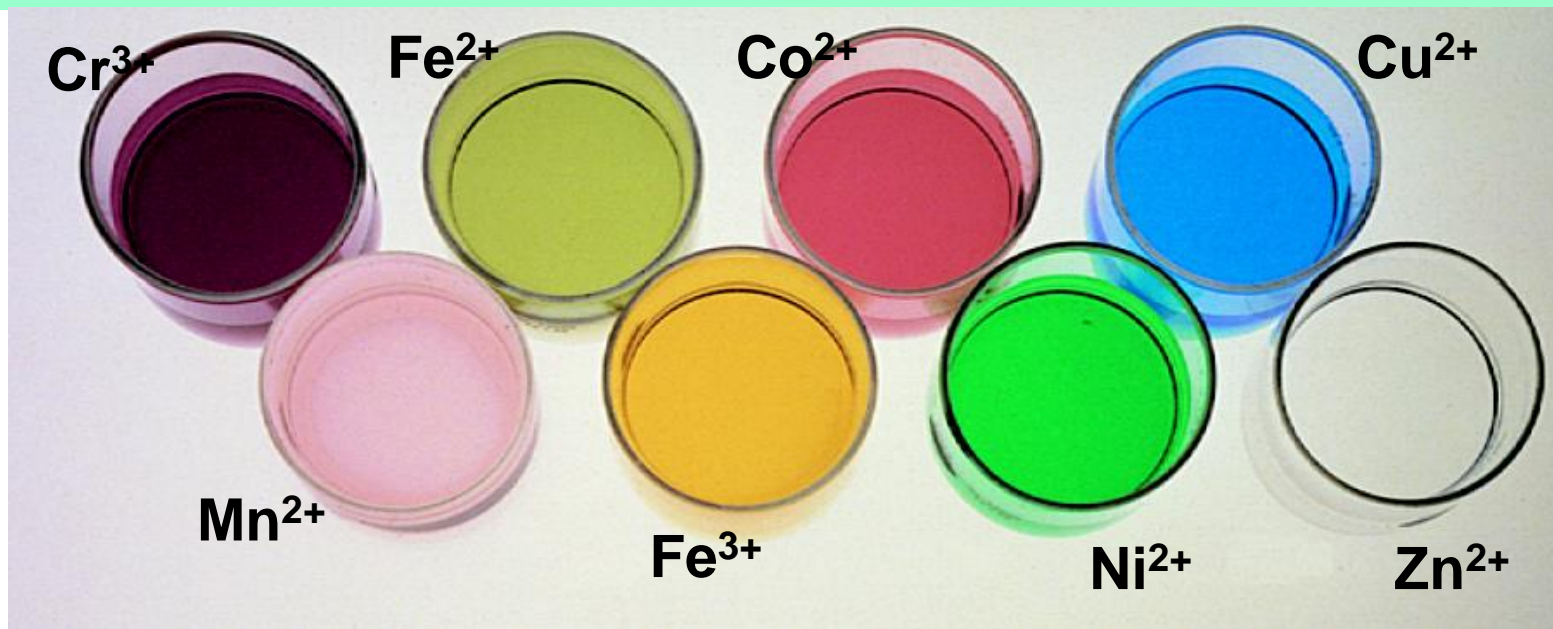
Πρώτα χάνουν τα  $s$  ηλεκτρόνια. Κατόπιν μπορούν να χάσουν ένα ή δύο από τα  $d$  ηλεκτρόνια.



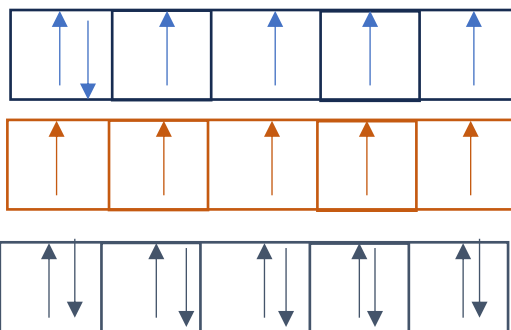
## Συνηθισμένα κατιόντα μεταβατικών μετάλλων

Ιόν	Όνομα ιόντος
$\text{Cr}^{3+}$	χρώμιο(III)
$\text{Mn}^{2+}$	Μαγγάνιο(II)
$\text{Fe}^{2+}$	Σίδηρος(II)
$\text{Fe}^{3+}$	Σίδηρος(III)
$\text{Co}^{2+}$	Κοβάλτιο(II)
$\text{Co}^{3+}$	Κοβάλτιο(III)
$\text{Ni}^{2+}$	Νικέλιο(II)
$\text{Cu}^{2+}$	Χαλκός(II)
$\text{Cu}^{+}$	Χαλκός(I)
$\text{Cu}^{+}$	Χαλκός(I)
$\text{Zn}^{2+}$	Ψευδάργυρος(II)
$\text{Ag}^{+}$	Άργυρος(I)
$\text{Cd}^{2+}$	Κάδμιο(II)
$\text{Hg}^{2+}$	Υδράργυρος(II)

Πολλές ενώσεις ιόντων μεταβατικών μετάλλων είναι έγχρωμες (ορατό φάσμα), λόγω d-d μεταπτώσεων δηλ. των ηλεκτρονίων στα *d* τροχιακά



1. Γιατί ο  $Fe^{2+}$  έχει διαφορετικό χρώμα από τον  $Fe^{3+}$  και γιατί ο  $Zn^{2+}$  είναι άχρωμος;



Ο  $Zn^{2+}$  είναι διαμαγνητικός και δε μπορεί να έχει d-d μεταπτώσεις

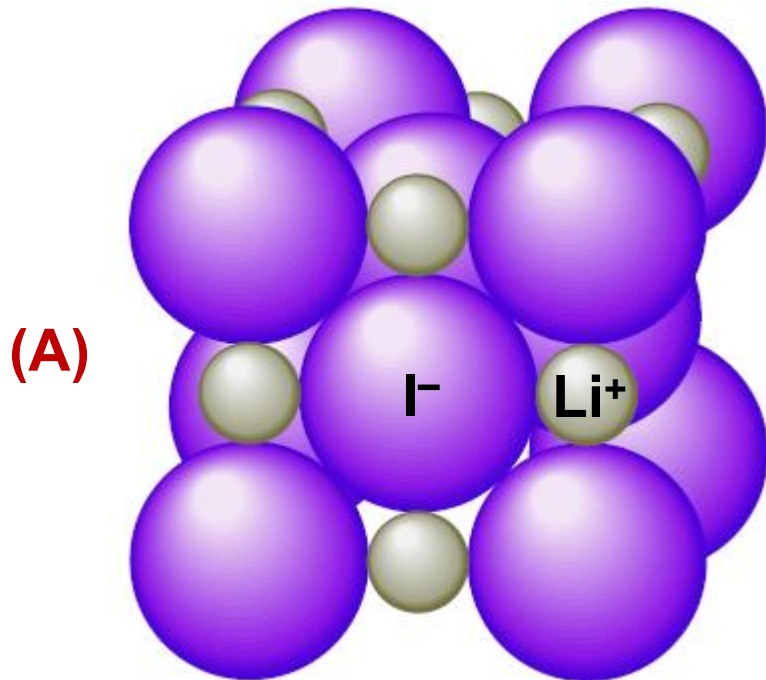
Τα ιόντα  $Fe^{2+}$  και  $Fe^{3+}$  έχουν διαφορετικές d-d μεταπτώσεις  
Λόγω διαφορετικής ηλεκτρον. διαμόρφωσης

2. Τα άλατα  $Cu^{2+}$  έχουν έντονο μπλε χρώμα τι πιστεύετε για τα άλατα του  $Cu^+$ ;

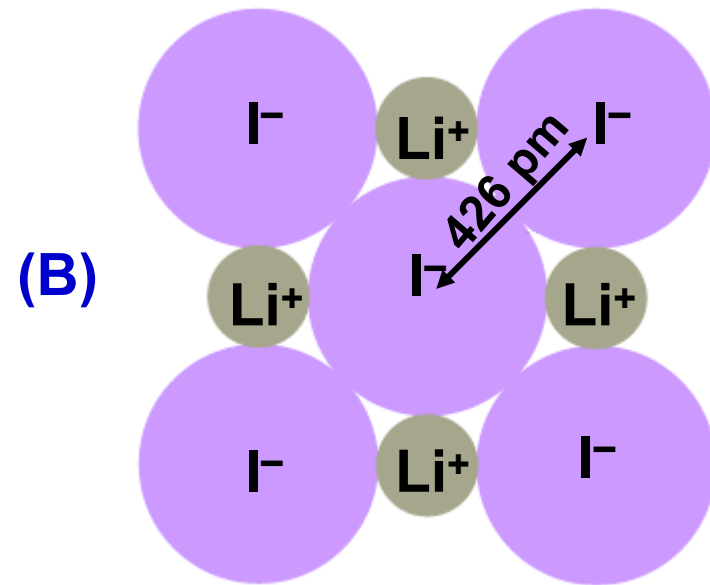
# Ιοντικές ακτίνες

**Ιοντική ακτίνα** : μέτρο του μεγέθους της σφαιρικής περιοχής γύρω από τον πυρήνα ενός ιόντος, όπου η πιθανότητα εύρεσης των ηλεκτρονίων είναι μεγίστη.

Μονάδα μέτρησης:  $\text{pm} = 10^{-9} \text{ m}$  ή  $\text{\AA} = 10^{-10} \text{ m} = 0.1 \text{ pm}$



Τρισδιάστατη απεικόνιση του κρυστάλλου  
Του άλατος LiI



Διατομή μιας στιβάδας ιόντων. Τα ιόντα ιωδιδίου, I<sup>-</sup>, θεωρούνται ως σφαίρες σε επαφή η μία με την άλλη. Η απόσταση μεταξύ των πυρήνων ιωδίου (426 pm) προσδιορίζεται πειραματικά. **ΤΟ ΜΙΣΟ ΑΥΤΗΣ ΤΗΣ ΑΠΟΣΤΑΣΗΣ (213 pm) ΙΣΟΥΤΑΙ ΜΕ ΤΗΝ ΑΚΤΙΝΑ ΤΟΥ ΙΟΝΤΟΣ ΙΩΔΙΔΙΟΥ.**

# Σύγκριση ατομικών και ιοντικών ακτίνων



Na

[He]  $2s^2 2p^6 3s^1$



Na<sup>+</sup>

[He]  $2s^2 2p^6$

το κατιόν είναι **μικρότερο** από το ουδέτερο άτομο.

Παρατηρούμε ότι το άτομο του νατρίου χάνει τον εξωτερικό του φλοιό κατά τον σχηματισμό του ιόντος Na<sup>+</sup>.



Cl

[Ne]  $3s^2 3p^5$



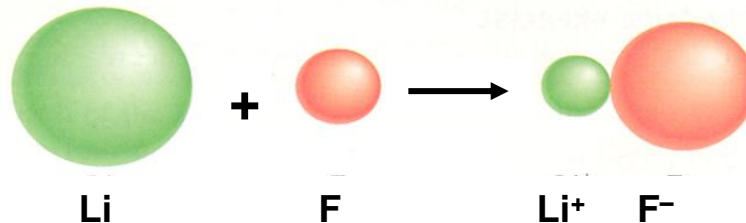
Cl<sup>-</sup>

[Ne]  $3s^2 3p^6$

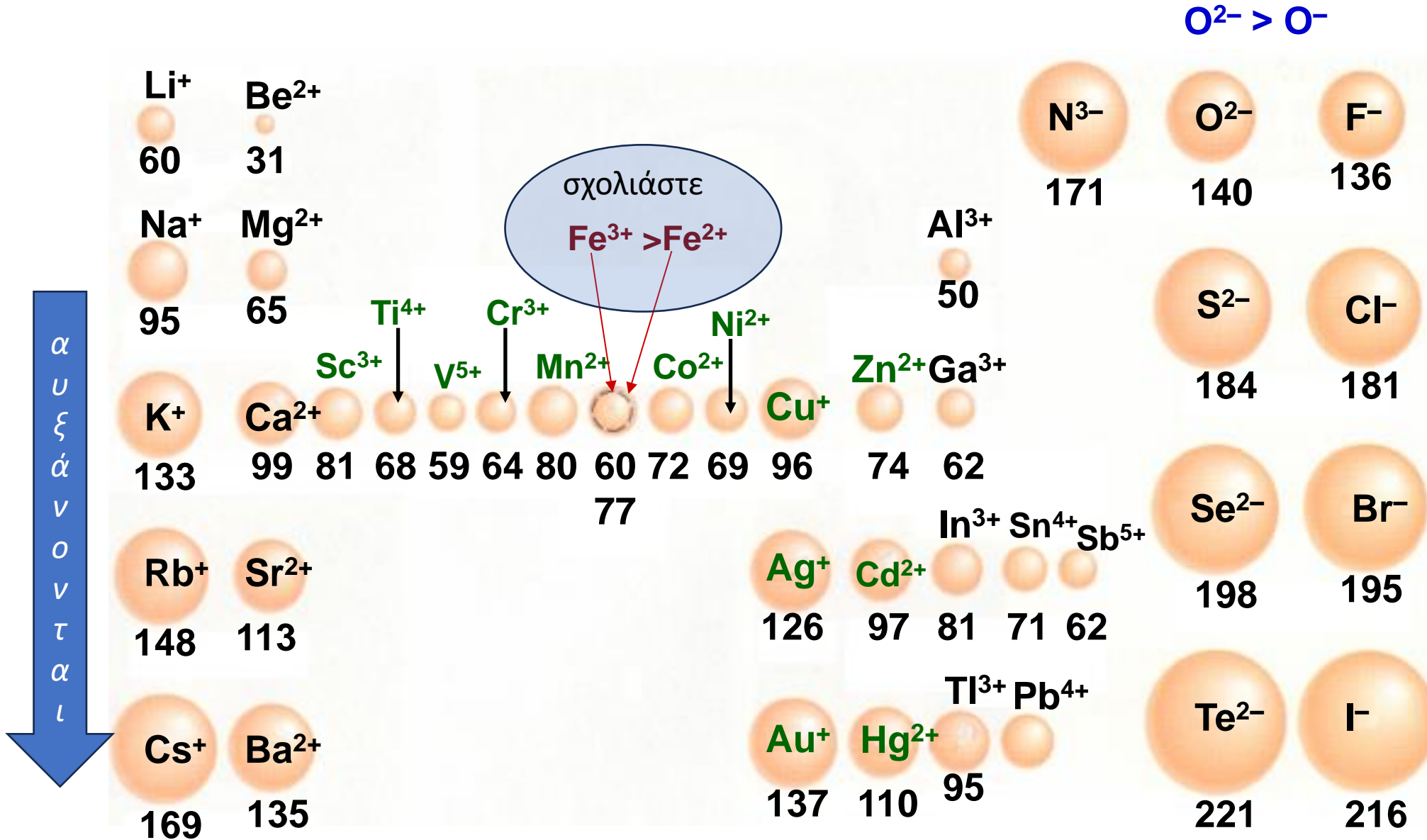
το ανιόν είναι **μεγαλύτερο** από το ουδέτερο άτομο.

Το ιόν Cl<sup>-</sup> είναι **μεγαλύτερο** από το άτομο Cl, επειδή το ίδιο πυρηνικό φορτίο συγκρατεί έναν μεγαλύτερο αριθμό ηλεκτρονίων λιγότερο ισχυρά.

όταν αντιδρούν «χάνει» μέγεθος το Li «κερδίζει» μέγεθος το F



# Μεταβολή των ιοντικών ακτίνων μέσα στον Π.Π.





## Σύγκριση ιοντικών ακτίνων

1. Ποιο έχει τη μεγαλύτερη ακτίνα, το S ή το S<sup>2-</sup> ; Εξηγείστε.

2. Τοποθετείστε τα ακόλουθα ιόντα κατά σειρά αυξανόμενης ιοντικής ακτίνας:  
Sr<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Ca<sup>2+</sup>

Be<sup>2+</sup>



31

Mg<sup>2+</sup>



65

Ca<sup>2+</sup>

99

Sr<sup>2+</sup>

113

Ba<sup>2+</sup>

135

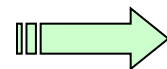
# Είδη χημικών δεσμών

Χημικός δεσμός: ισχυρή ελκτική δύναμη που ασκείται ανάμεσα σε ορισμένα άτομα μιας ουσίας

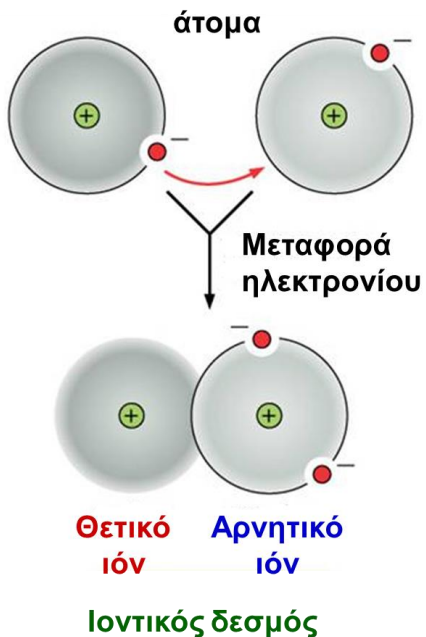
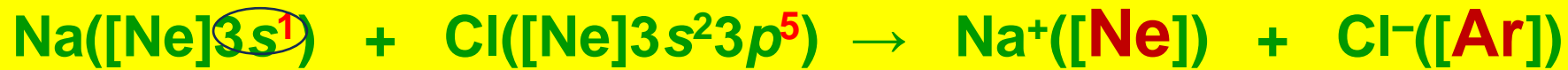
⇒ Ιοντικός δεσμός: σχηματίζεται από την ηλεκτροστατική έλξη μεταξύ κατιόντων/ανιόντων

⇒ Ομοιοπολικός δεσμός: δύο άτομα μοιράζονται ηλεκτρόνια σθένους και αποκτούν κοινά ζεύγη ηλεκτρονίων

⇒ Μεταλλικός δεσμός: κανονική διάταξη θετικών ιόντων περιβαλλόμενων από μια «θάλασσα» ηλεκτρονίων

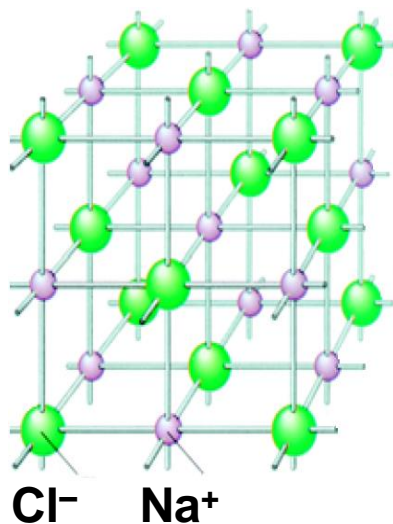


# Περιγραφή ιοντικών δεσμών



Ανάμεσα σε δύο άτομα, ένα ή περισσότερα **ηλεκτρόνια μεταφέρονται** από το φλοιό σθένους ενός ατόμου στο φλοιό σθένους του άλλου

Δημιουργούνται: **κατιόντα** και **ανιόντα**, που το καθένα έλκει όσο το δυνατόν περισσότερα γειτονικά ιόντα αντιθέτου φορτίου



**Μεγάλος αριθμός ιόντων μαζί σχηματίζουν ένα ιοντικό στερεό, κανονικής κρυσταλλικής δομής!**

Μοντέλο τμήματος ενός κρυστάλλου **NaCl**, στο οποίο διακρίνεται σαφώς η κανονική διάταξη των ιόντων νατρίου και χλωριδίου (σ.τ. 801 °C)

Κάθε ιόν **Na<sup>+</sup>** περιβάλλεται από έξι ιόντα **Cl<sup>-</sup>** και κάθε ιόν **Cl<sup>-</sup>** περιβάλλεται από έξι ιόντα **Na<sup>+</sup>**

# Σύμβολισμός Lewis

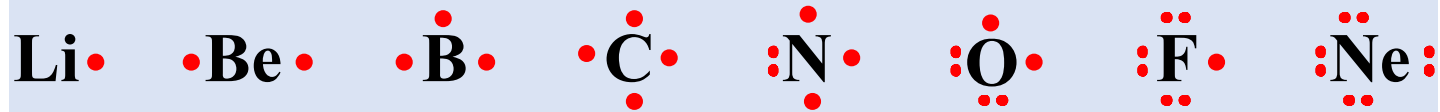
## ➤ Σύμβολα Lewis με ηλεκτρόνια-κουκκίδες

Τα ηλεκτρόνια σθένους (valence electrons, ve) παριστάνονται ως κουκκίδες γύρω από το σύμβολο του στοιχείου

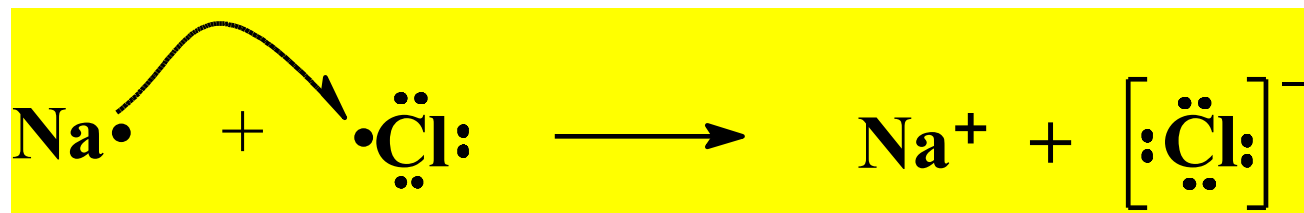
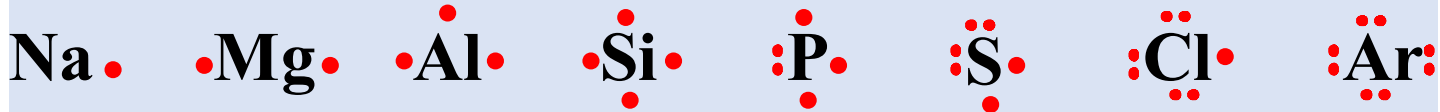
### Σύμβολα Lewis με ηλεκτρόνια-κουκκίδες για τα άτομα της 2ης και 3ης Περιόδου

	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A
Περίοδος	$s^1$	$ns^2$	$ns^2np^1$	$ns^2np^2$	$ns^2np^3$	$ns^2np^4$	$ns^2np^5$	$ns^2np^6$

Δεύτερη



Τρίτη



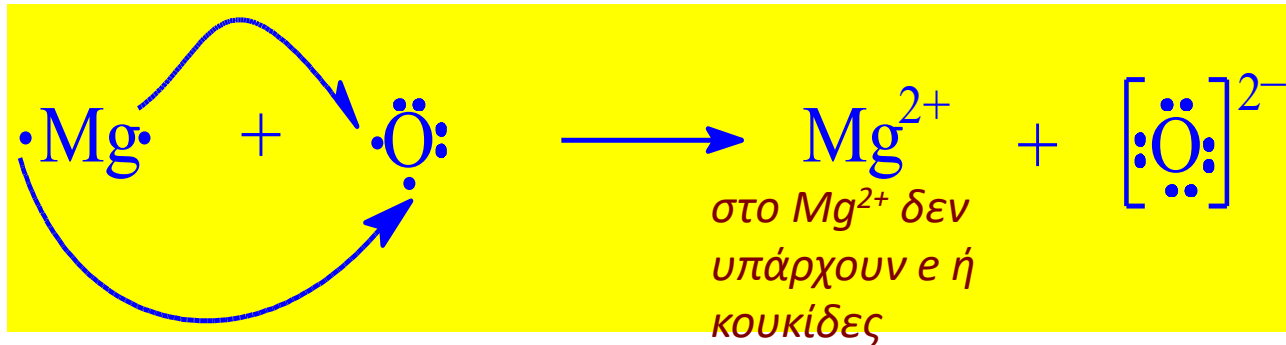
# Άσκηση1

Δείξτε το σχηματισμό ιοντικού στερεού με μεταφορά ηλεκτρονίων από το μαγνήσιο στο οξυγόνο, σύμβολα Lewis με ηλεκτρόνια κουκίδες.

Τα σύμβολα Lewis για τα άτομα Mg και O :



Το άτομο του Mg χάνει δύο  $e$  και το άτομο του O δέχεται δύο  $e$ .



Μικρή εισαγωγή σε θερμοδυναμικές έννοιες που απαιτούνται για την κατανόηση του κύκλου Born Haber

Η θερμοδυναμική (Κεφάλαιο 6ο) θα διδαχτεί μαζί με τη θερμοδυναμική ισορροπία (κεφάλαιο 17)

# Πώς ορίζεται η θερμότητα αντίδρασης

**Θερμότητα αντίδρασης:** Τιμή του  $q$ , ενέργεια που απαιτείται για να επιστρέψει ένα σύστημα σε δεδομένη θερμοκρασία από τη στιγμή που ολοκληρώνεται η αντίδραση



Τύπος διεργασίας	Πειραματικά διαπιστούμενο αποτέλεσμα	Μεταβολή στο σύστημα	Πρόσημο του $q$
------------------	--------------------------------------	----------------------	-----------------

Ενδόθερμη	Το δοχείο της αντίδρασης ψύχεται (απορροφάται ενέργεια)	Προστίθεται ενέργεια	+
-----------	---	----------------------	---



Εξώθερμη	Το δοχείο της αντίδρασης θερμαίνεται (εκλύεται ενέργεια)	Αφαιρείται ενέργεια	-
----------	--	---------------------	---

# Καταστατική συνάρτηση

⇒ Καταστατική συνάρτηση: ιδιότητα συστήματος που εξαρτάται μόνο από την κατάσταση στην οποία βρίσκεται εκείνη τη στιγμή, άρα είναι ανεξάρτητη από κάθε προηγούμενο ιστορικό του συστήματος π.χ. μηχανισμό αντίδρασης.

⇒ Καθορίζεται πλήρως από τις μεταβλητές  $T$  και  $P$ . π.χ.  $1\text{mol H}_2\text{O}$  ( $0\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $1\text{Atm}$ ) έχει ορισμένη ποσότητα ενέργειας.

Μια αναλογία για τη διευκρίνιση της καταστατικής συνάρτησης



Οι δύο τόποι διαφέρουν υψομετρικά κατά 1200 m. Η υψομετρική αυτή διαφορά είναι ανεξάρτητη από το μονοπάτι που ακολουθεί κάποιος για να φθάσει από τον ένα τόπο στον άλλο.

Όμως, η πορεία που διανύει και τα πράγματα που συναντά στη διαδρομή του εξαρτώνται από το μονοπάτι που επέλεξε.

Εδώ, το υψόμετρο είναι κάτι ανάλογο με μια θερμοδυναμική καταστατική συνάρτηση.

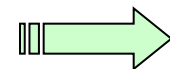


## Ενθαλπία και μεταβολή ενθαλπίας $H / \Delta H$

- ⇒ Ενθαλπία ( $H$ ): εκτατική ιδιότητα των ουσιών που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να βρεθεί το ποσόν θερμότητας που απορροφάται ή εκλύεται σε μια χημική αντίδραση κατά το σχηματισμό προϊόντος.
- ⇒ Η ενθαλπία είναι μια καταστατική συνάρτηση

⇒ Εκτατική ιδιότητα: κάθε ιδιότητα της οποίας το μέγεθος εξαρτάται από την ποσότητα των συστατικών του συστήματος (π.χ., μάζα, όγκος, **ενέργεια**, **ενθαλπία**, θερμοχωρητικότητα κ.λπ.)

⇒ Εντατική ιδιότητα: εξαρτάται από τη φύση των συστατικών του συστήματος και όχι από τη μάζα τους (π.χ., θερμοκρασία, πίεση, πυκνότητα, γραμμομοριακή μάζα κ.λπ.)



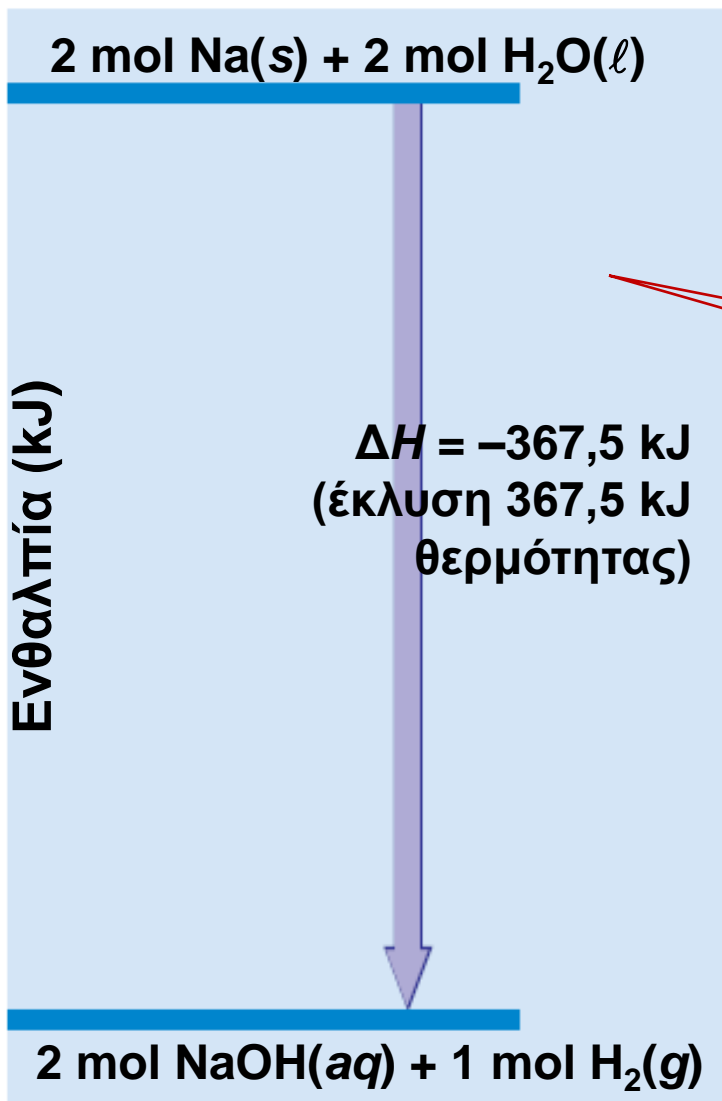
# Ενθαλπία και μεταβολή ενθαλπίας

Ενθαλπία αντίδρασης (υπό ορισμένη  $T$  και  $P$ ):

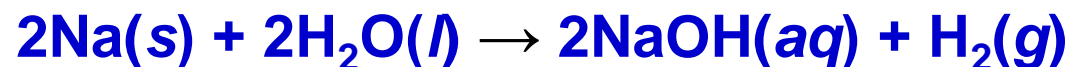
$$\Delta H(\text{αντίδρασης}) = H(\text{προϊόντων}) - H(\text{αντιδρώντων})$$

είναι ανεξάρτητη από μηχανισμό της αντίδρασης

Η Ενθαλπία αντίδρασης = με τη θερμότητα αντίδρασης  
υπό σταθερή πίεση



Διάγραμμα ενθαλπίας της αντίδρασης:



Πειραματικά βρίσκουμε ότι εκλύονται **367,5 kJ θερμότητας**

★ Η ενθαλπία του συστήματος ελαττώνεται κατά **367,5 kJ**.



# Ενέργειες που σχετίζονται με τη δημιουργία ιοντικού δεσμού

1. 1η ενέργεια ιοντισμού  $EI$ : Η απομάκρυνση **απαιτεί** ενέργεια ( $496 \text{ kJ/mol}$ )

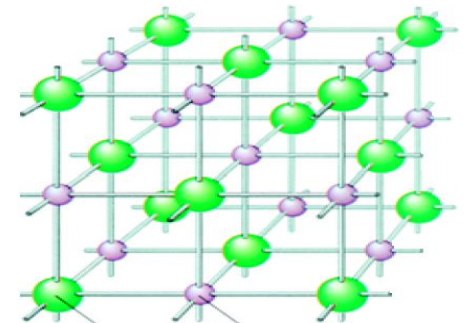
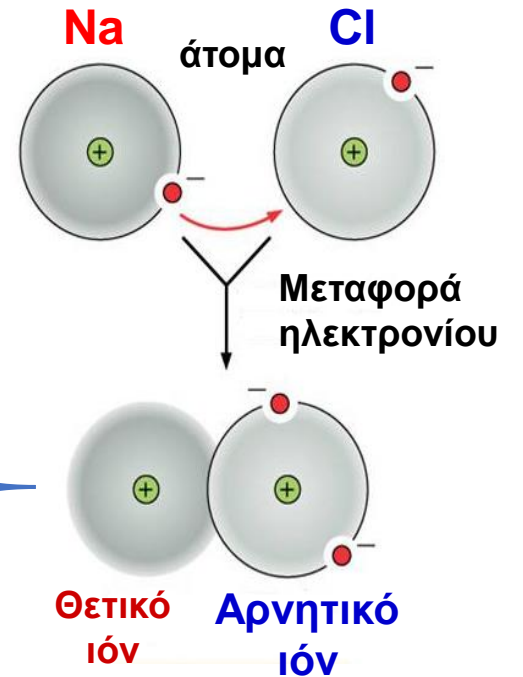
2. Ενέργεια προσθήκης  $EA$  (addition energy): Η προσθήκη **εκλύει** ενέργεια ( $-349 \text{ kJ mol}^{-1}$ )

Σχηματισμός ιόντων από άτομα:  $(EI+EA=496 -349) \text{ kJ mol}^{-1}$   
άρα απαιτεί ενέργεια  $147 \text{ kJ mol}^{-1}$

3. Ένωση θετικών-αρνητικών ιόντων, λόγω ηλεκτροστατικής έλξης, **εκλύει** Ενέργεια Coulomb

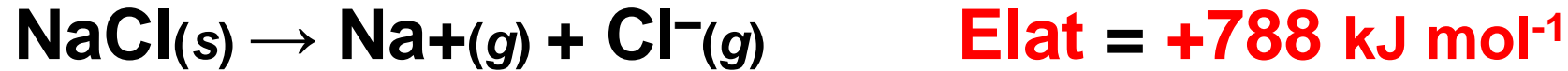
$$E = \frac{kQ_1Q_2}{r}$$

Για να επιτευχθεί ο σχηματισμός του κρυσταλλικού στερεού πρέπει  
**Ενέργεια Coulomb > E σχηματισμού ιόντων**



# Ενέργεια πλέγματος

**Ενέργεια πλέγματος ( $E_{\text{Lattice}}$ ):** η ενέργεια που απαιτείται για τον πλήρη διαχωρισμό ενός mole μιας στερεάς ιοντικής ένωσης στα **ιόντα** της (σε αέρια φάση).



**Ενέργεια σχηματισμού πλέγματος ( $U$ ):** η ενέργεια που εκλύεται κατά την ηλεκτροστατική έλξη των ιόντων της έχει αντίθετο πρόσημο από την  $E_{\text{lat}}$

Ένωση	Ενέργεια πλέγματος ( $\text{kJ mol}^{-1}$ )	Σημείο τήξεως ( $^{\circ}\text{C}$ )
LiF	1017	845
NaBr	736	750
KCl	699	772
MgCl <sub>2</sub>	2527	714
CaO	3461	2587
MgO	3890	2800

ΜΕΛΕΤΗ ΜΕ ΚΥΚΛΟ: Born–Haber

## Υπολογισμός σχηματισμού ένωσης ( $\Delta H$ )

Για να υπολογίσω το  $\Delta H$  σχηματισμού ένωσης, πρέπει να καταλάβω τα στάδια που απαιτούνται για το σχηματισμό της και να γνωρίζω τις επιμέρους ενέργειές τους

Τα ενεργειακά ποσά γνωστών ενώσεων έχουν υπολογιστεί **σε αέρια κατάσταση** και είναι διαθέσιμα σε πίνακες (data base)

**τα Ενεργειακά ποσά στα στάδια που απαιτούνται από την αρχική φυσική κατάσταση μέχρι το τελικό προϊόν**

1. Ενέργεια εξάχνωσης ( $E_{\text{sub}}$ ), αν η ουσία μου είναι στερεά
2. Ενέργεια σχάσης δεσμού σε αέρια κατάσταση αν έχω δι-ατομικό μόριο π.χ.  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{O}_2$  κλπ
3. Ενέργεια ιονισμού ( $E_I$ ) για να σχηματιστεί κατιόν
4. Ενέργεια προσθήκης ( $E_A$ ) για να σχηματιστεί ανιόν
5. Ενέργεια πλέγματος  $E_{\text{lattice}}$  ή  $U$

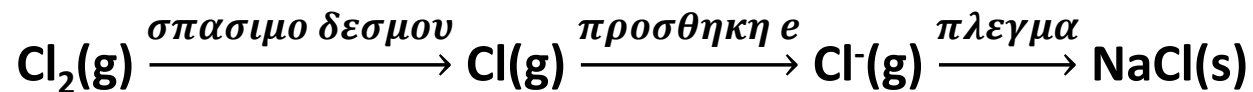
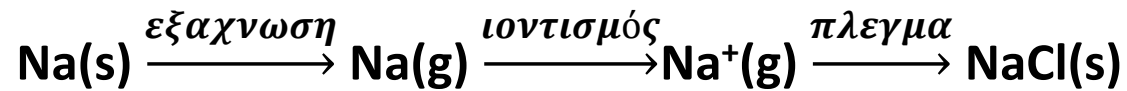
## ΜΕΛΕΤΗ ΜΕ ΚΥΚΛΟ: Born–Haber

Υπολογισμός  $\Delta H$  σχηματισμού ένωσης: σκέφτομαι τις επιμέρους ενέργειες

1ο βήμα: Γράφω την αντίδραση σχηματισμού π.χ.



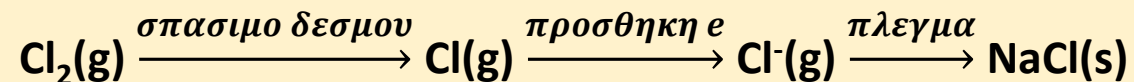
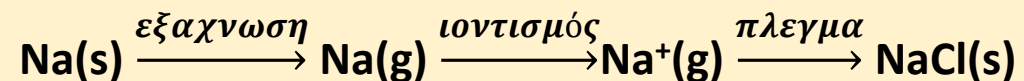
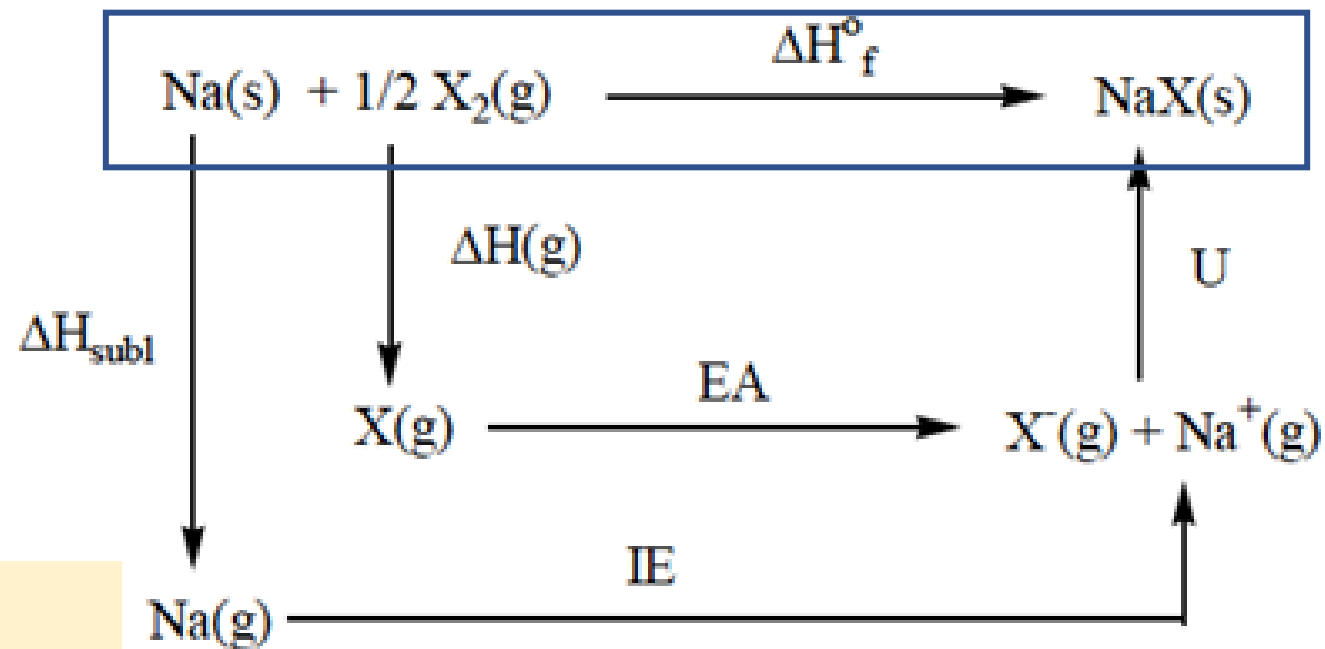
2ο βήμα: σκέφτομαι τα απαιτούμενα στάδια από την αρχική φυσική κατάσταση μέχρι το τελικό προϊόν.



## ΜΕΛΕΤΗ ΜΕ ΚΥΚΛΟ: Born–Haber

Υπολογισμός  $\Delta H$  σχηματισμού ένωσης: σχεδιάζω τον κύκλο Born-Haber

3ο βήμα: καταγράφω τα στάδια σε κυκλικό διάγραμμα ξεκινώντας από την αντίδραση σχηματισμού.





## 4ο βήμα: υπολογισμοί από τις τιμές δεδομένων

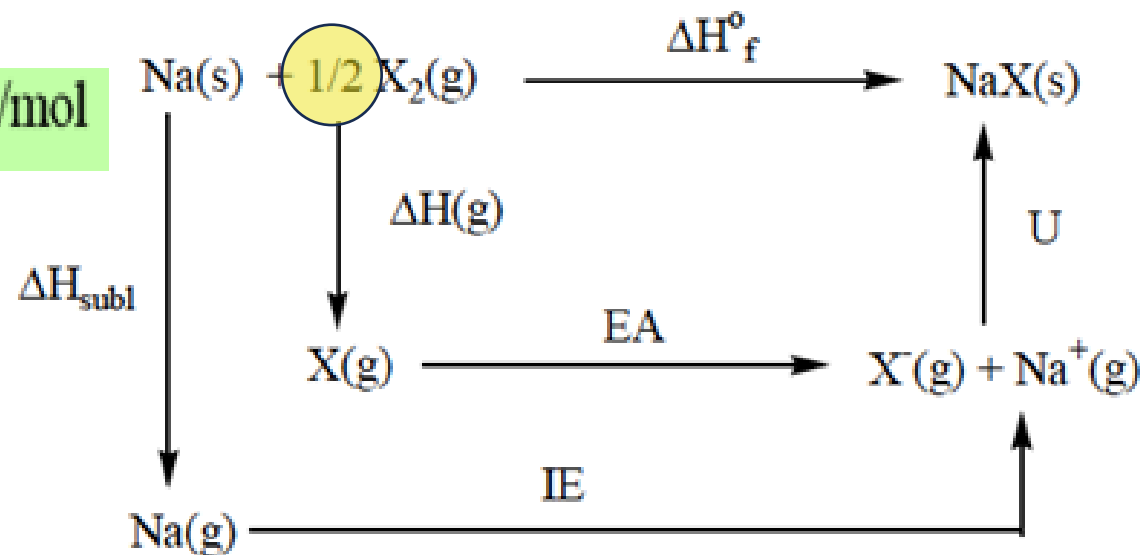
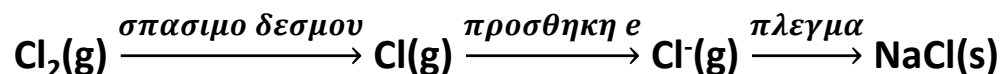
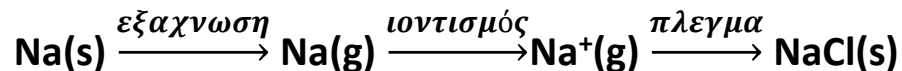
Υπολογισμός  $\Delta H_f$  σχηματισμού ένωσης (*formation*): προσθέτω αλγεβρικά τις επιμέρους ενέργειες

	Εξάχνωση Na(s)	Ιοντισμός Na(g)	Σπάσιμο δεσμού Cl <sub>2</sub>	Προσθήκη e	Σχηματισμός ιοντικού δεσμού
	$\Delta H_{\text{sub}}$	IE	$\Delta H_g$	EA	$U_{\text{B-H}}$
	Απαιτεί E	Απαιτεί E	Απαιτεί E	Εκλύει E	Εκλύει E
<b>NaCl</b>	(+) 107.3	495.9	243.4	-349	-787

$$\Delta H_f^\circ = \Delta H_{\text{SUB}} + \text{IE} + \frac{1}{2} \Delta H_g + \text{EA} + U$$

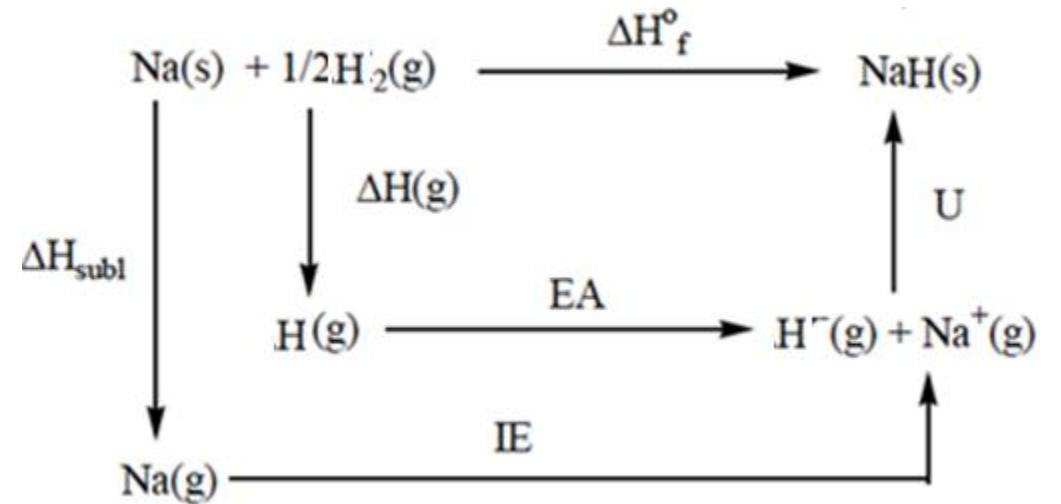
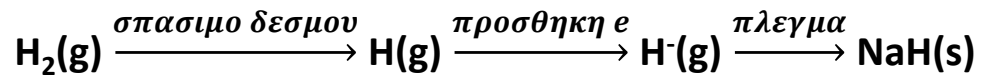
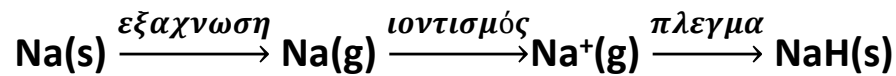
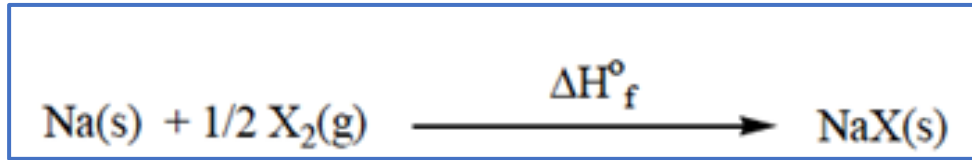
συντελεστής αντίδρασης

NaCl:  $\Delta H_f^\circ = 107.3 + 495.9 + 121.7 + (-349) + (-787) = -411 \text{ kJ/mol}$



## Υπολογισμός $\Delta H$ σχηματισμού ένωσης NaH. Δίδονται:

	$\Delta H_{\text{sub}}$	IE	$\Delta H_{\text{g}}$	EA	$U_{\text{B-H}}$
NaH	107.3	495.9	436.4	-77	-808



$$\Delta H^{\circ}_{\text{f}} = \Delta H_{\text{SUB}} + \text{IE} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{g}} + \text{EA} + U$$

συντελεστής αντίδρασης

$$\text{NaH: } \Delta H^{\circ}_{\text{f}} = 107.3 + 495.9 + 218.2 + (-77) + (-808) = -64 \text{ kJ/mol}$$

Υπολογίστε το  $X$  χρησιμοποιώντας τα σωστά πρόσημα στις διάφορες ενέργειες

	$\Delta h_{\text{sub}}$	IE	$\Delta H_{\text{g}}$	EA	$U_{\text{B-H}}$	$\Delta H_{\text{F}}$
MH	$\pm 89.2$	<b>X2</b>	$\pm 436.4$	$\pm 77$	$\pm 707$	<b>-57.8</b>

$$X = + 418.9 \text{ kJ/mol}$$

Γράψτε έναν κύκλο Born–Haber για το σχηματισμό του  $\text{CaH}_2$  και χρησιμοποιήστε τον για να υπολογίσετε την ενέργεια του πλέγματος αυτής της ένωσης.

### Δεδομένα σε απόλυτες τιμές

Θερμότητα σχηματισμού του  $\text{CaH}_2$  είναι 186 kJ/mol.

Θερμότητα της εξάχνωσης Ca είναι 178,2

ενέργειες πρώτο και δεύτερο ιονισμό 589,8 και 1145 kJ/mol, αντίστοιχα.

Θερμότητα διάσπασης  $\text{H}_{2(g)}$  είναι 436.4 kJ/mol

ΕΑ  $\text{H}_{(g)}$  είναι 77 kJ/mol

### ΠΡΟΣΟΧΗ ΣΤΑ ΠΡΟΣΙΜΑ!

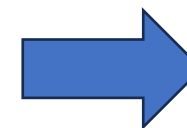
$\Delta H_{\text{SUB}} > 0$  απαιτεί ενέργεια

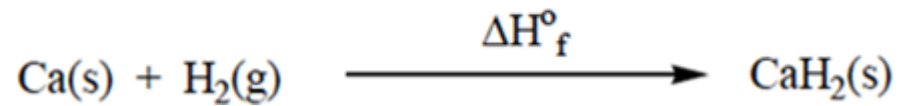
IE  $> 0$  απαιτεί ενέργεια

$\Delta H_{\text{g}} > 0$  απαιτεί ενέργεια

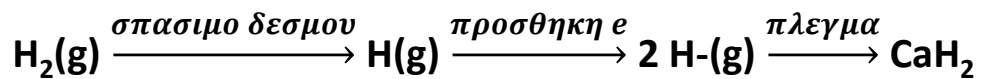
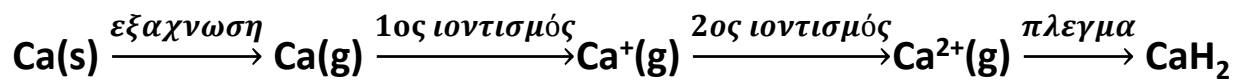
ΕΑ  $< 0$  αποδίδει ενέργεια

U  $< 0$  σχηματισμός πλέγματος, αποδίδει ενέργεια

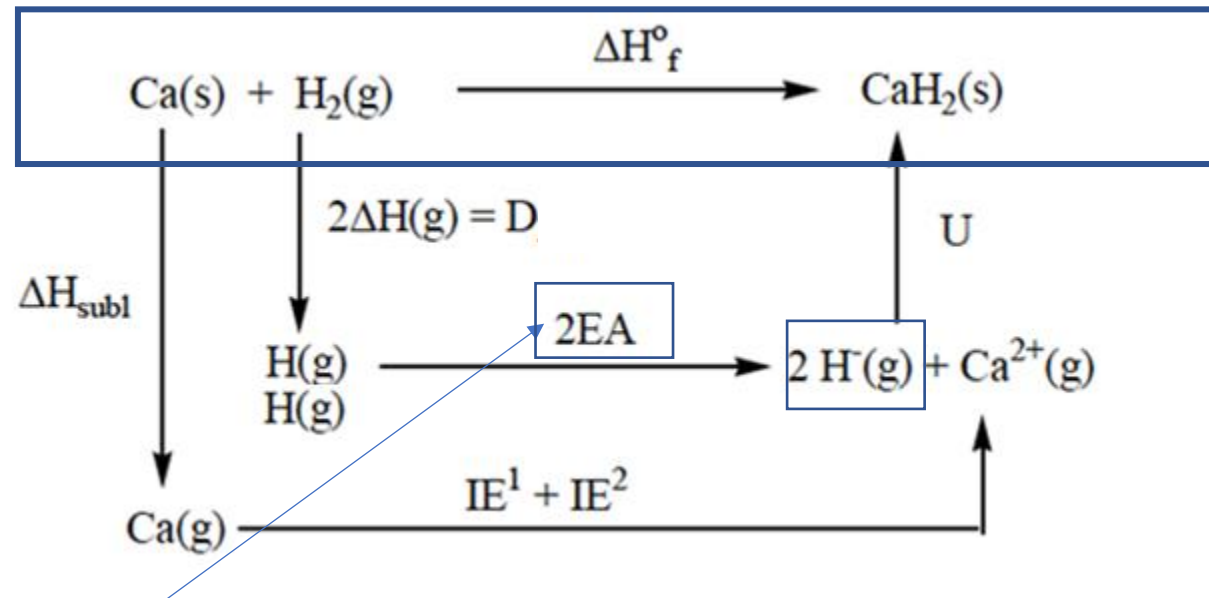




εχω κατιον 2+ άρα θα φύγουν 2 e



κύκλος Born–Haber για το CaH<sub>2</sub>



ΘΕΛΩ 2 Η- ΣΤΟ ΠΛΕΓΜΑ!

Θερμότητα σχηματισμού του  $\text{CaH}_2$  είναι 186 kJ/mol.

Θερμότητα της εξαχνωσης Ca είναι 178,2

ενέργειες πρώτο και δεύτερο ιονισμό 589,8 και 1145 kJ/mol, αντίστοιχα.

Θερμότητα διάσπασης  $\text{H}_{2(g)}$  είναι 436.4 kJ/mol

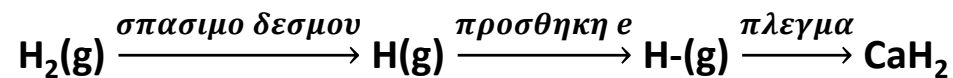
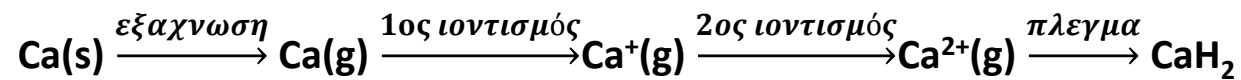
Ενέργεια προσθήκης στο  $\text{H}_{(g)}$  είναι 77 kJ/mol

	$\Delta H_{\text{sub}}$	IE	$\Delta H_{\text{g}}$	EA	U	$\Delta H_{\text{F}}$
CaH <sub>2</sub>	178.2	589.8 1145	436.4	-77	X	-186

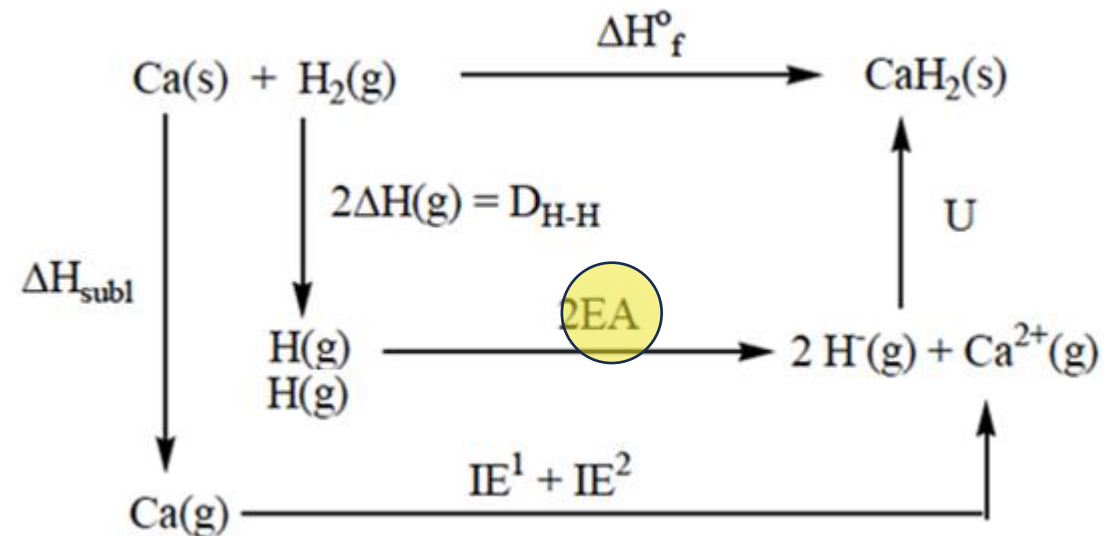
$$\Delta H_{\text{f}}^{\circ} = \Delta H_{\text{SUB}} + \text{IE}^1 + \text{IE}^2 + \Delta H_{\text{g}} + 2 \text{EA} + U$$

$$U = \Delta H_{\text{f}}^{\circ} - \Delta H_{\text{SUB}} - \text{IE}^1 - \text{IE}^2 - \Delta H_{\text{g}} - 2 \text{EA}$$

$$= -186 - 178.2 - 589.8 - 1145 - 436.4 - 2(-77) = -2381 \text{ kJ/mol}$$



κύκλος Born–Haber για το  $\text{CaH}_2$



	1A 1																					8A 18
	1 H 1s <sup>1</sup>	2A 2																				2 He 1s <sup>2</sup>
Ευγενές αέριο	[He]																					
	3 Li 2s <sup>1</sup>	4 Be 2s <sup>2</sup>																				
	[Ne]																					
	11 Na 3s <sup>1</sup>	12 Mg 3s <sup>2</sup>	3B 3	4B 4	5B 5	6B 6	7B 7	8 8	9 9	10 10	1B 11	2B 12	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>				
	[Ar]																					
	19 K 4s <sup>1</sup>	20 Ca 4s <sup>2</sup>	21 Sc 4s <sup>2</sup> 3d <sup>1</sup>	22 Ti 4s <sup>2</sup> 3d <sup>2</sup>	23 V 4s <sup>2</sup> 3d <sup>3</sup>	24 Cr 4s <sup>1</sup> 3d <sup>5</sup>	25 Mn 4s <sup>2</sup> 3d <sup>5</sup>	26 Fe 4s <sup>2</sup> 3d <sup>6</sup>	27 Co 4s <sup>2</sup> 3d <sup>7</sup>	28 Ni 4s <sup>2</sup> 3d <sup>8</sup>	29 Cu 4s <sup>1</sup> 3d <sup>10</sup>	30 Zn 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup>	31 Ga 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>1</sup>	32 Ge 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>2</sup>	33 As 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>3</sup>	34 Se 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>4</sup>	35 Br 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>5</sup>	36 Kr 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>6</sup>				
	[Kr]																					
	37 Rb 5s <sup>1</sup>	38 Sr 5s <sup>2</sup>	39 Y 5s <sup>2</sup> 4d <sup>1</sup>	40 Zr 5s <sup>2</sup> 4d <sup>2</sup>	41 Nb 5s <sup>2</sup> 4d <sup>3</sup>	42 Mo 5s <sup>1</sup> 4d <sup>5</sup>	43 Tc 5s <sup>2</sup> 4d <sup>5</sup>	44 Ru 5s <sup>1</sup> 4d <sup>7</sup>	45 Rh 5s <sup>1</sup> 4d <sup>8</sup>	46 Pd 4d <sup>10</sup>	47 Ag 5s <sup>1</sup> 4d <sup>10</sup>	48 Cd 5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup>	49 In 5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>1</sup>	50 Sn 5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>2</sup>	51 Sb 5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>3</sup>	52 Te 5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>4</sup>	53 I 5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>5</sup>	54 Xe 5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>6</sup>				
	[Xe]																					
	55 Cs 6s <sup>1</sup>	56 Ba 6s <sup>2</sup>	71 Lu 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>1</sup>	72 Hf 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>2</sup>	73 Ta 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>3</sup>	74 W 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>4</sup>	75 Re 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>5</sup>	76 Os 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>6</sup>	77 Ir 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>7</sup>	78 Pt 6s <sup>1</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup>	79 Au 6s <sup>1</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup>	80 Hg 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup>	81 Tl 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>1</sup>	82 Pb 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>2</sup>	83 Bi 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>3</sup>	84 Po 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>4</sup>	85 At 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>5</sup>	86 Rn 6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>6</sup>				
	[Rn]																					
	87 Fr 7s <sup>1</sup>	88 Ra 7s <sup>2</sup>	103 Lr 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>1</sup>	104 Rf 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>2</sup>	105 Db 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>3</sup>	106 Sg 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>4</sup>	107 Bh 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>5</sup>	108 Hs 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>6</sup>	109 Mt 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>7</sup>	110 Ds 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>8</sup>	111 Rg 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>9</sup>	112 Cn 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup>	113 Fl 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7p <sup>1</sup>	114 Cn 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7p <sup>2</sup>	115 Nh 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7p <sup>3</sup>	116 Lv 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7p <sup>4</sup>	117 Ts 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7p <sup>5</sup>	118 Og 7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7p <sup>6</sup>				

ΠΠ βοηθητικός για τις παρακάτω επαναληπτικές ασκήσεις

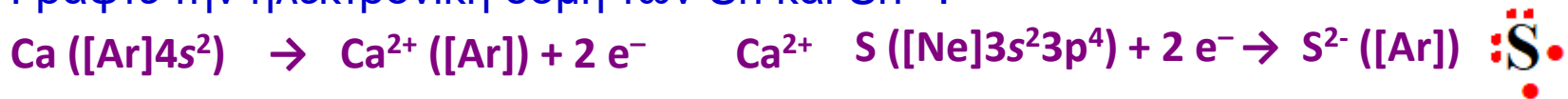
[Xe]	57 La 6s <sup>2</sup> 5d <sup>1</sup>	58 Ce 6s <sup>2</sup> 4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup>	59 Pr 6s <sup>2</sup> 4f <sup>3</sup>	60 Nd 6s <sup>2</sup> 4f <sup>4</sup>	61 Pm 6s <sup>2</sup> 4f <sup>5</sup>	62 Sm 6s <sup>2</sup> 4f <sup>6</sup>	63 Eu 6s <sup>2</sup> 4f <sup>7</sup>	64 Gd 6s <sup>2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

Μέταλλα
  Μεταλλοειδή
  Αμέταλλα

# Ασκήσεις Αναγραφή της ηλεκτρονικής δομής και του συμβόλου Lewis για ένα ιόν κύριας ομάδας

Γράψτε την ηλεκτρονική δομή και το σύμβολο Lewis για τα ιόντα  $\text{Ca}^{2+}$  και  $\text{S}^{2-}$ .

Γράψτε την ηλεκτρονική δομή των  $\text{Sn}$  και  $\text{Sn}^{4+}$ .



## Άσκηση Εύρεσης στοιχείου από την ηλεκτρονική δομή ενός ιόντος

Ένα ιόν  $\text{M}^{2+}$  της 1ης σειράς μεταβατικών μετάλλων έχει τέσσερα e στον υποφλοιό 3d. Ένα ιόν  $\text{M}^{3+}$  από της 1ης σειράς μεταβατικών μετάλλων έχει 5 e στον υποφλοιό 3d, Ποια είναι τα στοιχεία M;

Τα 3d μεταβατικά μέταλλα έχουν ηλ. διαμ.  $[\text{Ar}] 3d^x4s^2$

α)  $\text{M}^{2+}$  τα αντίστοιχα κατιόντα +2 θα έχουν ηλ. διαμ.  $[\text{Ar}] 3d^x$

Αυτό που ζητείται έχει 4 e στα d τροχιακά άρα ηλ. διαμ.  $\text{M}^{2+} [\text{Ar}] 3d^4$  δηλαδή προέρχεται από το μεταβατικό μέταλλο με ηλ.διαμ  $\text{M} [\text{Ar}] 3d^44s^2$  άρα θα είναι το 4ο σε σειρά μεταβατικό μέταλλο. Από τον ΠΠ θα είναι το Cr

ή  $\text{M} [\text{Ar}] 3d^54s^1$  λόγω ημισυμπληρωμένων τροχιακών

β)  $\text{M}^{3+}$  τα αντίστοιχα κατιόντα +3 θα έχουν ηλ. διαμ.  $[\text{Ar}] 3d^{x-1}$

Αυτό που ζητείται έχει 5 e στα d τροχιακά άρα ηλ. διαμ.  $\text{M}^{3+} [\text{Ar}] 3d^5$  δηλαδή προέρχεται από το μεταβατικό μέταλλο με ηλ.διαμ  $\text{M} [\text{Ar}] 3d^64s^2$  το 6ο σε σειρά μεταβατικό μέταλλο. Από τον ΠΠ θα είναι ο Fe

## Άσκηση (Αναγραφή ηλεκτρονικών δομών ιόντων μεταβατικών μετάλλων)

Γράψτε την ηλεκτρονική δομή του  $\text{Mn}^{2+}$  και του  $\text{Mn}^{3+}$ ;



Γράψτε έναν κύκλο Born–Haber για το σχηματισμό του CuH και χρησιμοποιήστε τον για να υπολογίσετε την ενέργεια του σχηματισμού αυτής της ένωσης. Σχηματίζεται αυθόρμητα το στερεό?

Θερμότητα πλέγματος του CuH είναι 1203 kJ/mol.

Θερμότητα της εξάχνωσης Cu είναι 338,3

ενέργειες πρώτο και δεύτερο ιονισμό 745,8 και 1221 kJ/mol, αντίστοιχα.

Θερμότητα διάσπασης  $1/2\text{H}_{2(\text{g})}$  είναι 218.2 kJ/mol

Ενέργεια προσθήκης  $\text{H}_{(\text{g})}$  είναι 77 kJ/mol

## ΠΡΟΣΟΧΗ ΣΤΑ ΠΡΟΣΙΜΑ!

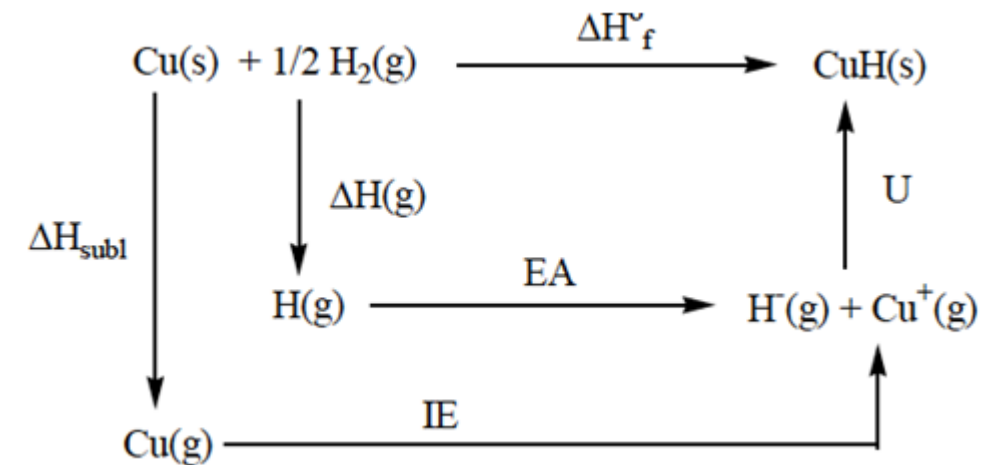
$\Delta H_{\text{SUB}} > 0$  απαιτεί ενέργεια

IE  $> 0$  απαιτεί ενέργεια

$\Delta H_{\text{g}} > 0$  απαιτεί ενέργεια

EA  $< 0$  αποδίδει ενέργεια

U  $< 0$  σχηματισμός πλέγματος, αποδίδει ενέργεια



$$\begin{aligned}\Delta H_f^\circ &= \Delta H_{\text{SUB}} + \text{IE} + \Delta H_{\text{g}} + \text{EA} + \text{U} \\ &= +338 + 745,8 + 218.2 + (-77) + (-1203) = 21 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

**Θετικό πρόσημα άρα απαιτείται ενέργεια για να σχηματιστεί**

Να γραφεί ο κύκλος Born–Haber για το  $\text{MgCl}_2$  και να υπολογιστεί η ενθαλπία σχηματισμού από τα δεδομένα του πίνακα

	$\Delta H_{\text{sub}}$	IE	$\Delta H_{\text{g}}$	EA	U	$\Delta H_{\text{F}}$
$\text{MgCl}_2$	187.6	628 1190	243.4	-349	-2597	X

Να γραφεί ο κύκλος Born–Haber για το  $\text{CaO}$  και να υπολογιστεί η ενθαλπία σχηματισμού από τα δεδομένα του πίνακα

	$\Delta H_{\text{sub}}$	IE	$\Delta H_{\text{g}}$	EA	U	$\Delta H_{\text{F}}$
$\text{CaO}$	193	589.8 1145	350	-244 -600	-3514	X