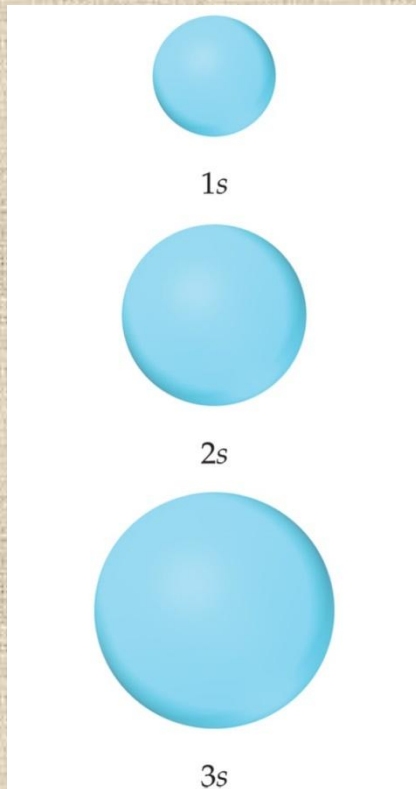


s τροχιακά



$$n = 1, 2, ..$$

$$l = 0$$

$$m_l = 0$$

σχήμα: σφαιρικό

ακτίνα σφαίρας: ανάλογη του n

Εξίσωση Schrödinger

$$\psi_{1s} = 2 \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\rho} \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2}$$

$$\rho = \frac{zr}{a_0}$$

Δεν υπάρχει εξάρτηση της ψ_{1s} από τις γωνίες θ και ϕ . Επομένως, η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο κάπου στο χώρο είναι η ίδια προς όλες τις κατευθύνσεις. Γι' αυτό το ηλεκτρονιακό νέφος του $1s$ τροχιακού παριστάνεται με σφαίρα.

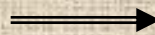
Ακτινικοί κόμβοι - τροχιακά s

$$R(r_i) = 0$$

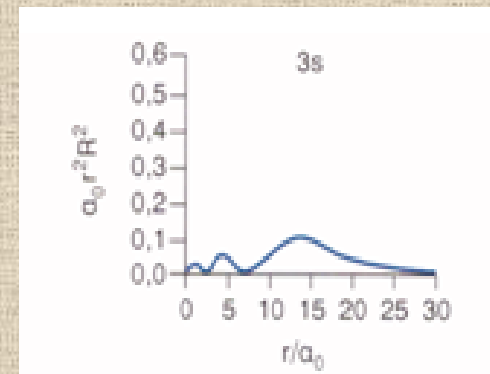
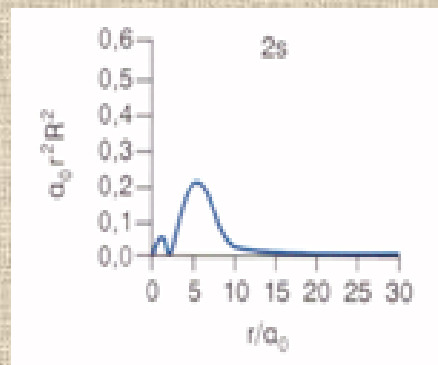
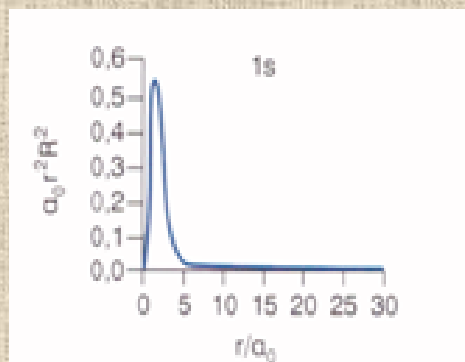
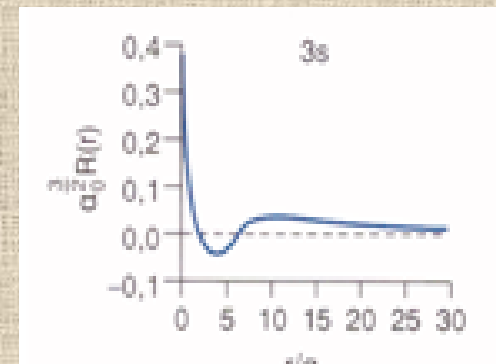
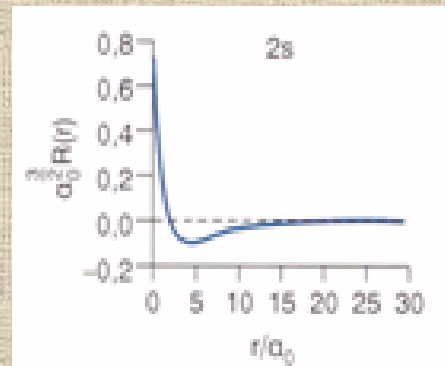
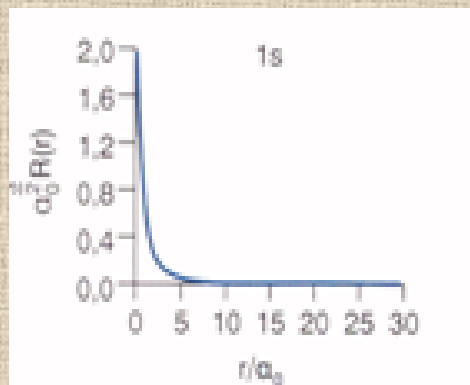


ακτινικός κόμβος

$$R^2(r_i) = 0$$

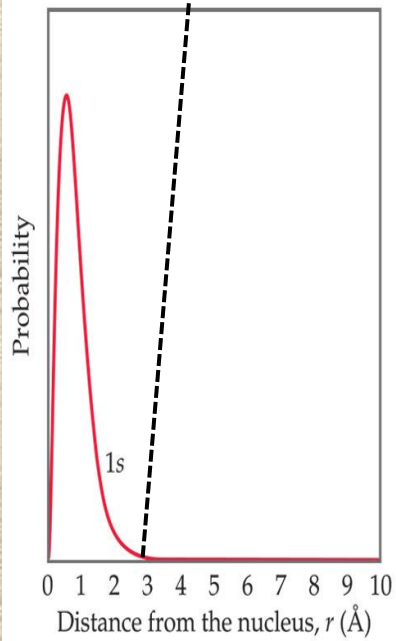


μηδενική πιθανότητα εύρεσης e

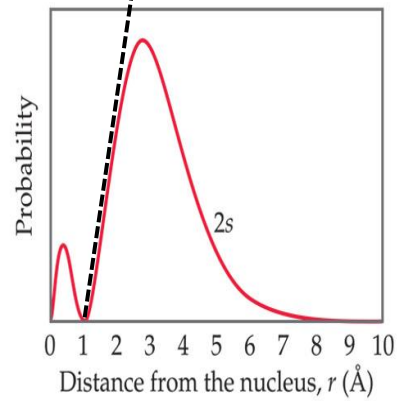


s τροχιακά

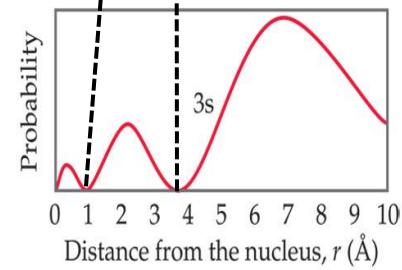
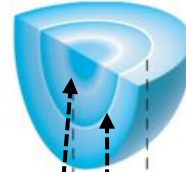
1s
 $n = 1, l = 0$



2s
 $n = 2, l = 0$



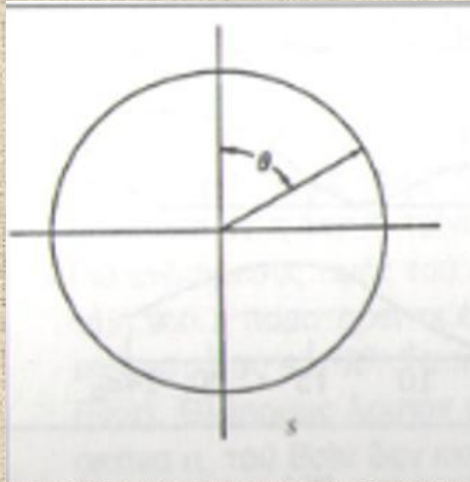
3s
 $n = 3, l = 0$



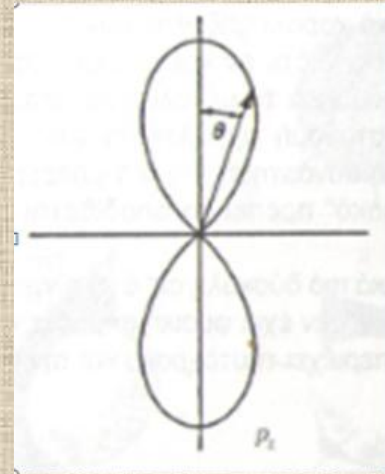
Τα τροχιακά με κύριο
κβαντικό αριθμό n
παρουσιάζουν $n-l-1$
κόμβους (nodes).

Συνάρτηση γωνιακής πιθανότητας $A(\theta, \phi)^2$

η πιθανότητα να βρεθεί το e σε χώρο που καθορίζεται από τις γωνίες θ και ϕ



$A(\theta, \phi)$ ανεξάρτητη
των θ και ϕ

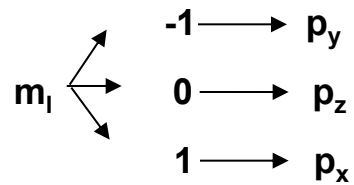


$A(\theta, \phi) = f(\theta, \phi)$

ρ τροχιακά

$n = 2, ..$

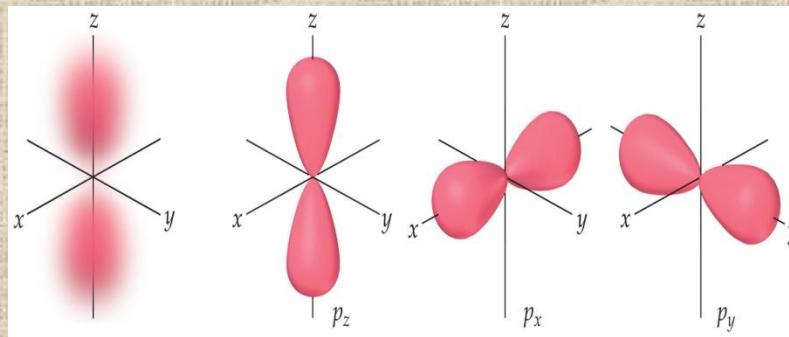
$l = 1$



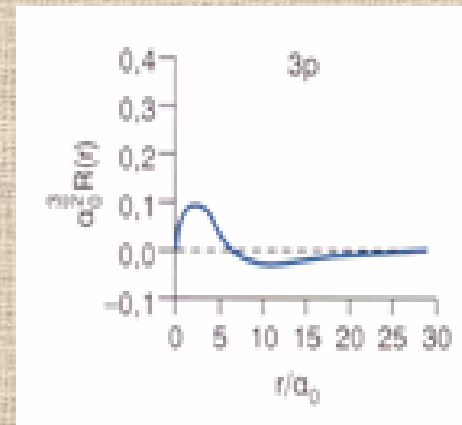
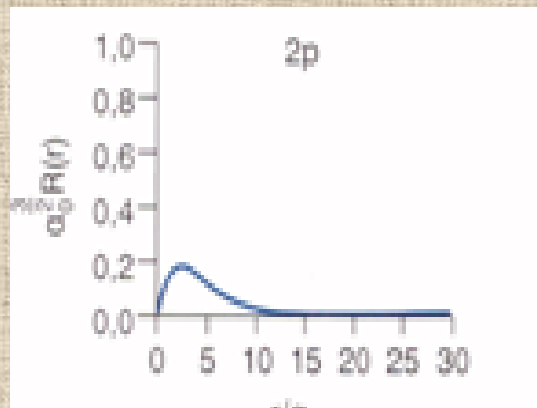
$$\psi_{2p_z} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$$

$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \varphi \cdot \eta \mu \theta$$

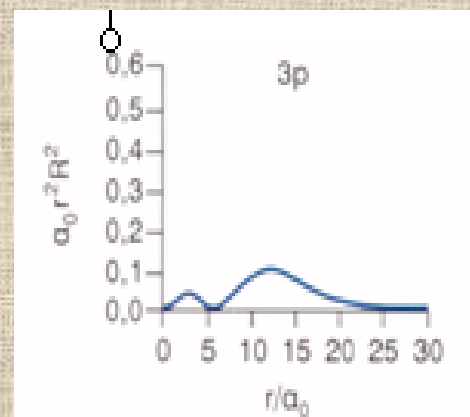
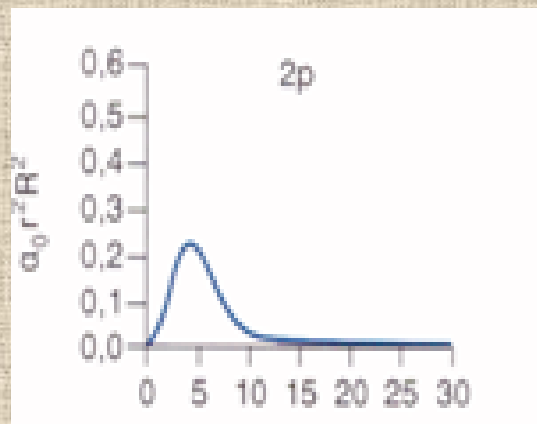
$$\psi_{2p_y} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \eta \mu \theta \cdot \eta \mu \varphi$$



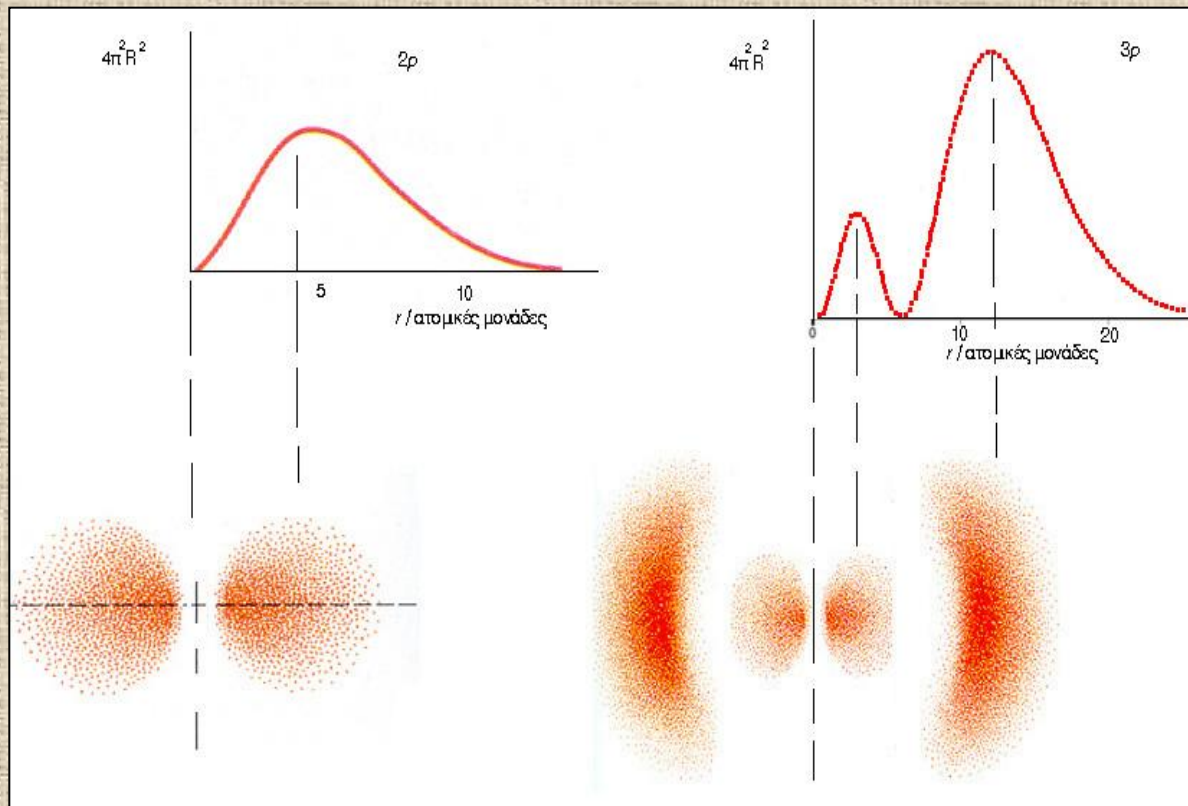
Ακτινικοί κόμβοι - τροχιακά p

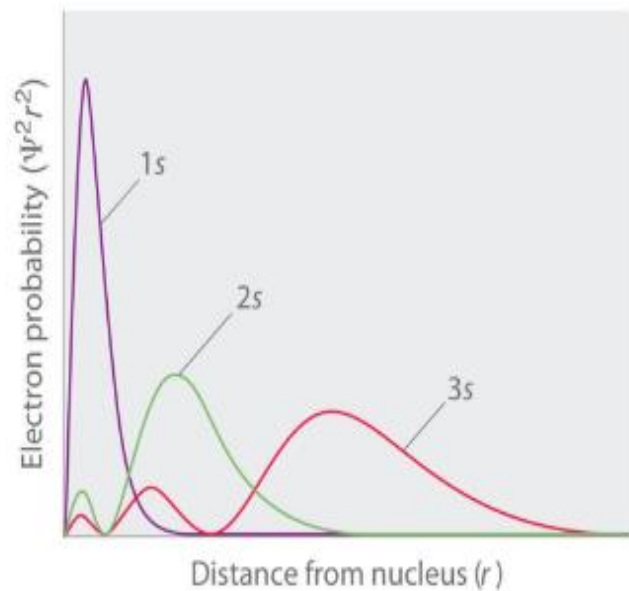


Κόμβοι = $n-l-1$

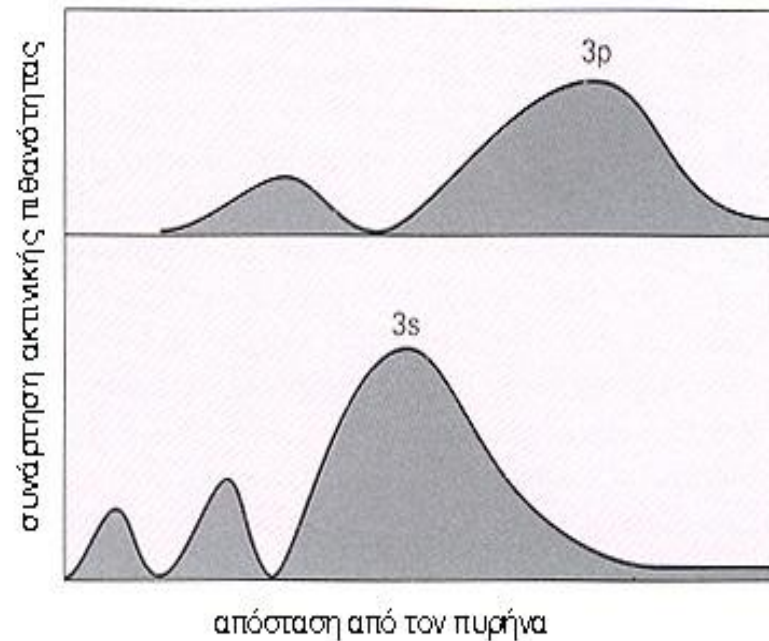


Ακτινικοί κόμβοι - τροχιακά p



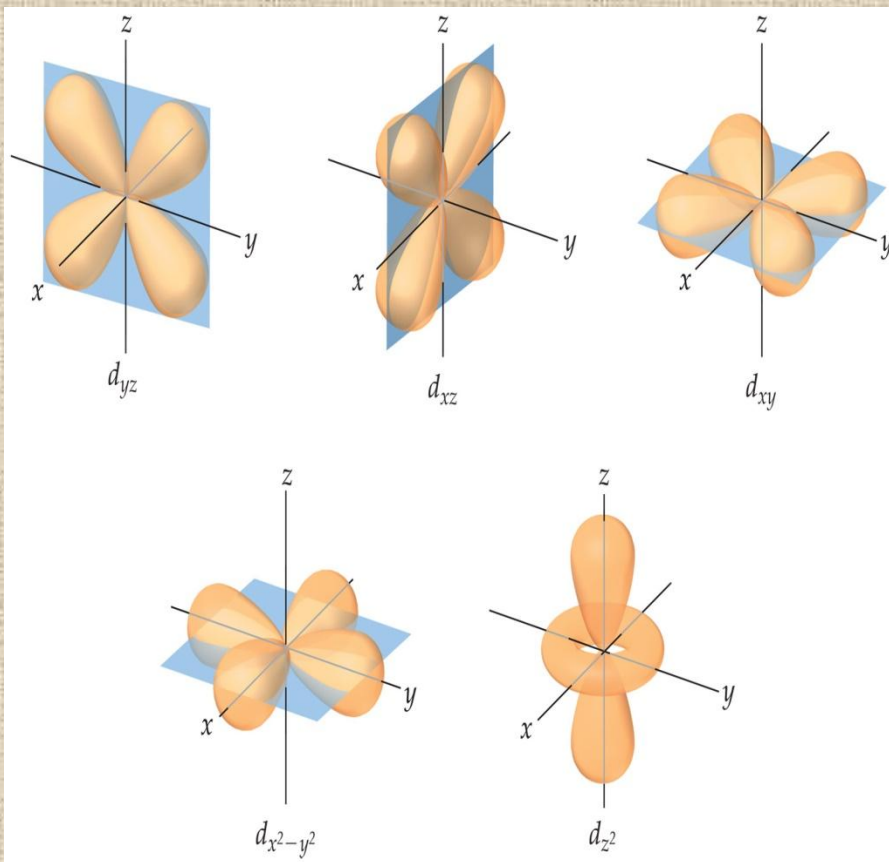


(c) Radial probability



σύνολο κόμβων = $n-l-1$

d τροχιακά



$n = 3, ..$

$l = 2$

m_l	-2	$\rightarrow$	d_{xy}
	-1	$\rightarrow$	d_{yz}
	0	$\rightarrow$	d_{z^2}
	1	$\rightarrow$	d_{xz}
	2	$\rightarrow$	$d_{x^2-y^2}$

$$\psi_{3d_{z^2}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

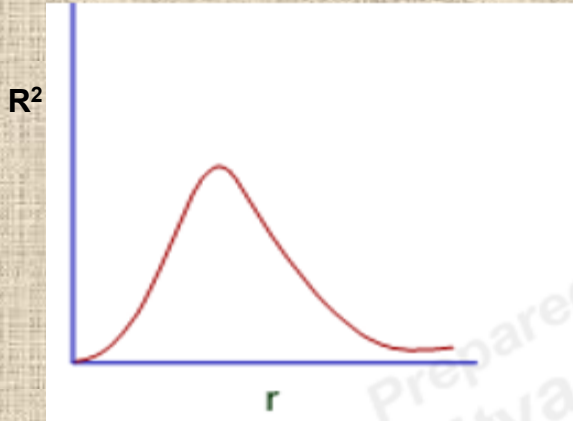
$$\psi_{3d_{xz}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} z^{3/2} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{30}{\pi}} \eta \mu \theta \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi$$

$$\psi_{3d_{yz}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} z^{3/2} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{30}{\pi}} \eta \mu \theta \cdot \sin \theta \cdot \eta \mu \varphi$$

$$\psi_{3d_{x^2-y^2}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \eta \mu^2 \theta \cdot \sin 2\varphi$$

$$\psi_{3d_{xy}} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/3} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \eta \mu^2 \theta \cdot \eta \mu 2\varphi$$

Κόμβοι - τροχιακά 3d



δεν υπάρχουν
ακτινικοί κόμβοι

Γωνιακός κόμβος

μηδενισμός της γωνιακής συνάρτησης $\Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$

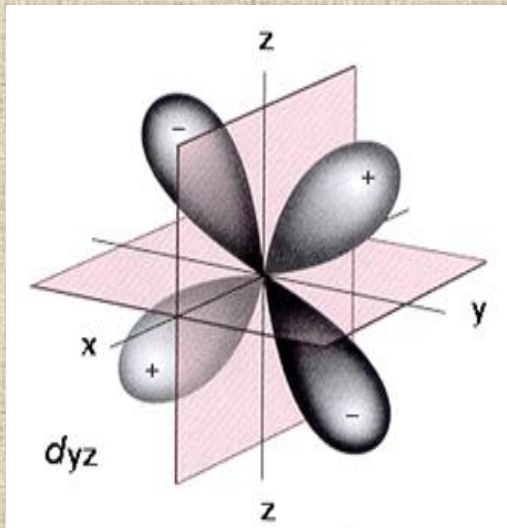
μηδενισμός $\Theta(\theta)$

κωνικές κομβικές
επιφάνειες

μηδενισμός $\Phi(\varphi)$

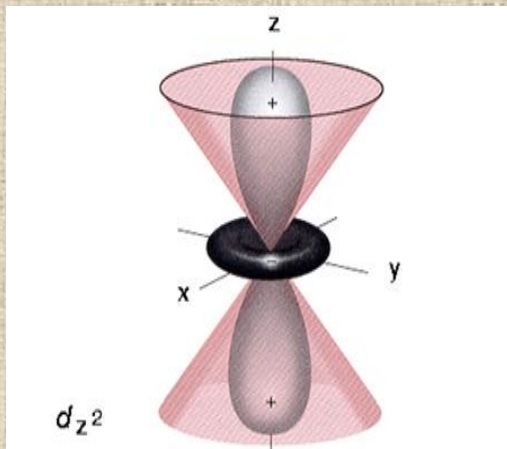
επίπεδες κομβικές
επιφάνειες

Κόμβοι - τροχιακά d

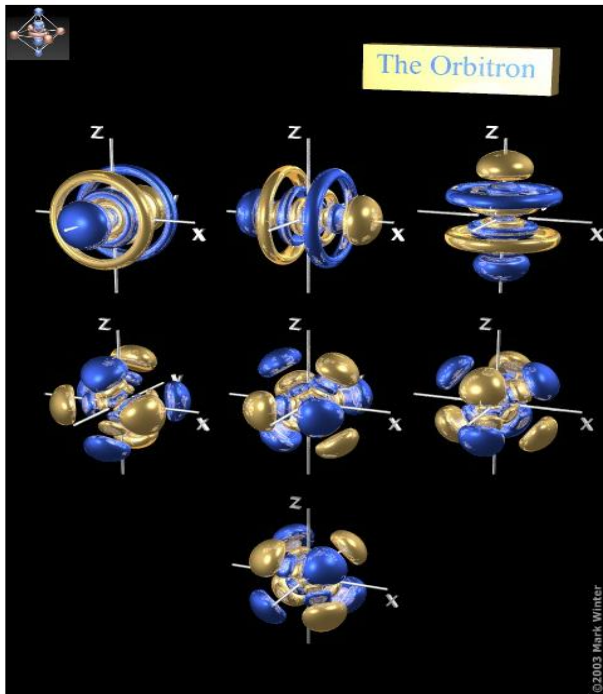


2 επίπεδοι κόμβοι

σύνολο επίπεδων κόμβων = 1

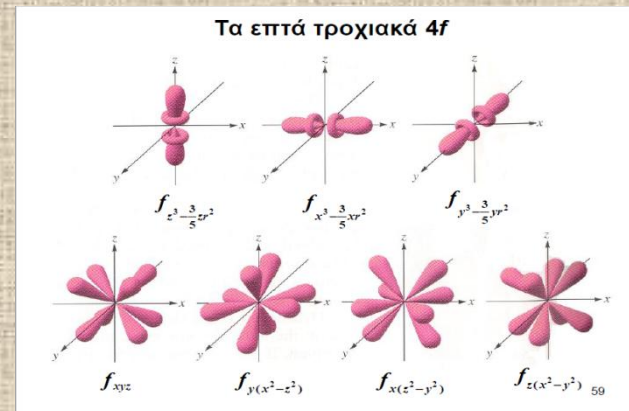


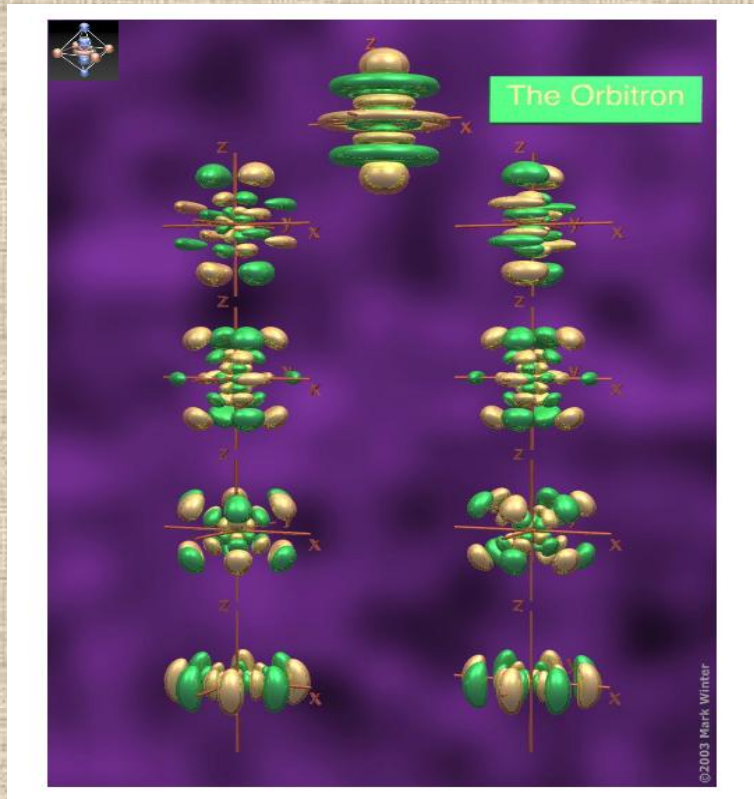
1 κωνικός κόμβος



The shape of the seven *4f* orbitals (cubic set). From left to right: (top row) $7f_y^3$, $7f_x^3$, $7f_z^3$, (middle row) $7f_x(z^2-y^2)$, $7f_y(z^2-x^2)$, $7f_z(x^2-y^2)$, and (bottom row) $7f_{xyz}$. For each, the blue zones are where the wave functions have negative values and the gold zones denote positive values.

f atomic orbitals





g atomic orbitals

[http://www.orbitals.com/orb/orbtable.
htm](http://www.orbitals.com/orb/orbtable.htm)

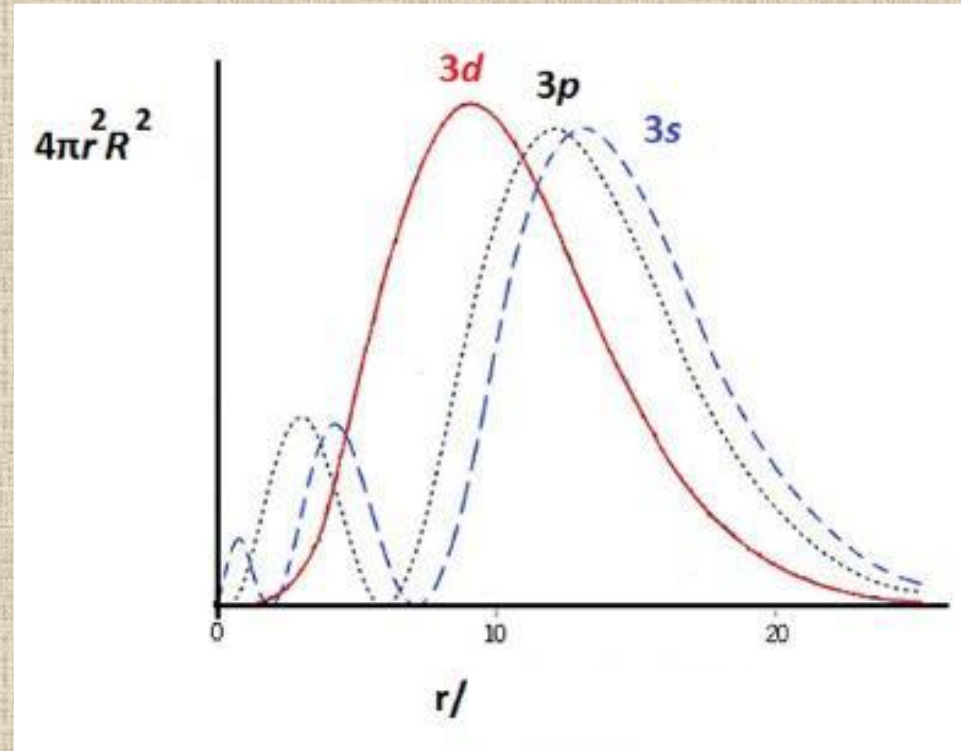
Η παρουσία μεγάλου αριθμού κόμβων αυξάνει την ηλεκτρονιακή πυκνότητα κοντά στον πυρήνα με αποτέλεσμα να αυξάνεται η διεισδυτικότητα του τροχιακού.



Όσο περισσότερες είναι οι κομβικές επιφάνειες τόσο χαμηλότερη είναι η ενέργεια του αντίστοιχου τροχιακού



$$E(3s) < E(3p) < E(3d)$$



$$\text{σύνολο κόμβων} = n - l - 1$$

Ατομικά Τροχιακά – Συνοπτικά

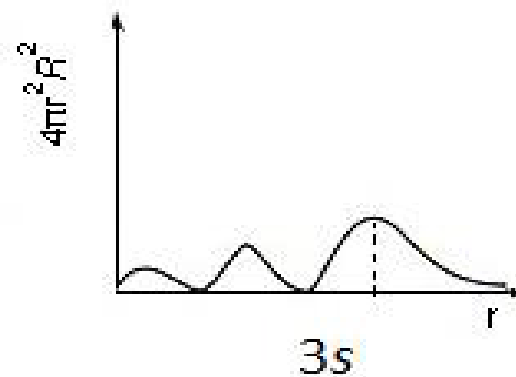
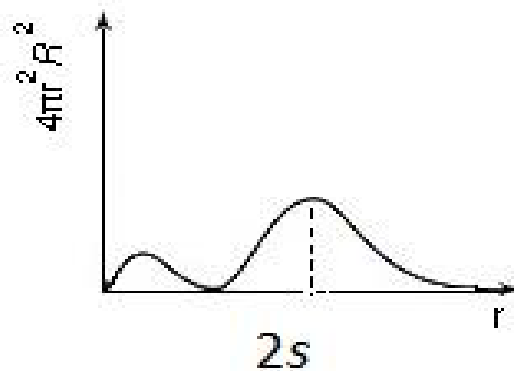
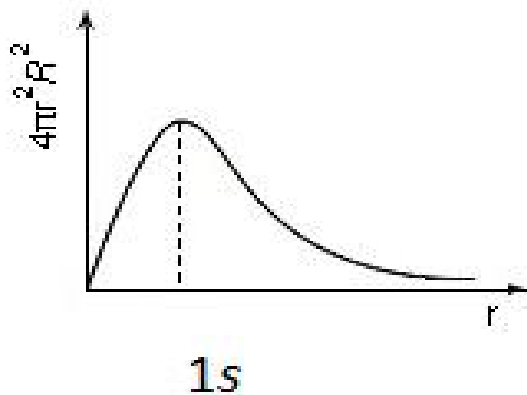
- ❖ Τα ατομικά τροχιακά είναι κυματοσυναρτήσεις των θέσεων του ηλεκτρονίου και υπάρχουν δυνητικά ακόμα και όταν δεν είναι κατειλημμένα με ηλεκτρόνια.
- ❖ Κάθε κυματοσυνάρτηση περιλαμβάνει την ακτινική (R) και την γωνιακή (A) συνάρτηση
- ❖ Η ακτινική συνάρτηση σχετίζεται με το μέγεθος του τροχιακού ενώ η ακτινική με τον προσανατολισμό του.
- ❖ Το μέγιστο του τετραγώνου της ακτινικής συνάρτησης αντιστοιχεί στην απόσταση από τον πυρήνα όπου είναι πιθανότερο να βρεθεί το e
- ❖ Κομβικά σημεία (nodes): σημεία μηδενικής πιθανότητας εύρεσης ηλεκτρονίου
- ❖ Κόμβος ή κομβική επιφάνεια: περιοχή μηδενικής πιθανότητας εύρεσης ηλεκτρονίου
- ❖ Υπάρχουν $n-1$ σφαιρικές κόμβικές επιφάνειες στην ακτινική συνάρτηση ενός τροχιακού
- ❖ Υπάρχουν l κομβικά επίπεδα στη γωνιακή συνάρτηση ενός τροχιακού
- ❖ Ο συνολικός αριθμός κομβικών επιφανειών (σφαιρικές και επίπεδες) είναι $n-1$

1. Γιατί για τον καθορισμό ενός s τροχιακού απαιτούνται δύο κβαντικοί αριθμοί, ενώ για τον καθορισμό κάθε άλλου είδους τροχιακού απαιτούνται τρεις;

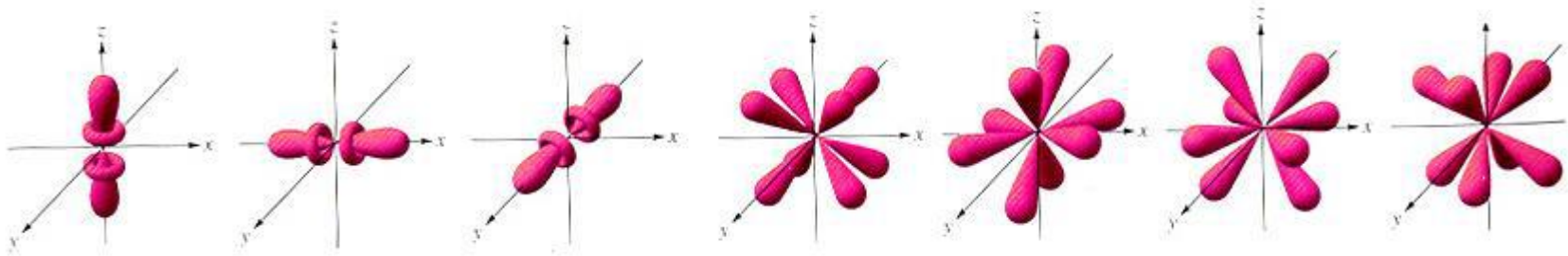
2. Η οριακή επιφάνεια που καλύπτει το 99% του ηλεκτρονιακού νέφους για το $2s$ τροχιακό είναι μια σφαίρα με ακτίνα 500 pm. Η οριακή επιφάνεια που καλύπτει το 99% του ηλεκτρονιακού νέφους για το $1s$ τροχιακό είναι μια σφαίρα με ακτίνα:
Α. 200 pm, Β. 500 pm, Γ. 600 pm, Δ. 800 pm.

3. Πώς τα ηλεκτρόνια διασχίζουν τις κομβικές επιφάνειες; Για παράδειγμα πως ένα p ηλεκτρόνιο περνά από τον ένα λοβό στον άλλο;

4. Με τι σχετίζεται η θέση της μέγιστης κορυφής στα παρακάτω διαγράμματα $4\pi r^2 R^2 - r$;

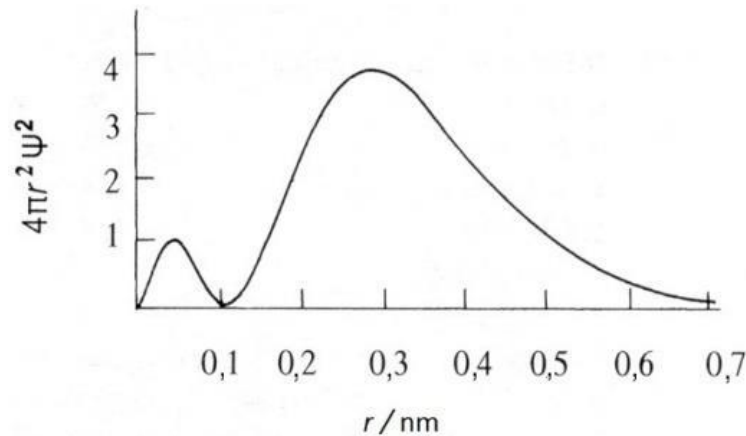


5. Παρακάτω δίνονται σχηματικά, με περιγράμματα (οριακές καμπύλες) ηλεκτρονιακής πυκνότητας, τα τροχιακά $4f$. Να εξηγήσετε τι εκφράζουν οι παραστάσεις αυτές και πως προκύπτουν; Γιατί υπάρχουν επτά διαφορετικά f τροχιακά;



6. Δίνεται η παρακάτω γραφική παράσταση της συνάρτησης ακτινικής πιθανότητας για το άτομο του υδρογόνου. Με βάση το διάγραμμα αυτό να απαντήσετε στα εξής:

- α. Πόσους κόμβους έχει η συνάρτηση αυτή;
- β. Ποιος τύπος τροχιακού εμπλέκεται στην περίπτωση αυτή;
- γ. Τι είδος τροχιακό θα είχαμε αν υπήρχε ένας ακόμα κόμβος;



5.4. Δίνεται η γραφική παράσταση της $R(r)$ για το 1s τροχιακό του H.

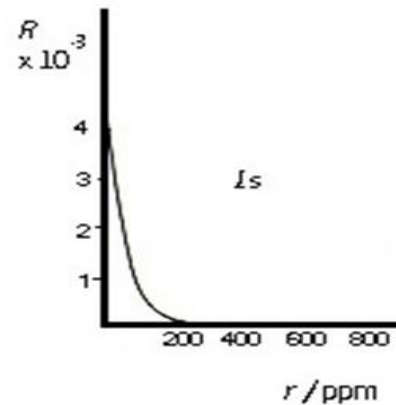
Τι διαφορά θα έχει η αντίστοιχη συνάρτηση για το He^+ ?

Να σχεδιάσετε συγκριτικά την γραφική παράσταση των

$4\pi r^2 R(r)^2$ για τα 2 είδη

Ακτινική συνάρτηση για 1s:

$$2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\rho} \quad \rho = \frac{Zr}{a_0}$$

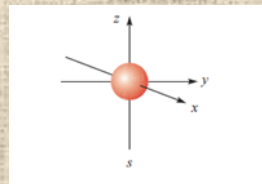


Hydrogenic Orbitals

Hydrogenic atoms are atoms that only have one electron orbiting around the nucleus, even though the nucleus may have more than one proton and one or more neutrons. In this case, the electron has the same orbitals as the hydrogen atom, except that they are scaled by a factor of $1/Z$. Z is the atomic number of the atom, the number of protons in the nucleus. The increased number of positively charged protons shrinks the size of the orbitals.

Thus, the same graphs for hydrogen above apply to hydrogenic atoms, except that instead of expressing the radius in units of a_0 , the radius is expressed in units of a_0/Z . Correspondingly, the values have to be renormalized by a factor of $(Z/a_0)^{3/2}$. So a He^+ atom has orbitals that are the same shape but half the size of the corresponding hydrogen orbitals and a Li^{2+} atom has orbitals that are the same shape but one third the size of the corresponding hydrogen orbitals.

Στο σχήμα φαίνεται η γραφική παράσταση της συνάρτησης γωνιακής πιθανότητας $A(\theta, \phi)^2$ για τα τροχιακά 1s και 2p. Πώς περιμένετε να είναι το σχήμα για τα τροχιακά 2s και 3p



$A(\theta, \phi)$

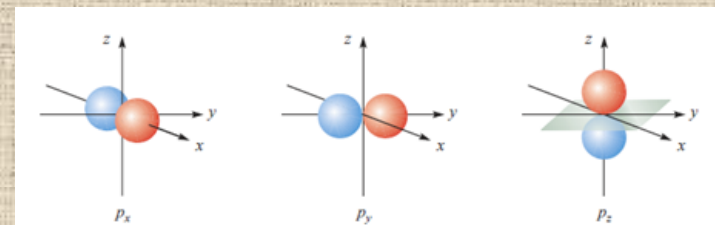
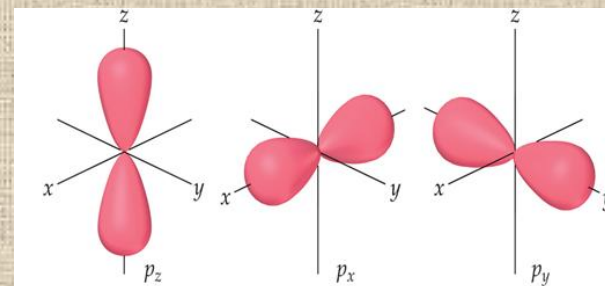


Table 2.3 Angular wave-functions of hydrogenic atom

l	$Y(\theta, \phi)$
0	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
1	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$
1	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sin \theta \cos \phi$
1	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sin \theta \sin \phi$
2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
2	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \sin \theta \cos \theta \cos \phi$
2	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \sin \theta \cos \theta \sin \phi$
2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \sin^2 \theta \cos 2\phi$
2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \sin^2 \theta \sin 2\phi$

$A(\theta, \phi)^2$



5.6. Το e του H (στη θεμελιώδη κατάσταση) είναι πιθανότερο να βρίσκεται σε απόσταση 52.9 pm από τον πυρήνα. Αυτό είναι συμβατό με την μέγιστη τιμή της $R(r)$ στο σημείο $r=0$?

Οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger για το άτομο του H

Atomic orbital	n	l	m_l	Radial part of the wavefunction, $R(r)^\dagger$	Angular part of wavefunction, $A(\theta, \phi)$
1s	1	0	0	$2e^{-r}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$

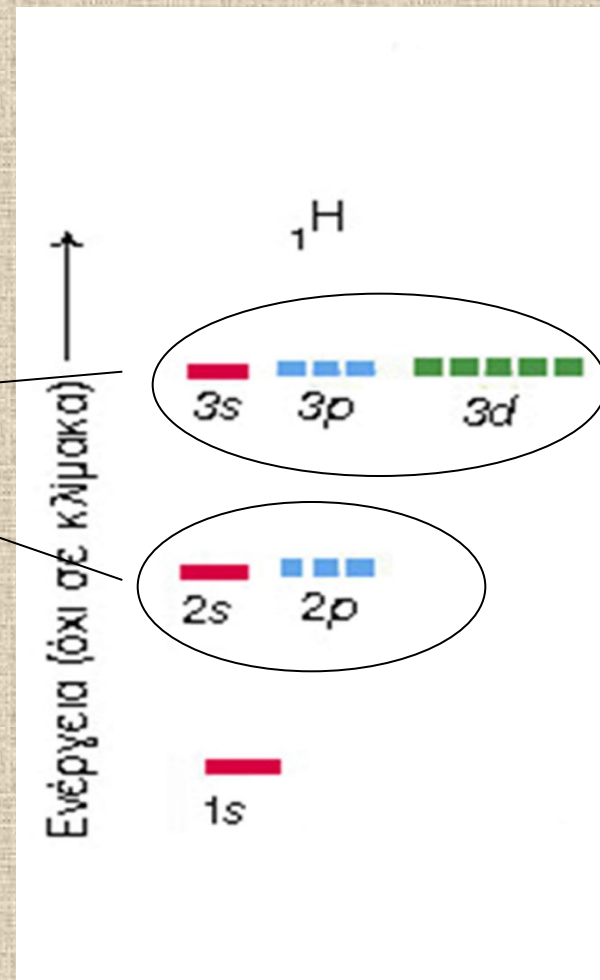
Ενεργειακή στάθμη τροχιακών Υδρογόνου – Υδρογονοειδή

εκφυλισμός τροχιακών
με ίδιο n

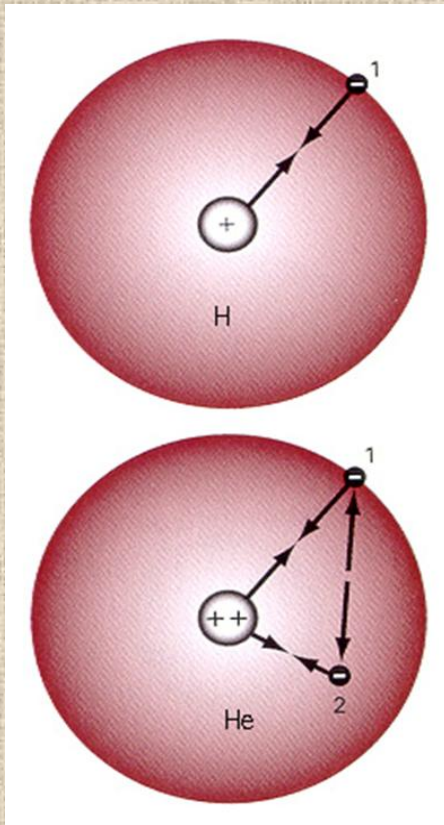
$$E = \frac{-2,18 \times 10^{-18} Z^2}{n^2}$$



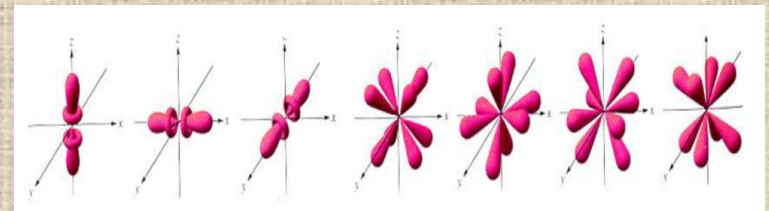
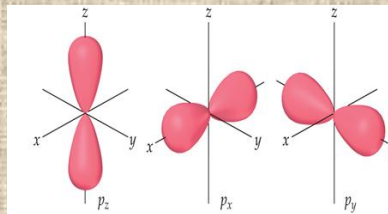
$1s < 2s = 2p < 3s = 3p = 3d < 4s = 4p = 4d = 4f < \dots$



Αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων σε πολυηλεκτρονικά άτομα

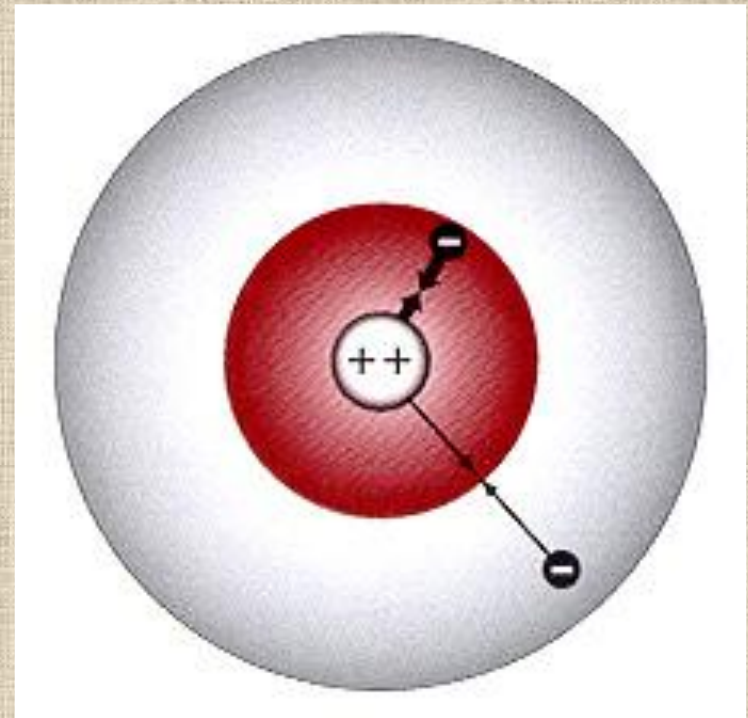


- τροποποίηση εξίσωσης Schrödinger για να περιλάβει και τις απώσεις των ηλεκτρονίων
- άρση εκφυλισμού για τα τροχιακά της κάθε στιβάδας (ίδιο n)
- οι ενέργειες των τροχιακών εξαρτώνται από n **KAI** l



Διείσδυση και θωράκιση ηλεκτρονίων

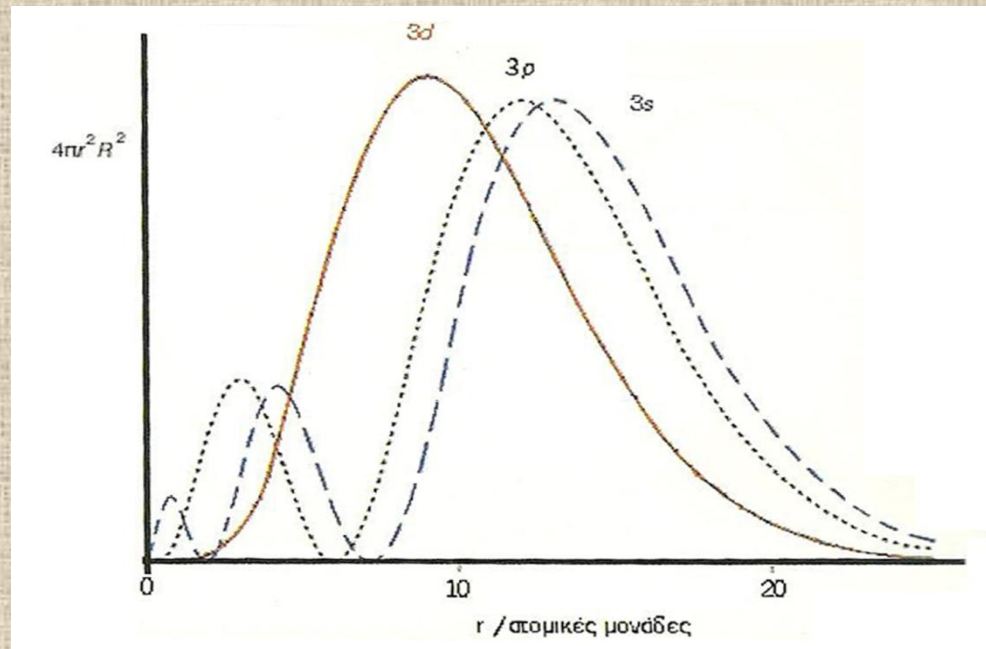
- ❖ Η θωράκιση ή προάσπιση ενός ηλεκτρονίου προκαλείται από τα “εσωτερικά” ηλεκτρόνια του ατόμου με αποτέλεσμα την απομάκρυνση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα, δηλαδή, αύξηση της ενέργειας του.
- ❖ Το εσωτερικό ηλεκτρόνιο λόγω μεγάλης διεισδυτικότητας βρίσκεται κοντά στον πυρήνα. Το ηλεκτρόνιο αυτό προασπίζει (θωρακίζει) τον πυρήνα, απωθώντας το δεύτερο (εξωτερικό) ηλεκτρόνιο.



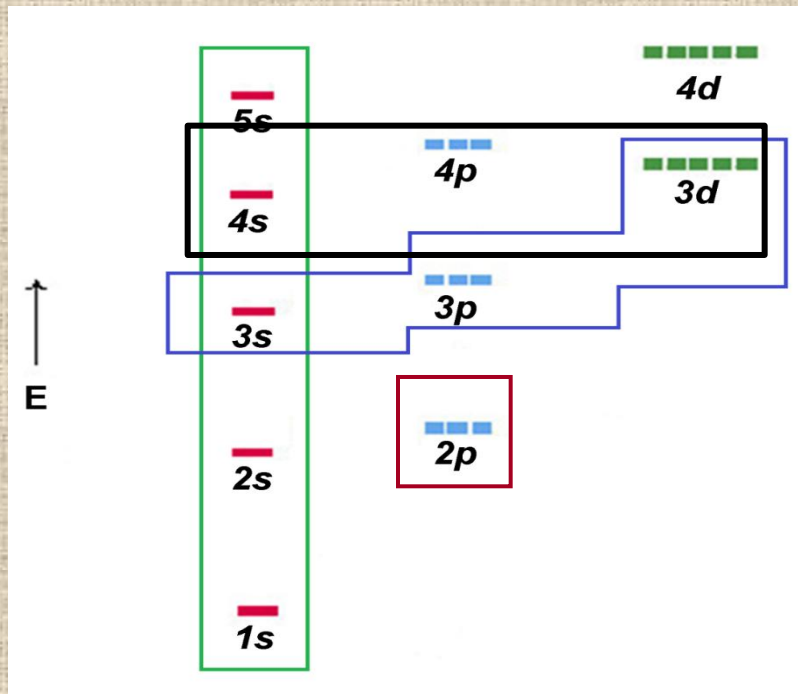
Διείσδυση και θωράκιση ηλεκτρονίων

❖ Η άρση του εκφυλισμού των τροχιακών στο ενεργειακό διάγραμμα των πολυηλεκτρονιακών ατόμων μπορεί να ερμηνευτεί με βάση το φαινόμενο της διείσδυσης και θωράκισης (ή προάσπισης) των ηλεκτρονίων

➤ Η διείσδυση εκφράζει την ικανότητα που έχει το ηλεκτρόνιο να προσεγγίζει τον πυρήνα του ατόμου. Όσο μεγαλύτερη είναι η διεισδυτικότητα ενός ηλεκτρονίου, τόσο μικρότερη είναι η ενέργειά του.

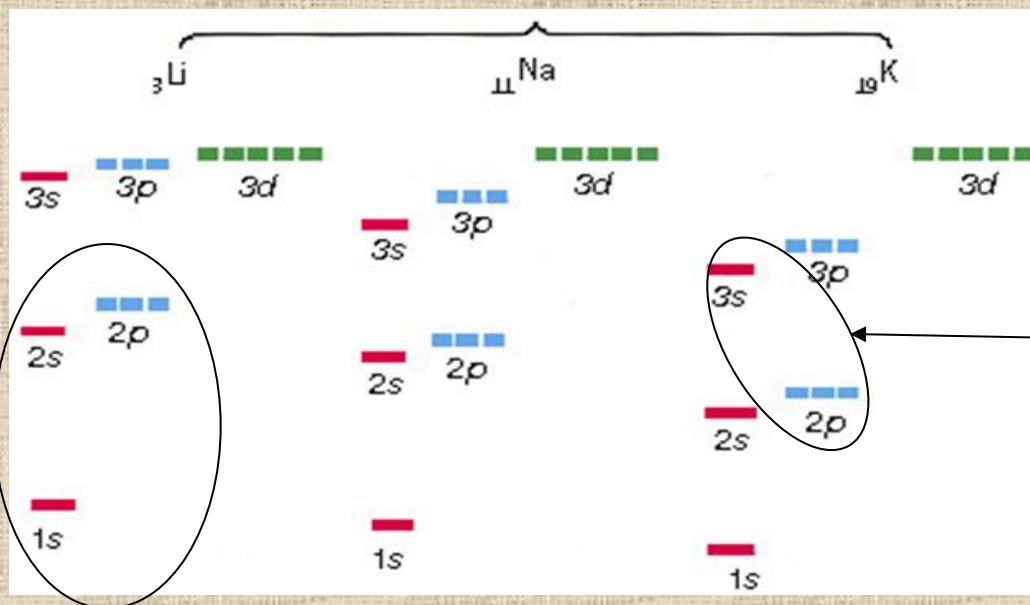


Ενεργειακές στάθμες σε πολυηλεκτρονιακά άτομα



- Η ενέργεια τροχιακών με ίδιο l , αυξάνεται με την αύξηση του n .
- Η ενέργεια των τροχιακών με ίδιο n αυξάνεται με την αύξηση του l .
- Όσο αυξάνεται το n , η εξάρτηση της ενέργειας των τροχιακών από τον l γίνεται σημαντικότερη ώστε το 4s να βρίσκεται χαμηλότερα από το 3d ($E_{5s} < E_{4d}$, $E_{6s} < E_{5d}$, $E_{6s} < E_{4f}$).
- Τα τροχιακά με ίδιο n και l είναι πάντα εκφυλισμένα
- Όσο αυξάνει το μέγεθος του ατόμου (αύξηση n), τόσο ελαττώνεται η ενεργειακή απόσταση ανάμεσα στα τροχιακά (πυκνές ενεργειακές στάθμες)

Ενεργειακές στάθμες σε πολυηλεκτρονιακά άτομα



Η ενέργεια των τροχιακών καθορίζεται από το άθροισμα $n+l$.

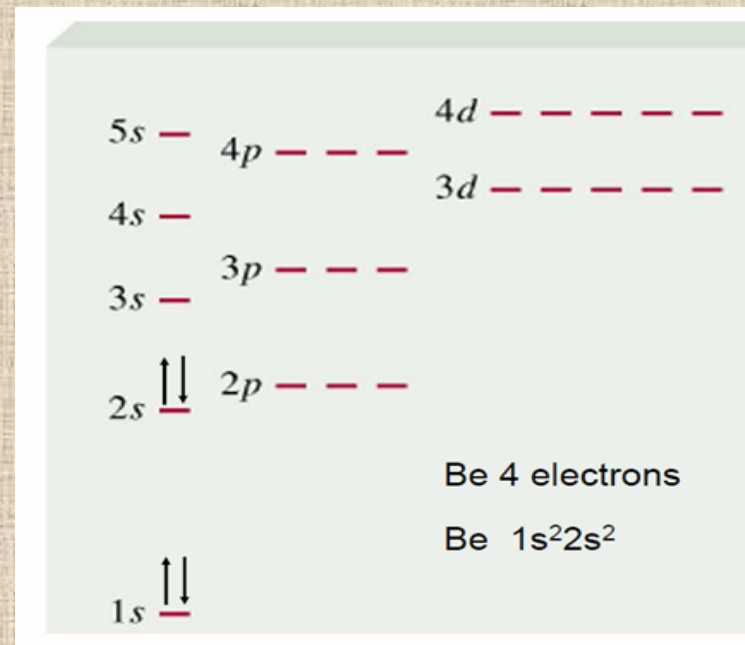
$(n+l) \uparrow$
ενέργεια $\uparrow$

Μεταξύ δύο τροχιακών με το ίδιο άθροισμα $(n+l)$, χαμηλότερη ενέργεια έχει εκείνο με το μικρότερο n

Να διατάξετε τα τροχιακά $1s$, $2s$, $2p$, $3s$, $3p$, $3d$ των ατόμων H και K κατά σειρά αυξανόμενης ενέργειας.

Μνημονικό σχήμα πλήρωσης ατομικών τροχιακών σύμφωνα με την αρχή της ελάχιστης ενέργειας.

	$l=0$	1	2	3	4	5
n=1	1s					
n=2	2s	2p				
n=3	3s	3p	3d			
n=4	4s	4p	4d	4f		
n=5	5s	5p	5d	5f	5g	
n=6	6s	6p	6d	6f	6g	
n=7	7s	7p	7d	7f		
n=8	8s	8p	8d	8f		



Ηλεκτρονιακή δόμηση των ατόμων

τοποθέτηση των ηλεκτρονίων στα διάφορα τροχιακά

Αρχές ηλεκτρονιακής δόμησης

Aufbau principles

- **αρχή ελάχιστης ενέργειας**
- **απαγορευτική αρχή Pauli**
- **κανόνας του Hund**

Αρχή ελάχιστης ενέργειας

Όσο μικρότερη (αλγεβρικά) είναι η ενέργεια ενός ατομικού συστήματος, τόσο σταθερότερο είναι το σύστημα αυτό.

- η σειρά πλήρωσης των τροχιακών εξαρτάται από την ενέργειά τους
- πρώτα συμπληρώνονται τα τροχιακά με το μικρότερο άθροισμα $(n+l)$ και μεταξύ αυτών πρώτα εκείνα με το μικρότερο n

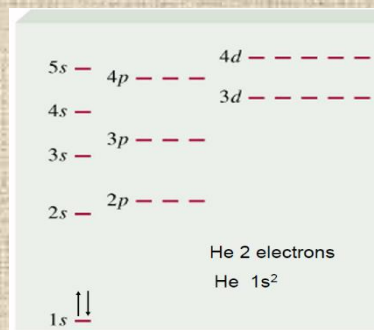
$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 5d \approx 4f < 6p < 7s < 6d \approx 5f$

Απαγορευτική αρχή του Pauli



Είναι αδύνατο να υπάρχουν στο ίδιο άτομο δύο ηλεκτρόνια με την ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών (n, l, m_l, m_s).

- σε κάθε τροχιακό μπορούν να τοποθετηθούν το πολύ 2 ηλεκτρόνια
- τα ηλεκτρόνια αυτά έχουν αντιπαράλληλα spin και είναι συζευγμένα
- για τη σύζευξη απαιτείται ενέργεια (ενέργεια σύζευξης)



Κανόνες του Hund

Συμπλήρωση εκφυλισμένων τροχιακών

Ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας (ίδια υποστιβάδας), έχουν κατά προτίμηση παράλληλα spin.

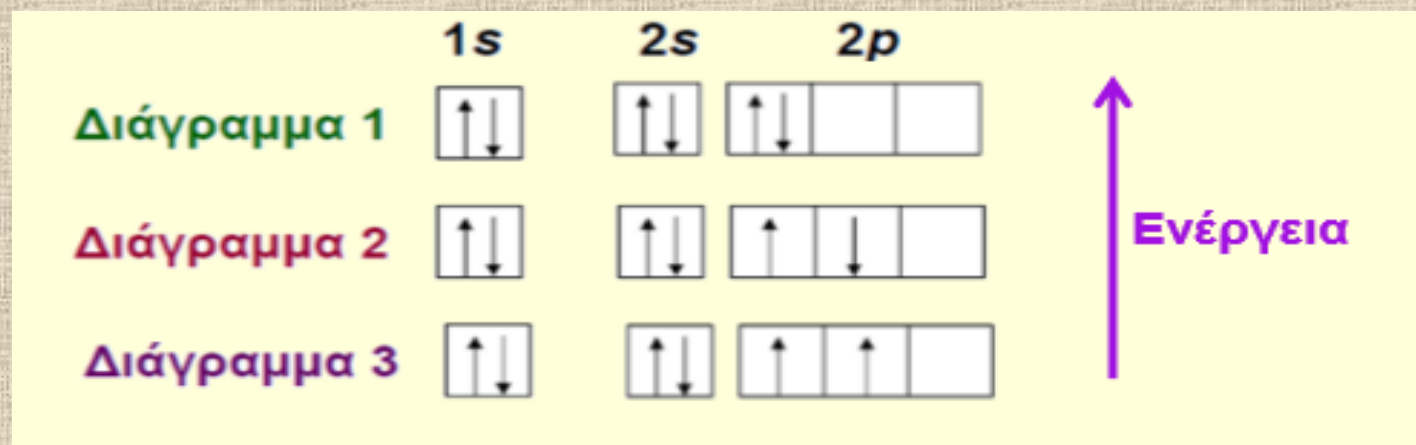
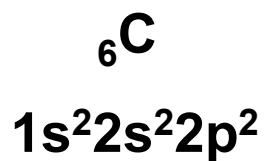
Η πιο σταθερή κατάσταση είναι εκείνη με το μέγιστο αριθμό ασύζευκτων ηλεκτρονίων (μέγιστη πολλαπλότητα spin)

πολλαπλότητα spin: $2S + 1$

S: ολικό spin $S = \sum_i m_{si}$

αριθμός ηλεκτρονίων	διάταξη	ασύζευκτα ηλεκτρόνια	πολλαπλότητα
1	$\uparrow$ $\underline{\quad}$ $\underline{\quad}$	1	2
2	$\uparrow$ $\uparrow$ $\underline{\quad}$	2	3
3	$\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	3	4
4	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	2	3
5	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$	1	2
6	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	0	1

Κανόνας του Hund



Ηλεκτρονική Απεικόνιση

${}_1\text{H}$

$1s^1$

Δείχνει τον αριθμό των ηλεκτρονίων στο τροχιακό

Δείχνει τον κβαντικό αριθμό l

Δείχνει τον κύριο κβαντικό αριθμό



${}_1\text{H } 1s^1$

Ηλεκτρονική Απεικόνιση

${}_1\text{H}$



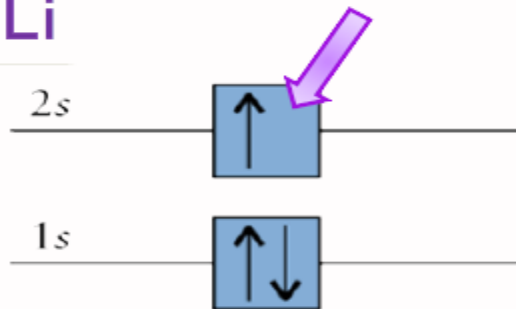
$\text{H } 1s^1$

${}_2\text{He}$



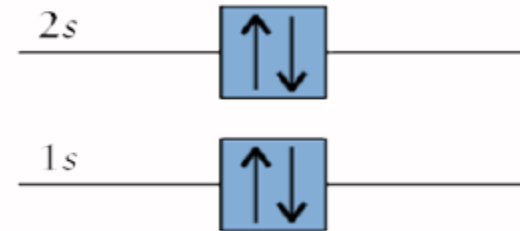
$\text{He } 1s^2$

${}_3\text{Li}$



$\text{Li } 1s^2 2s^1$

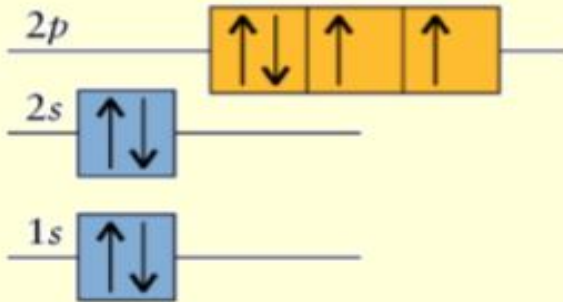
${}_4\text{Be}$



$\text{Be } 1s^2 2s^2$

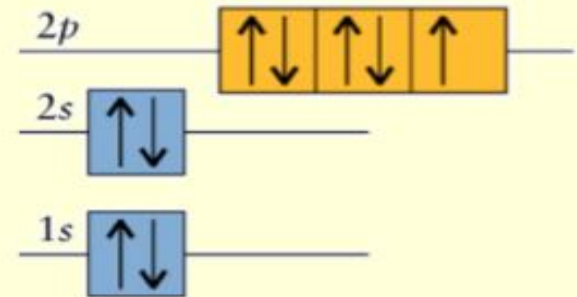
Ηλεκτρονική Απεικόνιση

${}_8\text{O}$



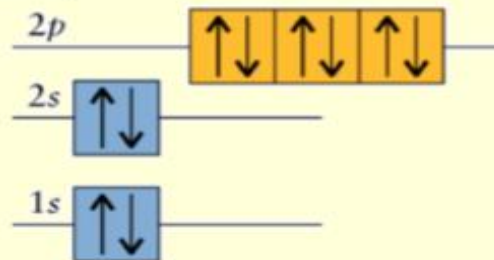
O $1s^2 2s^2 2p^4$, [He] $2s^2 2p^4$

${}_9\text{F}$



F $1s^2 2s^2 2p^5$, [He] $2s^2 2p^5$

${}_{10}\text{Ne}$



Ne $1s^2 2s^2 2p^6$, [He] $2s^2 2p^6$

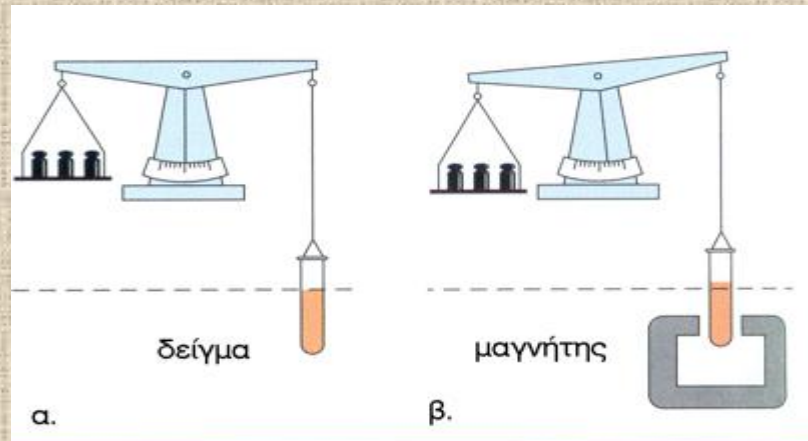
Ποιες από τις παρακάτω ηλεκτρονιακές δομήσεις είναι επιτρεπτές και ποιες απαγορευτικές. Γιατί?

- | | 1s | 2s | 2p |
|----|---------------------------------------|----|----|
| 1. | | | |
| 2. | | | |
| 3. | | | |
| 4. | $1s^2 2s^2 2p^4$ | | |
| 5. | $1s^2 2s^4 2p^2$ | | |
| 6. | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^{10} 3d^{10}$ | | |

Μαγνητική συμπεριφορά των υλικών

Διαμαγνητισμός

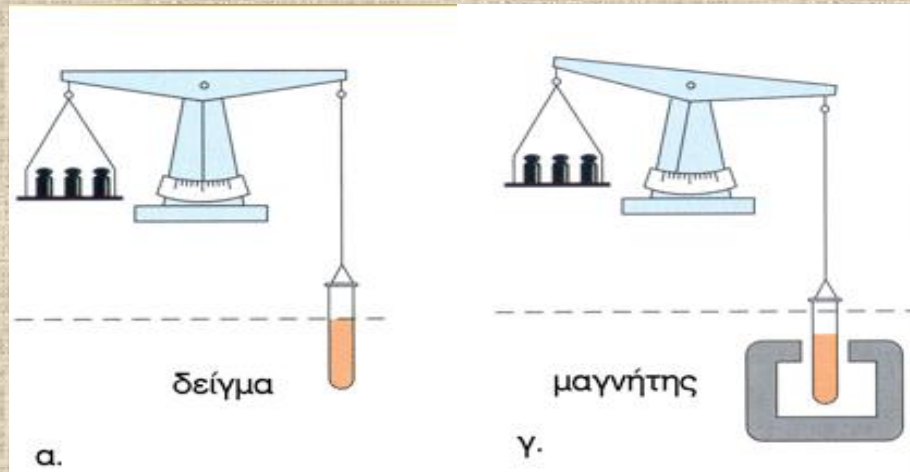
- ❖ όλα τα ηλεκτρόνια είναι συζευγμένα
- ❖ δεν υπάρχει μαγνητική ροπή λόγω spin ($\mu_s = 0$)
- ❖ τα διαμαγνητικά υλικά απωθούνται ελαφρώς από εξωτερικό μαγνητικό πεδίο



Μαγνητική συμπεριφορά των υλικών

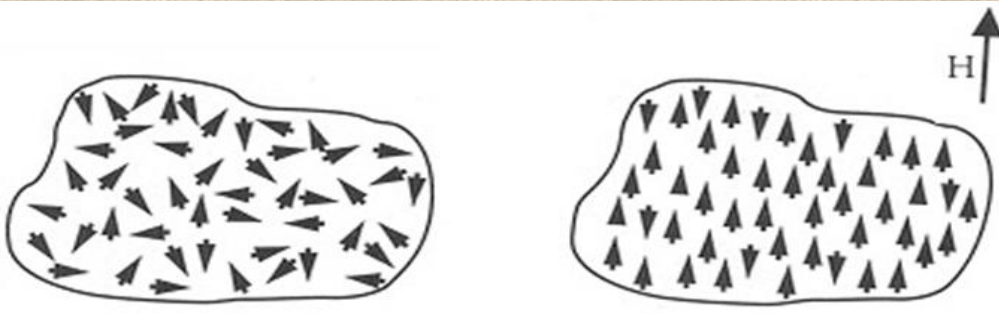
Παραμαγνητισμός

- ❖ υπάρχουν ένα ή περισσότερα ασύζευκτα ηλεκτρόνια
- ❖ υπάρχει μαγνητική ροπή λόγω spin ($\mu_s \neq 0$)
- ❖ τα παραμαγνητικά υλικά έλκονται ισχυρά από εξωτερικό μαγνητικό πεδίο



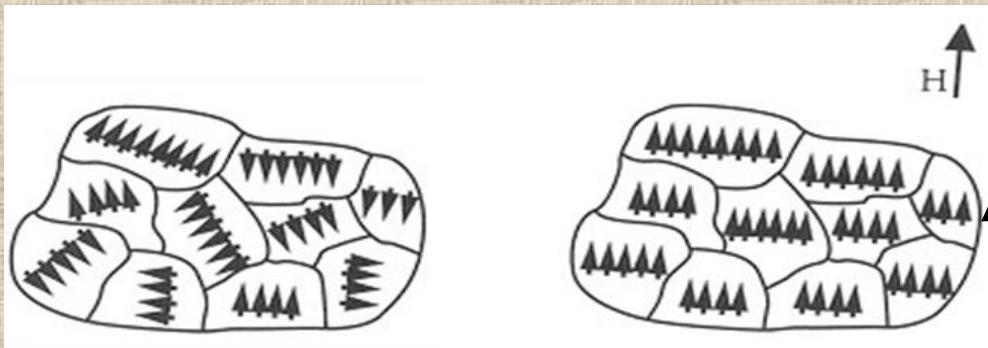
Παραμαγνητισμός

✓



- Ασύζευκτα ηλεκτρόνια
- Τυχαίος προσανατολισμός (εκτός μαγνητικού πεδίου)
- Ασθενής μαγνήτιση (εντός μαγνητικού πεδίου)

Σιδηρομαγνητισμός



- Ασύζευκτα ηλεκτρόνια
- Αυθόρμητος προσανατολισμός (εκτός μαγνητικού πεδίου)
- Έντονη μαγνήτιση (εντός μαγνητικού πεδίου)

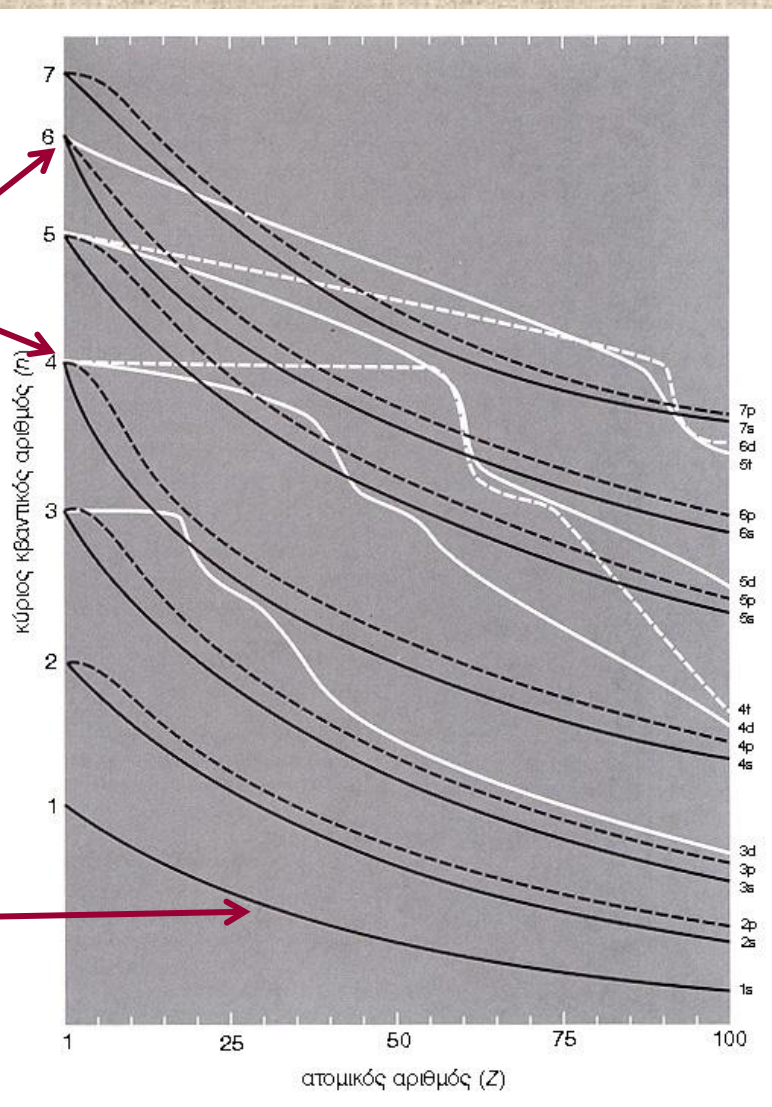
Z	Στοιχείο	Δομή	Z	Στοιχείο	Δομή
1	H	$1s^1$	19	K	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
2	He	$1s^2$	20	Ca	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
3	Li	$1s^2 2s^1$	21	Sc	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$
4	Be	$1s^2 2s^2$	22	Ti	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$
5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	23	V	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$
6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	24	Cr	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$
7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	25	Mn	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$
8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	26	Fe	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$
9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	27	Co	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$
10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	28	Ni	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$
11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	29	Cu	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$
12	Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	30	Zn	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$
13	Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	31	Ga	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$
14	Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	32	Ge	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$
15	P	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	33	As	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$
16	S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	34	Se	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^4$
17	Cl	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	35	Br	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5$
18	Ar	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	36	Kr	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$

Ενεργειακές στάθμες σε πολυηλεκτρονιακά άτομα

Γιατί για $Z=1$ και ίδιο n , η ενέργεια είναι ανεξάρτητη του l ?

Ποια είναι η γενική τάση? Γιατί?

Γιατί η καμπύλη έχει αυτή τη μορφή?



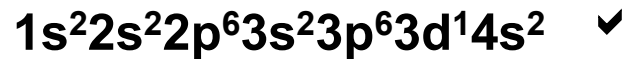
Η επίδραση του ατομικού αριθμού στην ενέργεια των υποστιβάδων

Εξαιρέσεις στην ηλεκτρονική διαμόρφωση

	l=0	1	2	3	4	5
n=1	1s					
n=2	2s	2p				
n=3	3s	3p	3d			
n=4	4s	4p	4d	4f		
n=5	5s	5p	5d	5f	5g	
n=6	6s	6p	6d	6f	6g	
n=7	7s	7p	7d	7f		
n=8	8s	8p	8d	8f		

1. Αναστροφή ενεργειακής στάθμης των υποστιβάδων ns, (n-1)d, (n-2)f:

$$3d < 4s, 4d < 5s, 4f < 6s, 5f < 7s$$



2. Η υποστιβάδα d παρουσιάζει μεγαλύτερη σταθερότητα όταν είναι ημισυμπληρωμένη (d^5) ή πλήρως συμπληρωμένη (d^{10})



Γράψτε την τετράδα των κβαντικών αριθμών που χαρακτηρίζει τα ακόλουθα ηλεκτρόνια i) το ηλεκτρόνιο που χάνει το ιόν Cu^+ όταν οξειδώνεται προς Cu^{2+} , ii) Το ηλεκτρόνιο που χάνει το ιόν Fe^{2+} , όταν οξειδώνεται προς Fe^{3+} .

Ατομικοί αριθμοί $_{29}\text{Cu}$, $_{26}\text{Fe}$.

IUPAC Periodic Table of the Elements

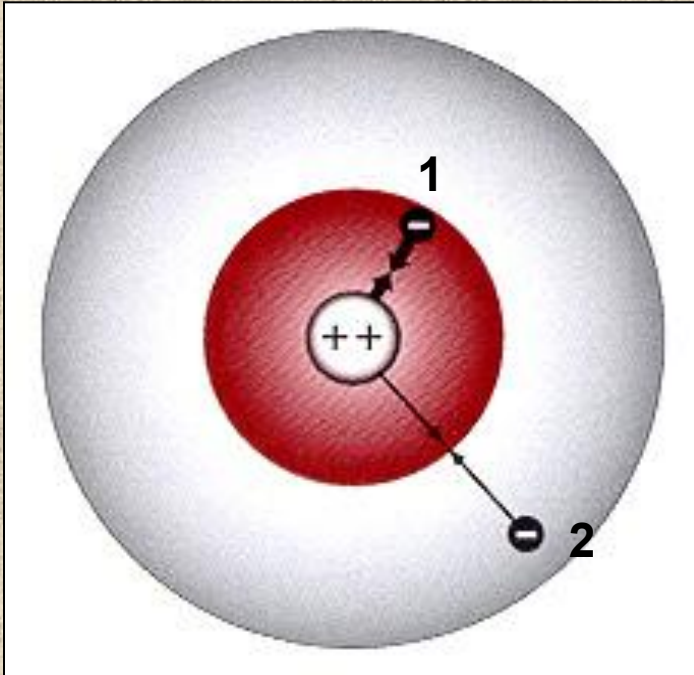
1 H hydrogen 1.008 (1.00784, 1.00824)	2 He helium 4.0026 4.0026																	18 Ar argon 39.948 39.948																	
3 Li lithium 6.94 (6.938, 6.941)	4 Be beryllium 9.0122 9.0122																	19 K potassium 39.098 (38.964, 39.098)	20 Ca calcium 40.078 (40.078, 40.078)	21 Sc scandium 44.956 44.956	22 Ti titanium 47.88 47.88	23 V vanadium 50.942 50.942	24 Cr chromium 51.996 51.996	25 Mn manganese 54.938 54.938	26 Fe iron 55.845 55.845	27 Co cobalt 58.933 58.933	28 Ni nickel 58.693 58.693	29 Cu copper 63.546 63.546	30 Zn zinc 65.38 65.38	31 Ga gallium 69.723 69.723	32 Ge germanium 72.630 72.630	33 As arsenic 74.922 74.922	34 Se selenium 78.96 78.96	35 Br bromine 79.904 79.904	36 Kr krypton 83.798 83.798
11 Na sodium 22.990 (22.989, 22.991)	12 Mg magnesium 24.304 (24.304, 24.305)																	37 Rb rubidium 85.468 85.468	38 Sr strontium 87.62 87.62	39 Y yttrium 88.906 88.906	40 Zr zirconium 91.224 91.224	41 Nb niobium 92.906 92.906	42 Mo molybdenum 95.94 95.94	43 Tc technetium 98.906 98.906	44 Ru ruthenium 101.07 101.07	45 Rh rhodium 102.91 102.91	46 Pd palladium 106.42 106.42	47 Ag silver 107.87 107.87	48 Cd cadmium 112.41 112.41	49 In indium 114.82 114.82	50 Sn tin 118.71 118.71	51 Sb antimony 121.76 121.76	52 Te tellurium 127.60 127.60	53 I iodine 126.90 126.90	54 Xe xenon 131.29 131.29
55 Cs caesium 132.91 132.91	56 Ba barium 137.33 137.33	57-71 La-Lu lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49 178.49	73 Ta tantalum 180.95 180.95	74 W tungsten 183.84 183.84	75 Re rhenium 186.21 186.21	76 Os osmium 190.23 190.23	77 Ir iridium 192.22 192.22	78 Pt platinum 195.08 195.08	79 Au gold 196.97 196.97	80 Hg mercury 200.59 200.59	81 Tl thallium 204.38 204.38	82 Pb lead 207.2 207.2	83 Bi bismuth 208.98 208.98	84 Po polonium 209 209	85 At astatine 210 210	86 Rn radon 222 222																		
87 Fr francium 223 223	88 Ra radium 226 226	89-103 Ac-Lr actinoids	104 Rf rutherfordium 261 261	105 Db dubnium 262 262	106 Sg seaborgium 266 266	107 Bh bohrium 264 264	108 Hs hassium 277 277	109 Mt meitnerium 268 268	110 Ds darmstadtium 271 271	111 Rg roentgenium 272 272	112 Cn copernicium 285 285	113 Nh nihonium 284 284	114 Fl flerovium 289 289	115 Mc moscovium 288 288	116 Lv livermorium 293 293	117 Ts tennessine 289 289	118 Og oganesson 294 294																		

INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY

57 La lanthanum 138.91 138.91	58 Ce cerium 140.12 140.12	59 Pr praseodymium 140.91 140.91	60 Nd neodymium 144.24 144.24	61 Pm promethium 145 145	62 Sm samarium 150.36 150.36	63 Eu europium 151.96 151.96	64 Gd gadolinium 157.25 157.25	65 Tb terbium 158.93 158.93	66 Dy dysprosium 162.50 162.50	67 Ho holmium 164.93 164.93	68 Er erbium 167.26 167.26	69 Tm thulium 168.93 168.93	70 Yb ytterbium 173.05 173.05	71 Lu lutetium 174.97 174.97
89 Ac actinium 227 227	90 Th thorium 232.04 232.04	91 Pa protactinium 231.04 231.04	92 U uranium 238.03 238.03	93 Np neptunium 237 237	94 Pu plutonium 244 244	95 Am americium 243 243	96 Cm curium 247 247	97 Bk berkelium 247 247	98 Cf californium 251 251	99 Es einsteinium 252 252	100 Fm fermium 257 257	101 Md mendelevium 258 258	102 No nobelium 259 259	103 Lr lawrencium 262 262

For notes and updates to this table, see www.iupac.org. This version is dated 28 November 2016.
Copyright © 2016 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry.

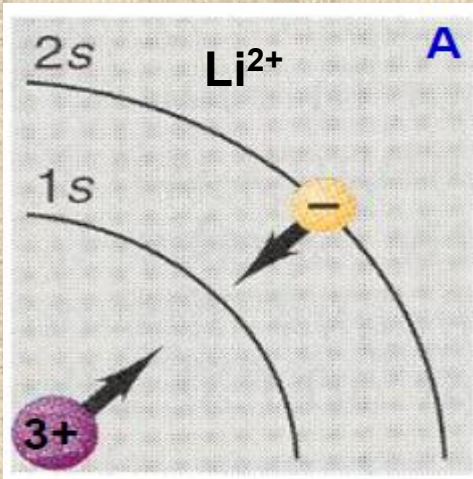
Διείσδυση και θωράκιση ηλεκτρονίων



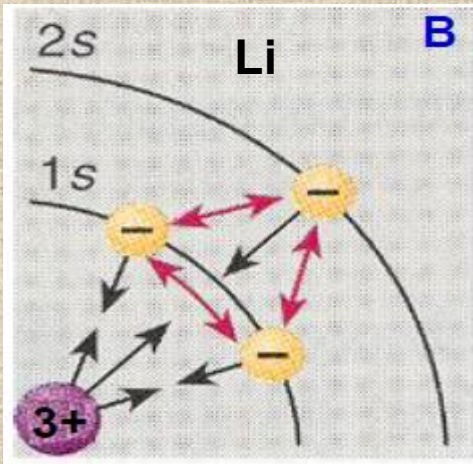
- ❖ Διείσδυση: ικανότητα ηλεκτρονίου να προσεγγίζει τον πυρήνα του ατόμου.
- ❖ Μεγάλη διεισδυτικότητα $e \rightarrow$ μείωση απόστασης e -πυρήνα $\rightarrow$ μείωση ενέργειας
- ❖ Θωράκιση ή προάσπιση: αποτέλεσμα της άπωσης από τα εσωτερικά ηλεκτρόνια
- ❖ Θωράκιση $\rightarrow$ αύξηση απόστασης e -πυρήνα $\rightarrow$ αύξηση ενέργειας

Το ηλεκτρόνιο 1 έχει μεγαλύτερη διεισδυτικότητα
Το ηλεκτρόνιο 2 θωρακίζεται από το 1

Διείσδυση και θωράκιση ηλεκτρονίων



Το μοναδικό e του Li^{2+} υφίσταται όλη την ελκτική δύναμη του φορτίου $+3$ του πυρήνα.



Τα δύο e που παρεμβάλλονται μειώνουν αισθητά την ελκτική δράση του πυρηνικού φορτίου πάνω στο $2s$ e .

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