

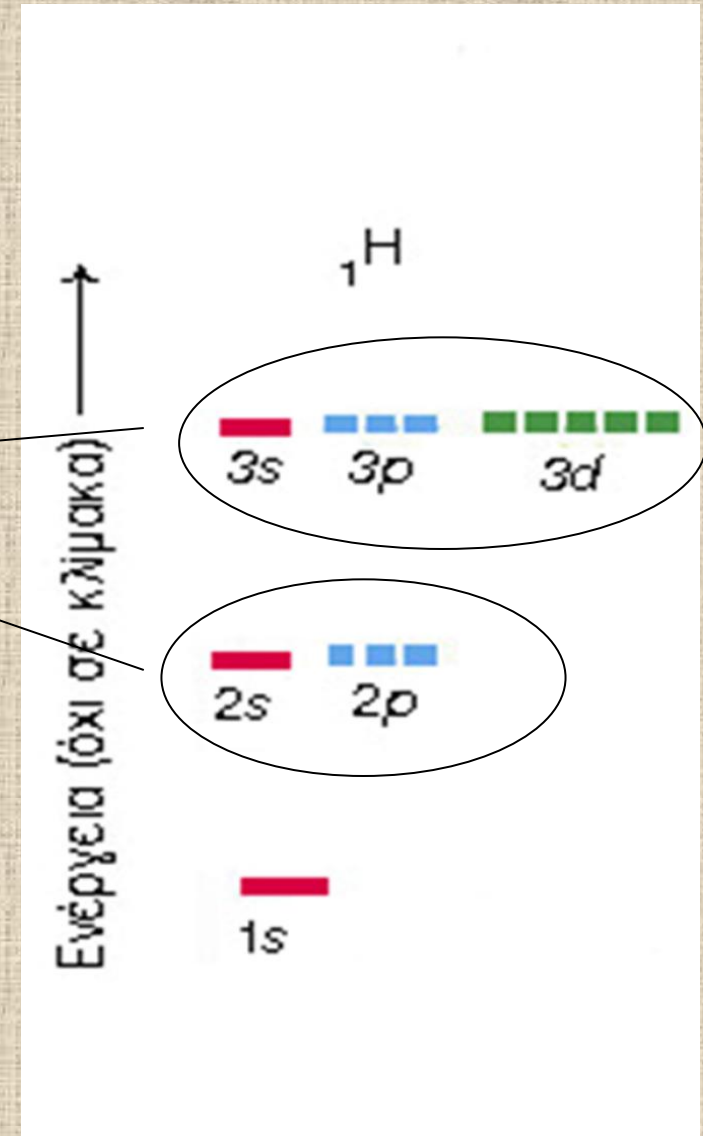
Ενεργειακή στάθμη τροχιακών Υδρογόνου – Υδρογονοειδή

εκφυλισμός τροχιακών
με ίδιο n

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

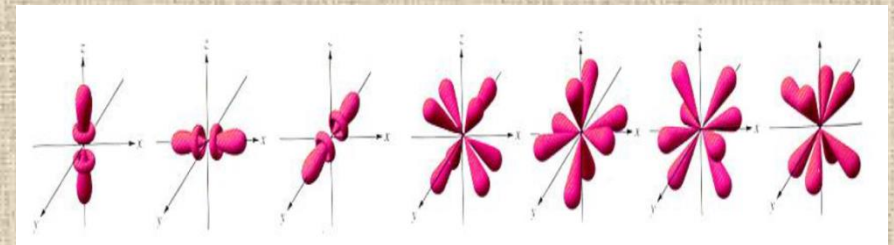
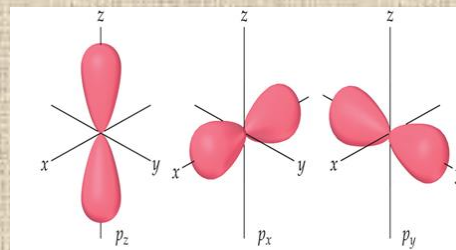
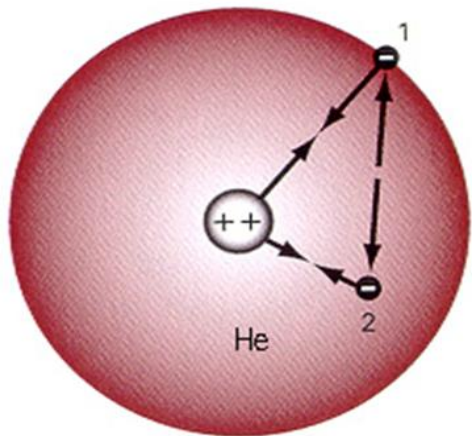
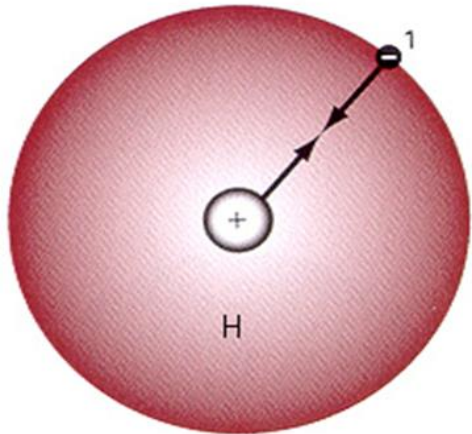


$$1s < 2s = 2p < 3s = 3p = 3d < 4s = 4p = 4d = 4f < \dots$$



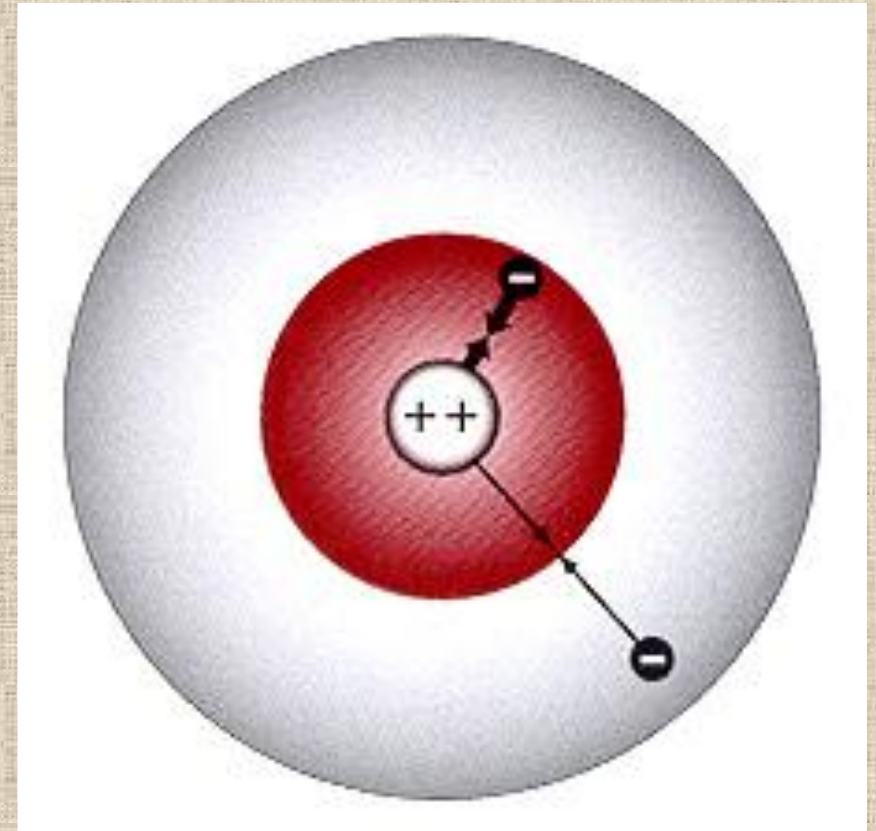
Αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων σε πολυηλεκτρονικά άτομα

- 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

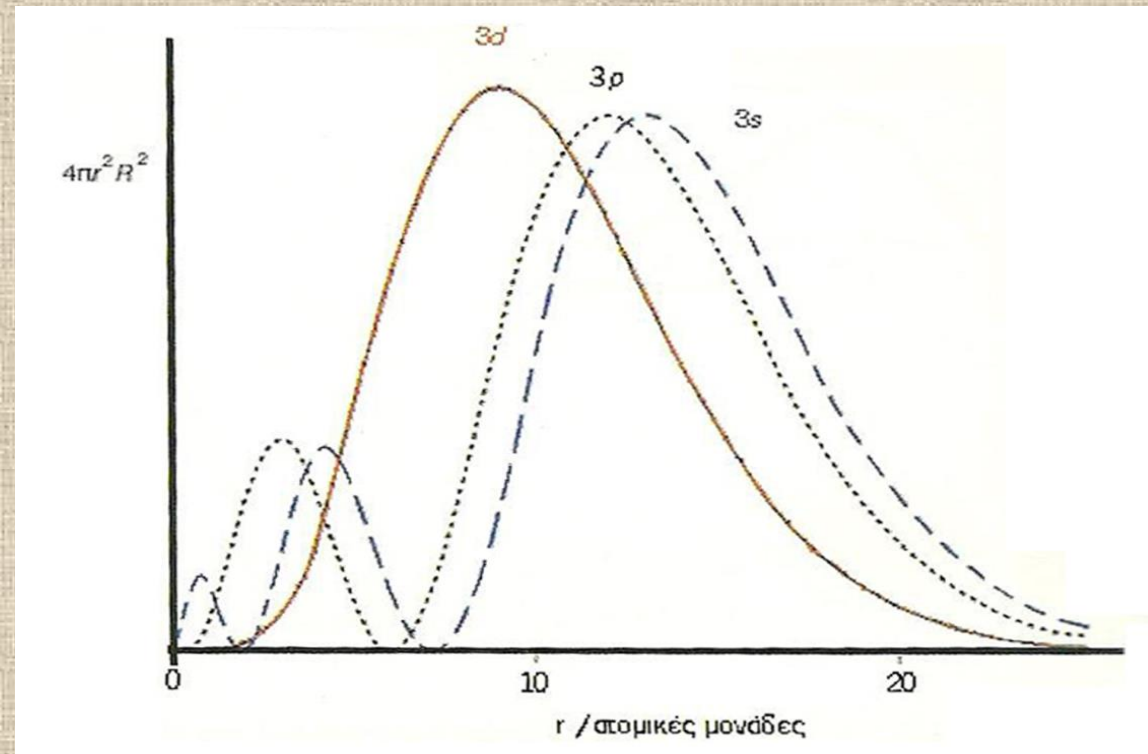
- ❖ Η θωράκιση ή προάσπιση ενός ηλεκτρονίου προκαλείται από τα “εσωτερικά” ηλεκτρόνια του ατόμου με αποτέλεσμα την απομάκρυνση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα, δηλαδή, αύξηση της ενέργειας του.
- ❖ Το εσωτερικό ηλεκτρόνιο λόγω μεγάλης διεισδυτικότητας βρίσκεται κοντά στον πυρήνα. Το ηλεκτρόνιο αυτό προασπίζει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



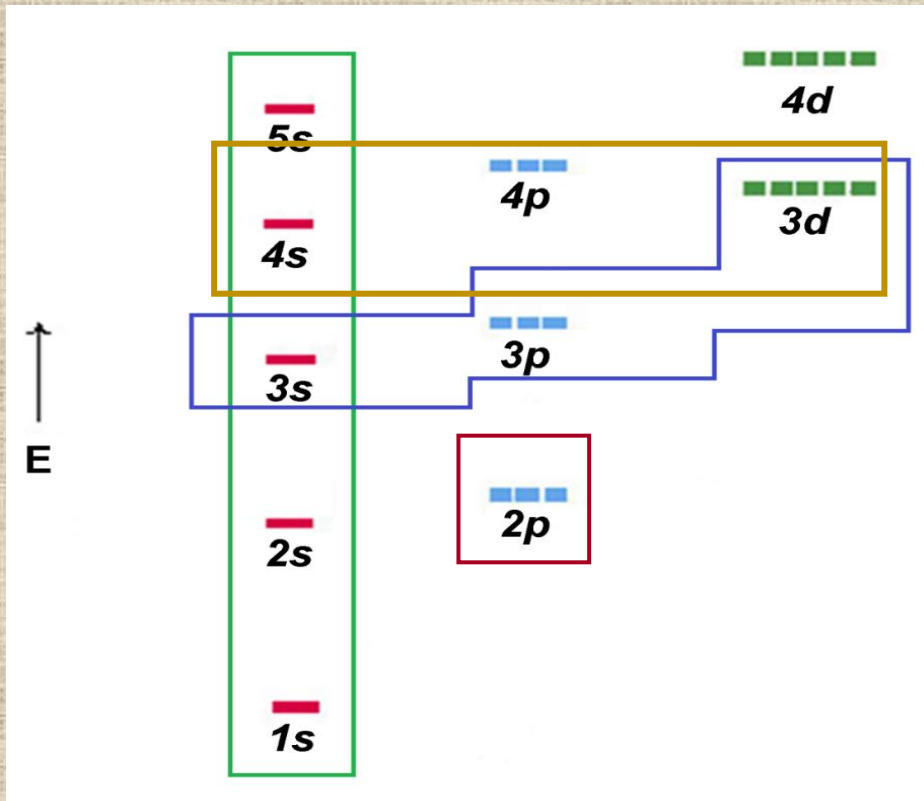
Διείσδυση και θωράκιση ηλεκτρονίων

❖ 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.

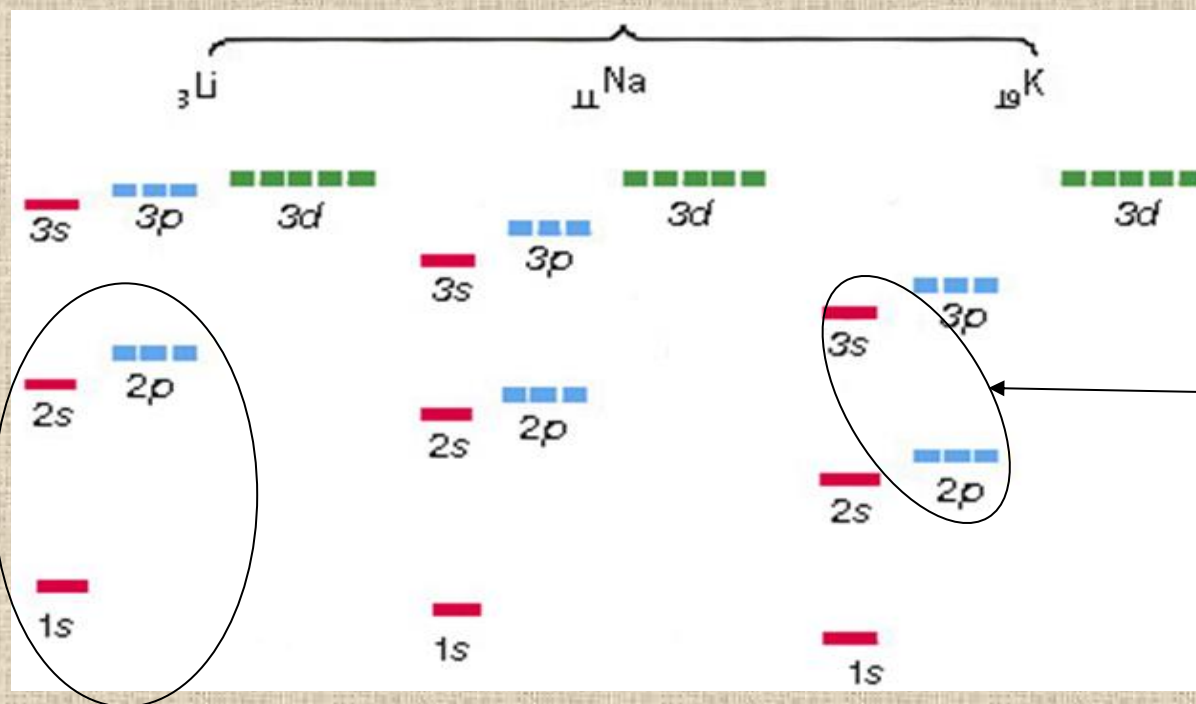


Ενεργειακές στάθμες σε πολυηλεκτρονιακά άτομα



- 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 $n+l$.

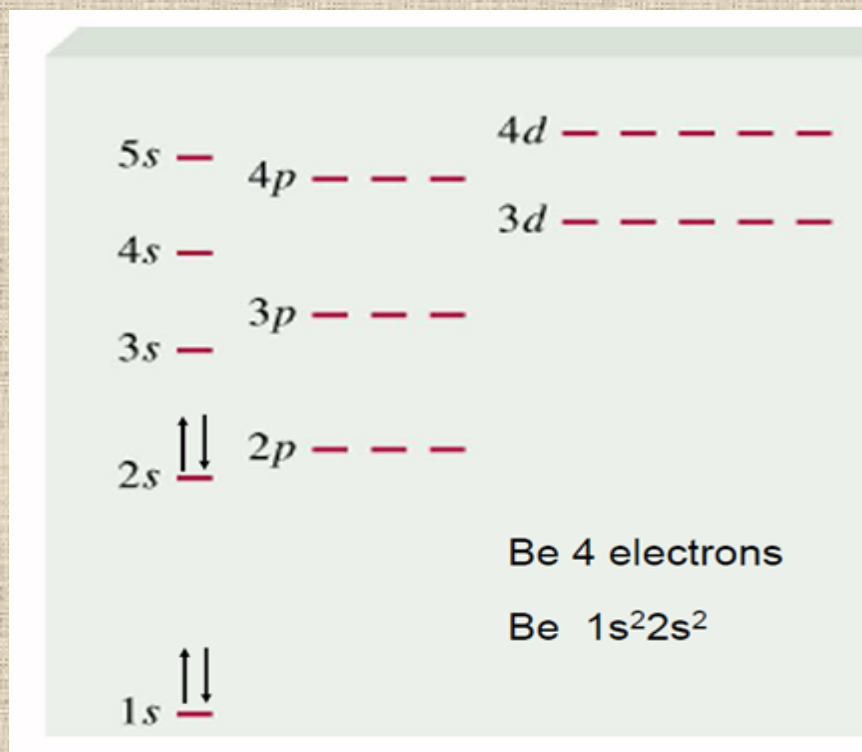
$(n+l) \uparrow$
ενέργεια \uparrow

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

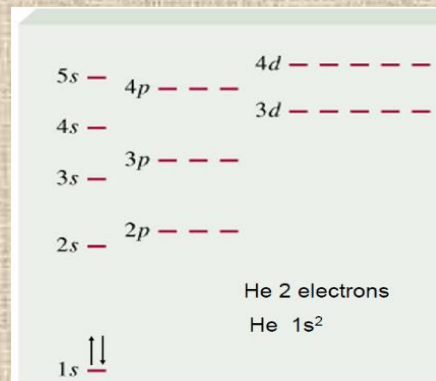




Απαγορευτική αρχή του Pauli

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.

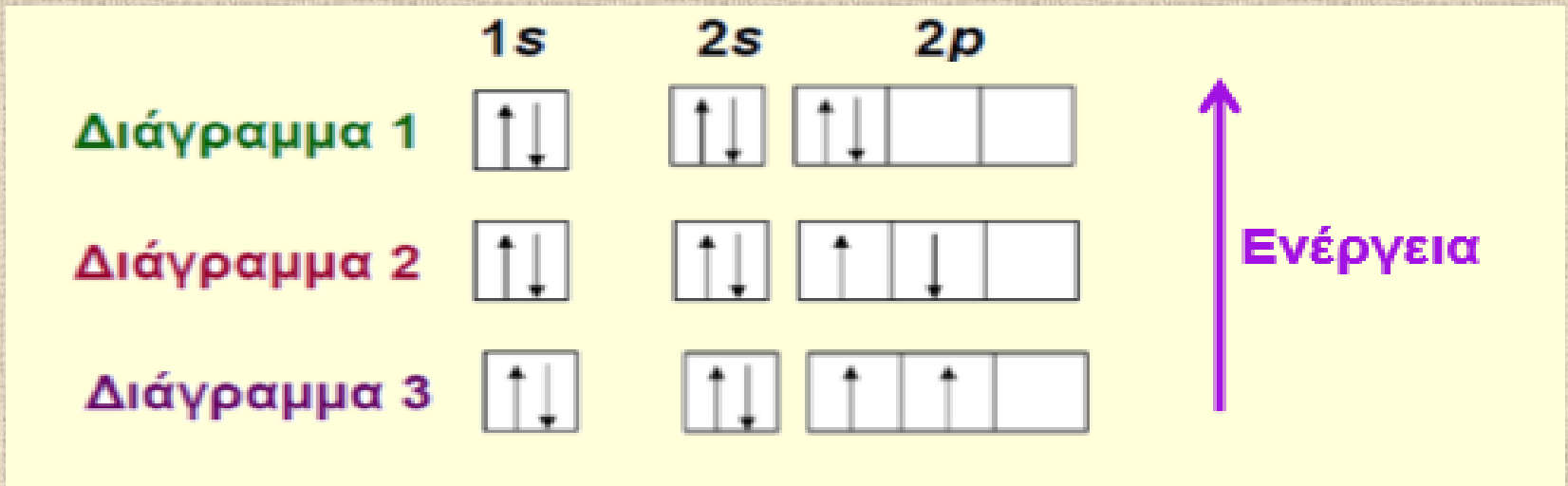
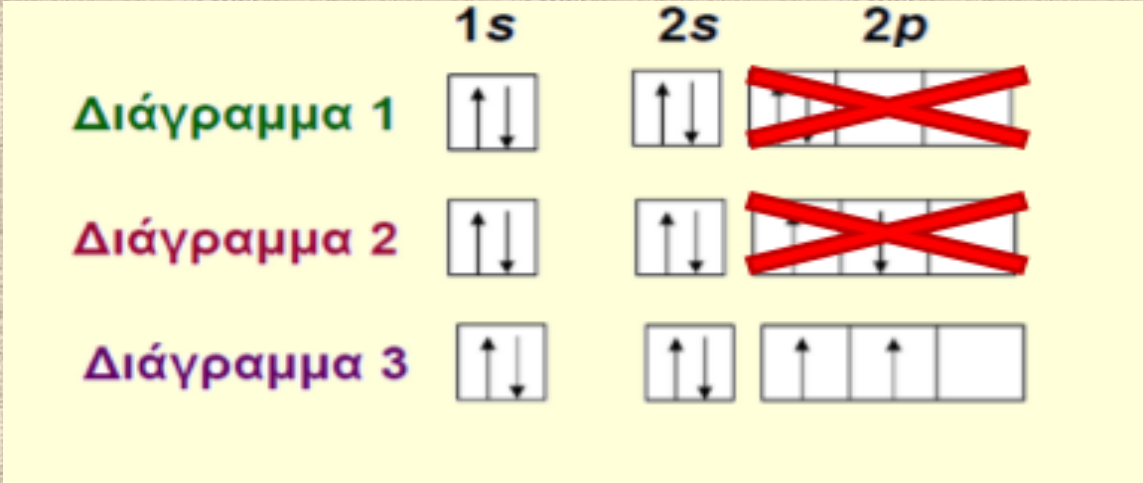
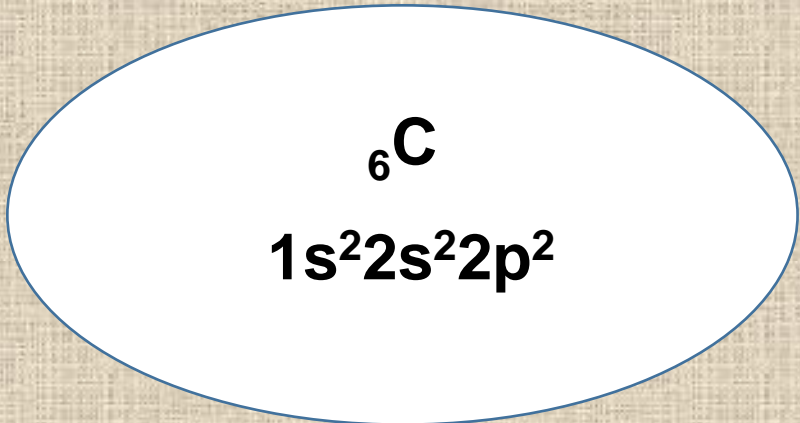
Η πιο σταθερή κατάσταση είναι εκείνη με το μέγιστο αριθμό ασύζευκτων ηλεκτρονίων (μέγιστη πολλαπλότητα spin)

$$\text{πολλαπλότητα spin: } 2S + 1$$

$$S: \text{ολικό spin } S = \sum_i m_{s_i}$$

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

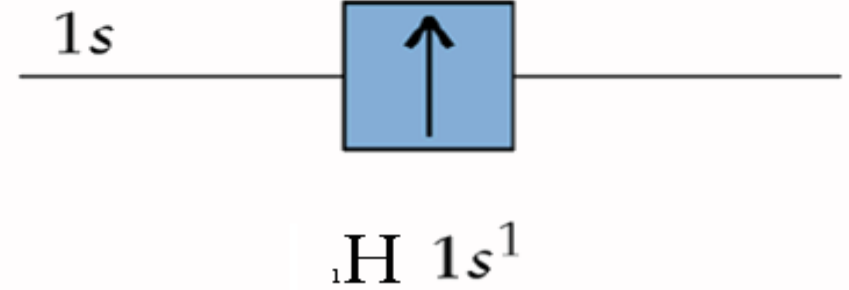
${}^1\text{H}$

$1s^1$

Δείχνει τον αριθμό των ηλεκτρονίων στο τροχιακό

Δείχνει τον κβαντικό αριθμό l

Δείχνει τον κύριο κβαντικό αριθμό



Ηλεκτρονική Απεικόνιση

${}^1\text{H}$



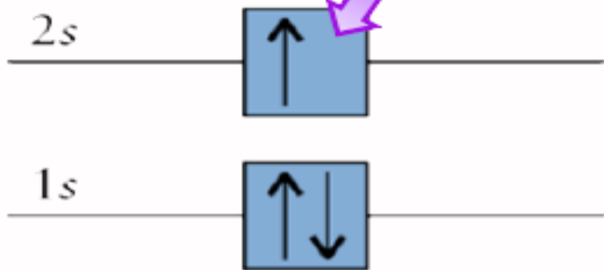
H $1s^1$

${}^2\text{He}$



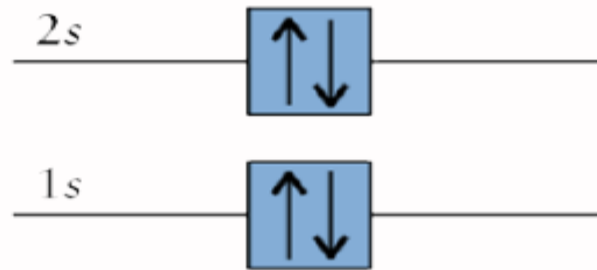
He $1s^2$

${}^3\text{Li}$



Li $1s^2 2s^1$

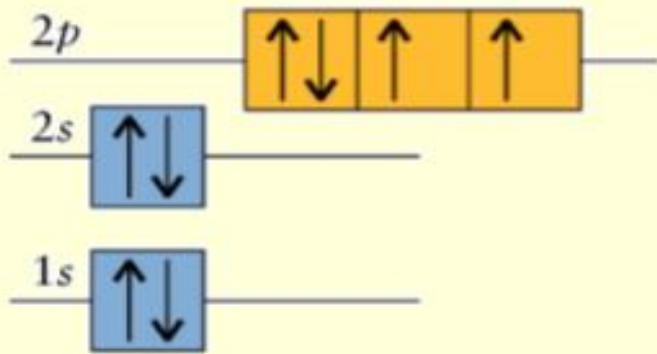
${}^4\text{Be}$



Be $1s^2 2s^2$

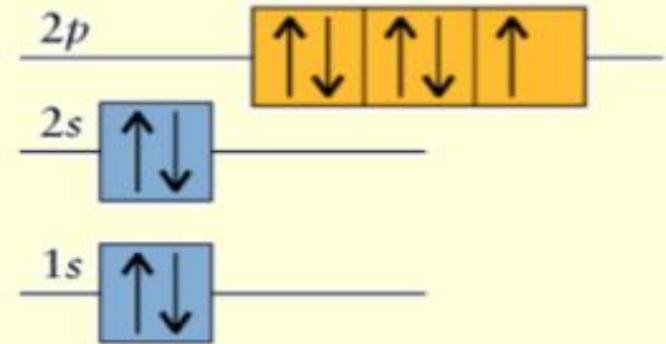
Ηλεκτρονική Απεικόνιση

8O



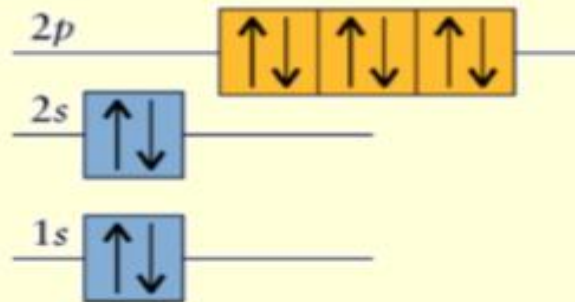
O $1s^2 2s^2 2p^4$, [He] $2s^2 2p^4$

9F












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

10Ne



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

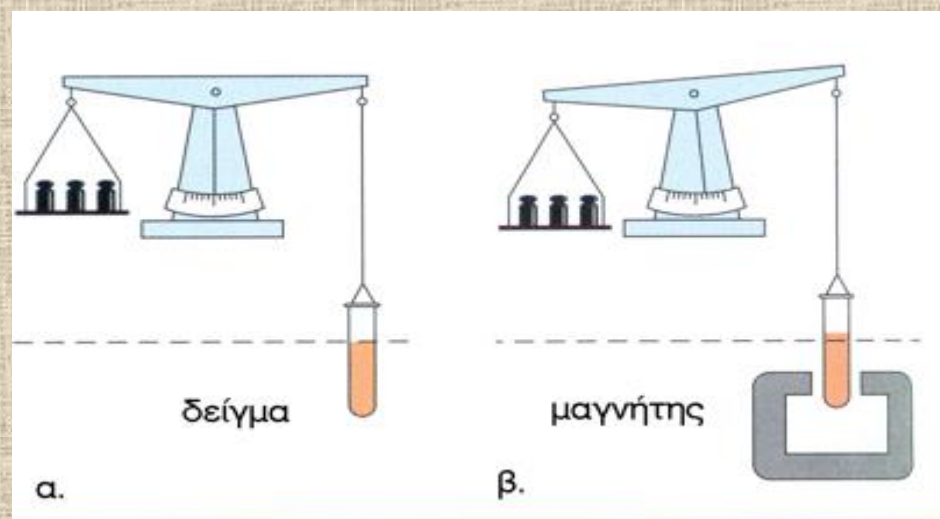
Ποιες από τις παρακάτω ηλεκτρονιακές δομήσεις είναι επιτρεπτές και ποιες απαγορευτικές. Γιατί?

	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

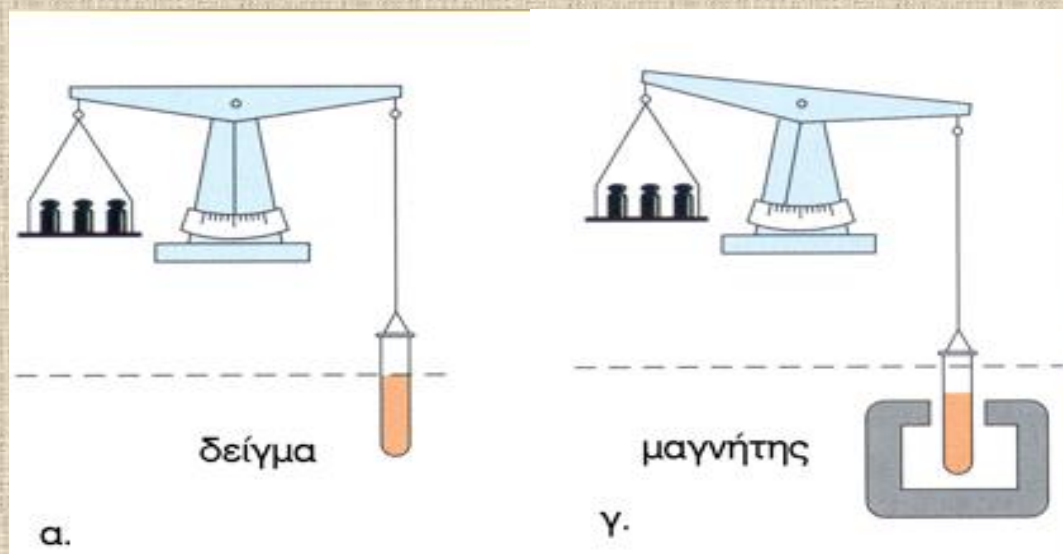
- ❖ όλα τα ηλεκτρόνια είναι συζευγμένα
- ❖ δεν υπάρχει μαγνητική ροπή λόγω spin ($\mu_s = 0$)
- ❖ τα διαμαγνητικά υλικά απωθούνται ελαφρώς από εξωτερικό μαγνητικό πεδίο



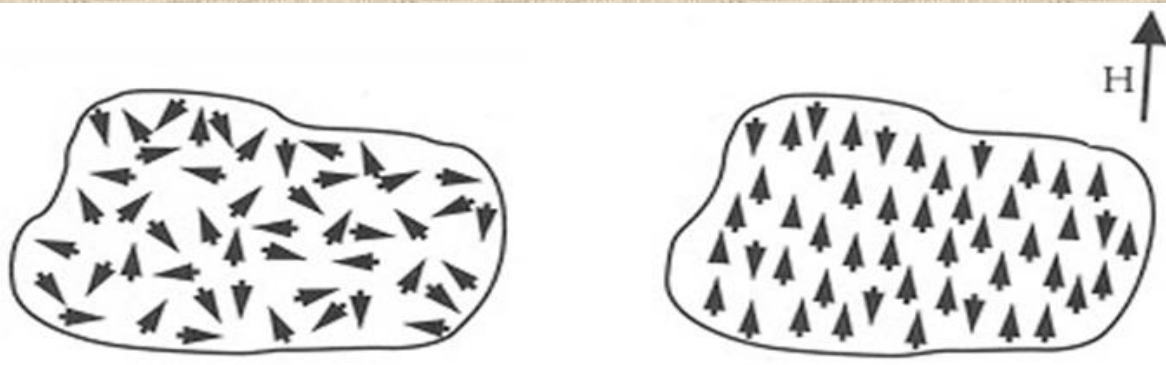
Μαγνητική συμπεριφορά των υλικών

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

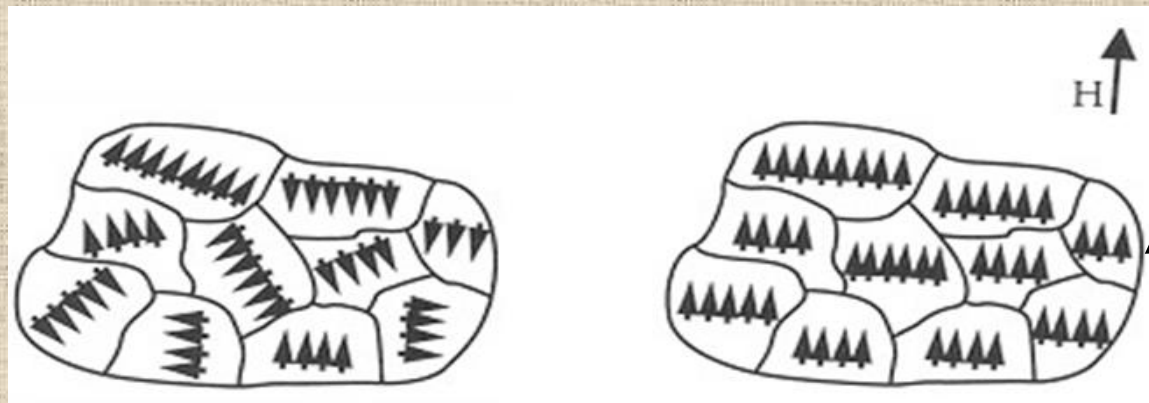


Παραμαγνητισμός



- 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)

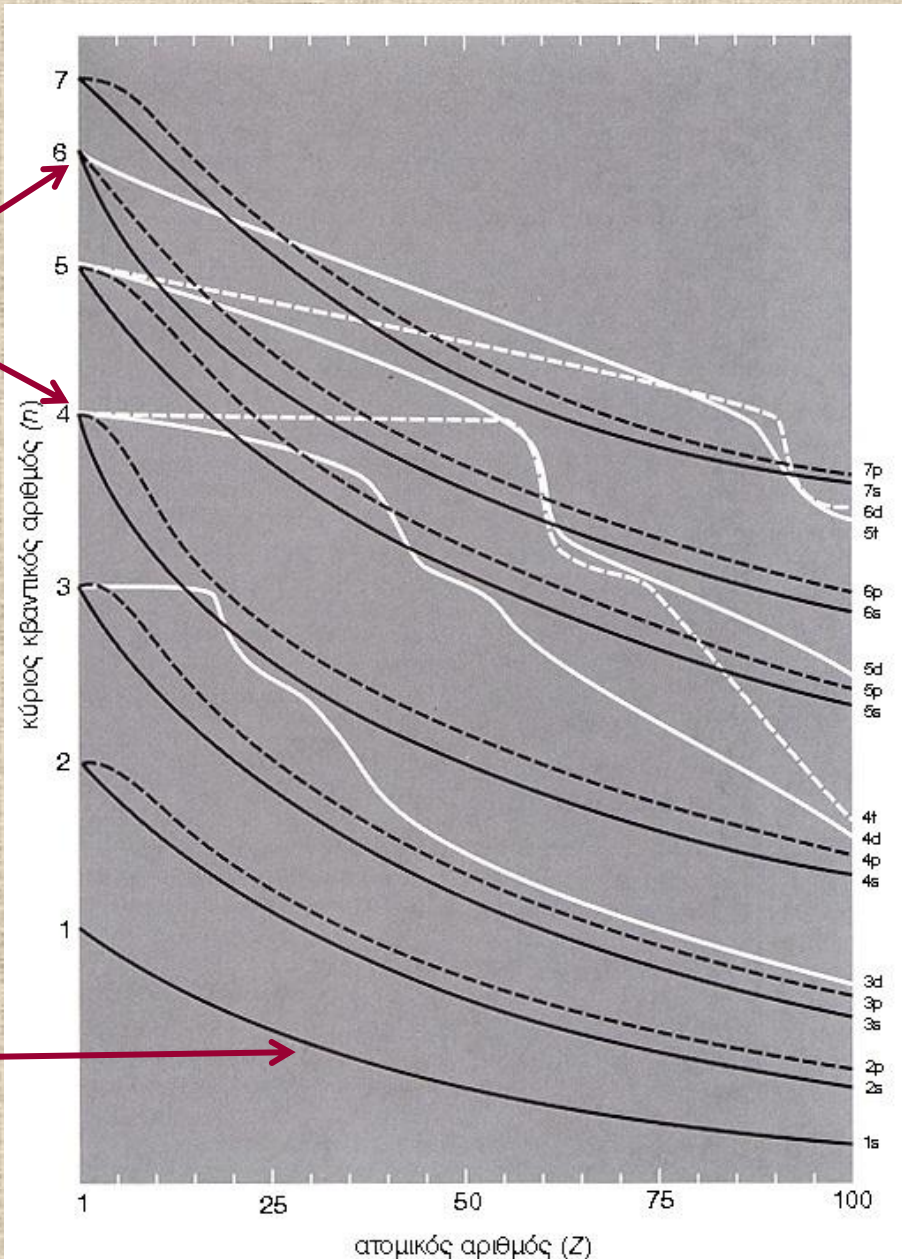
Z	Στοιχείο	Δομή	Z	Στοιχείο	Δομή
1	H	$1s^1$	19	K	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
2	He	$1s^2$	20	Ca	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
3	Li	$1s^2 2s^1$	21	Sc	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$
4	Be	$1s^2 2s^2$	22	Ti	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$
5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	23	V	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$
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?



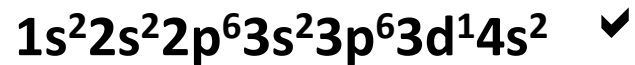
Η επίδραση του
ατομικού αριθμού
στην ενέργεια των
υποστιβάδων

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 Cu^+ όταν οξειδώνεται προς Cu^{2+} ,
 ii) Το ηλεκτρόνιο που χάνει το Fe^{2+} , όταν οξειδώνεται προς Fe^{3+} .

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

IUPAC Periodic Table of the Elements

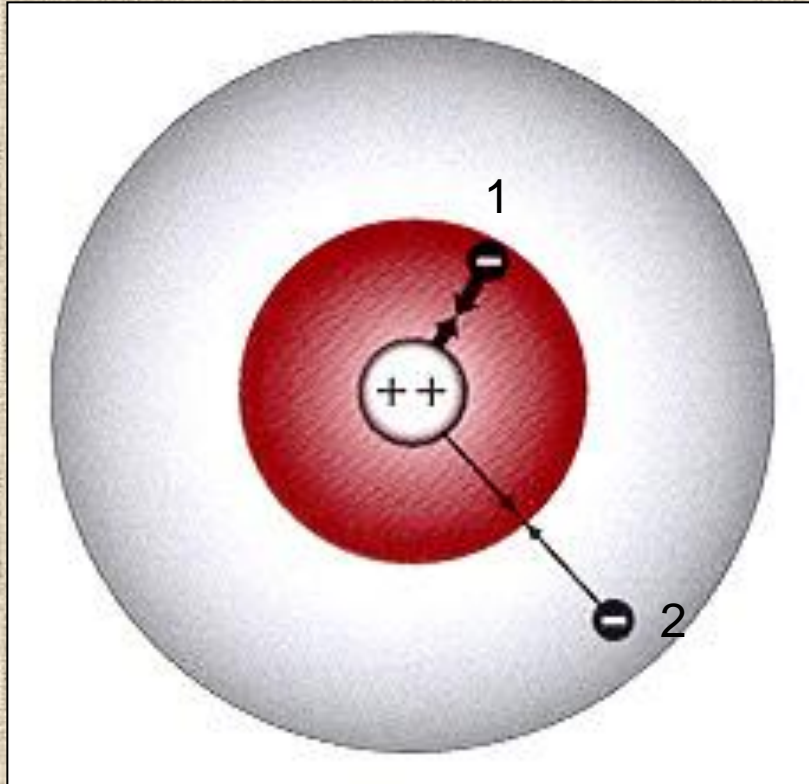
1 H hydrogen 1.00794(7)																	18 He helium 4.002602(2)
3 Li lithium 6.941(3)	4 Be beryllium 9.012182(2)											5 B boron 10.811(7)	6 C carbon 12.0107(8)	7 N nitrogen 14.00643(4)	8 O oxygen 15.999(4)	9 F fluorine 18.9984032(3)	10 Ne neon 20.1797(6)
11 Na sodium 22.98976928(2)	12 Mg magnesium 24.304(6)											13 Al aluminium 26.9815386(8)	14 Si silicon 28.0855(8)	15 P phosphorus 30.973762(5)	16 S sulfur 32.06(5)	17 Cl chlorine 35.45(3)	18 Ar argon 39.948(1)
19 K potassium 39.0983(1)	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.955912(2)	22 Ti titanium 47.88(7)	23 V vanadium 50.9415(1)	24 Cr chromium 51.9961(6)	25 Mn manganese 54.938044(1)	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933195(6)	28 Ni nickel 58.933195(6)	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.38(4)	31 Ga gallium 69.723(1)	32 Ge germanium 72.630(8)	33 As arsenic 74.9216(2)	34 Se selenium 78.9718(8)	35 Br bromine 79.904(1)	36 Kr krypton 83.798(4)
37 Rb rubidium 85.4678(3)	38 Sr strontium 87.62(3)	39 Y yttrium 88.90584(2)	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.90638(2)	42 Mo molybdenum 95.94(1)	43 Tc technetium 98(1)	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.9055(3)	46 Pd palladium 106.3274(8)	47 Ag silver 107.8642(1)	48 Cd cadmium 112.411(8)	49 In indium 114.818(8)	50 Sn tin 118.710(7)	51 Sb antimony 121.757(3)	52 Te tellurium 127.603(3)	53 I iodine 126.905(4)	54 Xe xenon 131.29(4)
55 Cs caesium 132.90545196(3)	56 Ba barium 137.327(7)	57-71 Lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(3)	73 Ta tantalum 180.94788(2)	74 W tungsten 183.84(1)	75 Re rhenium 186.207(1)	76 Os osmium 190.23(4)	77 Ir iridium 192.222(1)	78 Pt platinum 195.084(8)	79 Au gold 196.966569(4)	80 Hg mercury 200.59(4)	81 Tl thallium 204.38(3)	82 Pb lead 207.2(1)	83 Bi bismuth 208.9804(1)	84 Po polonium 209	85 At astatine 210	86 Rn radon 222
87 Fr francium 223	88 Ra radium 226	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium 261	105 Db dubnium 262	106 Sg seaborgium 263	107 Bh bohrium 264	108 Hs hassium 265	109 Mt meitnerium 266	110 Ds darmstadtium 267	111 Rg roentgenium 268	112 Cn copernicium 269	113 Nh nihonium 270	114 Fl flerovium 271	115 Mc moscovium 272	116 Lv livermorium 273	117 Ts tennessine 274	118 Og oganesson 275

**INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY**

57 La lanthanum 138.90547(7)	58 Ce cerium 140.12(1)	59 Pr praseodymium 140.90766(2)	60 Nd neodymium 144.242(8)	61 Pm promethium 144.9128(8)	62 Sm samarium 150.36(2)	63 Eu europium 151.964(1)	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.925(3)	66 Dy dysprosium 162.50(3)	67 Ho holmium 164.93032(8)	68 Er erbium 167.259(4)	69 Tm thulium 168.93032(8)	70 Yb ytterbium 173.05468(6)	71 Lu lutetium 174.967(1)
89 Ac actinium 227	90 Th thorium 232.0377(4)	91 Pa protactinium 231.03626(7)	92 U uranium 238.02891(3)	93 Np neptunium 237.048173(3)	94 Pu plutonium 244.06422(4)	95 Am americium 243.061361(3)	96 Cm curium 247.070353(3)	97 Bk berkelium 247.070353(3)	98 Cf californium 251.083208(7)	99 Es einsteinium 252.083208(7)	100 Fm fermium 257.10352(2)	101 Md mendelevium 258.10352(2)	102 No nobelium 259.10352(2)	103 Lr lawrencium 260.10352(2)

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



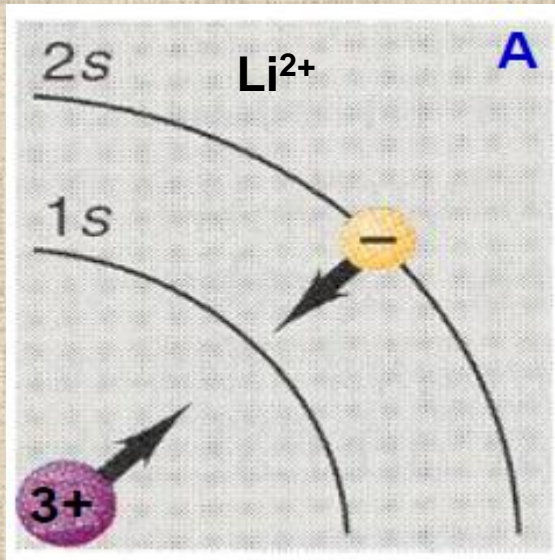
- ❖ Διείσδυση: ικανότητα ηλεκτρονίου να προσεγγίζει τον πυρήνα του ατόμου.
- ❖ Μεγάλη διεισδυτικότητα $e \rightarrow$ μείωση απόστασης e -πυρήνα \rightarrow μείωση ενέργειας

- ❖ Θωράκιση ή προάσπιση: αποτέλεσμα της άπωσης από τα εσωτερικά ηλεκτρόνια
- ❖ Θωράκιση \rightarrow αύξηση απόστασης e -πυρήνα \rightarrow αύξηση ενέργειας

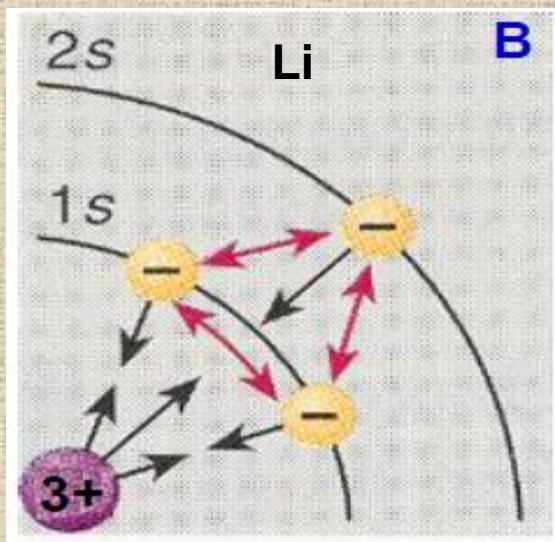
Το ηλεκτρόνιο 1 έχει μεγαλύτερη διεισδυτικότητα

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}).

ΚΑΝΟΝΕΣ SLATER

- η διεισδυτικότητα του ηλεκτρονίου καθορίζεται από το δραστικό πυρηνικό φορτίο Z^*
- Δραστικό πυρηνικό φορτίο είναι το φορτίο που “αισθάνεται” το εξωτερικό ηλεκτρόνιο λόγω του φορτίου του πυρήνα και το φαινόμενο της θωράκισης από εσωτερικά ηλεκτρόνια.
- Όσο πιο μεγάλο είναι το Z^* τόσο πιο μεγάλη είναι η διεισδυτικότητα του τροχιακού και τόσο περισσότερο έλκεται το ηλεκτρόνιο, άρα χαμηλότερη ενέργεια.

$$Z^* = Z - s$$

Z : ατομικός αριθμός

s : σταθερά θωράκισης

Υπολογισμός της σταθεράς προάσπισης S

Ομαδοποιούνται τα τροχιακά ως εξής (ομάδες Slater):

- Ομάδα 1: $1s$
- Ομάδα 2: $2s$ και $2p$
- Ομάδα 3: $3s$ και $3p$
- Ομάδα 4: $3d$
- Ομάδα 5: $4s$ και $4p$
- Ομάδα 6: $4d$
- Ομάδα 7: $4f$
- Ομάδα 8: $5s$ και $5p$ κλπ.

Ηλεκτρόνια που βρίσκονται σε ομάδα μεγαλύτερη από την ομάδα του ηλεκτρονίου που εξετάζουμε δεν συνεισφέρουν στη θωράκιση

$$(S = 0)$$

ΚΑΝΟΝΕΣ SLATER

Για τα ηλεκτρόνια των τροχιακών ns και np:

- για κάθε ηλεκτρόνιο της ίδιας ομάδας $S = 0.35$ - ειδικά για το 1s ηλεκτρόνιο $S = 0.30$
- για τα ηλεκτρόνια των n-1 τροχιακών $S = 0.85$
- για τα ηλεκτρόνια των n-2 τροχιακών (και χαμηλότερων στιβάδων) $S = 1.00$

Για τα ηλεκτρόνια των τροχιακών nd ή nf :

- για κάθε ηλεκτρόνιο της ίδιας ομάδας $S = 0.35$
- για κάθε ηλεκτρόνιο χαμηλότερης ομάδας $S = 1.00$

Παράδειγμα 1

Να υπολογιστεί το δραστικό πυρηνικό φορτίο ενός ηλεκτρονίου σθένους του ατόμου του ${}_8\text{O}$

Η ηλεκτρονιακή διαμόρφωση του οξυγόνου είναι: ${}_8\text{O}: 1s^2 2s^2 2p^4$

Η ομαδοποίηση σε τροχιακά σύμφωνα με τους κανόνες Slater είναι: $(1s^2) (2s^2 2p^4)$

Για ένα από τα ηλεκτρόνια σθένους το δραστικό πυρηνικό φορτίο είναι:

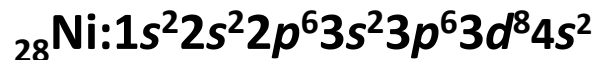
$$Z^* = Z - S = 8 - [(2 \times 0.85) + (5 \times 0.35)] = 4.55$$

Δηλαδή, το ηλεκτρόνιο σθένους συγκρατείται λόγω του φαινομένου θωράκισης με το $(4.55/8) \times 100 \approx 57\%$ της δύναμης που ασκεί ο πυρήνας των 8 πρωτονίων.

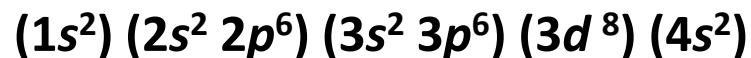
Παράδειγμα 2

Να υπολογιστεί το δραστικό πυρηνικό φορτίο ενός $3d$ και ενός $4s$ ηλεκτρονίου του $_{28}\text{Ni}$

Η ηλεκτρονιακή διαμόρφωση του νικελίου είναι:



Η ομαδοποίηση σε τροχιακά σύμφωνα με τους κανόνες Slater είναι:



Για ένα $3d$ ηλεκτρόνιο το δραστικό πυρηνικό φορτίο είναι:

$$Z^* = Z - S = 28 - [(18 \times 1.00) + (7 \times 0.35)] = 7.55$$

27%

Για ένα $4s$ ηλεκτρόνιο το δραστικό πυρηνικό φορτίο είναι:

$$Z^* = Z - S = 28 - [(10 \times 1.00) + (16 \times 0.85) + (1 \times 0.35)] = 4.05$$

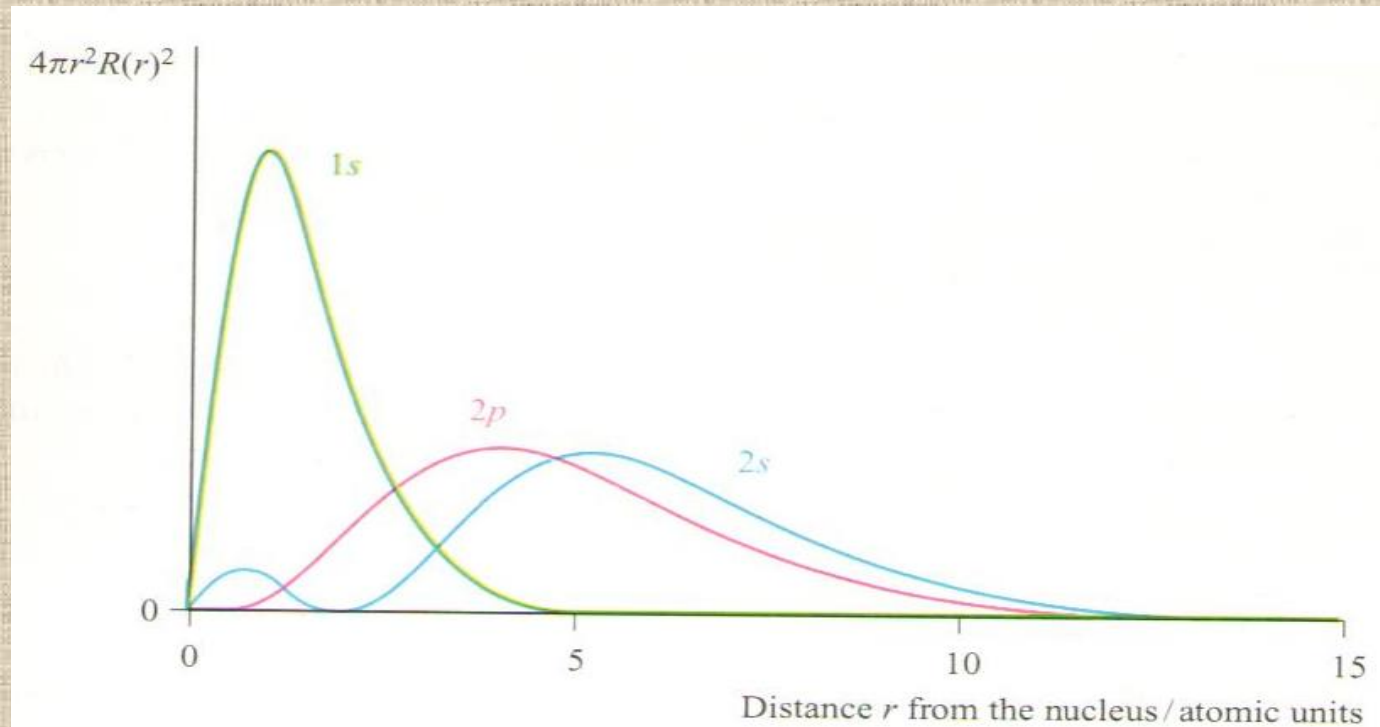
14.5%

Χρησιμοποιώντας τους κανόνες του Slater, να δείξετε ότι, για το K, η ηλεκτρονιακή δόμηση $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ είναι ενεργειακά σταθερότερη από την $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1$

Χρησιμοποιώντας τους κανόνες του Slater να δείξετε γιατί η ηλεκτρονιακή δόμηση του Cr είναι ${}_{24}\text{Cr}: [\text{Ar}]3d^5 4s^1$ και όχι $[\text{Ar}]3d^4 4s^2$

Να αποδείξετε, με εφαρμογή των κανόνων του Slater, ότι η ενέργεια πρώτου ιονισμού του ${}_{19}\text{K}$ είναι μικρότερη από την ενέργεια τρίτου ιονισμού του ${}_{21}\text{Sc}$.

Χρησιμοποιώντας το παρακάτω διάγραμμα και τις έννοιες διεξόδου - θωράκισης να εξηγήσετε γιατί η ηλεκτρονιακή δομή του ${}_{3}\text{Li}$ είναι $1s^2 2s^1$ και όχι $1s^2 2p^1$



Ηλεκτρονιακή διαμόρφωση ευγενών αερίων

συμπληρωμένα s και p τροχιακά της εξωτερικής στιβάδας
(2 και 6 ηλεκτρόνια, αντίστοιχα)

He: $1s^2$

Ne: $1s^2 2s^2 2p^6$

Ar: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Kr: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

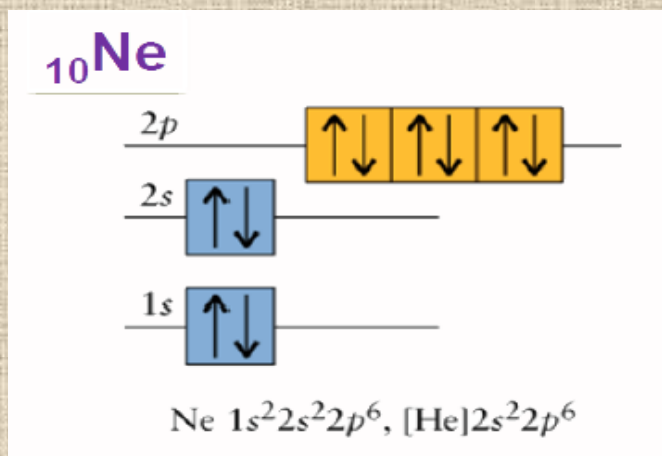
Xe: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6$

Ne: $[\text{He}] 2s^2 2p^6$

Ar: $[\text{Ne}] 3s^2 3p^6$

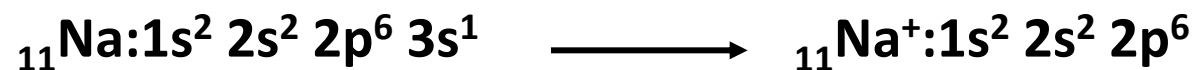
Kr: $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^6$

Xe: $[\text{Kr}] 5s^2 4d^{10} 5p^6$

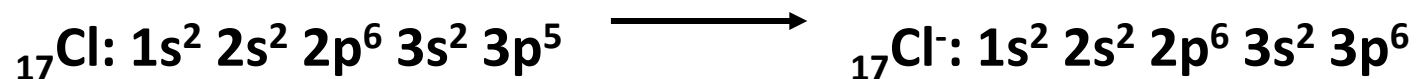


Τάση ορισμένων στοιχείων να αποκτήσουν δομή ευγενούς αερίου (ns^2np^6)

Τα αλκάλια (Li, Na, K, Rb, Cs) τείνουν να αποβάλλουν το μοναδικό e^- της εξωτερικής τους στιβάδας:

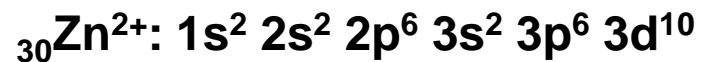
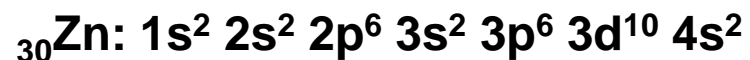


Τα αλογόνα (F, Cl, Br, I) τείνουν να προσλάβουν 1 e^- .



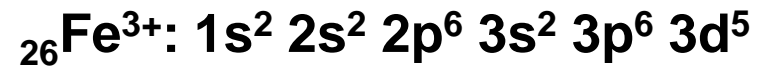
Τάση ορισμένων στοιχείων να αποκτήσουν δομή $(n-1)d^{10}$

Η διαμόρφωση με συμπληρωμένα τα d τροχιακά είναι πολύ σταθερή ενεργειακά με συνέπεια κάποια στοιχεία να αποβάλουν e^- από τα ns και np τροχιακά της εξωτερικής στιβάδας προκειμένου να αποκτήσουν την σταθερή δομή $(n-1)d^{10}$.



Τάση ορισμένων στοιχείων να αποκτήσουν δομή $(n-1)d^5$

Η διαμόρφωση με ημισυμπληρωμένα τα d τροχιακά είναι σταθερή ενεργειακά (λιγότερο από την d^{10}) με συνέπεια κάποια στοιχεία να αποβάλουν e^- από τα s τροχιακά της εξωτερικής στιβάδας προκειμένου να αποκτήσουν την σταθερή δομή $(n-1)d^5$.



Ποια είναι η ηλεκτρονιακή δομή των ακόλουθων ατόμων στη θεμελιώδη κατάσταση; ${}_7\text{N}$, ${}_{16}\text{S}$, ${}_{17}\text{Cl}$, ${}_{19}\text{K}$, ${}_{22}\text{Ti}$, ${}_{26}\text{Fe}$, ${}_{28}\text{Ni}$, ${}_{30}\text{Zn}$. β) Πόσα ασύζευκτα ηλεκτρόνια διαθέτει καθένα από αυτά τα άτομα και πόσα ηλεκτρόνια σθένους; γ) Ποια από τα παραπάνω άτομα είναι διαμαγνητικά; Ποια είναι παραμαγνητικά;

Να γραφεί η ηλεκτρονιακή κατανομή σε υποστιβάδες και στιβάδες για τα ιόντα: ${}_{17}\text{Cl}^-$, ${}_7\text{N}^+$, ${}_{20}\text{Ca}^{2+}$, ${}_{34}\text{Se}^{2-}$, ${}_{35}\text{Br}^-$

Να γραφεί η ηλεκτρονιακή δομή σε υποστιβάδες και στιβάδες για τα άτομα ${}_{25}\text{Mn}$, ${}_{26}\text{Fe}$, ${}_{28}\text{Ni}$ και ${}_{29}\text{Cu}$. Πόσα μονήρη ηλεκτρόνια διαθέτει το κάθε άτομο στη θεμελιώδη κατάσταση; Να κατατάξετε τα στοιχεία με αυξανόμενο παραμαγνητισμό. Να γραφεί η ηλεκτρονιακή δομή για τα ιόντα Mn^{2+} , Fe^{2+} και Fe^{3+} , ${}_{28}\text{Ni}^{2+}$ και Cu^{1+} .

Διατάξτε τα τροχιακά $1s$, $2s$, $2p$, $3s$, $3p$ και $3d$ κατά σειρά αυξανόμενης ενέργειας. Να δικαιολογηθεί η απάντησή σας.

Ποιες από τις παρακάτω ηλεκτρονιακές δομές δεν είναι σωστές;
α) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^3$, β) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{11} 4s^2$, γ) K(2) L(8) M(19) N(2),
δ) $1s^2 2s^2 2p^5 3s^2$

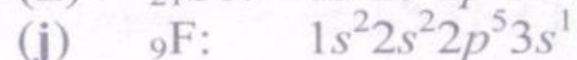
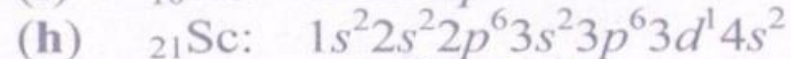
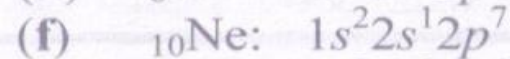
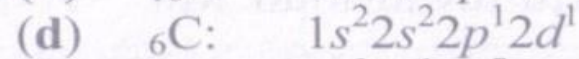
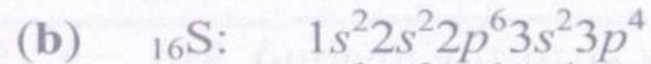
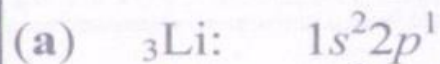
Ποιες από τις επόμενες ηλεκτρονιακές δομές αντιστοιχούν σε διεγερμένη κατάσταση ατόμου και ποιες σε δομή ιόντος; α) ${}_5\text{B}: 1s^2 2s^2 2p^2$, β) ${}_{10}\text{Ne}: 1s^2 2s^2 2p^4 3s^2$, γ) ${}_{19}\text{K}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$, δ) ${}_{16}\text{S}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Να υπολογίσετε τον ελάχιστο ατομικό αριθμό ενός στοιχείου το άτομο του οποίου στη θεμελιώδη κατάσταση έχει: α) 4 ηλεκτρόνια σε p τροχιακά, β) 3 ηλεκτρόνια σε d τροχιακά, γ) άθροισμα των κβαντικών αριθμών του spin ίσο με 1, δ) 3 μονήρη ηλεκτρόνια.

Κατά ποια σειρά τα παρακάτω τροχιακά θα συμπληρωθούν με ηλεκτρόνια σύμφωνα με την Αρχή Δομήσεως; Γιατί;

4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 6s

→4.22 Σε ποιες από τις παρακάτω περιπτώσεις πρόκειται για ουδέτερο άτομο, θετικό ή αρνητικό ιόν;



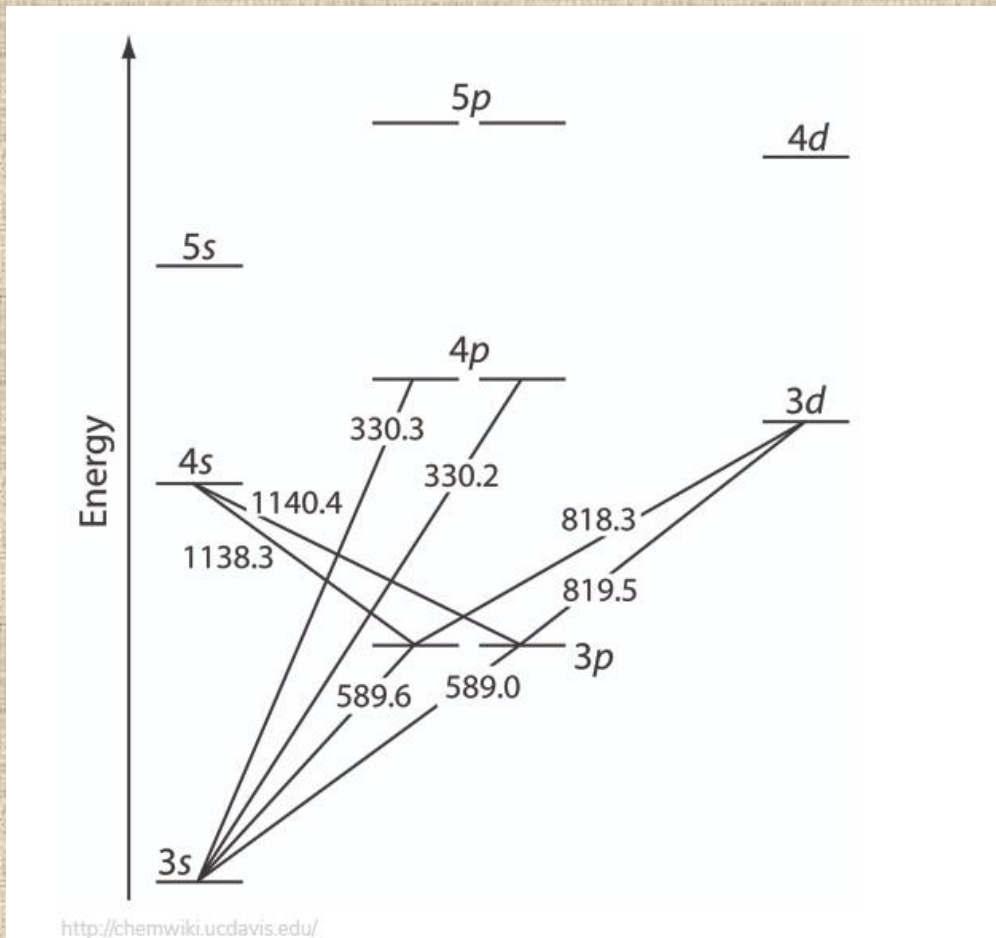
Ποιες απ' αυτές τις ηλεκτρονικές δομές αντιπροσωπεύουν θεμελιώδη ή διεγερμένη κατάσταση και ποιες είναι αδύνατες;

Να κατατάξετε τα παρακάτω στοιχεία κατά σειρά αυξανόμενου παραμαγνητισμού:



Ποια είναι η ηλεκτρονιακή δομή των τριών πρώτων διεγερμένων καταστάσεων του ατόμου ${}_{11}\text{Na}$. Ποια είναι η πρώτη διεγερμένη κατάσταση του ${}_{11}\text{Na}^+$

Διεγερμένες καταστάσεις (excited states)



Ενεργειακές στάθμες στο άτομο Na

Κανόνες επιλογής

$$\Delta l = \pm 1 (\neq 0)$$

$$\Delta S = 0$$



❖ οι μετακινήσεις είναι διαγώνιες – από και προς διπλανές στήλες