

# Κβαντική θεωρία και ηλεκτρονιακή δομή των ατόμων

## Κβαντικοί αριθμοί

Κύριος κβαντικός αριθμός ( $n$ )

Αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός ( $l$ )

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός ( $m_l$ )

Στροφορμή (Spin) ηλεκτρονίου κβαντικός αριθμός ( $m_s$ )

## Ατομικά τροχιακά

$s$  τροχιακά

$p$  τροχιακά

$d$  τροχιακά και άλλα υψηλής ενέργειας τροχιακά

Ενέργειες τροχιακών

## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Ενέργειες των ατομικών τροχιακών σε πολλά ηλεκτρονιακά συστήματα

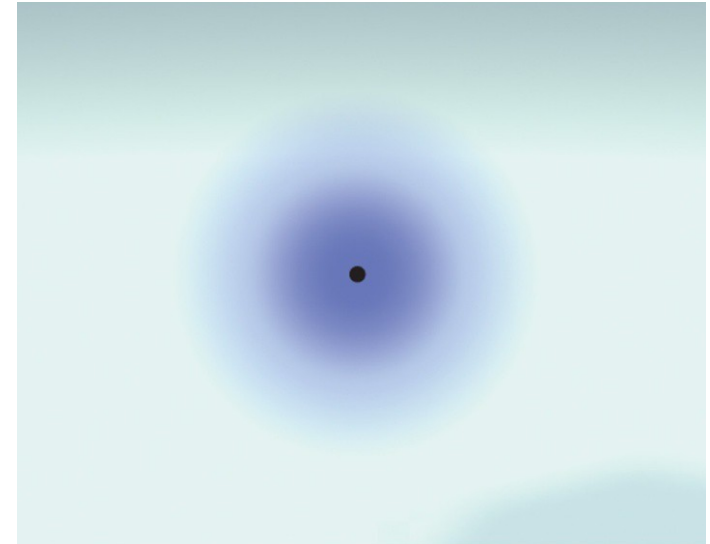
Η απαγορευτική αρχή Pauli (Exclusion Principle)

Αρχή ελάχιστης ενέργειας (Aufbau )

Ο κανόνας του Hund

Γενικοί κανόνες για την καταγραφή της διευθέτησης ηλεκτρονίων

## Ηλεκτρονιακή διευθέτηση και περιοδικός πίνακας

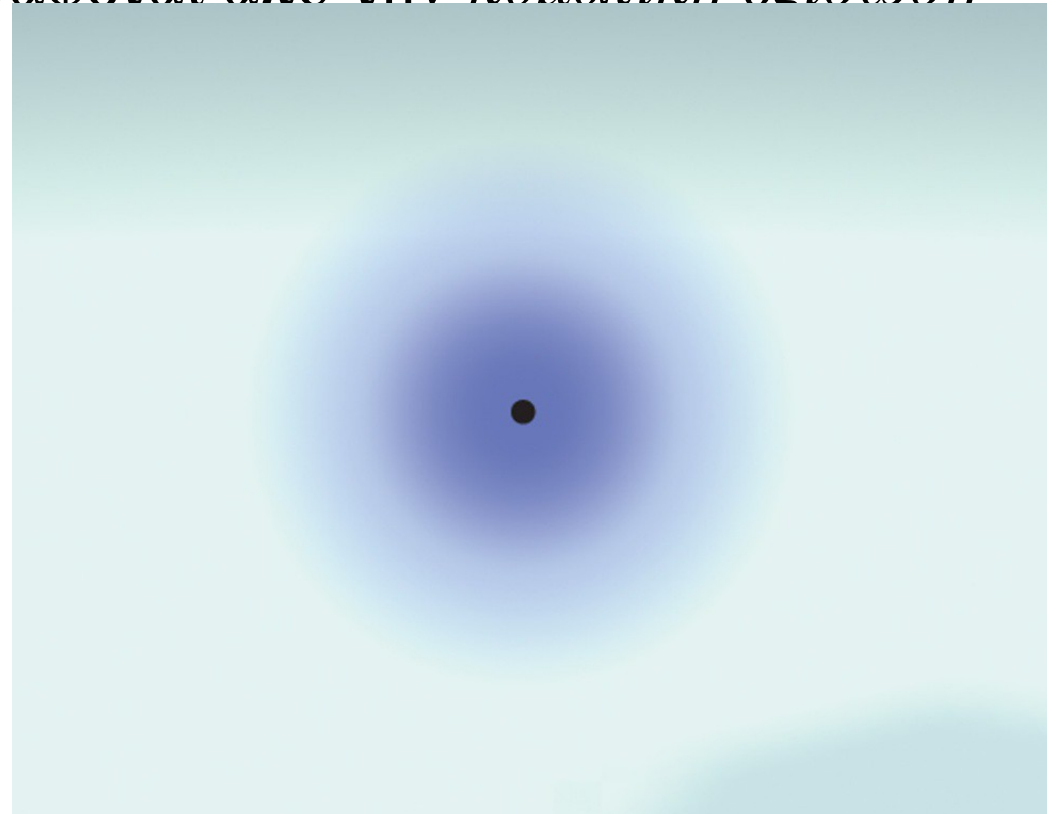


## Κβαντικοί αριθμοί

Ο Erwin Schrödinger ανακάλυψε ένα σύνθετο μαθηματικό τύπο που σχετίζει τα κυματικά και σωματιδιακά χαρακτηριστικά των ηλεκτρονίων.

Η κυματική συμπεριφορά περιγράφεται από την *κυματική εξίσωση*  $\psi$ .

Η πιθανότητα να βρούμε ένα ηλεκτρόνιο σε μια περιοχή του χώρου είναι ανάλογη του  $\psi^2$  και ονομάζεται *ηλεκτρονιακή πυκνότητα*.

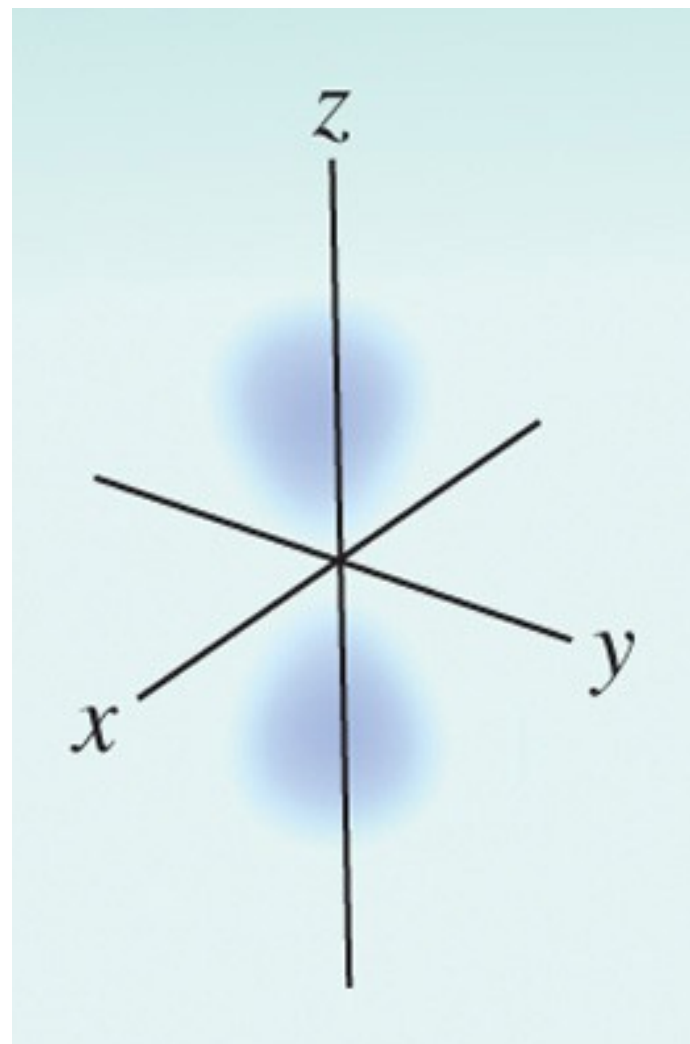


## Κβαντικοί αριθμοί

Η εξίσωση *Schrödinger* καθορίζει την κατά το δυνατόν ενεργειακή κατάσταση ενός ηλεκτρονίου που βρίσκεται στο άτομο του υδρογόνου.

Οι ενεργειακές καταστάσεις και οι κυματικές συναρτήσεις χαρακτηρίζονται από ένα σύνολο κβαντικών αριθμών.

Αντί να αναφερόμαστε σε τροχιές όπως στο πρότυπο του Bohr, οι κβαντικοί αριθμοί και οι κυματικές συναρτήσεις περιγράφουν τα **ατομικά τροχιακά**.



## Κβαντικοί αριθμοί

*Οι κβαντικοί αριθμοί* χρειάζονται για να περιγράψουν την κατανομή της ηλεκτρονιακής πυκνότητας σε ένα άτομο.

Είναι απαραίτητοι τρεις κβαντικοί αριθμοί για να περιγράψουν ένα *ατομικό τροχιακό*.

➤ Ο *κύριος κβαντικός αριθμός ( $n$ )* – σχετίζεται με τις διαστάσεις

Ο *αζιμοιθιακός κβαντικός αριθμός ( $l$ )* – περιγράφει το σχήμα

Ο *μαγνητικός κβαντικός αριθμός ( $m_l$ )* – καθορίζει τον προσανατολισμό του τροχιακού στο χώρο

## **Κβαντικοί αριθμοί**

Ο **κύριος κβαντικός αριθμός ( $n$ )** παρουσιάζει το μέγεθος του τροχιακού.

Μεγαλύτερες τιμές του  $n$  αντιστοιχούν σε μεγαλύτερα τροχιακά.

Οι επιτεπόμενες τιμές του  $n$  είναι οι ακέραιοι αριθμοί: 1, 2, 3 κλπ.

Η τιμή του  $n$  αντιστοιχεί στην τιμή του  $n$  στο μοντέλο του Bohr .

Μια συλλογή τροχιακών με ίδιες τιμές του  $n$  ονομάζεται *στιβάδα*.

## Κβαντικοί αριθμοί

Ο *αξιμοθιακός κβαντικός αριθμός* ( **$l$** ) περιγράφει το σχήμα του τροχιακού.

Οι του  $l$  εξαρτώνται από αυτές του κύριου κβαντικού αριθμού  $n$

Οι επιτρεπόμενες τιμές του  $l$  κυμαίνονται από 0 σε  $n - 1$ .

➤ Παράδειγμα: Εάν  $n = 2$ ,  $l$  μπορεί να είναι 0 ή 1.

$l$	0	1	2	3
τροχιακό	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>

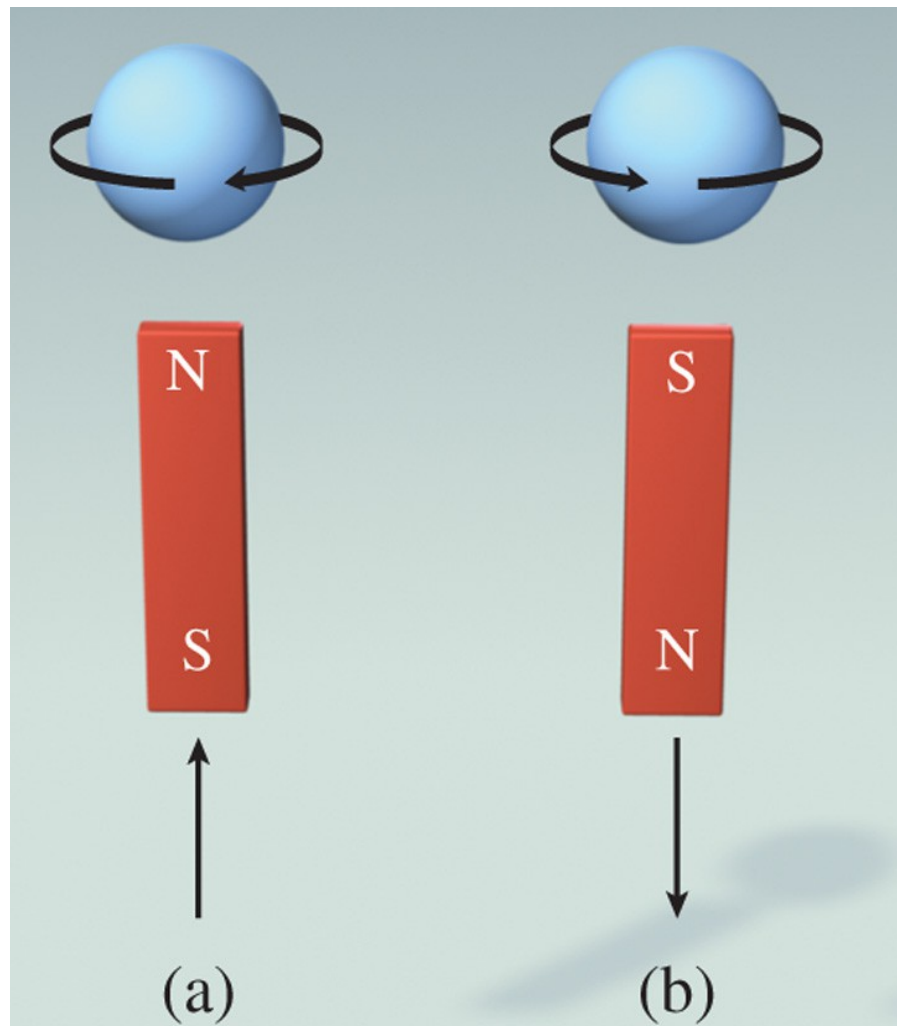
Μια συλλογή τροχιακών με ίδιες τιμές του  $n$  και  $l$  αναφέρεται ως *υποστιβάδα*.

## Κβαντικοί αριθμοί

Ο κβαντικός αριθμός της στροφορμής (spin) του ηλεκτρονίου ( $m_s$ ) χρησιμοποιείται για να καθορίσει το spin του ηλεκτρονίου.

Υπάρχουν δυο δυνατές κατευθύνσεις στροφορμής.

Επιτρεπόμενες τιμές του  $m_s$  είναι  $+1/2$  και  $-1/2$ .



## Κβαντικοί αριθμοί

Ο *μαγνητικός κβαντικός αριθμός* ( $m_l$ ) περιγράφει τη των τροχιακών στο χώρο.

Οι τιμές του  $m_l$  εξαρτώνται από τις τιμές του αζιμουθιακού κβαντικού αριθμού, και περνει τις τιμές:  $-1, \dots, 0, \dots, +1$



Επιτρεπόμενες τιμές των κβαντικών αριθμών  $n, l$  και  $m_l$

Όταν ο $n$ είναι	Ο $l$ μπορεί να είναι	Όταν ο $l$ είναι	Ο $m_l$ μπορεί να είναι
1	μόνο 0	0	μόνο 0
2	0 ή 1	0	μόνο 0
		1	-1, 0, +1
3	0, 1, 2	0	μόνο 0
		1	-1, 0, +1
		2	-2, -1, 0, +1, +2
4	0, 1, 2, 3	0	μόνο 0
		1	-1, 0, +1
		2	-2, -1, 0, +1, +2
		3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3

## Κβαντικοί αριθμοί

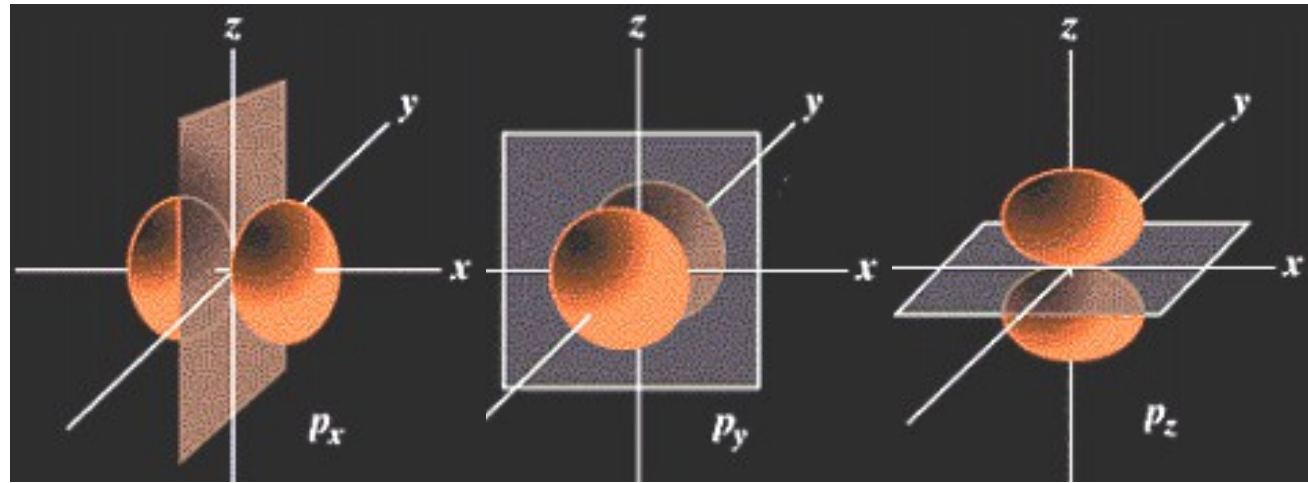
Ενεργειακό επίπεδο	Υπο-στιβάδες	Ολικά τροχιακά	Ολικά ηλεκτρόνια	Ολικά ηλεκτρόνια ανά επίπεδο
$n = 1$	s	1 (1s τροχιακό)	2	2
$n = 2$	s p	1 (2s τροχιακό) 3 (2p τροχιακά)	2 6	8
$n = 3$	s p d	1 (3s τροχιακό) 3 (3p τροχιακά) 5 (3d τροχιακά)	2 6 10	18
$n = 4$	s p d f	1 (4s τροχιακό) 3 (4p τροχιακά) 5 (4d τροχιακά) 7 (4f τροχιακά)	2 6 10 14	32

# Ατομικά τροχιακά: s, p, d, f

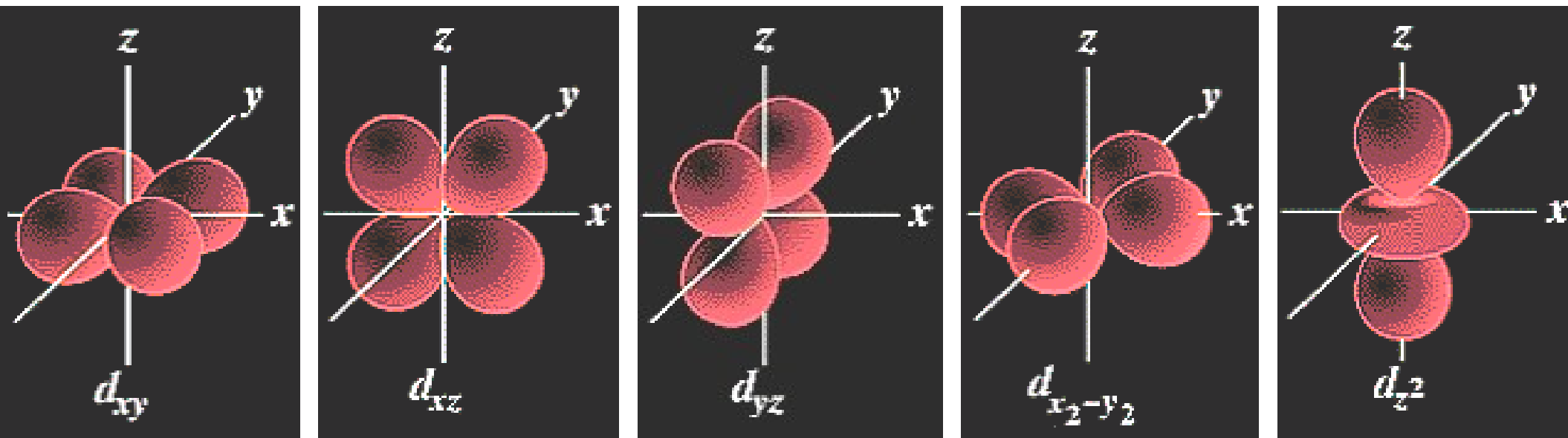
- Τα ατομικά τροχιακά είναι περιοχές του χώρου όπου η πιθανότητα να βρούμε το ηλεκτρόνιο γύρω από το άτομο είναι αυξημένη.
- Ιδιότητες του s τροχιακού :
  - Υπάρχει ένα s τροχιακό για κάθε n επίπεδο. για το οποίο  $\ell = 0$ , και μόνο μια τιμή του  $m_\ell = 0$  και χωρά δύο ηλεκτρόνια με spin  $+1/2, -1/2$

# ΣΥΝΟΠΤΙΚΑ: p τροχιακά και d τροχιακά

Τα p τροχιακά έχουν ατρακτοειδές σχήμα με τρεις διαφορετικούς προσανατολισμούς:  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ .

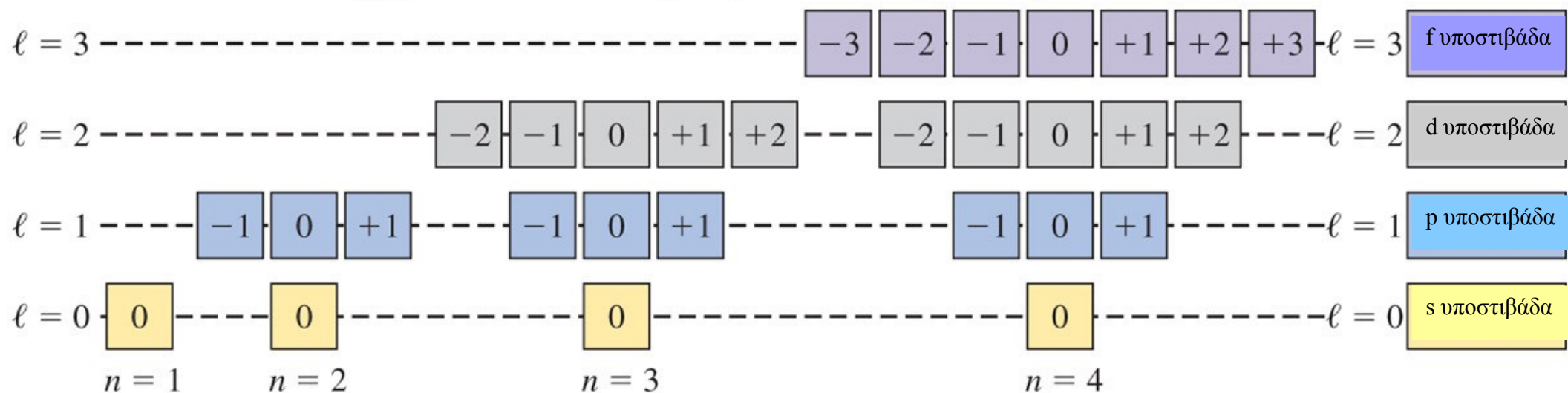


Τα τέσσερα d τροχιακά μοιάζουν με δυο ζεύγη ατράκτων διευθετημένα στους τρεις άξονες. Το τελευταίο d τροχιακό μοιάζει με ένα p τροχιακό ένα χωροδακτύλιο γύρω στο κέντρο.



## Κβαντικοί αριθμοί

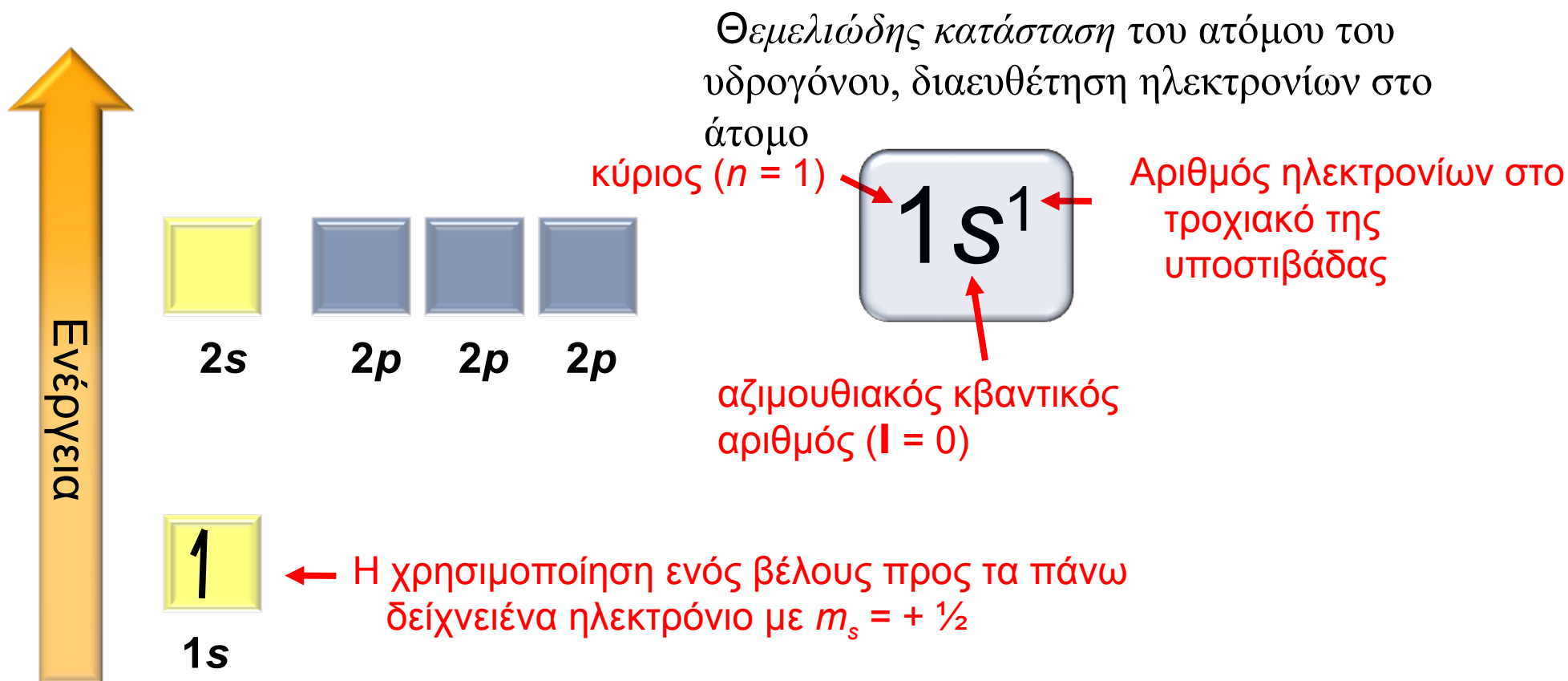
Οι κβαντικοί αριθμοί καθορίζουν στιβάδες, υποστιβάδες και τροχιακά.



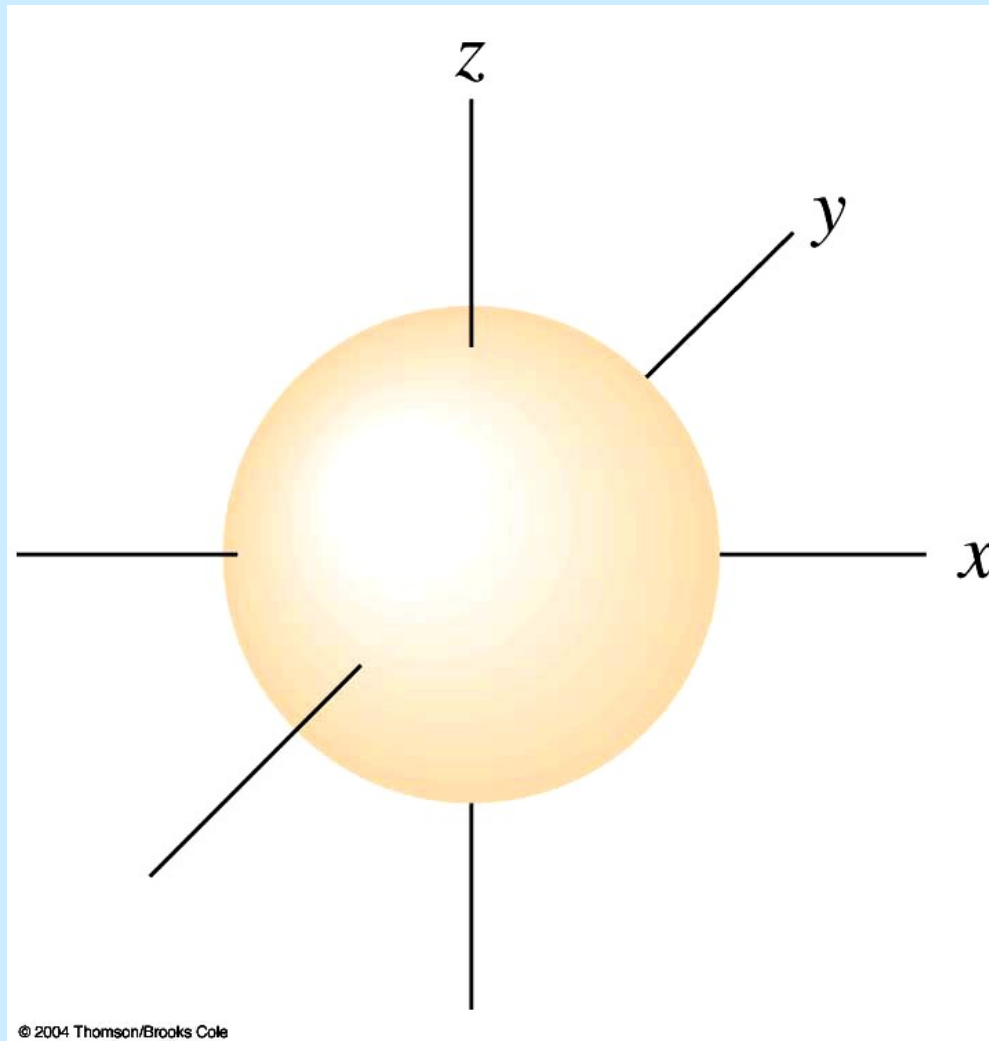
## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Η **ηλεκτρονιακή δόμηση** περιγράφει πως κατανέμονται τα ηλεκτρόνια στα διάφορα ατομικά τροχιακά.

Στη **θεμελιώδη κατάσταση** του ατόμου του υδρογόνου, τα ηλεκτρόνια βρίσκονται στο  $1s$  τροχιακό.



- Τα  $s$  τροχιακά έχουν σφαιρική συμμετρία



© 2004 Thomson/Brooks Cole

**Για κάθε  $s$  τροχιακό:**

$$\ell = 0 \text{ και } m_l = 0$$

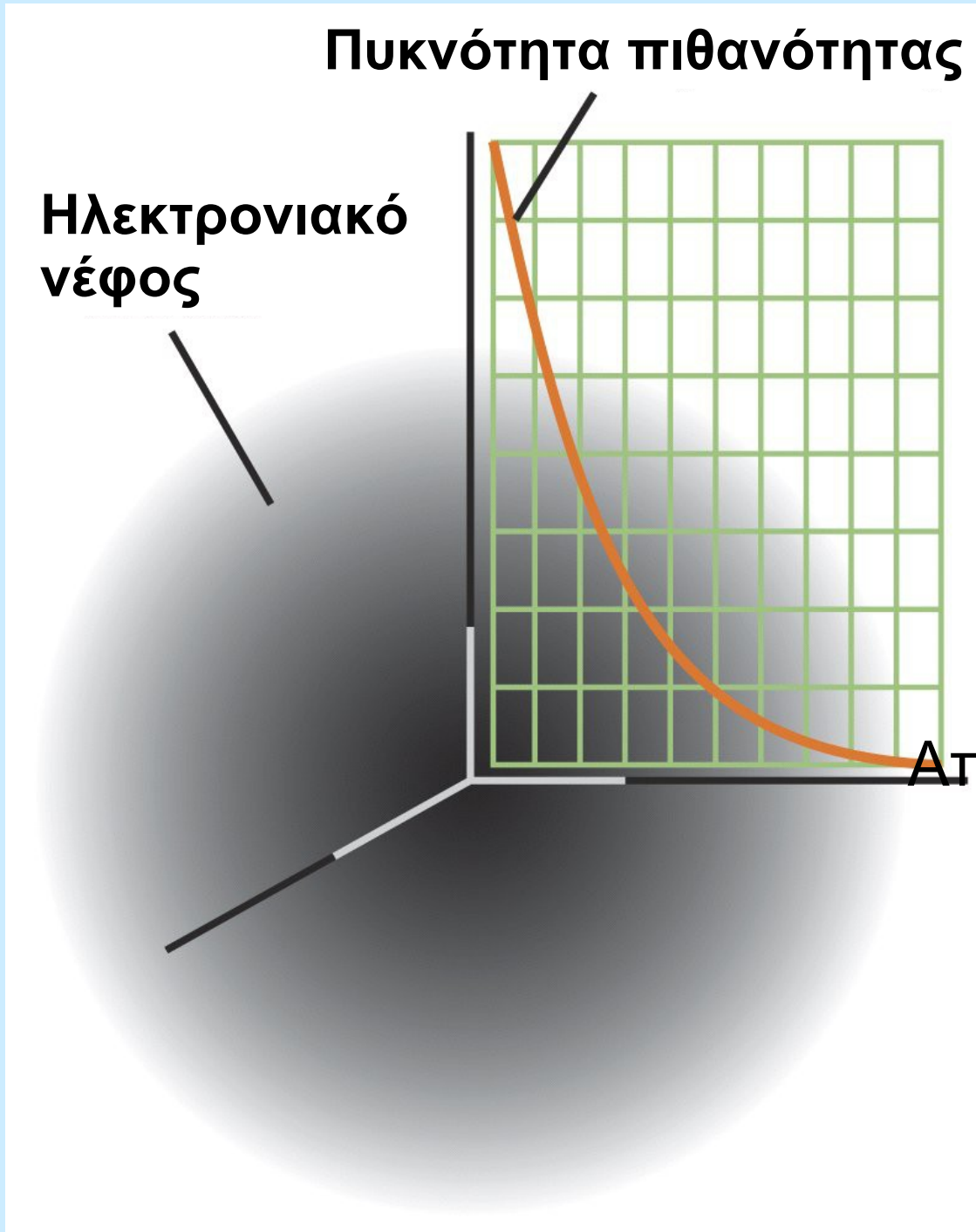
Το μόνο που αλλάζει στα  $s$  τροχιακά είναι ο αριθμός  $n$ .

Πυκνότητα πιθανότητας

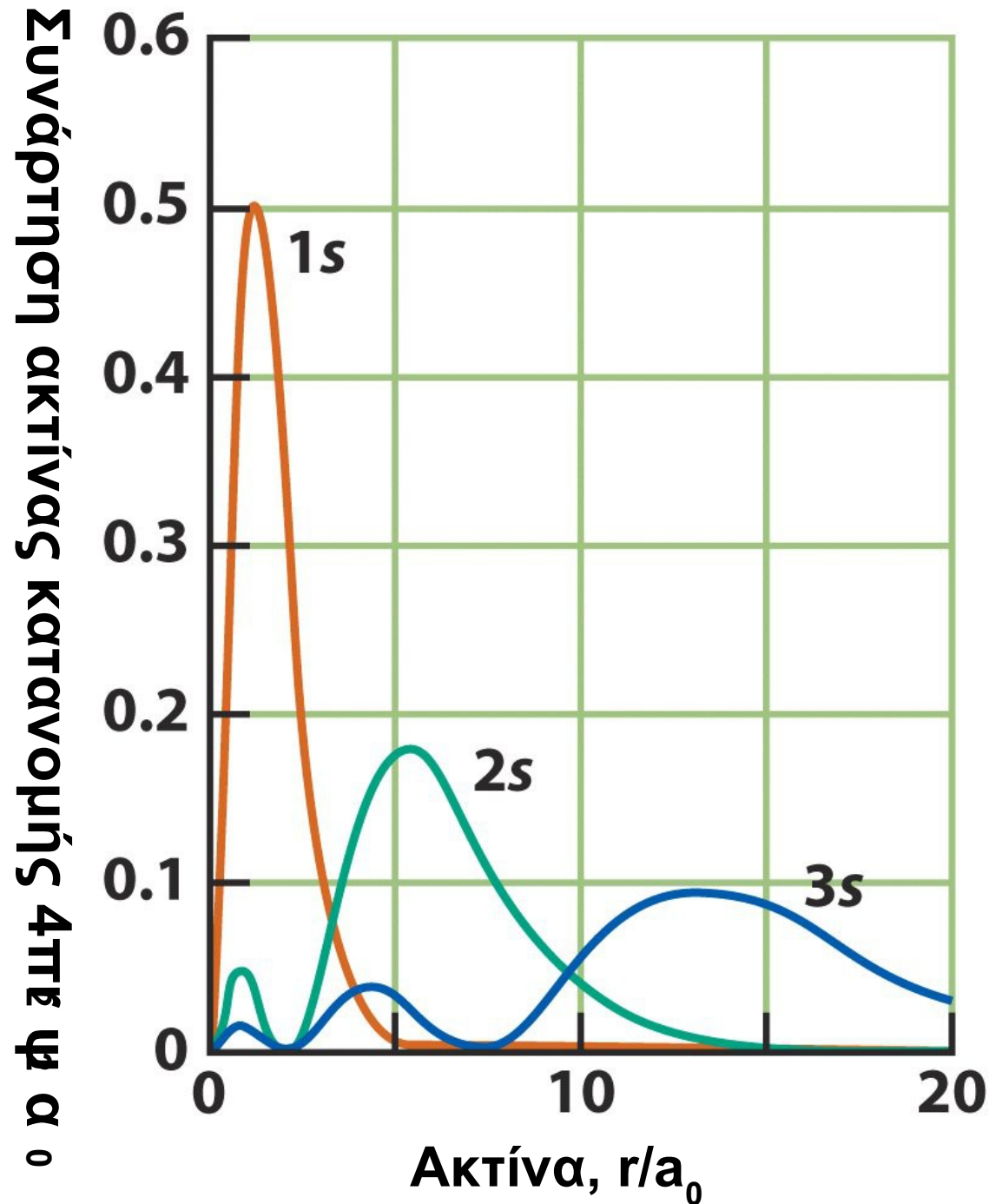
Ηλεκτρονιακό νέφος

1s τροχιακό  
του υδρογόνου

Απόσταση από τον πυρήνα

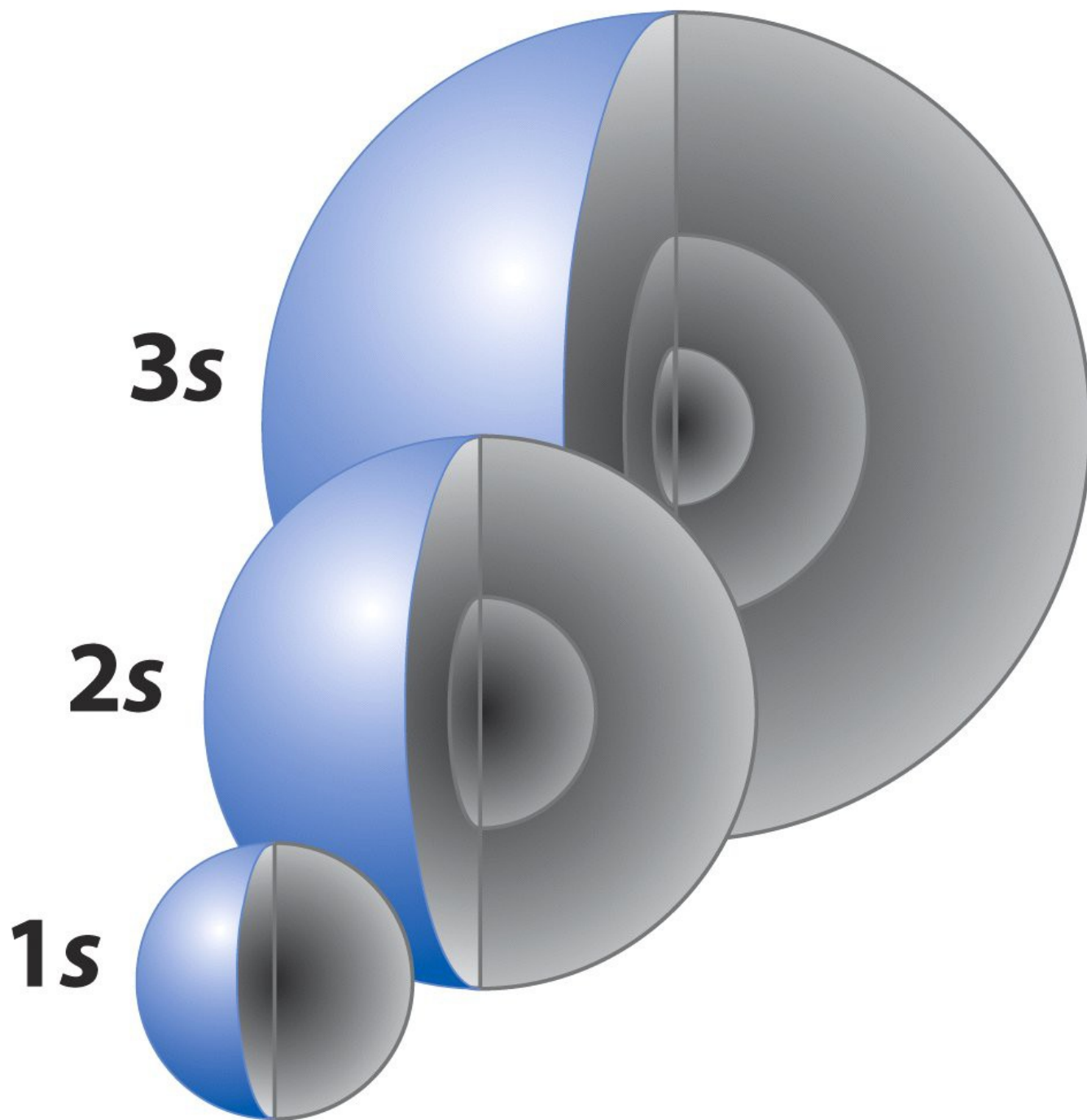






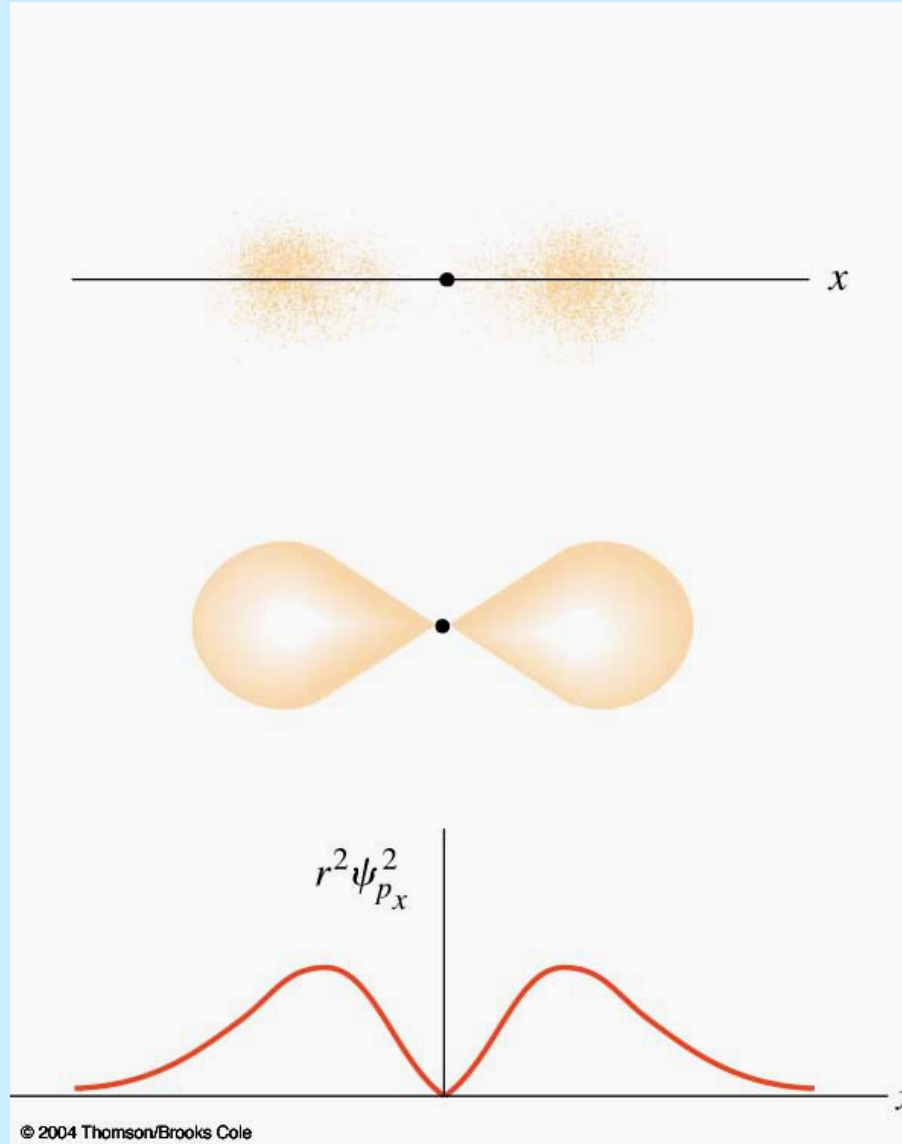
Πυκνότητα πιθανότητας για να βρούμε ένα ηλεκτρόνιο σε μια δοσμένη ακτίνα

1s, 2s, και 3s τροχιακά για το υδρογόνο



Τρισδιάστατες  
παραστάσεις  
της ηλεκτρονιακής  
κατανομής

- Τα p τροχιακά έχουν ατρακτοειδές σχήμα (μοιάζουν με φυστίκι ή βαράκια).

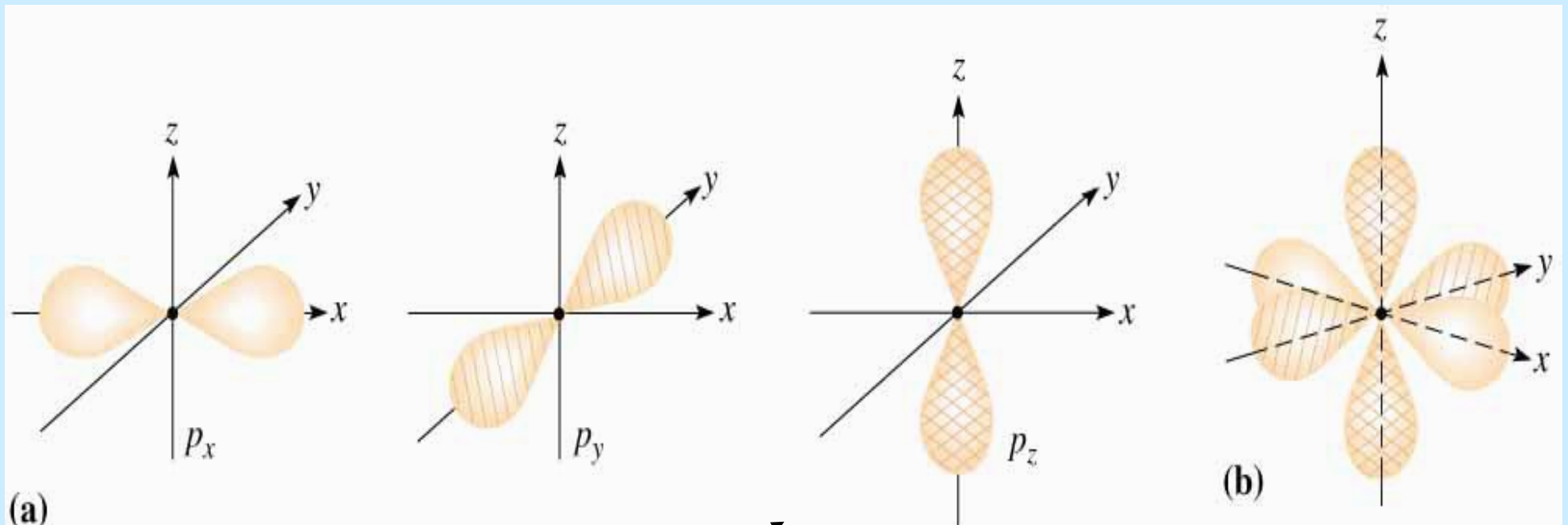


$$l = 1$$

- **Θυμηθείτε:** τροχιακό είναι ο χώρος όπου η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο είναι αυξημένη (δεν έχει πραγματική υπόσταση αλλά θεωρητική).

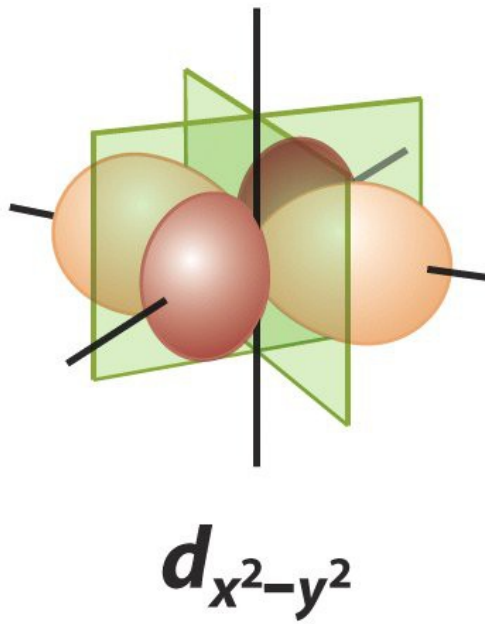
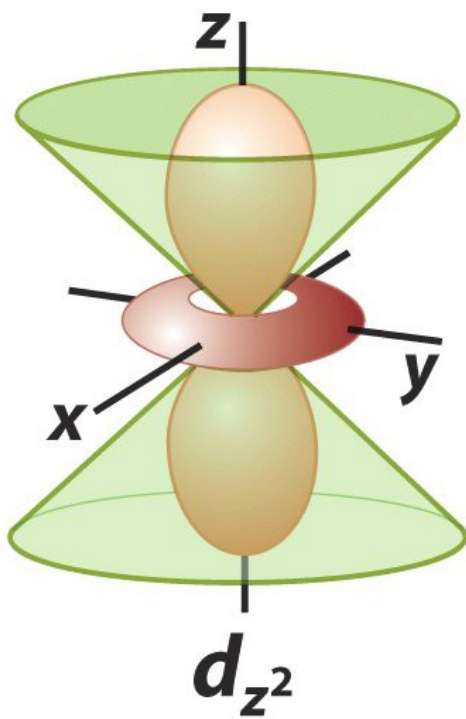
- α) Τα  $p$  τροχιακά όπως διευθετούνται στους τρεις άξονες.
- β) και τα τρία τροχιακά στο ίδιο σχήμα

$$l = 1$$



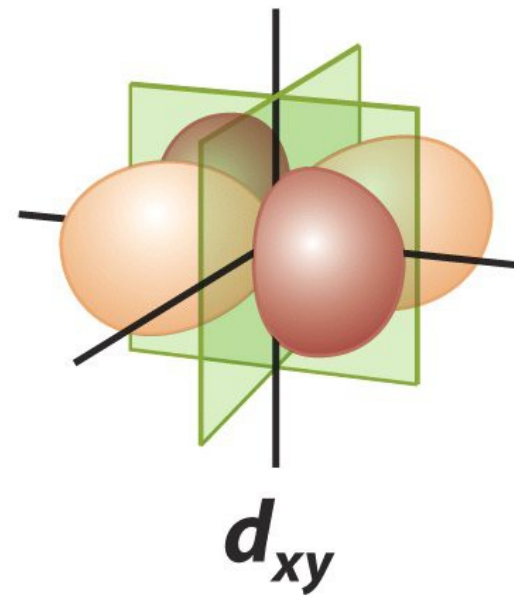
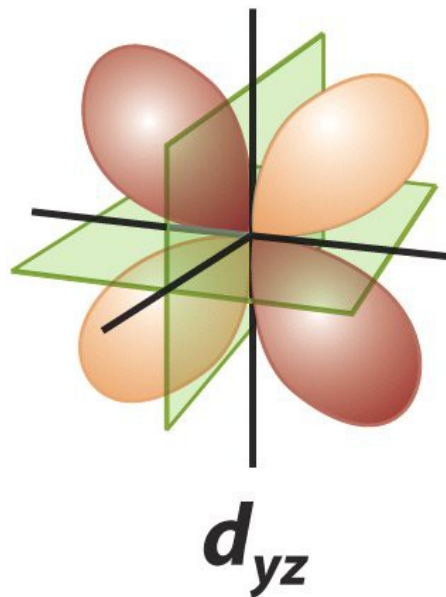
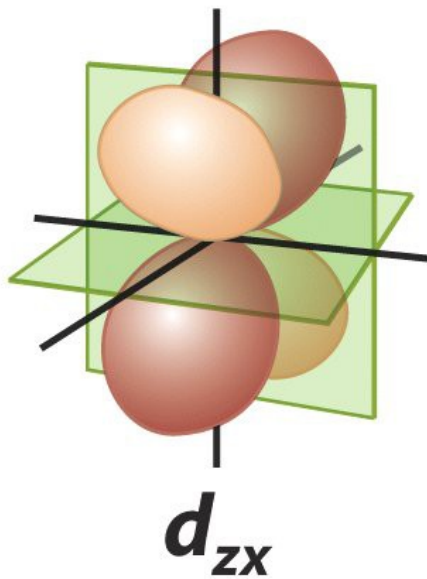
$$m_\ell = -1, 0, +1$$

# Τα d τροχιακά



$$l = 2$$

$$m_l = -2, -1, 0, +1, +2$$

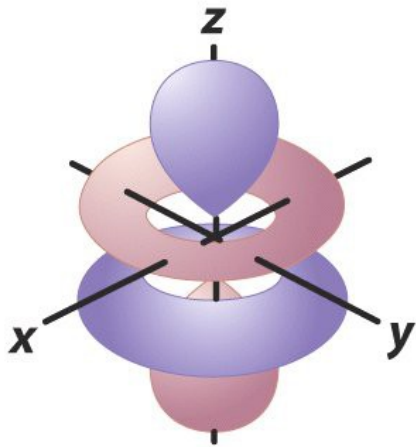


# Τα f τροχιακά

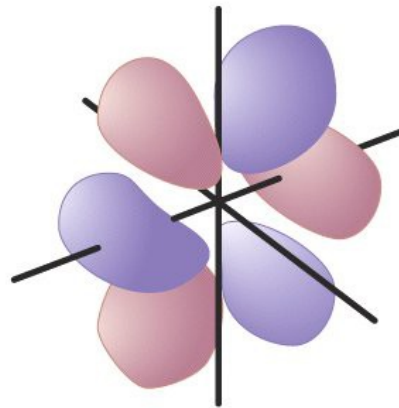
$$l = 3$$

$$m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$$

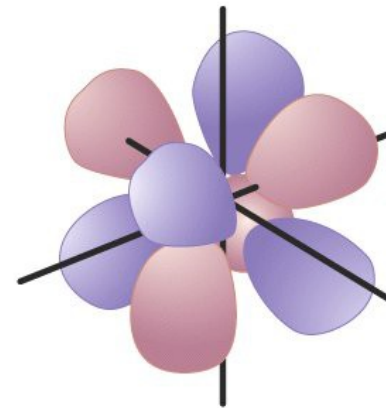
7 τιμές



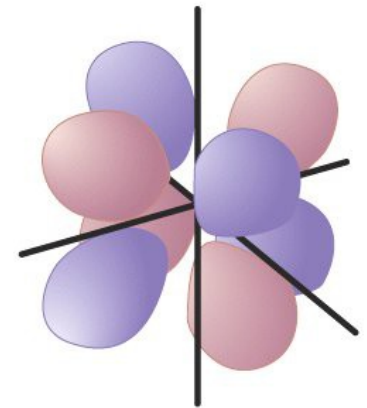
$$5z^3 - 3zr^2$$



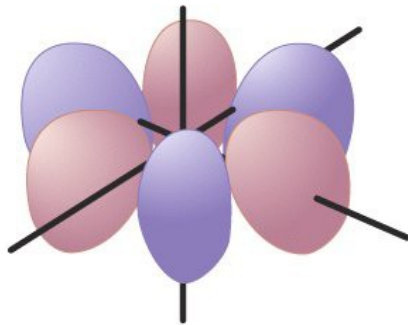
$$5xz^2 - xr^2$$



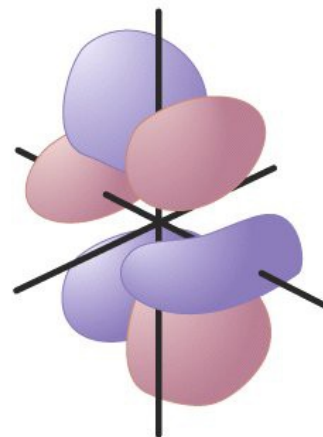
$$zx^2 - zy^2$$



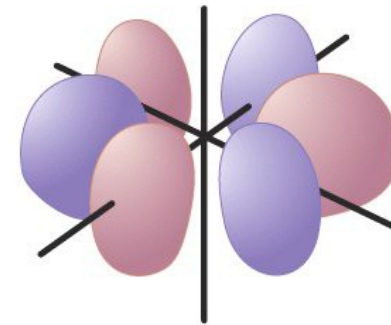
$$xyz$$



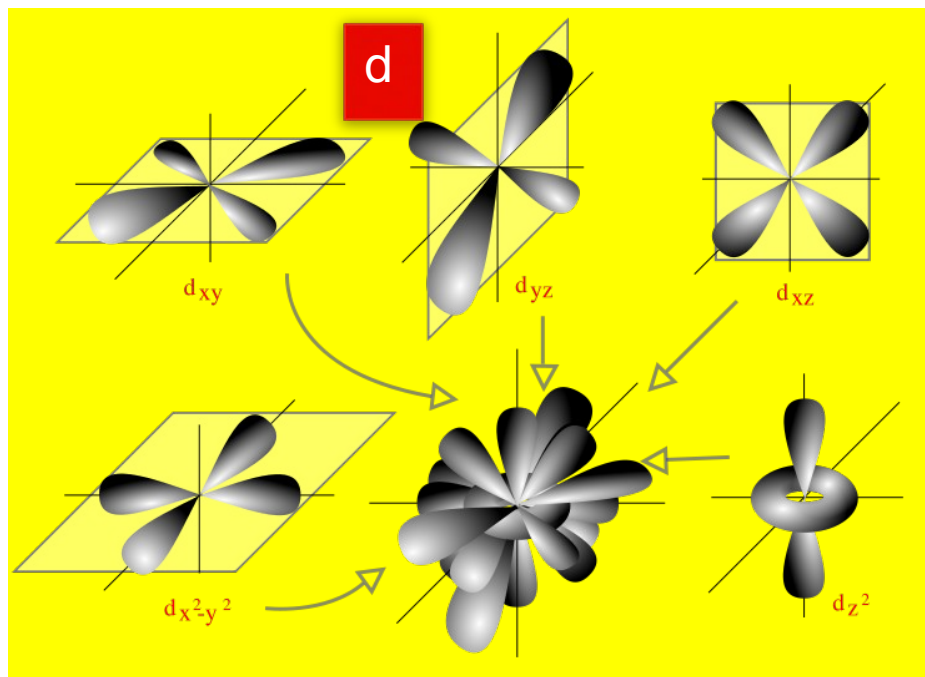
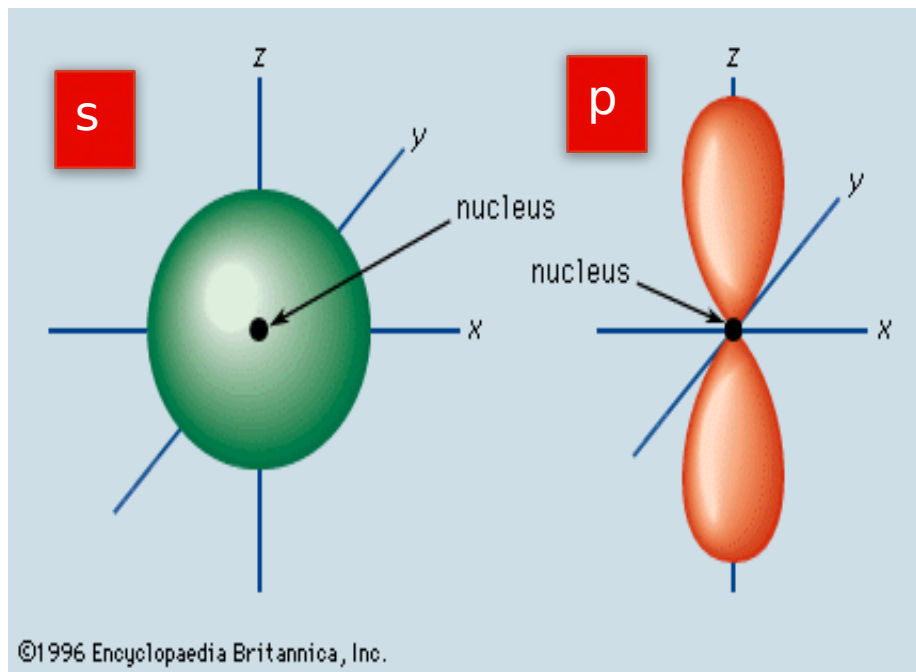
$$y^3 - 3yx^2$$



$$5yz^2 - yr^2$$



$$x^3 - 3xy^2$$



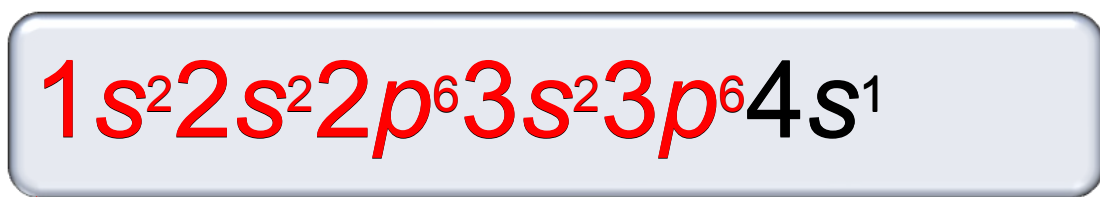
## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Η ηλεκτρονιακή διευθέτηση όλων των στοιχείων εκτός από το υδρογόνο και το ήλιο μπορεί να παρασταθεί με τη χρήση *ευγενούς αερίου*.

Η ηλεκτρονιακή διευθέτηση του καλίου ( $Z = 19$ ) είναι  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ .

Επειδή  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$  είναι η ηλεκτρονιακή διευθέτηση του στοιχείου αργόν, μπορούμε να απλοποιήσουμε αυτή του καλίου σε  $[Ar]4s^1$ .

Η θεμελιώδης ηλεκτρονιακή διευθέτηση στο Κ:





## Ηλεκτρονιακή διεύθετηση και διαγράμματα τροχιακών Για τα στοιχεία 1-10

Στοιχείο	Ατομικός αριθμός	Πλήρης ηλεκτρονιακή διεύθετηση	Ηλεκτρονιακή διεύθετηση με χρήση ευγενούς αερίου
Υδρογόνο	1	$1s^1$	$1s^1$
Ήλιο	2	$1s^2$	$1s^2$ ή [He]
Λίθιο	3	$1s^2 2s^1$	[He] $2s^1$
Βυρήλιο	4	$1s^2 2s^2$	[He] $2s^2$
Βόριο	5	$1s^2 2s^2 2p^1$	[He] $2s^2 2p^1$
Άνθρακας	6	$1s^2 2s^2 2p^2$	[He] $2s^2 2p^2$
Άζωτο	7	$1s^2 2s^2 2p^3$	[He] $2s^2 2p^3$
οξυγόνο	8	$1s^2 2s^2 2p^4$	[He] $2s^2 2p^4$
Φθόριο	9	$1s^2 2s^2 2p^5$	[He] $2s^2 2p^5$
Νέον	10	$1s^2 2s^2 2p^6$	[He] $2s^2 2p^6$ ή [Ne]

- 2<sup>ης</sup> σειράς στοιχεία

	<u>1s</u>	<u>2s</u>	<u>2p</u>	Διευθέτηση
<sub>3</sub> Li	<u>↑↓</u>	<u>↑</u>	___	$1s^2 2s^1$
<sub>4</sub> Be	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	___	$1s^2 2s^2$
<sub>5</sub> B	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑</u> ___	$1s^2 2s^2 2p^1$
<sub>6</sub> C	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑</u> <u>↑</u> ___	$1s^2 2s^2 2p^2$
<sub>7</sub> N	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑</u> <u>↑</u> <u>↑</u>	$1s^2 2s^2 2p^3$
<sub>8</sub> O	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u> <u>↑</u> <u>↑</u>	$1s^2 2s^2 2p^4$
<sub>9</sub> F	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑</u>	$1s^2 2s^2 2p^5$
<sub>10</sub> Ne	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u>	$1s^2 2s^2 2p^6$

Ηλεκτρονιακή διεύθετηση  
Και διαγράμματα τροχιακών  
Για τα στοιχεία 11-18

Στοιχείο	Ατομικός αριθμός	Πλήρης ηλεκτρονιακή διεύθετηση	Ηλεκτρονιακή διεύθετηση με χρήση ευγενούς αερίου
Νάτριο	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	$[\text{Ne}]3s^1$
Μαγνήσιο	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	$[\text{Ne}]3s^2$
Αργύλιο	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^1$
Πυρίτιο	14	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^2$
Φωσφόρος	15	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^3$
Θείο	16	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^4$
Χλώριο	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^5$
Αργόν	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^6$ ή $[\text{Ar}]$

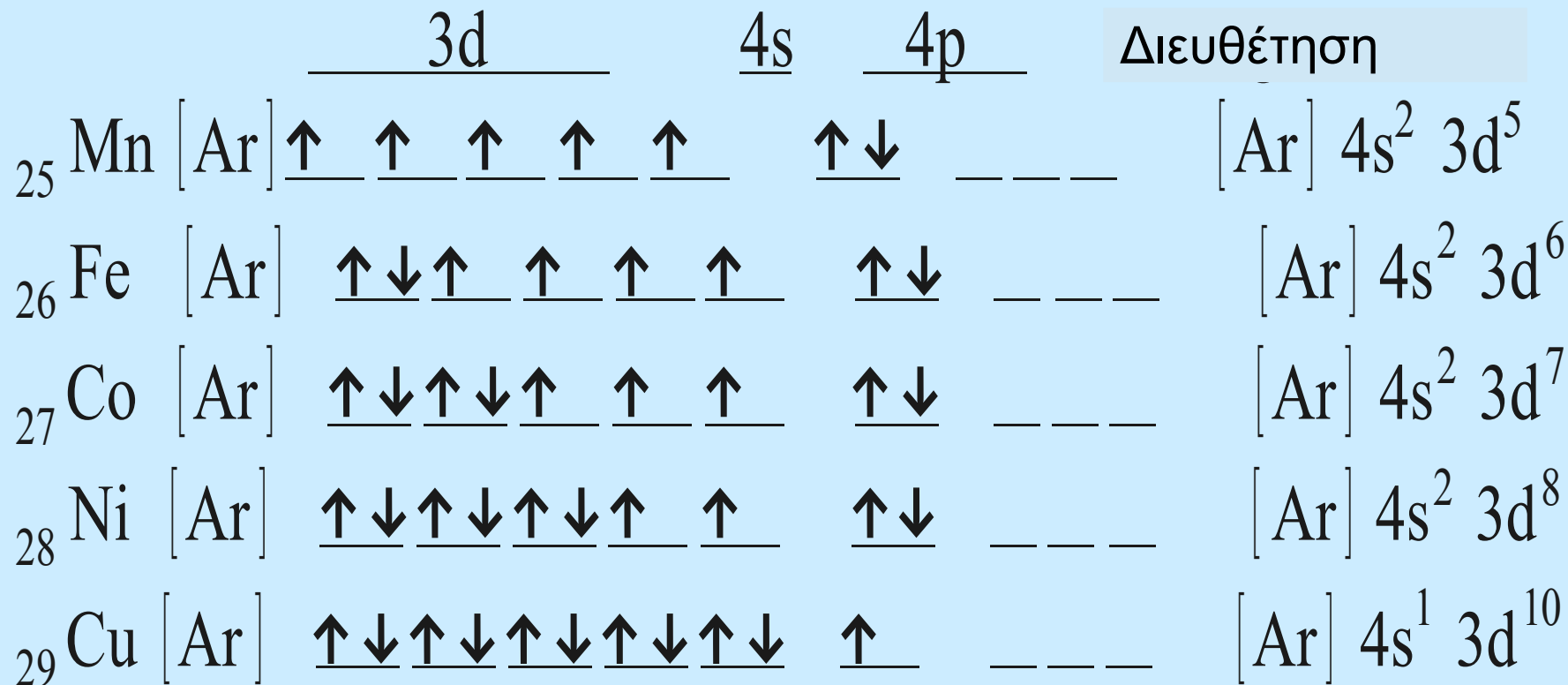
- 3<sup>η</sup> σειρά στοιχεία

		<u>3s</u>	<u>3p</u>	Διευθέτηση	
<sub>11</sub> Na	[Ne]	<u>↑</u>	— — —		[Ne]3s <sup>1</sup>
<sub>12</sub> Mg	[Ne]	<u>↑↓</u>	— — —		[Ne]3s <sup>2</sup>
<sub>13</sub> Al	[Ne]	<u>↑↓</u>	<u>↑</u> — —		[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>
<sub>14</sub> Si	[Ne]	<u>↑↓</u>	<u>↑</u> <u>↑</u> —		[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>
<sub>15</sub> P	[Ne]	<u>↑↓</u>	<u>↑</u> <u>↑</u> <u>↑</u>		[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>
<sub>16</sub> S	[Ne]	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u> <u>↑</u> <u>↑</u>		[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>
<sub>17</sub> Cl	[Ne]	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑</u>		[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>
<sub>18</sub> Ar	[Ne]	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u>		[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>

# Τέταρτης σειράς

	3d	4s	4p	Διευθέτηση
$_{19}\text{K}$ [Ar]	_____	↑	_____	[Ar] 4s <sup>1</sup>
$_{20}\text{Ca}$ [Ar]	_____	↑↓	_____	[Ar] 4s <sup>2</sup>
$_{21}\text{Sc}$ [Ar]	↑ _____	↑↓	_____	[Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>1</sup>
$_{22}\text{Ti}$ [Ar]	↑ ↑ _____	↑↓	_____	[Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>2</sup>
$_{23}\text{V}$ [Ar]	↑ ↑ ↑ _____	↑↓	_____	[Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>3</sup>
$_{24}\text{Cr}$ [Ar]	↑ ↑ ↑ ↑ ↑	↑	_____	[Ar] 4s <sup>1</sup> 3d <sup>5</sup>

# Τέταρτης σειράς



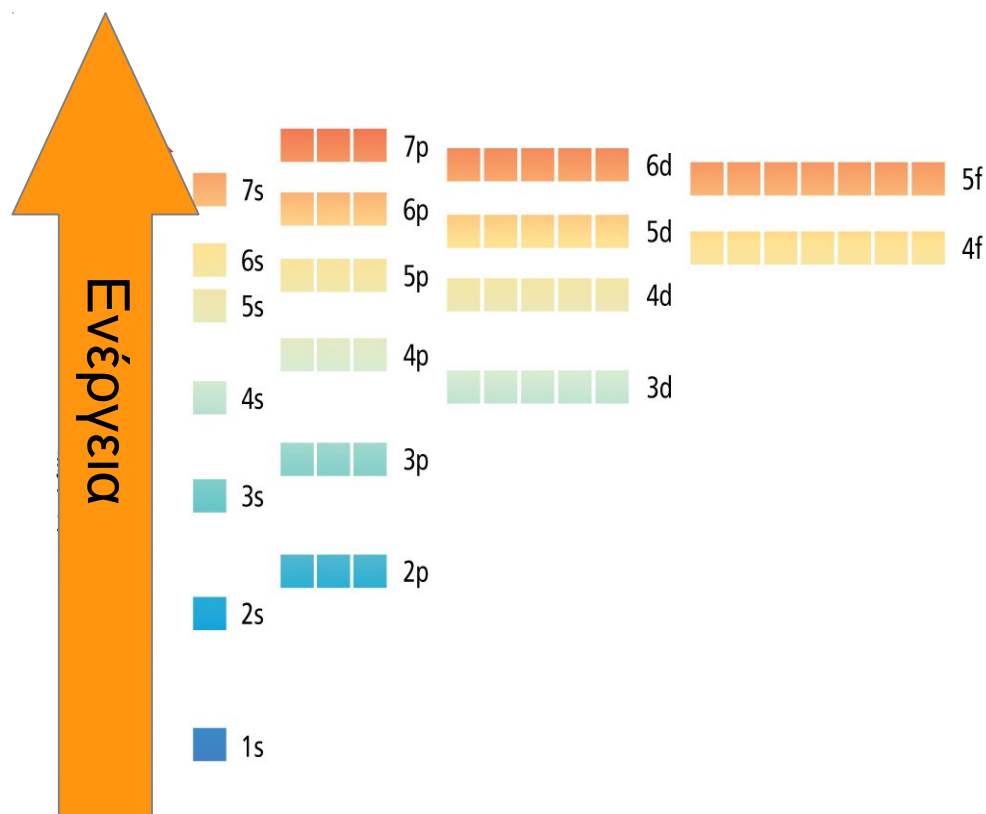
# Τέταρτης σειράς

		<u>3d</u>	<u>4s</u>	<u>4p</u>	Διευθέτηση
31 Ga	[Ar]	<u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	↑ _ _	[Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>1</sup>
32 Ge	[Ar]	<u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	↑↑ _	[Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>2</sup>
33 As	[Ar]	<u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	↑↑↑	[Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>3</sup>
34 Se	[Ar]	<u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	↑↓↑↑	[Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>4</sup>
35 Br	[Ar]	<u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	↑↓↑↓↑	[Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>5</sup>
36 Kr	[Ar]	<u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u> <u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	↑↓↑↓↑↓	[Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>6</sup>

## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Η διευθέτηση των ηλεκτρονίων στο άτομο ονομάζεται ηλεκτρονιακή δόμηση.

Η αρχή της ελαχίστης ενέργειας ( aufbau) καθορίζει ότι κάθε ηλεκτρόνιο καταλαμβάνει το τροχιακό της χαμηλότερης ενέργειας που διατίθεται.

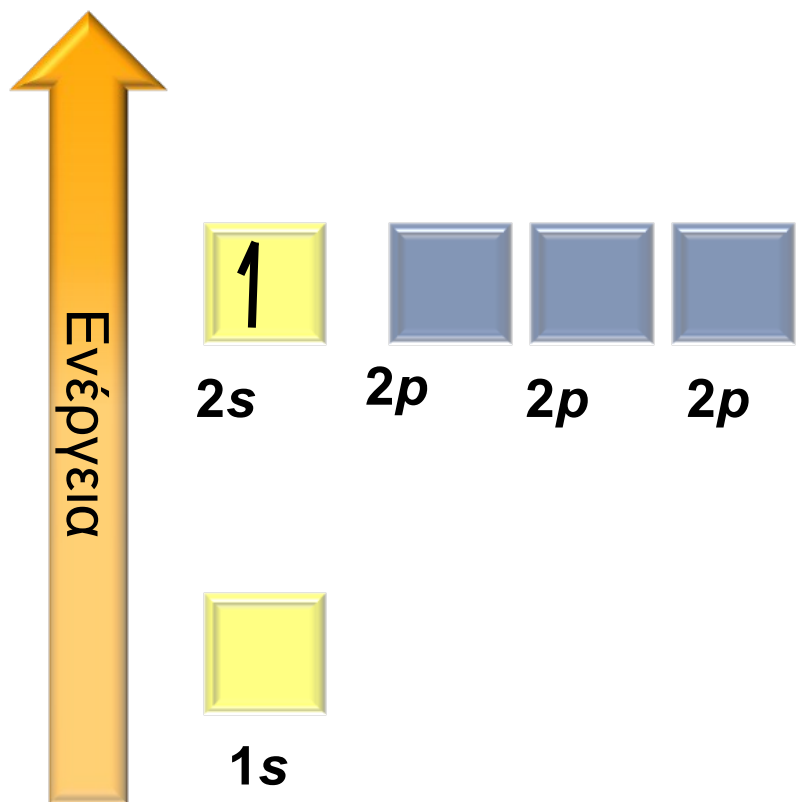




## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Εάν το ηλεκτρόνιο του υδρογόνου βρεθεί σε τροχιακό μεγαλύτερης ενέργειας, το άτομο βρίσκεται σε *διεγερμένη κατάσταση*.

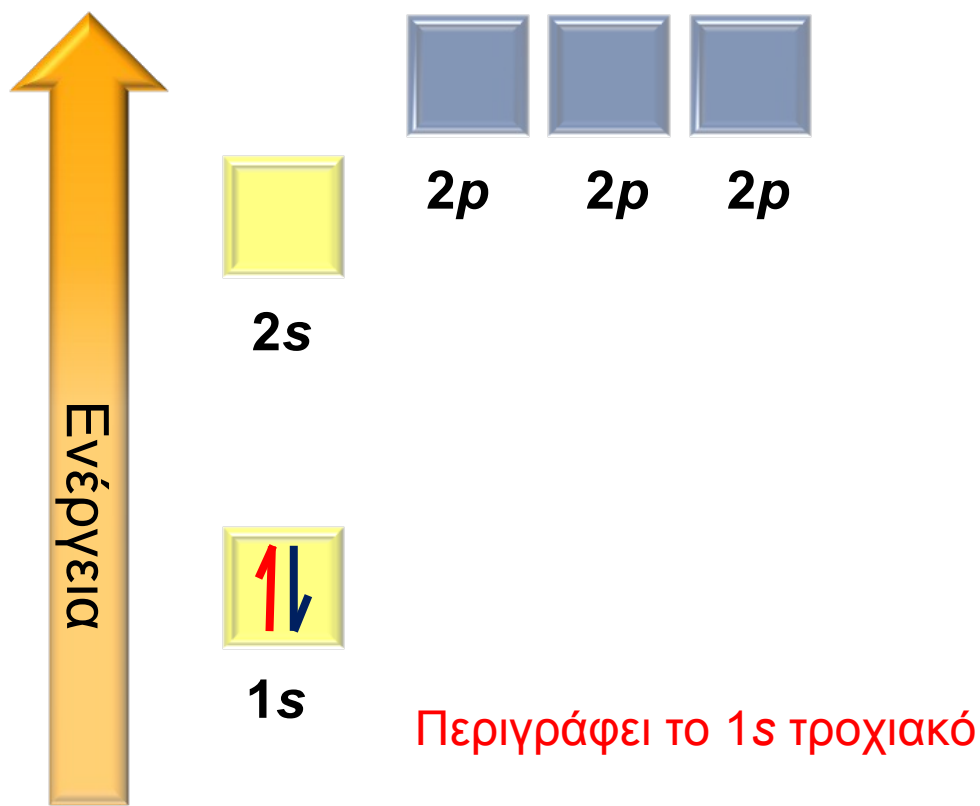
Μια δυνατή διεγερμένη κατάσταση του ηλεκτρονίου του υδρογόνου



## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του *Pauli*, δεν είναι δυνατόν δυο ηλεκτρόνια σε ένα άτομο να έχουν ίδιους και τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς.

Η θεμελιώδης κατάσταση ηλεκτρονίων στο ήλιο



Περιγράφει τα ηλεκτρόνια στο 1s τροχιακό

Κβαντικός αριθμός		
Κύριος ( $n$ )	1	1
Αζιμουθιακός ( $l$ )	0	0
Μαγνητικός ( $m_l$ )	0	0
spin ( $m_s$ )	+ 1/2	- 1/2

## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Η αρχή της ελαχίστης ενέργειας ( *Aufbau* ) καθορίζει ότι κάθε ηλεκτρόνιο καταλαμβάνει το τροχιακό της χαμηλότερης ενέργειας που διατίθεται.

Li έχει συνολικά 3  
ηλεκτρόνια



Το τρίτο ηλεκτρόνιο πρέπει να τοποθετηθεί στο επόμενο διαθέσιμο τροχιακό με την μικρότερη ενέργεια

Το 1s τροχιακό χωρά 2 ηλεκτρόνια (απαγορευτική αρχή *Pauli* )

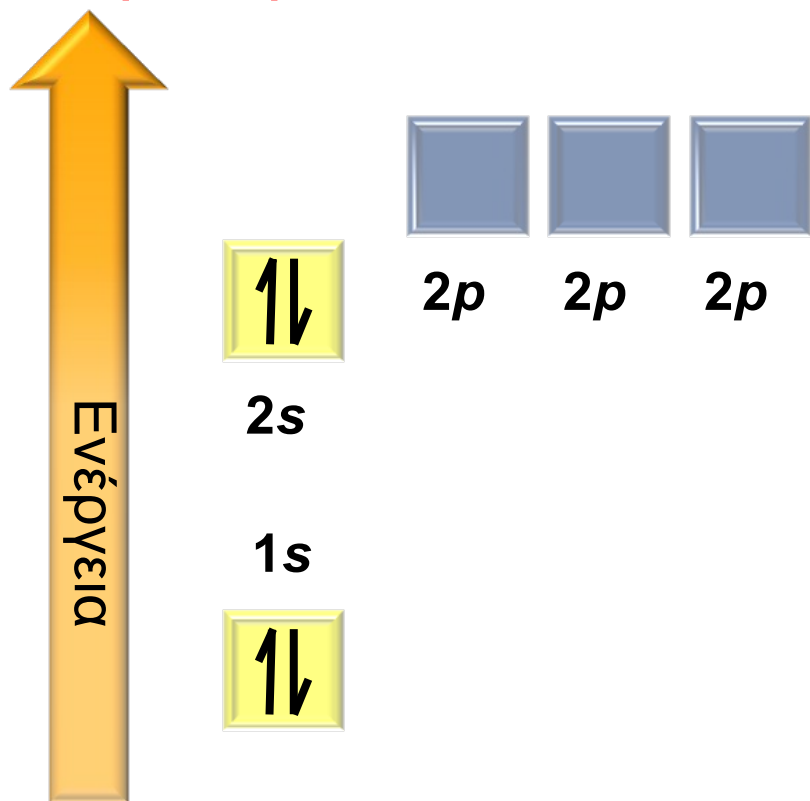
Η θεμελιώδης κατάσταση ηλεκτρονίων στο Li



## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Η αρχή της ελαχίστης ενέργειας (*Aufbau*) καθορίζει ότι κάθε ηλεκτρόνιο καταλαμβάνει το τροχιακό της χαμηλότερης ενέργειας που διατίθεται.

Be έχει συνολικά 4 ηλεκτρόνια

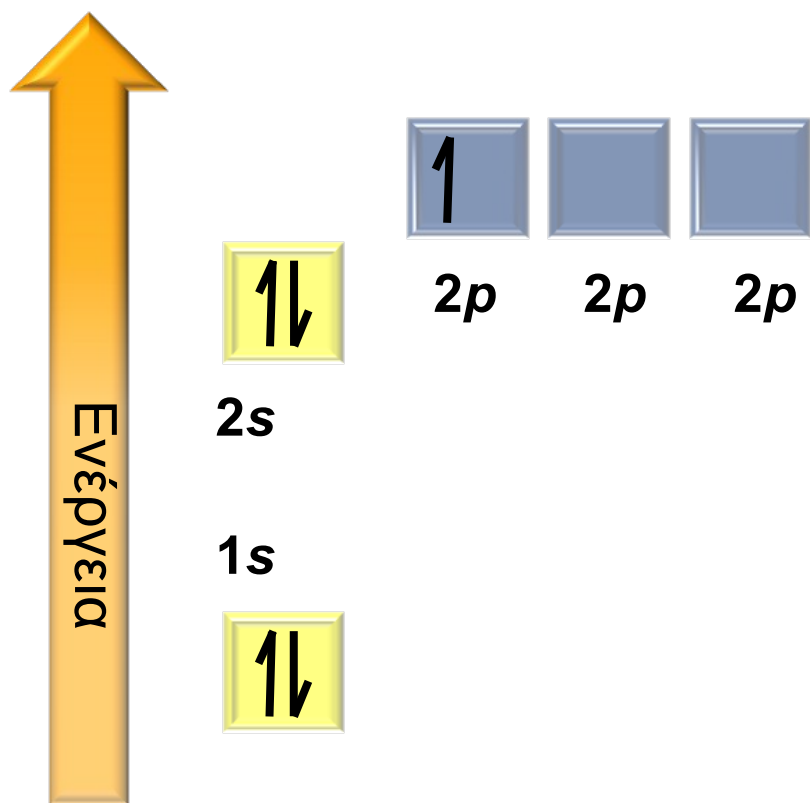


Η θεμελιώδης κατάσταση διευθέτησης ηλεκτρονίων στο Be

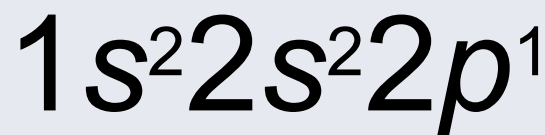


## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Η αρχή της ελαχίστης ενέργειας (*Aufbau*) καθορίζει ότι κάθε ηλεκτρόνιο καταλαμβάνει το τροχιακό της χαμηλότερης ενέργειας που διατίθεται.



Η θεμελιώδης κατάσταση  
διευθέτησης ηλεκτρονίων στο B

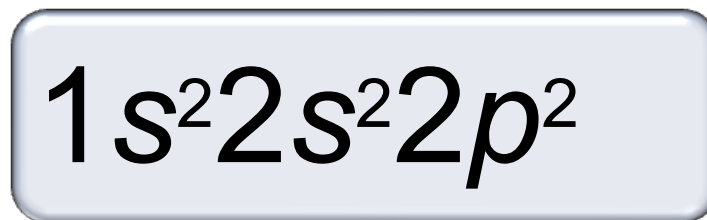


## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Σύμφωνα με τον *κανόνα του Hund*, η πιο σταθερή διευθέτηση των ηλεκτρονίων είναι αυτή στην οποία ο αριθμός των ηλεκτρονίων με το ίδιο spin είναι μέγιστος.

C έχει συνολικά 6 ηλεκτρόνια

Η θεμελιώδης κατάσταση διευθέτησης ηλεκτρονίων στον C



Τα 2p τροχιακά έχουν ίσες ενέργειες. Τοποθετούμε 1 σε κάθε τροχιακό και αφού τοποθετηθούν σε όλα τα τροχιακά, στη συνέχεια δημιουργούμε ζεύγη ηλεκτρονίων (κανόνας *Hund*).

## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Σύμφωνα με τον *κανόνα του Hund*, η πιο σταθερή διευθέτηση των ηλεκτρονίων είναι αυτή στην οποία ο αριθμός των ηλεκτρονίων με το ίδιο spin είναι μέγιστος.

**N έχει συνολικά 7 ηλεκτρόνια**

Η θεμελιώδης κατάσταση διευθέτησης ηλεκτρονίων στο N



Τα 2p τροχιακά έχουν ίσες ενέργειες. Τοποθετούμε 1 σε κάθε τροχιακό και αφού τοποθετηθούν σε όλα τα τροχιακά, στη συνέχεια δημιουργούμε ζεύγη ηλεκτρονίων (κανόνας *Hund*).

## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Σύμφωνα με τον *κανόνα του Hund*, η πιο σταθερή διευθέτηση των ηλεκτρονίων είναι αυτή στην οποία ο αριθμός των ηλεκτρονίων με το ίδιο spin είναι μέγιστος.

Ο έχει συνολικά 8 ηλεκτρόνια

Η θεμελιώδης κατάσταση διευθέτησης ηλεκτρονίων στο O



Μιας και όλα τα 2p τροχιακά έχουν από ένα ηλεκτρόνιο, το επιπλέον ηλεκτρόνιο θα κάνει ζεύγος με ένα που υπάρχει στο τροχιακό.



## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Σύμφωνα με τον *κανόνα του Hund*, η πιο σταθερή διευθέτηση των ηλεκτρονίων είναι αυτή στην οποία ο αριθμός των ηλεκτρονίων με το ίδιο spin είναι μέγιστος.

**F έχει συνολικά 9 ηλεκτρόνια**

Η θεμελιώδης κατάσταση διευθέτησης ηλεκτρονίων στο F



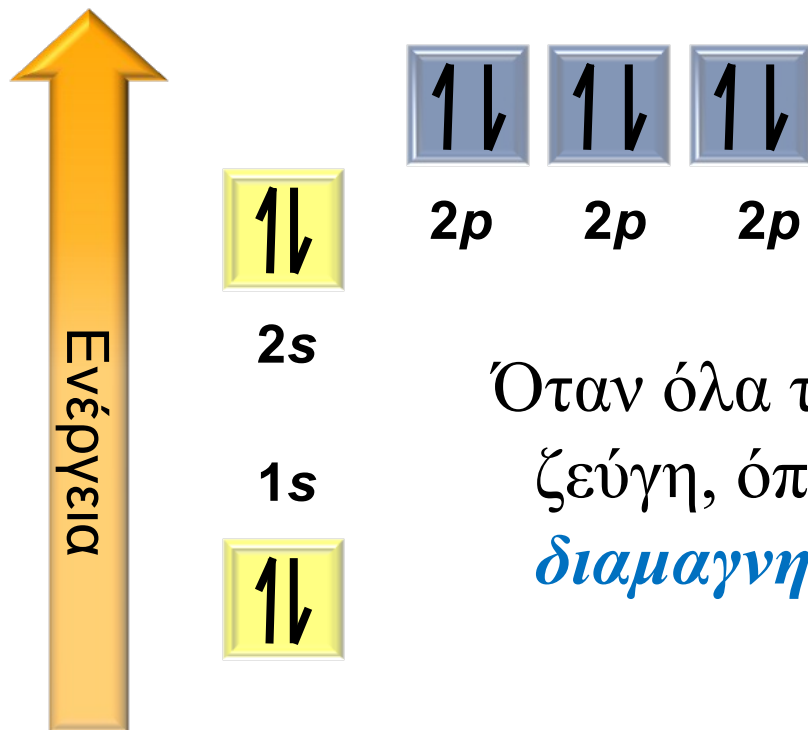
Όταν υπάρχουν ένα ή περισσότερα μη ζευγαρομένα ηλεκτρόνια, όπως στο οξυγόνο και στο φθόριο, το άτομο ονομάζεται *παραμαγνητικό*.

## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Σύμφωνα με τον *κανόνα του Hund*, η πιο σταθερή διευθέτηση των ηλεκτρονίων είναι αυτή στην οποία ο αριθμός των ηλεκτρονίων με το ίδιο spin είναι μέγιστος.

Ne έχει συνολικά 10 ηλεκτρόνια

Η θεμελιώδης κατάσταση διευθέτησης ηλεκτρονίων στο Ne

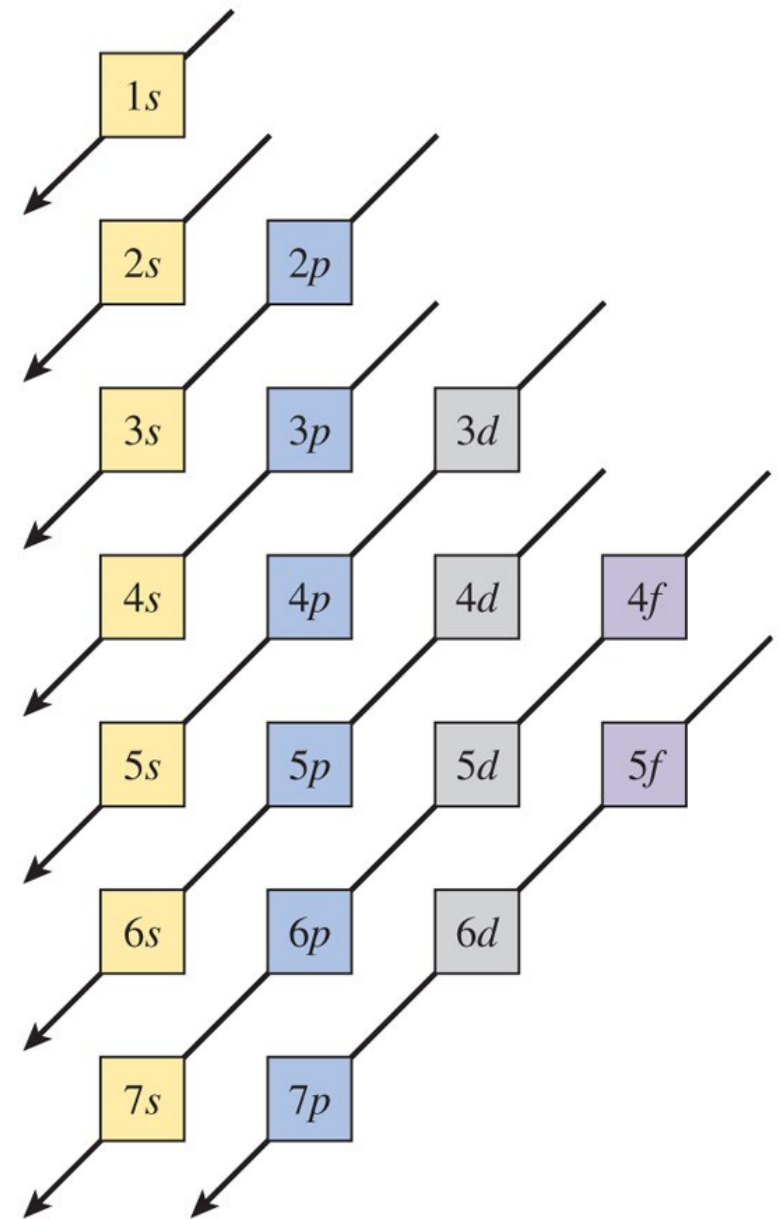


Όταν όλα τα ηλεκτρόνια του ατόμου είναι σε ζεύγη, όπως στο νέον, αυτό ονομάζεται *διαμαγνητικό*.

## Διευθέτηση ηλεκτρονίων

Γενικά για να γράψουμε την ηλεκτρονιακή διευθέτηση:

- 1) Τα ηλεκτρόνια τοποθετούνται στα διατιθέμενα τροχιακά της χαμηλότερης ενέργειας.
- 2) Κάθε τροχιακό μπορεί να υποδεχθεί το πολύ δυο ηλεκτρόνια.
- 3) Τα ηλεκτρόνια δεν δημιουργούν ζεύγη στα τροχιακά εάν διατίθεται και άλλο ισοενεργειακό τροχιακό.
- 4) Τα τροχιακά συμπληρώνονται σύμφωνα με την διπλανή σειρά.

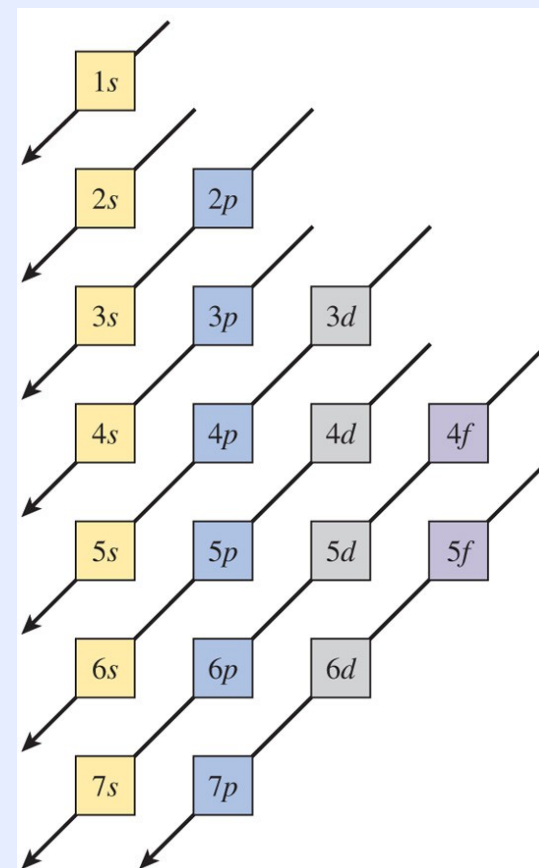
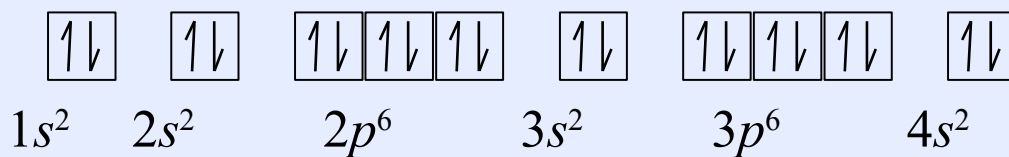
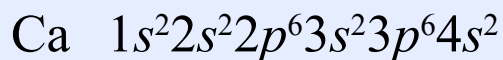


## Παράδειγμα

Γράψτε τη διευθέτηση των ηλεκτρονίων και δώστε το διάγραμμα των τροχιακών στο άτομο του ασβεστίου (Ca) ( $Z = 20$ ).

**Από τη θεωρία** Επειδή  $Z = 20$ , το Ca έχει 20 ηλεκτρόνια. Θα συμπληρωθούν τα τροχιακά σύμφωνα με το διπλανό σχέδιο. Κάθε  $s$  υποστιβάδα μπορεί να περιέχει το πολύ δυο ηλεκτρόνια, ενώ κάθε  $p$  υποστιβάδα μπορεί να περιέχει το πολύ έξη ηλεκτρόνια.

### Λύση



**Προσέξτε** Κοιτάξτε πάλι το διπλανό σχέδιο για να είστε σίγουροι ότι συμπληρώσατε σωστά τα τροχιακά και ότι τα συνολικά ηλεκτρόνια είναι 20. Θυμηθείτε ότι τα  $4s$  τροχιακά συμπληρώνονται πριν από τα  $3d$  τροχιακά.

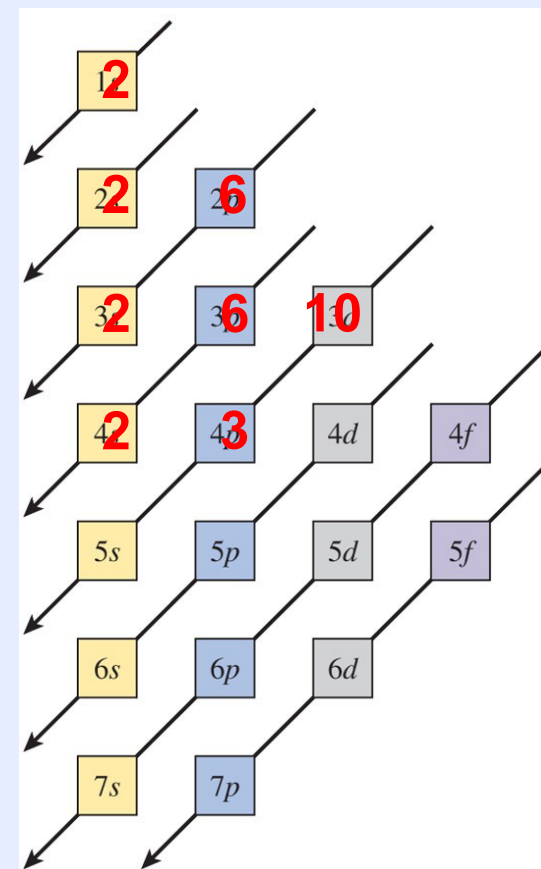
## Παράδειγμα

Γράψτε τη διευθέτηση των ηλεκτρονίων στο άτομο αρσενικού ( $Z = 33$ ) στη θεμελιώδη κατάσταση.

**Από τη θεωρία** Το προηγούμενο ευγενές αέριο πριν το As είναι το [Ar], όπου  $Z = 18$  για το Ar.

Η σειρά συμπλήρωσης μετά το ευγενές αέριο είναι  $4s$ ,  $3d$ , και  $4p$ . Δεκαπέντε ηλεκτρόνια πρόκειται να τοποθετηθούν σε αυτές τις υποστιβάδες επειδή  $33 - 18 = 15$  είναι στο As επιπλέον από το ευγενές αέριο.

### Λύση



**Προσέξτε** το αρσενικό είναι στοιχείο του  $p$ -τομέα, γιαυτό, περιμένουμε τα εξωτερικά ηλεκτρόνια να είναι στην  $p$  υποστιβάδα.

# Εξωτερικά ηλεκτρόνια και περιοδικός Πίνακας

1s				1s
2s				2p
3s				3p
4s			3d	4p
5s			4d	5p
6s	4f		5d	6p
7s	5f		6d	7p

# Στον ΠΕΡΙΟΔΙΚΟ ΠΙΝΑΚΑ τα εξωτερικά ηλεκτρόνια των στοιχείων ανήκουν στα σημειούμενα τροχιακά

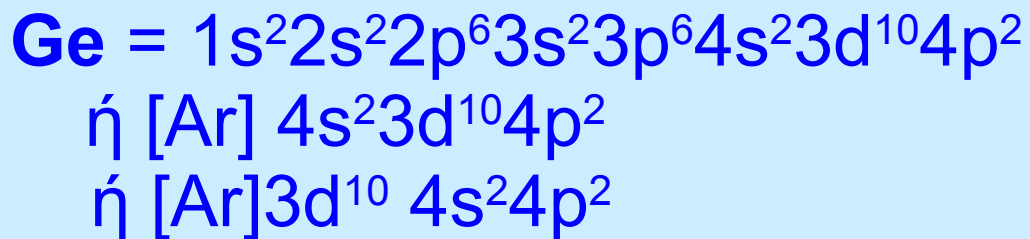
Ομάδα

	1A												8A	
1	1s	2A											1s	1
2	2s												2p	2
3	3s												3p	3
4	4s					3d							4p	4
5	5s					4d				Cd			5p	5
6	6s	La	Hf			5d							6p	6
7	7s	Ra	Ac			6d							7p	

							4f						
							5f						

Group

	1A																		8A
	1s	2A																	1s
1																			
2	2s																		
3	3s																		
4	4s					3d													
5	5s					4d													
6	6s	La	Hf			5d													
7	7s	Ra	Ac			6d													





# Χημικές ιδιότητες → ηλεκτρόνια σθένους

	<u>1s</u>	<u>2s</u>	<u>2p</u>	<u>Διευθέτηση</u>
<sub>3</sub> Li	<u>↑↓</u>	<u>↑</u>	— — —	$1s^2 2s^1$
<sub>4</sub> Be	<u>↑↓</u>	<u>↑ ↓</u>	— — —	$1s^2 2s^2$
<sub>5</sub> B	<u>↑↓</u>	<u>↑ ↓</u>	<u>↑</u> — —	$1s^2 2s^2 2p^1$
<sub>6</sub> C	<u>↑↓</u>	<u>↑ ↓</u>	<u>↑</u> <u>↑</u> —	$1s^2 2s^2 2p^2$
<sub>7</sub> N	<u>↑↓</u>	<u>↑ ↓</u>	<u>↑</u> <u>↑</u> <u>↑</u>	$1s^2 2s^2 2p^3$
<sub>8</sub> O	<u>↑↓</u>	<u>↑ ↓</u>	<u>↑↓</u> <u>↑</u> <u>↑</u>	$1s^2 2s^2 2p^4$