1.2 Αρχές δόμησης πολυηλεκτρονικών ατόμων

1. Ερώτηση: Τι είναι η ηλεκτρονική δόμηση ή ηλεκτρονική κατανομή;

Η συμπλήρωση των τροχιακών με ηλεκτρόνια, λέγεται ηλεκτρονική δόμηση ή ηλεκτρονική κατανομή. Στο άτομο του υδρογόνου, το μοναδικό ηλεκτρόνιο τοποθετείται στο τροχιακό 1s. Στην περίπτωση αυτή λέμε πως το άτομο βρίσκεται **στη θεμελιώδη του κατάσταση**. Η τοποθέτηση του σε οποιαδήποτε άλλο τροχιακό είναι δυνατή μετά **από διέγερση του ατόμου**.

ⓘ Στα πολυηλεκτρονικά άτομα προφανώς τα πράγματα είναι πιο πολύπλοκα.

2. Ερώτηση Ποια είναι η σημασία της γνώσης της ηλεκτρονικής κατανομής των ατόμων;

ⓘ Η ηλεκτρονική δόμηση έχει θεμελιώδη σημασία, γιατί **με βάση αυτή διαμορφώνεται η ηλεκτρονική δομή των ατόμων και κατ' επέκταση η χημική συμπεριφορά τους.**

3. Ερώτηση: Με βάση ποιες τρεις αρχές γίνεται η ηλεκτρονική κατανομή στα άτομα;

Η αρχή ηλεκτρονικής δόμησης (aufbau) περιλαμβάνει :

1. την απαγορευτική αρχή του Pauli,

2. την αρχή ελάχιστης ενέργειας και

3. τον κανόνα του Hund

4. Ερώτηση: Τι γνωρίζεται για την απαγορευτική αρχή του Pauli;

Σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli είναι αδύνατο να υπάρχουν στο ίδιο άτομο δύο ηλεκτρόνια με ίδια τετράδα κβαντικών αριθμών (n, l, m_l, m_s). Συνεπώς, <u>δεν μπορεί ένα τροχιακό να χωρέσει πάνω από δύο ηλεκτρόνια</u>

ⓘ Το καθένα ατομικό τροχιακό μπορεί να έχει: **κανένα, ένα ή δύο ηλεκτρόνια.**

ⓘ Τα ηλεκτρόνια των γνωστών μέχρι σήμερα στοιχείων κατανέμονται στις υποστιβάδες **s, p, d, f.** Για καθεμιά από αυτές ο αριθμός των ατομικών τροχιακών και ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων που χωρούν είναι:

Υποστιβάδα	*s*	*p*	*d*	*f*
Αριθμός ατομικών τροχιακών	1	3	5	7
Μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων	2	6	10	14

Παναγιώτης Αθανασόπουλος
Χημικός – Διδάκτωρ Πανεπιστημίου Πατρών

ⓘ .Να παρατηρήσουμε ότι δεν υπάρχουν ηλεκτρόνια σε υποστιβάδες 5*g* ή 6*f* κλπ **σε μη διεγερμένα άτομα.**

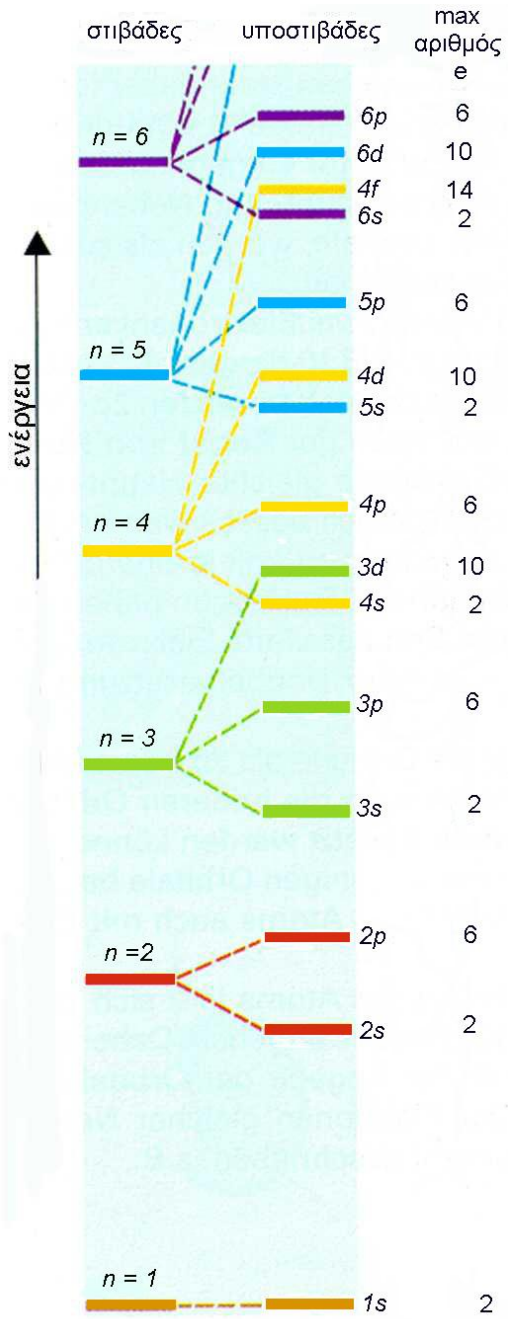
5. Ερώτηση: Τι γνωρίζετε για την αρχή ελάχιστης ενέργειας;

Σύμφωνα με την αρχή της ελάχιστης ενέργειας, κατά την ηλεκτρονική δόμηση ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου, τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τα τροχιακά με τη μικρότερη ενέργεια, ώστε να αποκτήσουν τη μεγίστη σταθερότητα στη θεμελιώδη κατάσταση.

Παρατηρήσεις!!

1. Αν και οι εξισώσεις Schrödinger μπορούν να επιλυθούν ακριβώς μόνο στην περίπτωση του υδρογόνου και των υδρογονοειδών (ιόντων με ένα μόνο ηλεκτρόνιο π.χ. He^{+}, Li^{2+} κλπ.), έχει αποδειχτεί ότι **η μορφή των τροχιακών στα πολυηλεκτρονικά άτομα δε διαφέρει αισθητά απ' αυτήν που περιγράφηκε για το άτομο του υδρογόνου.**

2. Στα πολυηλεκτρονικά άτομα υπάρχει διαφορά στη διαδοχή των ενεργειακών σταθμών του ηλεκτρονίου. Αυτό συμβαίνει γιατί σ' ένα πολυηλεκτρονικό άτομο, **πλην των ελκτικών δυνάμεων πυρήνα - ηλεκτρονίου (που καθορίζονται από τον κύριο κβαντικό αριθμό), ασκούνται απώσεις ηλεκτρονίου - ηλεκτρονίου (που καθορίζονται από το δευτερεύοντα κβαντικό αριθμό). Για το λόγο αυτό διαφοροποιούνται οι ενεργειακές στάθμες των υποστιβάδων της ίδιας στιβάδας, όπως φαίνεται στο διπλανό σχήμα.**



3. Επειδή δύσκολα μπορεί να θυμηθεί κανείς το διάγραμμα διαδοχής των ενεργειακών σταθμών, που παρατίθεται παραπλεύρως, δίνεται ένα **μνημονικό διάγραμμα**.

s: 1 ατομικό τροχιακό, 2 ηλεκτρόνια
p: 3 ατομικά τροχιακά, 6 ηλεκτρόνια
d: 5 ατομικά τροχιακά, 10 ηλεκτρόνια
f: 7 ατομικά τροχιακά, 14 ηλεκτρόνια

4. Σύμφωνα με την αρχή της ελάχιστης ενέργειας ισχύει ότι ανάμεσα σε δύο υποστιβάδες, τη **καμηλότερη ενέργεια έχει εκείνη που έχει το μικρότερο άθροισμα** των δύο πρώτων κβαντικών αριθμών **(*n*+ *l*)**

Στην περίπτωση που το άθροισμα (*n*+ *l*) είναι το ίδιο για δύο υποστιβάδες, **τότε μεγαλύτερη ενέργεια έχει η υποστιβάδα με το μεγαλύτερο *n*.**

5. Στο υδρογόνο και τα υδρογονοειδή οι ενεργειακές στάθμες των υποστιβάδων, που ανήκουν στην ίδια στιβάδα, ταυτίζονται .

Παράδειγμα:

Στο άτομο του υδρογόνου στη θεμελιώδη του κατάσταση, τα ατομικά τροχιακά της υποστιβάδας 2s έχουν ίση ενέργεια με αυτά της υποστιβάδας 2p, ενώ **σε οποιοδήποτε πολυλεκτρονικό άτομο** στη θεμελιώδη του κατάσταση, τα ατομικά τροχιακά της υποστιβάδας 2p έχουν μεγαλύτερη ενέργεια από αυτά της υποστιβάδας 2s.

6. Ερώτηση: Πως κατανέμονται τα 26 ηλεκτρόνια στο άτομο του σιδήρου, στη θεμελιώδη του κατάσταση;

s: 1 ατομικό τροχιακό, 2 ηλεκτρόνια
p: 3 ατομικά τροχιακά, 6 ηλεκτρόνια
d: 5 ατομικά τροχιακά, 10 ηλεκτρόνια
f: 7 ατομικά τροχιακά, 14 ηλεκτρόνια

1. Πρώτα τοποθετούνται δύο ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 1s, και γράφουμε $1s^2$,

2.μετά τοποθετούμε δύο ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 2s ($1s^2\ 2s^2$),

3. ακολουθούν έξι ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 2p ($1s^2\ 2s^2\ 2p^6$),

4.δύο ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 3s ($1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2$),

5. έξι στην υποστιβάδα 3p ($1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6$)

6. δύο στην 4s ($1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2$).

7. Τα τελευταία έξι ηλεκτρόνια πάνε στην υποστιβάδα 3d, η οποία χωράει συνολικά δέκα ηλεκτρόνια.

8. Έτσι, η ηλεκτρονική δομή του σιδήρου είναι:

$$_{26}Fe : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^6\ 4s^2$$

Προσοχή!!

Στην παραπάνω ηλεκτρονική δομή ότι γράφουμε πρώτα την 3*d* και μετά την 4*s*, παρόλο που η υποστιβάδα 4*s* συμπληρώθηκε πρώτη, σύμφωνα με την αρχή ελάχιστης ενέργειας. Αυτό συμβαίνει επειδή **μετά την εισαγωγή ηλεκτρονίων στην υποστιβάδα 3*d* αυτή αποκτά λιγότερη ενέργεια από την 4*s*.** Ανάλογα ισχύει και για τις 4*d* και 5*s* . Για τον ίδιο λόγο κατά τον ιοντισμό του Fe σε Fe^{2+} αποβάλλονται τα 4s και όχι τα 3d ηλεκτρόνια.

Γενικά όταν καταγράφουμε την ηλεκτρονική δομή αφού συμπληρώσουμε τις υποστιβάδες με ηλεκτρόνια τις καταγράφουμε κατά αύξοντα n.

7. Ερώτηση: Να γράψετε την ηλεκτρονική δομή του κατιόντος: Fe^{2+}

1. Βρίσκω πρώτα τη δομή του ατόμου $_{26}Fe$:

$$_{26}Fe : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^6\ 4s^2$$

2. Αφαιρώ τόσα ηλεκτρόνια όσα το θετικό φορτίο του ιόντος Fe^{2+} ξεκινώντας από την τελευταία υποστιβάδα.

$$Fe^{2+} : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^6$$

3. Αν γράψουμε τα ηλεκτρόνια σε στιβάδες και όχι σε υποστιβάδες έχουμε:

$$Fe : K^2\ L^8\ M^{14}\ N^2 \quad \text{και} \quad Fe^{2+} : K^2\ L^8\ M^{14}$$

8. Ερώτηση: Τι γνωρίζετε για τη θεωρία των συμπληρωμένων και ημισυμπληρωμένων υποστιβάδων;

Οι συμπληρωμένες με ηλεκτρόνια ή οι ημισυμπληρωμένες υποστιβάδες έχουν αυξημένη ενεργειακή σταθερότητα και προτιμούνται.

Σε ορισμένες περιπτώσεις η κατανομή των ηλεκτρονίων **δεν είναι αυτή που προβλέπεται**, με βάση τις αρχές δόμησης.

Παράδειγμα:

Η ηλεκτρονική δομή του $_{24}Cr$ είναι η $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ \underline{3d^5}\ 4s^1$ και όχι η $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ \underline{3d^4}\ 4s^2$.

Η ηλεκτρονική δομή του $_{29}Cu$ είναι η $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ \underline{3d^{10}}\ 4s^1$ και όχι η $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ \underline{3d^9}\ 4s^2$

9. Ερώτηση: Τι λέει ο κανόνας του Hund ;

Ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας (της ίδιας υποστιβάδας), έχουν κατά προτίμηση παράλληλα spin, ώστε τα ηλεκτρόνια να αποκτήσουν το μέγιστο άθροισμα των κβαντικών αριθμών spin ».

10. Ερώτηση: Ποια διαδικασία ακολουθείται κατά τη συμπλήρωση των ατομικών τροχιακών προκειμένου να ικανοποιείται κανόνας του Hund ;

- Βρίσκω πόσα ατομικά τροχιακά έχει η υποστιβάδα
- τα γεμίζω με τόσα ηλεκτρόνια όσα έχει η υποστιβάδα βάζοντας στην αρχή ένα στο καθένα ατομικό τροχιακό σημειώνοντας τα με διάνυσμα φοράς προς τα επάνω και μετά
- ζευγαρώνω τα αρχικά με όσα ηλεκτρόνια υπολείπονται με διάνυσμα φοράς προς τα κάτω χωρίς να υπερβαίνω τα δύο σε καθένα από αυτά

παραδείγματα:

1. Για παράδειγμα **στο άτομο του αζώτου $_7$N** η κατανομή **σε υποστιβάδες** είναι:

$_7$N: $1s^2\ 2s^2\ 2p^3$

ή αναλυτικότερα, αν θέλουμε να δείξουμε **την κατανομή των ηλεκτρονίων στα τροχιακά:**

	$1s$	$2s$	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$
$_7$N	↑↓	↑↓	↑	↑	↑

2. Ομοίως, **η κατανομή των ηλεκτρονίων σε υποστιβάδες** στο άτομο του οξυγόνου είναι: **$_8$O : $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$**

ή αναλυτικότερα **σε τροχιακά:**

	$1s$	$2s$	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$
$_8$O	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑

ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

1. ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ ΣΤΙΒΑΔΩΝ, ΥΠΟΣΤΙΒΑΔΩΝ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ

Η μεγαλύτερη ενέργεια καθορίζεται ως εξής:

- Μεταξύ **διαφορετικών στιβάδων**, μεγαλύτερη ενέργεια έχει αυτή με το **μεγαλύτερο n.**
- Μεταξύ **διαφορετικών υποστιβάδων**, μεγαλύτερη ενέργεια έχει αυτή με το **μεγαλύτερο άθροισμα n + *l*** . Επίσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί και το ενεργειακό διάγραμμα.

  1. Στην περίπτωση **ίσων αθροισμάτων** μεγαλύτερη ενέργεια έχει αυτή με το **μεγαλύτερο n**

- Μεταξύ **διαφορετικών ηλεκτρονίων**, μεγαλύτερη ενέργεια έχει αυτό με το **μεγαλύτερο n**

2. ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ

1. Χρησιμοποιούμε το ενεργειακό διάγραμμα.
2.

i. **Στα άτομα** κατανέμουμε τα ηλεκτρόνια που προσδιορίζονται από τον ατομικό του αριθμό Z.

ii. **στα ανιόντα** κατανέμουμε τα ηλεκτρόνια που προσδιορίζονται από τον **ατομικό αριθμό του ατόμου του ιόντος αυξημένο κατά την απόλυτη τιμή του φορτίου:** $Z + |\text{φορτίο ιόντος}|$.

iii. **στα κατιόντα:**

   i. Πρώτα κάνουμε κατανομή **των ηλεκτρονίων του ατόμου**

   ii. Γράφουμε την **ηλεκτρονική δομή του ατόμου κατά αύξοντα Z**

   iii. **Αφαιρούμε** από την τελευταία στιβάδα **τόσα ηλεκτρόνια**, όσα το **φορτίο του ιόντος**.

   iv.

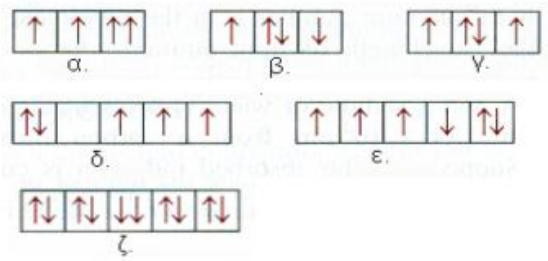
3. ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ ΣΕ ΣΤΙΒΑΔΕΣ ΥΠΟΣΤΙΒΑΔΕΣ ΚΑΙ ΑΤΟΜΙΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

i. **Στις στιβάδες ή τις υποστιβάδες**, γράφουμε τον αριθμό σε καθεμιά από αυτές σαν εκθέτη στο σύμβολό της.

ii. Αν όμως η τοποθέτηση τους γίνεται **σε ατομικά τροχιακά** τότε τοποθετούμε το πολύ δύο ηλεκτρόνια σε καθένα από αυτά με αντιπαράλληλα spin.

Λυμένα Παραδείγματα

1. Ποιες από τις παρακάτω ηλεκτρονικές δομές παραβιάζουν την απαγορευτική αρχή του Pauli και ποιες τον κανόνα του Hund;



Απάντηση

Στις δομές α και ζ παρατηρούμε πως στο ίδιο ατομικό τροχιακό υπάρχουν δύο ηλεκτρόνια με το ίδιο spin, δηλαδή έχουν και τους 4 κβαντικούς αριθμούς τους ίδιους. Αυτό αντιβαίνει με την απαγορευτική αρχή του Pauli.

Στις δομές β, δ, ε υπάρχουν μονήρη ηλεκτρόνια σε ατομικά τροχιακά της ίδιας υποστιβάδας με αντιπαράλληλα spin. Αυτό αντιβαίνει με τον κανόνα του Hund.

2. Από τις ακόλουθες δομές για το άτομο του οξυγόνου (Z = 8) στη θεμελιώδη κατάσταση:

1s	2s	2p			
(↑↓)	(↑↓)	(↑↓)	(↑)	(↑)	(I)
(↑↓)	(↑↓)	(↑↓)	(↑↓)	( )	(II)
(↑↓)	(↑↑)	(↑↓)	(↑)	(↑)	(III)
(↑↓)	(↑)	(↑↓)	(↑↓)	(↑)	(IV)

i) δεν υπακούουν στον κανόνα του Hund:
   α. οι (II) και (IV) γ. η (II)
   β. οι (I) και (III) δ. η (IV)

ii) υπακούουν στην αρχή της ελάχιστης ενέργειας:
   α. οι (I), (II) και (III) γ. η (IV)
   β. οι (I), (III) και (IV) δ. όλες

iii) δεν υπακούουν στην απαγορευτική αρχή του Pauli:
   α. η (I) γ. η (III)
   β. η (II) δ. η (IV).

Απάντηση

i) **Η γ. Υπάρχουν μονήρη ηλεκτρόνια σε ατομικά τροχιακά της ίδιας υποστιβάδας με αντιπαράλληλα spin. Αυτό αντιβαίνει με τον κανόνα του Hund.**

ii). **Η α. Είναι συμπληρωμένες τα ατομικά τροχικά μικρότερης ενέργειας.**

iii). **Η γ. Παρατηρούμε πως στο ίδιο ατομικό τροχιακό υπάρχουν δύο ηλεκτρόνια με το ίδιο spin, δηλαδή έχουν και τους 4 κβαντικούς αριθμούς τους ίδιους. Αυτό αντιβαίνει με την απαγορευτική αρχή του Pauli.**

3. Ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων για κάθε στιβάδα προκύπτει με εφαρμογή:

α. της αρχής της ελάχιστης ενέργειας
β. της απαγορευτικής αρχής του Pauli
γ. του κανόνα του Hund
δ. όλων των παραπάνω.

Απάντηση

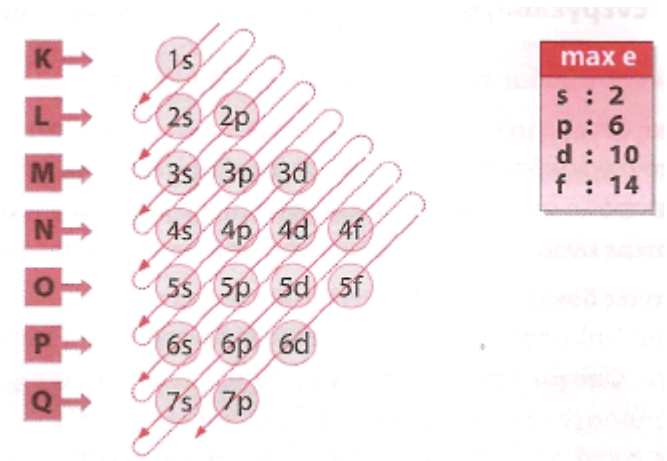
Η δ.

4. Να τοποθετήσετε κατά σειρά αυξανόμενης ενέργειας τις κενές υποστιβάδες: 2p, 3p, 3d, 4s, 4p, 4f.

Απάντηση

Υπάρχουν δύο τρόποι για να απαντήσουμε:.

i. Ο ένας είναι με τη χρήση του ενεργειακού διαγράμματος.



Η κατάταξη είναι η: **2p <3p < 4s < 3d < 4p < 4f**

ii. **Ο άλλος είναι με έλεγχο του αθροίσματος n+*l*.** Όσο μεγαλύτερο είναι το άθροισμα n+*l*, **τόσο μεγαλύτερο είναι η ενέργεια της υποστιβάδας**. **Σε ίσα αθροίσματα**, τη **μεγαλύτερη ενέργεια** την έχει

η υποστιβάδα με το **μεγαλύτερο n:**

nl	**3p**	**4p**	**3d**	**4s**	**4f**
n+l	3+1=**4**	4+1=**5**	3+2=**5**	4+0=**4**	4+3=**7**

Φυσικά καταλήγουμε στην ίδια κατάταξη: **2p< 3p < 4s < 3d < 4p < 4f**

5. Να τοποθετήσετε κατά σειρά αυξανόμενης ενέργειας τις κενές υποστιβάδες: 2p, 3p, 3d, 4s, 4p, 4f **στο άτομο του υδρογόνου**.

Απάντηση

Επειδή **το άτομο του υδρογόνου** περιέχει ένα μόνο ηλεκτρόνιο, σ' αυτό και στα **υδρογονοειδή άτομα**, δεν παίζει ρόλο στη διαμόρφωση της ενέργειας η επίδραση ηλεκτρονίου - ηλεκτρονίου, δηλαδή ο κβαντικός αριθμός *l*. Έτσι η ενέργειά τους **καθορίζεται μόνο από τον κβαντικό αριθμό n**. Οι υποστιβάδες και τα ατομικά τροχιακά με το ίδιο n έχουν ίδια ενέργεια[1]. Έτσι η ζητούμενη κατάταξη είναι η :

2p <3p = 3d < 4s = 4p = 4f

6. Να κατατάξετε τα ηλεκτρόνια $2p^1$, $3p^1$, $3d^1$, $4s^1$, $4p^1$, $4f^1$ κατά σειρά αυξανόμενης ενέργειας.

Απάντηση:

Η ενέργεια των ηλεκτρονίων διαφορετικών υποστιβάδων καθορίζεται αποκλειστικά από τον κύριο κβαντικό αριθμό n. Η ενέργεια των ηλεκτρονίων ίδιων υποστιβάδων καθορίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς n και l. Έτσι η ζητούμενη σειρά κατάταξης είναι η:

$2p^1 < 3p^1 < 3d^1 < 4s^1 < 4p^1 < 4f^1$

Η ενέργειας των υποστιβάδων καθορίζεται από το άθροισμα **n+l**
Η ενέργειας των ηλεκτρονίων καθορίζεται αποκλειστικά **από το n στις διαφορετικές στιβάδες και από την ενέργεια της υποστιβάδας μέσα στην ίδια στιβάδα.**

7. Να γίνει η κατανομή των ηλεκτρονίων του ατόμου του κασσιτέρου ($_{50}Sn$) σε υποστιβάδες στη θεμελιώδη ενεργειακά κατάσταση.

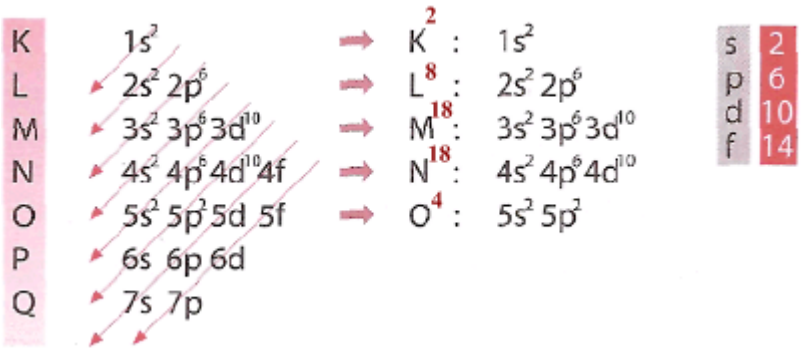
Απάντηση:

Βρίσκουμε το συνολικό αριθμό των ηλεκτρονίων από τον ατομικό αριθμό:

Δηλαδή **50 ηλεκτρόνια**.

Από το μνημονικό πίνακα βρίσκουμε τη ζητούμενη κατανομή:

[1] Αυτά ονομάζονται εκφυλισμένα τροχιακά.



Η ζητούμενη κατανομή των ηλεκτρονίων σε υποστιβάδες είναι:

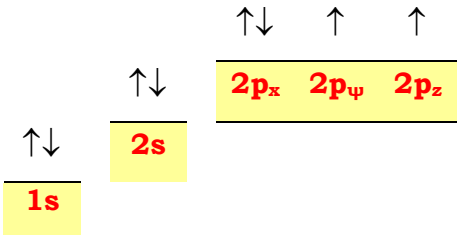
$_{50}$**Sn:** $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^6\ 4d^{10}\ 5s^2\ 5p^2$

ⓘ Παρατηρούμε ότι στην παρουσίαση της σειράς των υποστιβάδων γράφουμε πρώτα την υποστιβάδα 3d και μετά την *4s*, παρότι συμπληρώνεται πρώτα η 4s (4s < 3d, αρχή της ελάχιστης ενέργειας). Αυτό γίνεται γιατί, όταν εισάγονται ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 3d, η υποστιβάδα 3d αποκτά λιγότερη ενέργεια από την 4s. Όμοια συμβαίνει και στην περίπτωση των υποστιβάδων 4d και 5s.

8. Πόσα μονήρη ηλεκτρόνια και πόσα ζεύγη ηλεκτρονίων υπάρχουν στην εξωτερική στιβάδα του $_8$O, όταν αυτό βρίσκεται στη θεμελιώδη του κατάσταση;

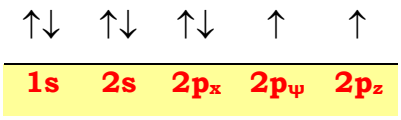
Απάντηση

Φτιάχνουμε την ηλεκτρονική κατανομή σε ατομικά τροχιακά:



Όταν **αναζητούμε μονήρη ηλεκτρόνια ή ζεύγη ηλεκτρονίων** πρέπει να **κάνουμε την κατανομή ηλεκτρονίων σε ατομικά τροχιακά**, έστω κι αν δεν μας το ζητούν, γιατί έτσι αποκαλύπτεται πιο άμεσα, ο αριθμός τους.

Η κατανομή αυτή γράφεται απλούστερα:



Βρίσκουμε τα μονήρη ηλεκτρόνια[2] και τα μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων[3]

Από αυτή παρατηρούμε πως στην εξωτερική στιβάδα του $_8$O υπάρχουν **2 μονήρη ηλεκτρόνια (στα $2p_ψ$, $2p_z$) και ένα ζεύγος ηλεκτρονίων (στο $2p_x$).**

[2] Αυτά που δεν είναι συζευγμένα με άλλο ηλεκτρόνιο στο ίδιο ατομικό τροχιακό, δηλαδή αυτά που είναι μόνα τους μέσα στο ατομικό τροχιακό.
[3] Μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων είναι το σύνολο των ζευγών ηλεκτρονίων που ισούται με τον αριθμό των συμπληρωμένων με δύο ηλεκτρόνια, ατομικών τροχιακών.

9. Ποιες από τις επόμενες ηλεκτρονικές δομές αντιστοιχούν στη δομή διεγερμένων καταστάσεων του ατόμου του σκανδίου ($_{21}Sc$):

α. $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 2d^{10}\ 3s^1$

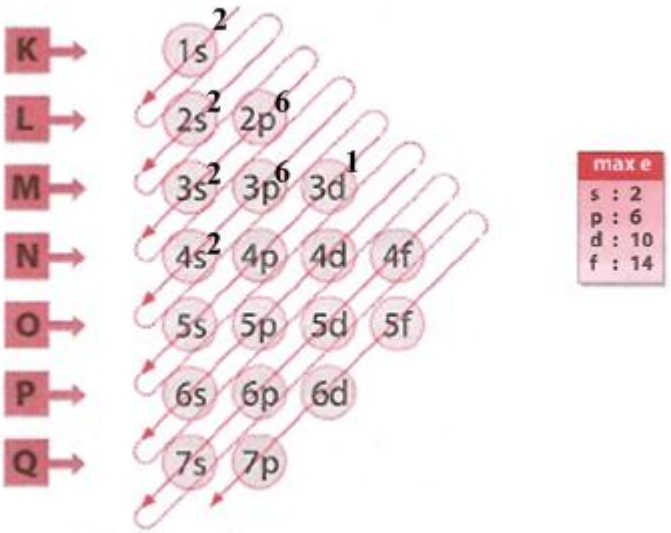
β. $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^3$

γ. $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^1\ 4s^2$

δ. $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^2\ 4s^1$.

Απάντηση:

Βρίσκουμε τη δομή της θεμελιώδους κατάστασης με τη χρήση του μνημονικού κανόνα και την εξαιρούμε:



Στη θεμελιώδη κατάσταση αντιστοιχεί η δομή γ.

Βρίσκουμε ποιες από τις δομές είναι αδύνατες και τις εξαιρούμε:

Η α είναι αδύνατη γιατί δεν υπάρχει 2d τροχιακό.

Αυτές που απομένουν είναι οι δομές των διεγερμένων καταστάσεων :

δηλαδή οι δομές β και δ.

10. Βρείτε το μέγιστο αριθμό ηλεκτρονίων που περιέχουν τους κβαντικούς αριθμούς:

i. n=2

ii. n=3, και l=1

iii. n=5, l=1, m_l=1

iv. n=1, m_l=1

Απάντηση:

i. **n=2:** Πρόκειται για τη στιβάδα L η οποία συμπληρώνεται με **8 ηλεκτρόνια**

ii. **n=3, και l=1:** Πρόκειται για την υποστιβάδα 3p η οποία συμπληρώνεται με **6 ηλεκτρόνια**

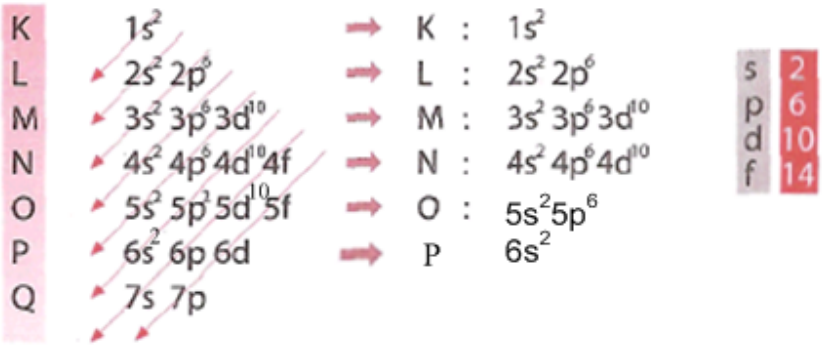
iii. **n=5, l=1, m_l=1:** Πρόκειται για ατομικό τροχιακό $3p_x$ το οποίο συμπληρώνεται με **2 ηλεκτρόνια**

iv. **n=1, m_l=1:** Δεν υπάρχει τροχιακό που η τετράδα του να είναι της μορφής (1,*l*,1), γιατί για n=1, η τιμή του *l=0*, άρα το m_l=0

11. Να γίνει η κατανομή των ηλεκτρονίων του κατιόντος βαρίου ($_{56}Ba^{2+}$) και του ανιόντος σεληνίου ($_{34}Se^{2-}$) σε στιβάδες και σε υποστιβάδες στη θεμελιώδη ενεργειακά κατάσταση.

Απάντηση:

Κάνουμε την κατανομή του ατόμου $_{56}Ba$



Για τον προσδιορισμό της κατανομής ηλεκτρονίων στα **κατιόντα βρίσκουμε πρώτα την ηλεκτρονιακή κατανομή του ατόμου** και στη συνέχεια απομακρύνουμε από το τέλος τόσα ηλεκτρόνια όσα το φορτία του ιόντος

$_{56}$Ba: 1 s^2 $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^6$ $3d^{10}$ $4s^2$ $4p^6$ $4d^{10}$ $5s^2$ $5p^6$ $6s^2$

Προσδιορίζουμε την κατανομή του κατιόντος $_{34}Se^{2-}$ **:**

Ba^{2+}: 1 s^2 $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^6$ $3d^{10}$ $4s^2$ $4p^e$ $4d^{10}$ $5s^2$ $5p^6$

Προσδιορίζουμε τα συνολικά ηλεκτρόνια στο ανιόν $_{34}Se^{2-}$ **:**

34+2=36 ηλεκτρόνια

Κάνουμε την κατανομή των 36 ηλεκτρονίων με τη βοήθεια του μνημονίου:

Για τον προσδιορισμό της κατανομής ηλεκτρονίων στα **ανιόντα βρίσκω το σύνολο των ηλεκτρονίων** του και στη συνέχεια τα κατανέμω όπως γνωρίζω για τα άτομα.

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

12. Να κάνετε την ηλεκτρονική κατανομή των ευγενών αερίων. Τι συμπεραίνετε;

Δίνεται η σειρά των ευγενών αερίων: $_{2}He$, $_{10}Ne$, $_{18}Ar$, $_{36}Kr$, $_{54}Xe$, $_{86}Rn$

Απάντηση:

$_{2}He$: $1s^2$

$_{10}Ne$: $1s^2 2s^2 2p^6$

$_{18}Ar$: $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^6$

$_{36}Kr$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$

$_{54}Xe$: $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^6$ $3d^{10}$ $4s^2$ $4p^6$ $4d^{10}$ $5s^a$ $5p^6$

$_{86}Rn$: $1s^2$ $2s^2$ $2p^5$ $3s^2$ $3p^6$ $3d^{10}$ $4s^2$ $4p^6$ $4d^{10}$ $4f^{14}$ $5s^2$ $5p^6$ $5d^{10}$ $6s^2$ $6p^6$

Από τις δομές αυτές συμπεραίνουμε:

- Τα ευγενή αέρια **εκτός από το He** έχουν στην εξωτερική τους στιβάδα τη δομή **ns^2, np^6** (8 ηλεκτρόνια)
- **Το He** έχει στην εξωτερική του στιβάδα τη δομή **$1s^2$** (2 ηλεκτρόνια)
- Η μεγαλύτερη ενεργειακά υποστιβάδα είναι η **np** με 6 ηλεκτρόνια (όπου n ο αριθμός της περιόδου που ανήκει το ευγενές αέριο) εκτός από το He, στο οποίο η μεγαλύτερη ενεργειακά υποστιβάδα είναι η **1s** με 2 ηλεκτρόνια
- Παρατηρήστε στις παραπάνω δομές πως για να θυμόμαστε τη δομή ενός ευγενούς αερίου, αρκεί να γνωρίζουμε τη μεγαλύτερη ενεργειακά υποστιβάδα του. Όλες οι προηγούμενες υποστιβάδες **συμπληρώνονται** με βάση τον μνημονικό πίνακα.

13. Δίνονται οι παρακάτω ηλεκτρονικές διαμορφώσεις που αφορούν ορισμένα άτομα:

α. $1s^1$ $1p^1$ β. $2s^1$ γ. $[He]2s^2 2p^3$ δ. $1s^2 2s^2$ ε. $1s^2 2s^2 2p^6 2d^3$, στ. $[Ne]3s^2 3p^6 4s^1$,

ζ. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^7 4s^2 4p^1$ η. $1s^2$ $2s^2$ $4s^1$.

Να χαρακτηρίσετε καθεμία περίπτωση ως θεμελιώδη (Θ), διεγερμένη (Δ) ή αδύνατη (Α).

Απάντηση:

α. $1s^1 1p^1$ **Α.** Δεν υπάρχει 1p ατομικό τροχιακό.

β. $2s^1$ **Δ.** Η θεμελιώδης κατάσταση είναι η $1s^1$.

γ. $[He]2s^2 2p^3$ **Θ.**

δ. $1s^2 2s^2$ **Θ.**

ε. $1s^2 2s^2 2p^6 2d^3$ **Α.** Δεν υπάρχει 2d ατομικό τροχιακό.

στ. [Ne]$3s^2 3p^6 4s^1$ Θ.

ζ. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^7 4s^2 4p^1$ Α. Η 3p υποστιβάδα δε χωράει 7 ηλεκτρόνια.

η. $1s^2\ 2s^2\ 4s^1$. Δ. Η θεμελιώδης κατάσταση είναι η: **$1s^2\ 2s^2\ 2p^1$.**

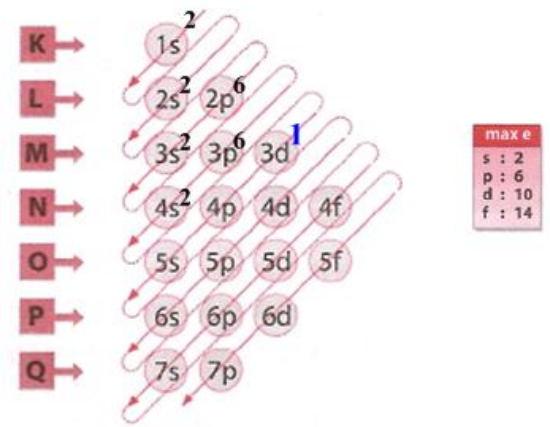
14. Να βρείτε το στοιχείο με το μικρότερο ατομικό αριθμό, το οποίο στη θεμελιώδη του κατάσταση έχει:

α. ένα d ηλεκτρόνιο, β. τρία f ηλεκτρόνια, γ. συμπληρωμένη την υποστοιβάδα s, δ. έξι ρ ηλεκτρόνια, ε. συμπληρωμένη την υποστοιβάδα d, στ. πέντε ρ ηλεκτρόνια, ζ. ένα s ηλεκτρόνιο.

Απάντηση:

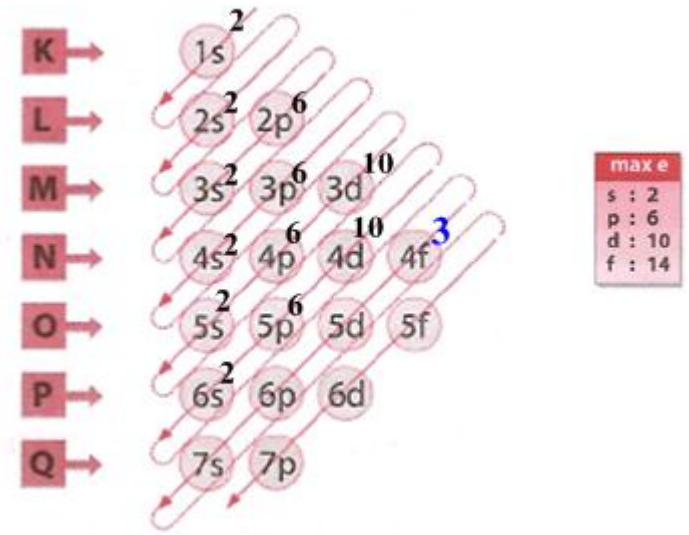
Προσδιορίζω τις παραπάνω απαιτήσεις με εφαρμογή του μνημονικού κανόνα και την κατανομή σε ατομικά τροχιακά των ηλεκτρονίων που απαιτεί το πρόβλημα:

α.



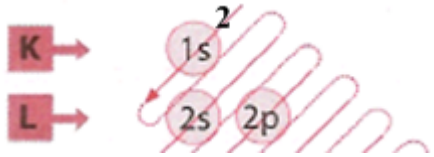
Z=21

β.



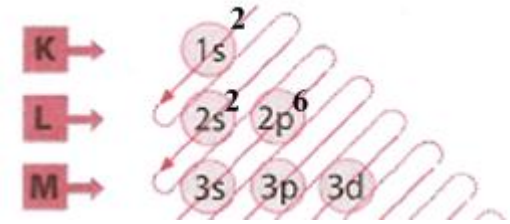
Z=59

γ.



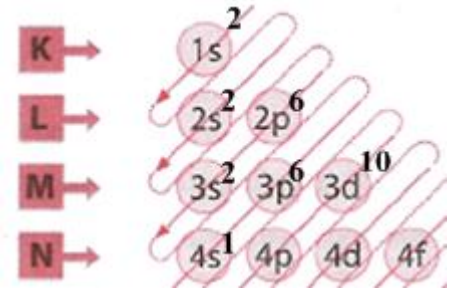
Z=2

δ.



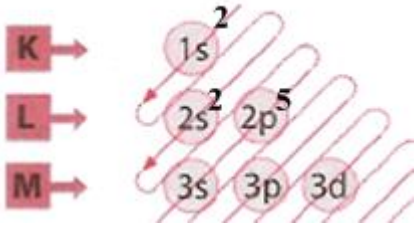
Z=10

ε.



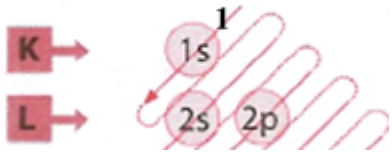
Z=29

στ.



Z=9

ζ.



Z=1

15. Στοιχείο Χ έχει 41 ηλεκτρόνια τα οποία έχουν $m_s = -\frac{1}{2}$ στην τετράδα των κβαντικών αριθμών στη θεμελιώδη κατάσταση. Να βρεθεί ο ατομικός αριθμός του στοιχείου Χ.

Απάντηση

Σύμφωνα με τον κανόνα του Hund, εφόσον υπάρχουν 41 ηλεκτρόνια με $m_s = -\frac{1}{2}$, θα υπάρχουν και 41 ηλεκτρόνια με $m_s = +\frac{1}{2}$, άρα σίγουρα θα υπάρχουν 41 ζεύγη ηλεκτρονίων, δηλαδή 82 ηλεκτρόνια.

Τοποθετούμε τα ηλεκτρόνια σύμφωνα με τους κανόνες της ηλεκτρονικής δόμησης. Με τη συμπλήρωση της υποστιβάδας 5d έχουν τοποθετηθεί 80 ηλεκτρόνια (40 ζεύγη). Επομένως, θα υπάρχει ένα ζεύγος ηλεκτρονίων στην υποστιβάδα 6p, εφόσον το στοιχείο έχει 41 ζεύγη ηλεκτρονίων.

Σύμφωνα με τον κανόνα του Hund, η δομή της υποστιβάδας θα είναι:

6p | ↑↓ | ↑ | ↑ | δηλαδή, θα έχει συνολικά τέσσερα ηλεκτρόνια ($6p^4$).

Σύμφωνα με τα παραπάνω το στοιχείο Χ έχει την ηλεκτρονική δομή:

X: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^6\ 4d^{10}\ 4f^{14}\ 5s^2\ 5p^6\ 5d^{10}\ 6s^2\ 6p^4$

Τα συνολικά ηλεκτρόνια του στοιχείου είναι 84.

Άρα, ο ατομικός αριθμός του στοιχείου Χ θα είναι ίσος με **84.**

16. Κάθε ηλεκτρόνιο ενός ατόμου εκφράζεται με μια τετράδα κβαντικών αριθμών (n, l, m_l, m_s). Αν για κάποιο στοιχείο Χ αθροίσουμε όλες τις τιμές των κβαντικών αριθμών όλων των ηλεκτρονίων του σε θεμελιώδη κατάσταση, θα βρούμε άθροισμα 27,5. Να προσδιορίστε! ο ατομικός αριθμός του στοιχείου Χ.

Απάντηση

Αρχίζουμε να τοποθετούμε τα ηλεκτρόνια στην 1 s υποστιβάδα και υπολογίζουμε το αντίστοιχο άθροισμα ($n + l + m_l + m_s$) για τα δύο ηλεκτρόνια. Το ίδιο κάνουμε και στις επόμενες υποστιβάδες.

Τα ηλεκτρόνια μιας συμπληρωμένης υποστιβάδας s έχουν άθροισμα τιμών m_s ίσο με το μηδέν.
Τα ηλεκτρόνια μιας συμπληρωμένης ή ημισυμπληρωμένης υποστιβάδας p έχουν άθροισμα τιμών m_p ίσο με μηδέν (-1+0+1).

Χρησιμοποιούμε τον πίνακα που ακολουθεί, για να φτιάξουμε το άθροισμα που έχουμε:

Υποστιβάδα	**n**	**l**	**m_l**	**m_s**	**Άθροισμα υποστιβάδας**	**Συνολικό άθροισμα**
$1s^2$	2x1	2x0	2x0	0	2	2
$2s^2$	2x2	2x0	2x0	0	4	6
$2p^6$	6x2	6x1	6x1	0	18	24
$3s^1$	1x3	1x0	1x0	$+\frac{1}{2}$	3,5	27,5

Επομένως η ζητούμενη δομή είναι η: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$, άρα **Z = 11.**

Ερωτήσεις σύμφωνες με το 1° & 2° θέμα των εξετάσεων

3-1. Η ύπαρξη δύο ή και περισσότερων ηλεκτρονίων με $m_s = -^1/_2$ στο ίδιο ατομικό τροχιακό αντιβαίνει:

α. με την απαγορευτική αρχή του Pauli

β. με την αρχή της ελάχιστης ενέργειας

γ. με την αρχή διατήρησης της ενέργειας

δ. με τον κανόνα του Hund.

3-2. Η ηλεκτρονική δομή για το άτομο του Βηρυλλίου (Z = 4) στη θεμελιώδη του κατάσταση, σύμφωνα με τον κανόνα του Hund, είναι: $1s^2$ (↑↑) $2s^2$ (↑↑) **Σ – Λ**

3-3. Το μέγεθος, το σχήμα και ..... ενός ατομικού τροχιακού καθορίζονται από τρεις παραμέτρους που ονομάζονται αντίστοιχα ..... , ... και .....

3-4. Οι συνδυασμοί τιμών των δύο πρώτων κβαντικών αριθμών n = 3, l = 1 και n = 4 , l = 3 χαρακτηρίζουν αντίστοιχα τα ατομικά τροχιακά ..... και ..... .

3-5. Ο τέταρτος κβαντικός αριθμός ονομάζεται και ..... , παίρνει τις τιμές ..... και εκφράζει .....

3-6. Μία υποστιβάδα p αποτελείται από ..... ατομικά τροχιακά τα οποία έχουν ..... διαφορετικούς προσανατολισμούς, που καθορίζονται από τις τιμές του ..... κβαντικού αριθμού.

3-7. Η τιμή του κύριου κβαντικού αριθμού καθορίζει την ..... δύναμη μεταξύ..... , ενώ η τιμή του δευτερεύοντος κβαντικού αριθμού καθορίζει την..... δύναμη που ασκείται στα ηλεκτρόνια από.....

3-8. Το κάθε ατομικό τροχιακό μπορεί να περιέχει από ..... μέχρι ..... ηλεκτρόνια.

3-9. Κριτήριο για τη σύγκριση των ενεργειών δύο υποστιβάδων είναι η τιμή του αθροίσματος .....

3-10. Εξηγήστε το λόγο για τον οποίο για τον καθορισμό ενός s ατομικού τροχιακού απαιτείται η γνώση δύο κβαντικών αριθμών, ενώ για τον καθορισμό κάθε άλλου ατομικού τροχιακού πρέπει να γνωρίζουμε την τιμή και ενός τρίτου κβαντικού αριθμού. Δώστε ένα σχετικό παράδειγμα.

3-11. Διατυπώστε την απαγορευτική αρχή του Pauli και εφαρμόστε την αρχή αυτή προκειμένου να υπολογίσετε το μέγιστο αριθμό ηλεκτρονίων στη στιβάδα L ενός ατόμου.

3-12. Να προσδιορίσετε αν τα ατομικά τροχιακά $2p_x$, $2p_y$ και $2p_z$ έχουν την ίδια ή διαφορετική ενέργεια.

3-13. Με ποια σειρά θα πληρωθούν τα παρακάτω τροχιακά, σύμφωνα με την αρχή δόμησης (aufbau): 4d, 4f, 5s, 5d, 6s.

3-14. Οι κβαντικοί αριθμοί 4 ηλεκτρονίων που ανήκουν στο ίδιο άτομο είναι:

α. $n = 4$, $l = 0$, $m_l = 0$, $m_s = +1/2$

β. $n = 3$, $l = 2$, $m_l = 1$, $m_s = +1/2$

γ. $n = 3$, $l = 2$, $m_l = -2$, $m_s = -1/2$

δ. $n = 3$, $l = 1$, $m_l = 1$, $m_s = -1/2$

Να ταξινομήσετε τα ηλεκτρόνια κατά σειρά αυξανόμενης ενέργειας.

3-15. Μεταξύ των ενεργειών E_{2p} και E_{3s} των υποστιβάδων 2p και 3s:

α. ισχύει $E_{3s} < E_{2p}$

β. ισχύει $E_{3s} > E_{2p}$

γ. ισχύει $E_{3s} \leq E_{2p}$

Παναγιώτης Αθανασόπουλος
Χημικός – Διδάκτωρ Πανεπιστημίου Πατρών

δ. δεν είναι δυνατή η σύγκριση.

3-16. Ένα ατομικό τροχιακό 3d χαρακτηρίζεται από λιγότερη ενέργεια σε σχέση με ένα ατομικό τροχιακό 4p διότι:

α. το άθροισμα n + l έχει μικρότερη τιμή για το 3d

β. κάθε ηλεκτρόνιο της στιβάδας M έχει γενικά λιγότερη ενέργεια από οποιοδήποτε ηλεκτρόνιο της στιβάδας N

γ. τα τροχιακά d είναι ενεργειακά φτωχότερα από τα τροχιακά p

δ. το άθροισμα n + l έχει την ίδια τιμή για τα δύο αυτά τροχιακά, αλλά ο κύριος κβαντικός αριθμός είναι μικρότερος για το τροχιακό 3d.

3-17. Να διατάξετε τις υποστιβάδες 3d, 2p, 5s, 4p, 5f, 3p, 4d, 4s και 2s κατά σειρά αυξανόμενης ενέργειας.

3-18. Στη θεμελιώδη του κατάσταση το άτομο του υδρογόνου χαρακτηρίζεται από την ελάχιστη ενέργεια. **Σ – Λ**

3-19. Οι υποστιβάδες 3p και 4s είναι ενεργειακά ισοδύναμες. **Σ – Λ**

3-20. α. Σε μια στοιβάδα η ενεργειακή αύξηση των υποστιβάδων της γίνεται σύμφωνα με τη σειρά:

Α. s < ρ < d < f, Β. s > ρ > d > f , Γ. s < ρ < f < d

Δ. Εξαρτάται από το ποια είναι η στοιβάδα,

β. Να αιτιολογήσετε την απάντηση σας.

3-21. α. Ποια είναι η κατανομή των ηλεκτρονίων σε ατομικά τροχιακά για το λίθιο ($_3$Li); Πόσα ηλεκτρόνια έχει στην εξωτερική του στοιβάδα;

β. Έχουμε δύο άτομα λιθίου. Στο ένα άτομο το ηλεκτρόνιο της εξωτερικής στοιβάδας βρίσκεται στην υποστοιβάδα 2s και στο άλλο άτομο βρίσκεται στην υποστοιβάδα 4s.

i. Ποιο άτομο βρίσκεται σε διεγερμένη κατάσταση;

ii. Ποιο άτομο έχει τη μικρότερη ενέργεια;

iii. Ποιο άτομο μπορεί να εκπέμψει φωτόνιο;

iv. Ποιο άτομο χρειάζεται μικρότερη ενέργεια για να αποβάλει το ηλεκτρόνιο της εξωτερικής στοιβάδας;

ν. Σε ποιο άτομο το ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε τροχιακό μεγαλύτερου μεγέθους;

3-22. Τι κοινό χαρακτηριστικό έχετε να παρατηρήσετε στις ηλεκτρονικές δομές των παρακάτω ιόντων ή ατόμων;

α. $_8O^{2-}$ β. $_{12}Mg^{2+}$ γ. $_7N^{3-}$

δ. $_{10}Ne$

ε. $_{11}Na^+$.

3-23. Ποια είναι σωστή ηλεκτρονική δομή του ατόμου $_{25}$Mn στη θεμελιώδη του κατάσταση;

α. $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^7$
β. $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 4p^5$
γ. $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^5\ 4s^2\ 4p^6$
δ. $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^5\ 4s^2$

3-24. Ποια είναι η ηλεκτρονική δομή των παρακάτω ατόμων στη θεμελιώδη τους κατάσταση: $_5$B, $_{11}$Na, $_{18}$Ar, $_{16}$S.

3-25. Ποια από τις επόμενες ηλεκτρονικές δομές ανταποκρίνεται στη θεμελιώδη κατάσταση του $_{26}$Fe

α. $K^2\ L^8\ M^8\ N^8$
β. $K^2\ L^8\ M^9\ N^5$
γ. $K^2\ L^8\ M^{14}\ N^2$
δ. $K^2\ L^8\ M^{16}$

3-26. Ποια από τις παρακάτω ηλεκτρονικές δομές αναφέρεται στο άτομο $_7$N στη θεμελιώδη του κατάσταση;

α. ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑
β. ↑↓ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑
γ. ↑↓ ↑↓ ↑ ↑ ↑
δ. ↑↓ ↑↓ ↑↓ __ __ ↑

3-27. Ποια είναι η ηλεκτρονική δομή των ιόντων: $_{20}Ca^{2+}$, $_{19}K^{+}$, $_{35}Br^{-}$. Τι κοινό έχουν οι δομές αυτές;

3-28. Να βρείτε ποια είναι η ηλεκτρονική δομή του $_{6}C$ στη θεμελιώδη του κατάσταση και να αναγράψετε τις τιμές όλων των κβαντικών αριθμών των ηλεκτρονίων του.

3-29. Η κατανομή των τεσσάρων ηλεκτρονίων στα ατομικά τροχιακά 2s, $2p_{\chi}$, $2p_{\psi}$ και $2p_z$ της στιβάδας L του ατόμου του άνθρακα είναι:

α. $2s^1\ 2p_{\chi}^1\ 2p_{\psi}^1\ 2p_z^1$ β. $2s^2\ 2p_{\chi}^1\ 2p_{\psi}^1$

γ. $2s^2\ 2p_{\chi}^2$ δ. $2p_{\chi}^2\ 2p_{\psi}^1$ και $2p_z^1$

3-30. Στο άτομο του οξυγόνου (Z= 8) στη θεμελιώδη κατάσταση ο αριθμός των τροχιακών που περιέχουν μόνο ένα ηλεκτρόνιο είναι: α.2 β.0 γ. 3 δ.1

3-31. Από τους ακόλουθους συμβολισμούς (I) έως (IV):

s	p			
(↑↓)	(↑↓)	(↑)	( )	(I)
(↑↓)	(↑)	(↑)	(↑)	(II)
(↑)	(↑↓)	(↑)	(↑)	(III)
(↑)	(↑↓)	(↑↓)	( )	(IV)

παριστάνει τη δομή της εξωτερικής στιβάδας του ατόμου του φωσφόρου (Z = 15) στη θεμελιώδη κατάσταση:

α. η (I) β. η (II) γ. η (III) δ. η (IV)

ε. καμία.

3-32. Από τις ηλεκτρονικές δομές:

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2$ (I)

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^2$ (II)

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6$ (III)

$1s^2\ 2s^2\ 2p^5$ (IV)

$1s^2\ 2s^2\ 2p^4$ (V)

αποτελούν τις δομές του ιόντος $_{12}Mg^{2+}$ και του ιόντος $_{9}F^{1-}$ στη θεμελιώδη κατάσταση:

α. οι (I) και (IV) αντίστοιχα

β. η (III)

γ. οι (II) και (V) αντίστοιχα

δ. οι (III) και (V) αντίστοιχα.

3-33. Η ηλεκτρονική κατανομή κατά υποστιβάδες στο άτομο του Li (Z = 3) είναι ..... . Η κατανομή αυτή συμφωνεί με την αρχή ....

3-34. Κάντε την κατανομή των ηλεκτρονίων κατά υποστιβάδες στο άτομο του Br (Z = 35) και βρείτε τον αριθμό των ηλεκτρονίων σθένους στο άτομο αυτού του στοιχείου.

3-35. Να βρεθεί η ηλεκτρονική δομή των παρακάτω στοιχείων σε υποστοιβάδες και στιβάδες:

α. $_{39}K$ β. $_{25}Mn$ γ. $_{30}Zn$

δ. $_{33}As$ ε. $_{39}Y$ στ. $_{42}Mo$

ζ. $_{49}In$ η. $_{58}Ce$ θ. $_{75}Re$

ι $_{78}Pt$ ια. $_{82}Pb$ ιβ. $_{85}At$.

3-36. Να βρεθεί η ηλεκτρονική δομή των επόμενων ιόντων:

α. $_{1}H^{+}$ β. $_{1}H^{-}$ γ. $_{2}He^{2+}$ δ. $_{9}F^{-}$

ε. $_{11}Na^{+}$ στ. i_6S^{2-} ζ. $_{20}Ca^{2+}$ η. $_{55}Cs^{+}$.

3-37. Να βρεθεί η ηλεκτρονική δομή των επόμενων ιόντων:

α. $_{24}Cr^{3+}$ β. $_{29}Cu^{+}$ γ. $_{29}Cu^{2+}$ δ. $_{30}Zn^{2+}$

ε. $_{47}Ag^{+}$.

3-38. Δίνονται οι παρακάτω ηλεκτρονικές δομές:

α. $1s^2\ 2s^1\ 2p^4$ β. $1s^2 2s^2 2p^5 3s^3$ γ. $[Ar]3d'^0 4p^4$

δ. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 4p^2$.

Να εξηγήσετε, όπου είναι απαραίτητο, γιατί οι παραπάνω δομές θεμελιώδους κατάστασης δεν είναι δυνατές.

3-39. Ορισμένες από τις ηλεκτρονικές δομές ατόμων που δίνονται αναφέρονται σε διεγερμένη κατάσταση. Να γράψετε τις

αντίστοιχες ηλεκτρονικές δομές στη θεμελιώδη κατάσταση των ατόμων.

α. $1s^1\ 2s^1$
β. $1s^2\ 2s^2\ 2p^2\ 3d^1$
γ. $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 4s^1$
δ. $[Ar]\ 4s^1\ 3d^{10}\ 4p^4$
ε. $[Ne]\ 3s^2\ 3p^4\ 3d^1$

3-40. Δίνονται οι παρακάτω ηλεκτρονικές δομές:

α. $[He]\ 2s^1\ 2p^5$
β. $[Ar]\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^5$
γ. $[Ne]\ 3s^2 3p^2 4s^1$
δ. $[Kr]\ 5s^2\ 4d^{10} 5p^1$

Να βρείτε σε ποια στοιχεία ανήκουν οι ηλεκτρονικές αυτές δομές αφού προηγουμένως προσδιορίσετε αν αυτές ανήκουν σε διεγερμένα άτομα.

3-41. Το μοναδικό ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου στη θεμελιώδη κατάσταση βρίσκεται στην υποστιβάδα 1s διότι:

α. το άτομο του υδρογόνου έχει σφαιρικό σχήμα
β. η υποστιβάδα 1s χαρακτηρίζεται από την ελάχιστη ενέργεια
γ. το άτομο του υδρογόνου δεν διαθέτει άλλο ατομικό τροχιακό
δ. στην υποστιβάδα αυτή το ηλεκτρόνιο χαρακτηρίζεται από τη μέγιστη δυνατή ενέργεια.

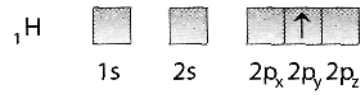
3-42. Δεν είναι ποτέ δυνατό το μοναδικό ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου να βρεθεί στην υποστιβάδα 2s ή 2p. **Σ – Λ**

3-43. Στη θεμελιώδη κατάσταση το ηλεκτρόνιο στο άτομο του υδρογόνου είναι δυνατό να βρεθεί έξω από το χώρο ο οποίος ορίζεται ως 1s ατομικό τροχιακό.

3-44. α. Έχουμε δύο άτομα υδρογόνου σε διεγερμένη κατάσταση.

Το πρώτο έχει δομή:

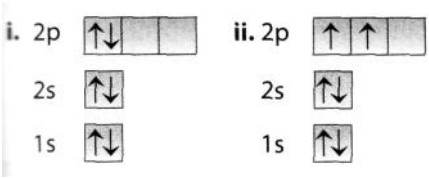
Το δεύτερο έχει δομή:



i. Σε τι διαφέρουν τα δύο ηλεκτρόνια;

ii. Ποια είναι η σχέση των ενεργειών των δύο ηλεκτρονίων;

Β. Ποια από τις παρακάτω διαμορφώσεις έχει τη μεγαλύτερη ενέργεια;



3-45. Σε ένα άτομο ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων τα οποία χαρακτηρίζονται με τους κβαντικούς αριθμούς: i) n = 3, l = 2 , ii) n =2, l = 1, m_l = -1 και

iii) n = 3, l = 3 είναι αντίστοιχα:

α. 18, 4 και 18 β.10, 2 και 0
γ. 10, 6 και 14 δ. 10, 2 και 14.

3-46. Ένα άτομο διαθέτει τρία ηλεκτρόνια στην υποστιβάδα 2p. Το άθροισμα των κβαντικών αριθμών του spin για τα τρία αυτά ηλεκτρόνια είναι:

α. $^3/_2$ β. 0 γ. $^1/_2$ δ. $-^1/_2$

3-47. Ο μικρότερος ατομικός αριθμός του στοιχείου, το άτομο του οποίου στη θεμελιώδη κατάσταση έχει συνολικά 7 ηλεκτρόνια σε τροχιακά s είναι:

α. 7 β. 13 γ. 19 δ. 29.

3-48. Ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων που μπορεί να έχει ένα άτομο και τα οποία χαρακτηρίζονται από τους κβαντικούς αριθμούς:

α) $n = 2$ β) $n = 3$, $m_l = 1$

γ) $n = 4$, $l = 1$ δ) $n = 1$, $m_s = {}^1/_2$

ε) $n = 3$, $l = 2$

είναι αντίστοιχα φ, χ, ψ, ω και z.

Να διατάξετε τους αριθμούς φ, χ, ψ, ω και z κατ' αύξουσα σειρά.

3-49. Ο μέγιστος αριθμός των ηλεκτρονίων ενός πολυηλεκτρονικού ατόμου που έχουν τους κβαντικούς αριθμούς:

i) $n = 3$ και $l = 2$ είναι α

ii) $n = 2$ και $l = 2$ είναι β

iii) $n = 4$ και $l = 1$ είναι γ

iv) $n = 1$ και $m_l = 0$ είναι δ

v) $n = 2$ και $m_s = +{}^1/_2$ είναι ε

vi) $n = 3$, $m_l = -2$ και $m_s = -{}^1/_2$ είναι ζ.

Να διατάξετε τους αριθμούς α, β, γ, δ, ε και ζ κατ' αύξουσα σειρά.

3-50. Δίνονται τα χημικά στοιχεία $Σ_1$ (Z = 21), $Σ_2$ (Z = 11), $Σ_3$ (Z = 15), $Σ_4$ (Z = 31), $Σ_5$ (Z = 17), $Σ_6$ (Z = 8).

Να διατάξετε τα στοιχεία $Σ_1$, $Σ_2$, $Σ_3$, $Σ_4$, $Σ_5$ και $Σ_6$ κατά σειρά αυξανόμενου αριθμού ηλεκτρονίων που περιέχουν τα άτομά τους στη στιβάδα σθένους.

3-51. Να διατάξετε τα στοιχεία $_{25}Mn$, $_{11}Na$, $_{7}N$, $_{14}Si$ και $_{18}Ar$ κατά σειρά αυξανόμενου αριθμού μονήρων ηλεκτρονίων που περιέχονται στα άτομά τους σε θεμελιώδη κατάσταση.

3-52. Να διατάξετε τα στοιχεία $_{16}S$, $_{10}Ne$, $_{12}Mg$, $_{35}Br$ και $_{19}K$ κατά σειρά αυξανόμενου αριθμού ηλεκτρονιακών ζευγών που περιέχονται στη στιβάδα σθένους των ατόμων τους.

3-53. Στο άτομο του αζώτου (Z = 7) περιέχονται στη θεμελιώδη του κατάσταση τρία ασύζευκτα ηλεκτρόνια. **Σ – Λ**

3-54. Το πλήθος των s υποστιβάδων σε ένα άτομο (είτε περιέχουν ηλεκτρόνια είτε όχι) είναι αριθμητικά μεγαλύτερο από τον αριθμό των υποστιβάδων p. **Σ – Λ**

3-55. Το πλήθος των s τροχιακών σε ένα άτομο (συμπληρωμένων, ημισυμπληρωμένων ή κενών) είναι αριθμητικά μεγαλύτερο από το πλήθος των p τροχιακών. **Σ – Λ**

3-56. Ο μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων για τις υποστιβάδες 1s, 2p, 3d και 4f είναι αντίστοιχα ..... , ... , ... και ..... .

3-57. Το κάθε ατομικό τροχιακό μπορεί να περιέχει από ..... μέχρι ..... ηλεκτρόνια.

3-58. Οι στιβάδες K, L, M και N:

α) αποτελούνται αντίστοιχα από ..... , ... , ... και ..... υποστιβάδες

β) αποτελούνται αντίστοιχα από ..... , ... , ... και ..... ατομικά τροχιακά.

γ) μπορεί να περιέχουν αντίστοιχα μέχρι ..... , ... , ... και ..... ηλεκτρόνια.

3-59. Ποια και πόσα συμπληρωμένα ή ημισυμπληρωμένα ατομικά τροχιακά στο άτομο του οξυγόνου (Z = 8) έχουν:

α) το ίδιο σχήμα και διαφορετικό μέγεθος

β) το ίδιο σχήμα και το ίδιο μέγεθος.

3-60. Υπολογίστε τον αριθμό των συμπληρωμένων και των ημισυμπληρωμένων ατομικών τροχιακών που περιέχονται στο

άτομο του As (Z = 33) στη θεμελιώδη του κατάσταση.

3-61. Εξετάστε πόσα ηλεκτρόνια στο άτομο του βορίου (Z = 5) χαρακτηρίζονται από την τιμή $m_s = +^1/_2$ του κβαντικού αριθμού του spin; Ποιες είναι οι τιμές των δύο πρώτων κβαντικών αριθμών για το καθένα απ' αυτά τα ηλεκτρόνια;

3-62. Ποιος είναι ο μέγιστος αριθμός μονήρων ηλεκτρονίων που μπορεί να υπάρχουν στην υποστιβάδα 2p ενός ατόμου; Διατυπώστε τον κανόνα με βάση τον οποίο προσδιορίζεται ο αριθμός αυτός και δείξτε ότι υπάρχει ένα μόνο στοιχείο τα άτομα του οποίου είναι δυνατό να έχουν το μέγιστο αριθμό μονήρων ηλεκτρονίων στην υποστιβάδα 2p, υπολογίζοντας τον ατομικό αριθμό αυτού του στοιχείου.

3-63. Υπολογίστε τον ελάχιστο ατομικό αριθμό του καθενός από τα στοιχεία $Σ_1$, $Σ_2$ και $Σ_3$ για τα οποία δίνεται ότι:

α) το $Σ_1$ έχει ημισυμπληρωμένη μία υποστιβάδα p

β) το $Σ_2$ έχει συμπληρωμένα όλα τα ατομικά τροχιακά της στιβάδας M

γ) το $Σ_3$ έχει ένα μόνο ηλεκτρόνιο σε υποστιβάδα f.

3-64. Η στιβάδα σθένους των ατόμων ενός στοιχείου Σ είναι ημισυμπληρωμένη, ενώ το άθροισμα των τιμών του κβαντικού αριθμού του spin για το σύνολο των ηλεκτρονίων στο άτομο αυτού του στοιχείου είναι ίσο με 1. Υπολογίστε τον ατομικό αριθμό του στοιχείου Σ.

3-65. Βρείτε το μέγιστο αριθμό ηλεκτρονίων σε ένα άτομο για τα οποία ισχύουν:

α) n = 3 και l = 2

β) n = 2 και $m_l = 1$

γ) n = 4, l = 3 και $m_s = +^1/_2$.

3-66. Οι τρεις πρώτοι κβαντικοί αριθμοί ενός ηλεκτρονίου στο άτομο κάποιου στοιχείου Σ που βρίσκεται στη θεμελιώδη κατάσταση διαπιστώθηκε ότι έχουν θετικές τιμές και ότι αν διαταχθούν κατάλληλα αποτελούν αριθμητική πρόοδο με λόγο 2 (διαφέρει ο καθένας από τον προηγούμενό του κατά δύο μονάδες).

α) Βρείτε τις τιμές των τριών κβαντικών αριθμών αυτού του ηλεκτρονίου.

β) Εξετάστε αν είναι δυνατό να υπάρχει στο ίδιο άτομο και δεύτερο ηλεκτρόνιο με αυτές τις τιμές των τριών πρώτων κβαντικών αριθμών.

3-67. Το άθροισμα των κβαντικών αριθμών του spin για το σύνολο των ηλεκτρονίων στο άτομο ενός στοιχείου Σ είναι ίσο με $^7/_2$.

α) Βρείτε το συνολικό αριθμό των μονήρων ηλεκτρονίων στο άτομο του Σ.

β) Δεδομένου ότι το στοιχείο Σ δεν είναι υπερουράνιο ($Z \leq 92$), βρείτε τον ατομικό του αριθμό.

3-68. Βρείτε τους ατομικούς αριθμούς:

α) του στοιχείου $Σ_1$ που διαθέτει τρία μονήρη ηλεκτρόνια στη στιβάδα M

β) του στοιχείου $Σ_2$ που διαθέτει δύο ηλεκτρονικά ζεύγη στην υποστιβάδα 4p.

3-69. Ένα ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε τροχιακό: α. της 7s, β· της2p,

γ. της4d, δ. της 5f υποστοιβάδας. Να γράψετε τις πιθανές τετράδες των κβαντικών αριθμών για το ηλεκτρόνιο.

3-70. α. Το άτομο ενός στοιχείου έχει στην εξωτερική του στοιβάδα (N) πέντε ηλεκτρόνια. Η ηλεκτρονική του δομή θα είναι:

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

Β. $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^3$

Γ. $[Ar]3d'^0 4s^2 4p'4d'4f$

Δ. Δεν μπορούμε να γνωρίζουμε, εφόσον μας είναι άγνωστος ο ατομικός του αριθμός.

β. Για το παραπάνω στοιχείο, να τοποθετη**θ**ούν σε ατομικά τροχιακά τα ηλεκτρόνια της εξωτερικής του στοιβάδας.

3-71. Να βρεθεί η ηλεκτρονική δομή των επόμενων στοιχείων:

α. Στοιχείο Χ που έχει μαζικό αριθμό 80 και στον πυρήνα του ανιόντος του X^{2-} υπάρχουν 12 νετρόνια περισσότερα από τα πρωτόνια.

β. Στοιχείο Υ του οποίου το κατιόν Y^{2+} έχει την ίδια ηλεκτρονική δομή με το τέταρτο (με βάση την αύξηση του ατομικού αριθμού) ευγενές αέριο.

3-72. Κανένα από τα γνωστά στοιχεία δεν περιέχει ηλεκτρόνια στην g (l= 4) υποστοιβάδα στη θεμελιώδη κατάσταση. Αν ανακαλυφθεί ένα στοιχείο, το οποίο να έχει ηλεκτρόνιο στην υποστοιβάδα g, ποια θα είναι η μικρότερη τιμή για τον n και για τον Z στην περίπτωση αυτή; Πόσα ηλεκτρόνια θα μπορεί να έχει η υποστοιβάδα g;

3-73. Ένα ηλεκτρόνιο έχει n = 2 και l = 1.

α. Σε ποια υποστοιβάδα ανήκει το ηλεκτρόνιο;

β. Ποιες είναι οι τιμές που μπορεί να πάρει ο m_l;

γ. Ποια είναι η επίδραση της τιμής του m_l στην ενέργεια του ηλεκτρονίου;

δ. Πόσα τέτοια ηλεκτρόνια υπάρχουν στο άτομο του άνθρακα;

3-74. Για το ευγενές αέριο Xe (Z=54), να βρεθεί ο αριθμός των ηλεκτρονίων του τα οποία έχουν στην τετράδα των κβαντικών αριθμών τους:

α. $m_l = -1$, β. l = 2.

3-75. Στο άτομο του ράδιου ($_{88}Ra$) να βρεθεί ο αριθμός των ηλεκτρονίων που έχουν:

α. n = 4, $m_s = -1/2$,

β. n = 7, l = 0

γ. n = 5, l = 3,

δ. l= 3, $m_l = -1$,

ε. 1 = 2, $m_l = +2$.

3-76. Να βρεθούν οι ατομικοί αριθμοί για τα στοιχεία Χ, Υ και Ω, αν γνωρίζουμε ότι:

α. το στοιχείο Χ έχει μονήρες ηλεκτρόνιο με τετράδα κβαντικών αριθμών (4,0, 0, +1/2),

β. το στοιχείο Υ έχει για το τελευταίο του ηλεκτρόνιο τετράδα κβαντικών αριθμών (3,1,-1,-1/2),

γ. το στοιχείο Ω έχει για τα τρία τελευταία ηλεκτρόνια του τετράδες κβαντικών αριθμών: (5,1,1,+1/2), (5,1,0,+1/2), (5,1,-1,+1/2)

3-77. Στοιχείο Χ έχει ημισυμπληρωμένη την υποστοιβάδα με l = 1.

α. Το στοιχείο Χ θα έχει μικρότερο ατομικό αριθμό ίσο με:

Α. 15 Β. 7 Γ. 3 Δ. 33 m.

Στην περίπτωση αυτή να βρεθεί ο αριθμός των ηλεκτρονίων που έχουν m_s = - 1/2 στην τετράδα των κβαντικών αριθμών.

3-78. Ποιος είναι ο μικρότερος ατομικός αριθμός ενός στοιχείου που περιέχει:

α. τρία s ηλεκτρόνια,

β. τέσσερα p ηλεκτρόνια,

γ. έξι ηλεκτρόνια σε d τροχιακά;

3-79. Ποιος είναι ο μεγαλύτερος ατομικός αριθμός ενός στοιχείου, το οποίο έχει:

α. επτά s ηλεκτρόνια,

β. δεκατέσσερα ηλεκτρόνια με l= 1,

γ. είκοσι ηλεκτρόνια σε d υποστοιβάδες;

3-80. Να βρεθούν: α. η πιθανή ηλεκτρονική δομή και

β. ο μικρότερος ατομικός αριθμός ενός στοιχείου, το οποίο έχει άθροισμα των τιμών m_s όλων των ηλεκτρονίων του ίσο με τρία.

3-81. Να βρεθούν οι ατομικοί αριθμοί:

α. του στοιχείου X με άθροισμα όλων των τιμών του l για το σύνολο των ηλεκτρονίων, του ίσο με 14,

β. του στοιχείου Y με άθροισμα όλων των κβαντικών αριθμών όλων των ηλεκτρονίων του που ανήκουν σε υποστοιβάδα d ίσο με 27,5.

3-82. Να βρεθεί ο ατομικός αριθμός για τα στοιχεία που παρουσιάζουν:

α. άθροισμα των τιμών του l όλων των ηλεκτρονίων του σε p υποστοιβάδες ίσο με 16,

β. άθροισμα των τιμών του l όλων των ηλεκτρονίων του σε d υποστοιβάδες ίσο με 12,

γ. άθροισμα των τιμών του l όλων των ηλεκτρονίων του σε f υποστοιβάδες ίσο με 6.

3-83. α. Για το στοιχείο Ca έχουμε την ηλεκτρονική δομή [Ar] $4s^2$. Τι δηλώνει ο συμβολισμός [Ar];

β. Να ταξινομηθούν κατά αύξοντα ατομικό αριθμό τα ευγενή αέρια. Ποια είναι η εξωτερική στοιβάδα για κάθε ευγενές αέριο;

γ. Ποια θα είναι η ηλεκτρονική δομή:

i.για στοιχείο με ένα ηλεκτρόνιο παραπάνω από το Ne,

ii. για στοιχείο με δύο ηλεκτρόνια παραπάνω από το Rn,

iii. για στοιχείο με πέντε ηλεκτρόνια παραπάνω από το Ar,

iv. για στοιχείο με δεκαπέντε ηλεκτρόνια παραπάνω από το Kr;

3-84. Ποιες από τις παρακάτω προτάσεις είναι σωστές και ποιες λανθασμένες;

α. Τα ατομικά τροχιακά $3p_x$, $3p_y$ και $3p_z$ έχουν διαφορετική ενέργεια.

β. Η υποστοιβάδα f (l = 3) υπάρχει μετά τη στοιβάδα L ($n \geq 3$).

γ. Ένα ατομικό τροχιακό μπορεί να μην έχει ηλεκτρόνιο ή να έχει ένα ή δύο το πολύ ηλεκτρόνια.

δ. Στο άτομο του οξυγόνου έχουμε ίσο αριθμό s και p ηλεκτρονίων.

ε. Η ηλεκτρονική δομή $[_{18}A_r]\ 4s^2\ 4p^1$ αναφέρεται στο στοιχείο με Z = 21.

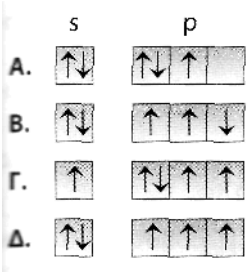
στ. Όταν βρίσκουμε την ηλεκτρονική δομή ενός στοιχείου, συμπληρώνεται η χαμηλότερη ενεργειακά στοιβάδα και στη συνέχεια

τοποθετούνται ηλεκτρόνια στην επόμενη ενεργειακά στοιβάδα, σύμφωνα με την αρχή της ελάχιστης ενέργειας.

Να αιτιολογήσετε τις απαντήσεις σας.

3-85. α. Να βρεθεί η ηλεκτρονική δομή του φωσφόρου (Z = 15).

β. Ποια από τις ηλεκτρονικές δομές που αφορούν τα ατομικά τροχιακά της εξωτερικής στοιβάδας του φωσφόρου ικανοποιούν τον κανόνα του Hund;



γ. Πόσα μονήρη ηλεκτρόνια και πόσα ζεύγη ηλεκτρονίων έχει το άτομο του φωσφόρου στην εξωτερική του στοιβάδα;