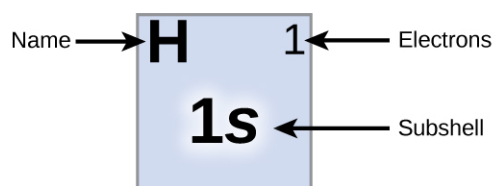


Ο περιοδικός πίνακας

Electron Configuration Table

Period	Group																	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H 1s																	He 1s
2	Li 2s	Be 2s											B 2p	C 2p	N 2p	O 2p	F 2p	Ne 2p
3	Na 3s	Mg 3s											Al 3p	Si 3p	P 3p	S 3p	Cl 3p	Ar 3p
4	K 4s	Ca 4s	Sc 3d	Ti 3d	V 3d	Cr 3d	Mn 3d	Fe 3d	Co 3d	Ni 3d	Cu 3d	Zn 3d	Ga 4p	Ge 4p	As 4p	Se 4p	Br 4p	Kr 4p
5	Rb 5s	Sr 5s	Y 4d	Zr 4d	Nb 4d	Mo 4d	Tc 4d	Ru 4d	Rh 4d	Pd 4d	Ag 4d	Cd 4d	In 5p	Sn 5p	Sb 5p	Te 5p	I 5p	Xe 5p
6	Cs 6s	Ba 6s	La* 5d	Hf 5d	Ta 5d	W 5d	Re 5d	Os 5d	Ir 5d	Pt 5d	Au 5d	Hg 5d	Tl 6p	Pb 6p	Bi 6p	Po 6p	At 6p	Rn 6p
7	Fr 7s	Ra 7s	Ac** 6d	Rf 6d	Db 6d	Sg 6d	Bh 6d	Hs 6d	Mt 6d	Ds 6d	Rg 6d	Cn 6d	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo
			* Ce 1 Pr 2 Nd 3 Pm 4 Sm 5 Eu 6 Gd 7 Tb 8 Dy 9 Ho 10 Er 11 Tm 12 Yb 13 Lu 14 4f															
			** Th 1 Pa 2 U 3 Np 4 Pu 5 Am 6 Cm 7 Bk 8 Cf 9 Es 10 Fm 11 Md 12 No 13 Lr 14 5f															



Εικόνα 1. Περιοδικός πίνακας των στοιχείων. Πάνω δεξιά σημειώνεται ο αριθμός ηλεκτρονίων στο υποκέλυφος που συμπληρώνεται τελευταίο. Οι σειρές αντιπροσωπεύουν τις επτά περιόδους και οι στήλες (εκτός 3 – 12, τα μεταβατικά μέταλλα) τις οκτώ ομάδες που παραδοσιακά συμβολίζονται με ρωμαϊκούς αριθμούς. Τα λανθανίδια (La) και τα ακτινίδια (Ac) εμφανίζονται σε ξεχωριστές γραμμές.

Πολλές από τις φυσικές και χημικές ιδιότητες των στοιχείων είναι περιοδική συνάρτηση του ατομικού αριθμού, Z , που αντιπροσωπεύει τον αριθμό των πρωτονίων στον πυρήνα και είναι ίσος με τον αριθμό των ηλεκτρονίων. Στην εικόνα 1 δίνεται ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων: οι περίοδοι αναφέρονται στις γραμμές του πίνακα και δεν είναι ίσες. Παρόλα αυτά, στοιχεία όπως H, Li, Na, K (ομάδα I) έχουν πολύ όμοιες ιδιότητες· ομοίως και τα He, Ne, Ar (ομάδα VIII). Τα στοιχεία σε μια ομάδα έχουν πολύ παρόμοιες χημικές και οπτικές ιδιότητες. Αυτό συμβαίνει επειδή οι ιδιότητες αυτές καθορίζονται από την ηλεκτρονική δομή. Τα άτομα μιας ομάδας έχουν παρόμοια ηλεκτρονική δομή.

Για την ηλεκτρονική δομή θα πρέπει να λαμβάνουμε υπόψη δύο κατευθυντήριες αρχές:

1. Η ηλεκτρονική δομή θα πρέπει να ικανοποιεί την απαγορευτική αρχή του Pauli. Επειδή για κάθε κάθε l , το m_l μπορεί να πάρει $(2l + 1)$ τιμές και επειδή για κάθε m_l η τιμή του m_s μπορεί να είναι $\pm 1/2$, σε κάθε υποκέλυφος (το σύνολο των καταστάσεων με ίδιο n και l) μπορούν να χωρέσουν $2(2l + 1)$ ηλεκτρόνια.
2. Η δομή θεμελιώδους κατάστασης είναι αυτή που η ενέργεια ελαχιστοποιείται. Στην περίπτωση του υδρογόνου η ενέργεια προέρχεται από την αλληλεπίδραση του ηλεκτρονίου και του πρωτονίου. Σε πολυηλεκτρονικά άτομα η ενέργεια προκύπτει από την αλληλεπίδραση των Z ηλεκτρονίων με τον πυρήνα αλλά και μεταξύ τους. Ο υπολογισμός αυτής της ενέργειας δεν μπορεί να γίνει αναλυτικά και χρησιμοποιούμε αριθμητικές μεθόδους. Τα σημαντικότερα αποτελέσματα του υπολογισμού μπορούν να εξηγηθούν με ποιοτικά επιχειρήματα:

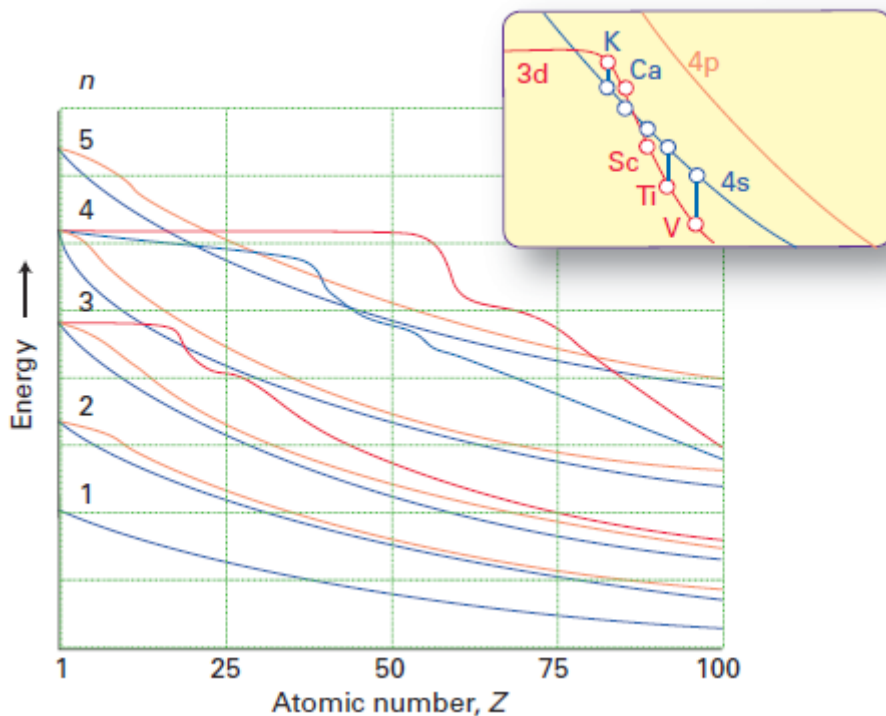
α. Η συνολική ενέργεια ενός ηλεκτρονίου σε πολυηλεκτρονικό άτομο αυξάνεται (γίνεται λιγότερο αρνητική) με αυξανόμενο n . Η αύξηση από κάποιο n στο επόμενο είναι μικρότερη για

μεγαλύτερες τιμές του n . Θυμηθείτε από την προηγούμενη ενότητα ότι καθώς αυξάνεται το n αυξάνεται και η μέση απόσταση από τον πυρήνα, επομένως τα ηλεκτρόνια σε αυτές τις καταστάσεις είναι χαλαρότερα δεσμευμένα στον πυρήνα.

β. Για δεδομένο n το ηλεκτρόνιο με το μικρότερο l έχει την χαμηλότερη ενέργεια. Στην περίπτωση του υδρογόνου οι καταστάσεις με ίδιο n και διαφορετικό l είναι εκφυλισμένες. Σε πολυηλεκτρονικά άτομα η εικόνα είναι διαφορετική. Έστω άτομο με Z ηλεκτρόνια από τα οποία τα $Z - 2$ έχουν γεμίσει έναν αριθμό υποκελύφων. Ένα πλήρες υποκέλυφος έχει σφαιρική συμμετρία. Αυτό σημαίνει ότι εξωτερικά των πλήρων υποκελύφων τα δύο υπόλοιπα ηλεκτρόνια θα βλέπουν ένα φορτίο δύο πρωτονίων. Όπως όμως είδαμε στην προηγούμενη ενότητα υπάρχει πεπερασμένη πιθανότητα αυτά τα ηλεκτρόνια να καταλάβουν τον χώρο κοντά στον πυρήνα διεισδύοντας στα εσωτερικά υποκέλυφα, εφόσον βρίσκονται σε υποκέλυφος με μικρό l . Κοντά στον πυρήνα, το φορτίο των πρωτονίων δεν καλύπτεται από τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια και τα δύο αυτά ηλεκτρόνια θα είναι ισχυρότερα δεσμευμένα, δηλ. η ενέργεια θα είναι περισσότερο αρνητική (μικρότερη). Επομένως, η ενέργεια θα είναι μικρότερη για τα ηλεκτρόνια με μικρό l .

Με βάση τις παραπάνω αρχές βλέπουμε στο περιοδικό πίνακα ότι πρώτα συμπληρώνεται από αριστερά προς τα δεξιά (αυξανόμενου του ατομικού αριθμού) με την εξής σειρά $1s, 2s, 2p, 3s, 3p$ αλλά εδώ “χαλάει” η σειρά και παρεμβάλεται το υποκέλυφος $4s$ (K και Ca) και το $3d$ ακολουθεί.¹ Αυτό είναι αποτέλεσμα των υπολογισμών – μπορούμε όμως να αποκτήσουμε μια αίσθηση για τον λόγο από το εξής επιχείρημα. Καθώς αυξάνεται το n η εξάρτηση της ενέργειας από το l γίνεται πιο σημαντική ενώ τα ηλεκτρόνια αυξάνονται. Η διαφορά στο φορτίο που αισθάνεται ένα ηλεκτρόνιο όταν είναι κοντά στον πυρήνα σε σχέση με όταν είναι μακριά είναι μεγαλύτερη όταν τα ηλεκτρόνια είναι περισσότερα παρά όταν είναι λιγότερα. Για παράδειγμα στο Li, που έχει τρία ηλεκτρόνια, το ηλεκτρόνιο στο $2s$ βλέπει ένα φορτίο ενός e όταν βρίσκεται έξω από την περιχή που καταλαμβάνουν τα $1s$ ηλεκτρόνια και $3e$ όταν είναι εσωτερικά των $1s$ – τριπλάσιο φορτίο (e είναι το φορτίο του ηλεκτρονίου ή το φορτίο του πρωτονίου). Στο K, που έχει 19 ηλεκτρόνια, το ηλεκτρόνιο στην $4s$ βλέπει ένα φορτίο e όταν βρίσκεται έξω από την περιοχή των υπολοίπων και $19e$ όταν είναι εσωτερικά αυτής – 19 φορές μεγαλύτερο. Αντιστροφές αυτού του τύπου εμφανίζονται και σε μεγαλύτερες τιμές του ατομικού αριθμού (εικόνα 2).

¹ Τα s, p, d, f αναφέρονται σε τιμές του $l = 0, 1, 2, 3$ αντίστοιχα. Τα σύμβολα προέρχονται από ονομασίες που έχουν δοθεί στις αντίστοιχες φασματικές γραμμές: *sharp, principal, diffuse, fundamental*.



Εικόνα 2. Μεταβολή της ενέργειας των υποκελύφων συναρτήσει του ατομικού αριθμού (μπλε: s , πορτοκαλί: p , κόκκινο: d – για τα $4d$ και $4f$ ειδικά, κυανό και κόκκινο αντίστοιχα – σημειώνονται τα υποκελύφη μέχρι $5p$). Προσέξτε τον εκφυλισμό στο υδρογόνο ($Z = 1$). Στο ένθετο δίνεται η λεπτομέρεια κοντά στα μέταλλα μετάπτωσης.

Τα ευγενή αέρια εκτός από το He έχουν πλήρη p υποκελύφη, κι επομένως σφαιρική συμμετρία. Το φορτίο ενός τέτοιου ατόμου φαίνεται σε άλλα γειτονικά του ως ένα ουδέτερο σημειακό φορτίο στο κέντρο του ατόμου. Επιμένως αυτά τα άτομα δεν έχουν ηλεκτρικό δίπολο (αλλά ούτε και μαγνητικό). Κάθε ηλεκτρόνιο με θετικό m_l έχει το αντίθετό του (το ίδιο και για το m_s). Ακριβώς το ίδιο ισχύει και για το spin. Επιπλέον, η διαφορά ενέργειας του υποκελύφους p με το επόμενο s είναι μεγάλη για να μπορεί να καλυφθεί από θερμική διέγερση στην θερμοκρασία δωματίου. Η ηλεκτρονική δομή είναι πολύ σταθερή για αυτά τα άτομα.

Τα αλκάλια από την άλλη έχουν την ηλεκτρονική δομή των ευγενών αερίων συν ένα ηλεκτρόνιο. Επειδή τα πληρη υποκελύφη είναι δύσκολο να διαταραχθούν οι χημικές και κάποιες φυσικές ιδιότητες καθορίζονται από την συμπεριφορά – για παράδειγμα, το οπτικό φάσμα οφείλεται στις διεγέρσεις αυτού του ηλεκτρονίου. Επειδή τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια καλύπτουν το φορτίο του πυρήνα για αυτό το εξωτερικό ηλεκτρόνιο μερικώς (για μικρό l) ή πλήρως η ενέργεια για να αποσπαστεί από το άτομο (ενέργεια ιονισμού) είναι μικρή. Έτσι τα αλκάλια είναι χημικά πολύ ενεργά. Χάνουν εύκολα το ηλεκτρόνιο αυτό σε άλλα άτομα και αλληλεπιδρούν με αυτά ηλεκτρικά (κουλομπικά). Τα περισσότερα από αυτά τα στοιχεία σχηματίζουν ιοντικά σύμπλοκα ή μεταλλικά στερεά.

Το πρώτο από τα στοιχεία μετάπτωσης είναι το Sc: εκεί ξεκινάει η πλήρωση του υποκελύφους $3d$ που ολοκληρώνεται στο Zn. Καθώς πηγαίνουμε στον πίνακα από το Sc στο Zn έχει ήδη συμπληρωθεί η $4s$. Όμως η μέση ακτίνα του $4s$ είναι μεγαλύτερη από αυτήν του $3d$ κι επομένως τα ηλεκτρόνια στο $4s$ καλύπτουν τα ηλεκτρόνια του $3d$ από εξωτερικές επιδράσεις. Έτσι, η προσθήκη ενός ακόμη ηλεκτρονίου στο $3d$ δεν αλλάζει την αλληλεπίδραση μεταξύ διαφορετικών ατόμων. Τα ηλεκτρόνια του $4s$ είναι αυτά που συμμετέχουν στον σχηματισμό δεσμών ενώ αυτά του $3s$ παραμένουν εντοπισμένα στο άτομό τους.

Η ηλεκτρονική δομή των ατόμων που προκύπτει από την θεωρία του Schroedinger είναι υπεύθυνη για την κατάταξη των στοιχείων στον περιοδικό πίνακα.