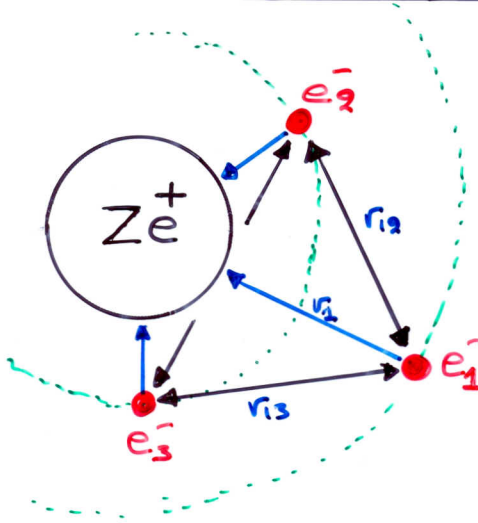


# Πολυηλεκτρονιακά Άτομα



$$V(r_1, r_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ -\frac{Z}{r_1} + \sum_{i=1}^3 \frac{1}{r_{1i}} \right]$$

Π1 :  $V(r_1) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ -\frac{Z}{r_1} + \sum_{i=1}^3 \frac{1}{r_{1i}} \right]$  εξ1

Π2 :  $\nabla V(r_1)$

↳  $\Psi = R(r) Y(\theta, \phi) \dots \rightarrow$

εξ. Schrödinger:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z_1^2} \right] + V(r_1) \Psi = E \Psi$  εξ2

Το  $\nabla$  εξαρτάται από την  $\Psi$  και η  $\Psi$  από το  $\nabla$  ???

$H\Psi = E\Psi$  με  $H, \Psi, E$  άγνωστα !!!

## Μέθοδος **Self Consistent Field**

1. κάνουμε μια "εξυπνη" υπόθεση για τα τροχιακά

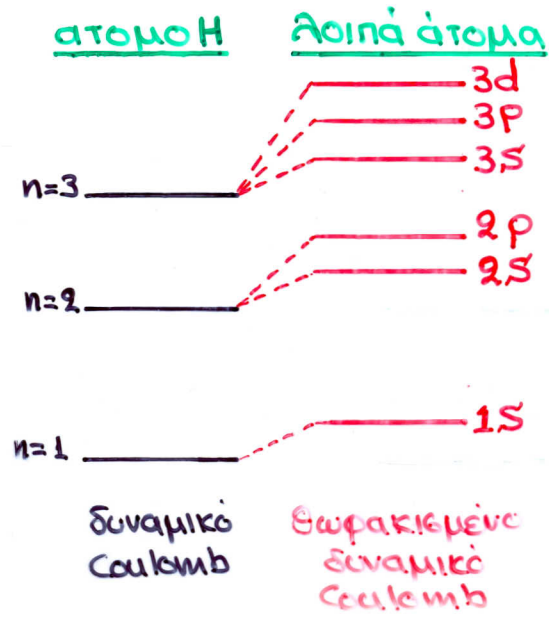
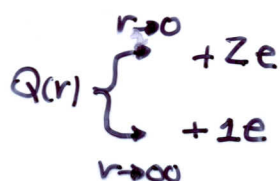
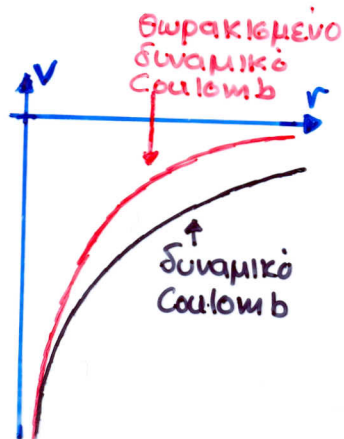
2. με τα τροχιακά αυτά υπολογίζουμε το  $\bar{V}$  εξ1

3. λύνουμε αριθμητικά την εξ.2 και βρίσκουμε ιδιοενέργειες  $E_k$  και τροχιακά  $\Psi_k$

4.

Επαναλαμβάνουμε έως ότου η μέθοδος να ευχκλίνει

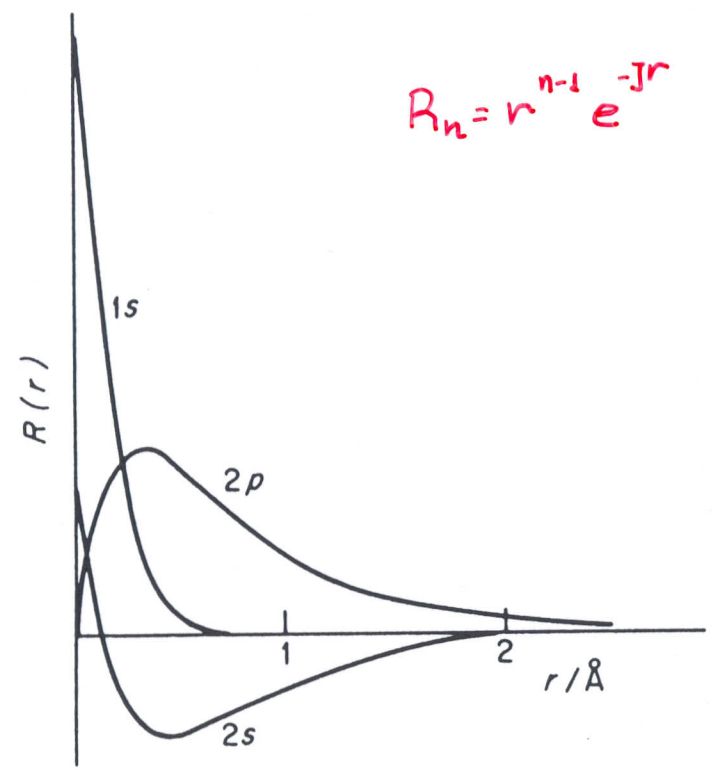
(να μην αλλάξουν τα τροχιακά και το  $V$  σε κάθε νέο κύκλο)



μορφή. Οι ευρύτερα χρησιμοποιούμενες συναρτήσεις είναι γνωστές ως τροχιακά Slater ή συναρτήσεις Slater. Τα ακτινικά μέρη τέτοιων συναρτήσεων έχουν τη μορφή

$$R_n = r^{n-1} \exp(-\zeta r) \tag{3.35}$$

όπου ο εκθέτης  $\zeta$  εξαρτάται από το άτομο και τον κβαντικό αριθμό  $\ell$ . Αν και έχουν δοθεί κανόνες για την επιλογή της καλύτερης τιμής του  $\zeta$ , αυτοί οι κανόνες δεν χρησιμοποιούνται σήμερα πολύ. Αντί αυτού, δείχνουμε στον Πίνακα 3.2 τιμές που προκύπτουν από ακριβείς υπολογισμούς για τα άτομα  $H - Ne$ .



Σχήμα 3.8 Οι ακτινικές κυματοσυναρτήσεις για τα ατομικά τροχιακά 1s, 2s και 2p του άνθρακα.

Από τη σχέση (3.35) βλέπουμε ότι τα τροχιακά Slater 1s, και 2s, έχουν τη μορφή:

$$R_{1s} = \exp(-\zeta_1 r), \tag{3.36}$$

$$R_{2s} = r \exp(-\zeta_2 r). \tag{3.37}$$

σωστή συνδυάζοντας τροχιακά Slater. Για παράδειγμα, για  $\theta$  συνάρτηση

$$kR_{1s} - R_{2s} = k \exp(-\zeta_1 r) - r \exp(-\zeta_2 r)$$

είναι θετική για  $r = 0$ , έχει έναν κόμβο σε κάποια πεπειρασμένη  $r$  και μειώνεται εκθετικά καθώς το  $r \rightarrow \infty$ . Έτσι συμπεριφέρονται τα τροχιακά 2s των Σχημάτων 3.4 και 3.8.

Μπορούμε να έχουμε πιο ακριβείς απεικονίσεις των τροχιακών συνδυάζοντας ακόμη περισσότερες συναρτήσεις (3.35). Πρότυπες ομάδες τέτοιων συναρτήσεων έχουν ήδη δημ

Πίνακας 3.2 Οι καλύτερες τιμές των εκθετών ( $\zeta$ ) των ατομικών τροχιακών για τα ελεύθερα άτομα όπως ορίζονται από την εξίσωση (3.35). [Clementi and Raimondi, J. Chem. Phys., 38, 2686 (1963)].

|    | 1s     | 2s     | 2p     |
|----|--------|--------|--------|
| H  | 1,0    | ---    | ---    |
| He | 1,6875 | ---    | ---    |
| Li | 2,6906 | 0,6396 | ---    |
| Be | 3,6848 | 0,9560 | ---    |
| B  | 4,6795 | 1,2881 | 1,2107 |
| C  | 5,6727 | 1,6083 | 1,5679 |
| N  | 6,6651 | 1,9237 | 1,9170 |
| O  | 7,6579 | 2,2458 | 2,2266 |
| F  | 8,6501 | 2,5638 | 2,5500 |
| Ne | 9,6421 | 2,8792 | 2,8792 |

### 3.5 Οι ενέργειες των ατομικών τροχιακών

Το τέλος του 19ου αιώνα ήταν μια περίοδος μεγάλης δραστηριότητας στη μελέτη των διακριτών μηκών κύματος του φωτός που εκπέμπουν από θερμά άτομα. Τα δεδομένα αυτά, τελικά ερμηνεύθηκαν με τη βοήθεια του Bohr για τις κβαντισμένες ενεργειακές καταστάσεις του ατόμου. Έγινε ένα πρώτο σημαντικό βήμα και από τους Balmer, Rydberg και άλλους.

Ο Balmer, το 1855, έφτασε στο πολύ σημαντικό συμπέρασμα

## ΠΕΡΙΟΔΙΚΟ ΣΥΣΤΗΜΑ ΤΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

Η περιοδική επανεμφάνιση στοιχείων με παρόμοιες χημικές ιδιότητες οδύνησε τον Ρώσο φυσικό Mendeleev το 1869 στην ανακάλυψη του περιοδικού συστήματος

- Bohr - 1921 - Αρχή Οικοδόμησης : Η ηλεκτρονική δομή ενός ατόμου χτίζεται από εκείνη του προηγούμενου, με την προσθήκη ενός ηλεκτρονίου στο χαμηλότερης ενέργειας τροχιακό.
  - Αναγορευτική Αρχή του Pauli
  - Γενικευμένη Αρχή του Pauli : Δύο ατομικά ηλεκτρόνια ζεύονται να απομακρύνονται όταν τα spin τους είναι παράλληλα και να πλησιάζουν όταν είναι αντιπαράλληλα.
  - Τα τροχιακά συμπληρώνονται εκεί ώστε πρώτα να γεμίσει αυτά με μικρότερο άθροισμα  $(n+l)$ . Όταν περισσότερα από ένα έχουν την ίδια τιμή  $(n+l)$  τότε συμπληρώνονται πρώτα αυτά με τη μεγαλύτερη τιμή του  $l$
- $E(n,d) \approx E[(n+1)s]$  ,  $E(n,f) \approx E[(n+1)d]$
- Cr  $4s3d^5$  όχι  $4s^23d^4$  } συμπληρωμένα ή ημι συμπληρωμένα στοιχεία  
 Cu  $4s3d^{10}$  όχι  $4s^23d^9$  } φαίνεται να έχουν μια επιπλέον σταθερότητα
- Γιατί η χημική συμπεριφορά εφάρμοζεται από τον κβαντικό αριθμό  $l$  της στροφορμής και όχι από τον κύριο κβαντικό αριθμό ;

# PERIODIC TABLE

## Atomic Properties of the Elements

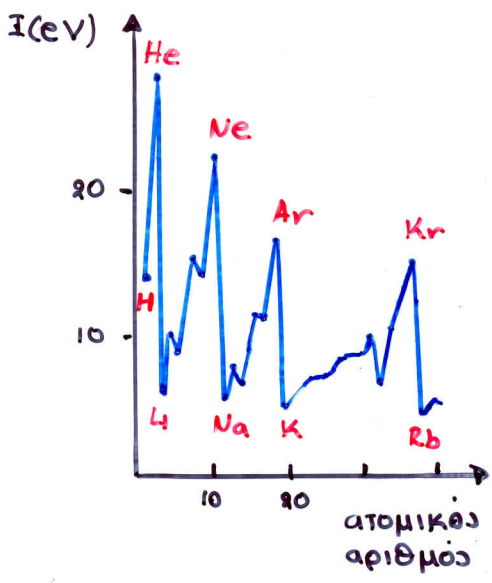
U.S. DEPARTMENT OF COMMERCE  
Technology Administration  
National Institute of Standards and Technology

**Frequently used fundamental physical constants**  
 For the most accurate values of these and other constants, visit [physics.nist.gov/constants](http://physics.nist.gov/constants)  
 1 second = 9 192 631 770 periods of radiation corresponding to the transition between the two hyperfine levels of the ground state of <sup>133</sup>Cs

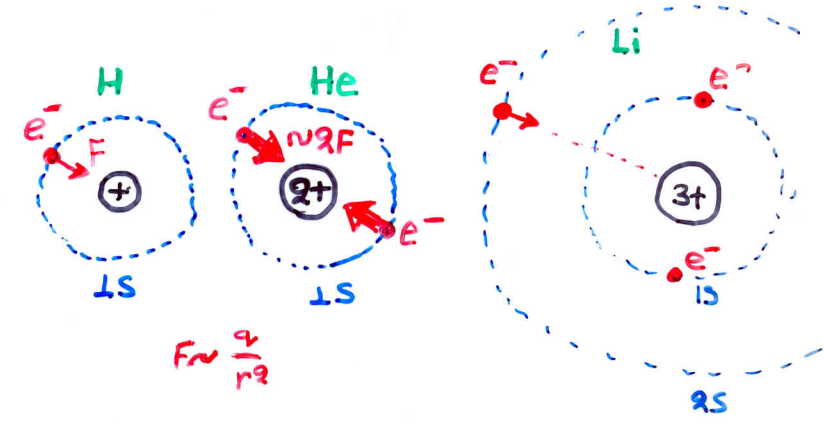
|                          |                                   |  |                            |
|--------------------------|-----------------------------------|--|----------------------------|
| speed of light in vacuum | <i>c</i>                          | 299 792 458 m s <sup>-1</sup>                | (exact)                    |
| Planck constant          | <i>h</i>                          | 6.6261 × 10 <sup>-34</sup> J s               | ( <i>h</i> = <i>h</i> /2π) |
| elementary charge        | <i>e</i>                          | 1.6022 × 10 <sup>-19</sup> C                 |                            |
| electron mass            | <i>m<sub>e</sub></i>              | 9.1094 × 10 <sup>-31</sup> kg                |                            |
|                          | <i>m<sub>e</sub>c<sup>2</sup></i> | 0.5110 MeV                                   |                            |
| proton mass              | <i>m<sub>p</sub></i>              | 1.6726 × 10 <sup>-27</sup> kg                |                            |
| fine-structure constant  | <i>α</i>                          | 1/137.036                                    |                            |
| Rydberg constant         | <i>R<sub>∞</sub></i>              | 10 973 732 m <sup>-1</sup>                   |                            |
|                          | <i>R<sub>∞c</sub></i>             | 3.289 84 × 10 <sup>16</sup> Hz               |                            |
|                          | <i>R<sub>∞hc</sub></i>            | 13.6057 eV                                   |                            |
| Boltzmann constant       | <i>k</i>                          | 1.3807 × 10 <sup>-23</sup> J K <sup>-1</sup> |                            |

| Group | IA   | PERIODIC TABLE  |   |  |   |  |  |   |  |   |   |   |  |  |   |   |   | VIII  |  |
|-------|--|---|---|--|---|--|--|---|--|---|---|---|--|--|---|---|---|---|--|
| 1     | <sup>1</sup> H<br>Hydrogen<br>1.00794<br>1s<br>13.5984             |   |   |  |   |  |  |   |  |   |   |   |  |  |   |   |   | <sup>2</sup> He<br>Helium<br>4.00260<br>1s <sup>2</sup><br>24.5874                                      |  |
| 2     | <sup>3</sup> Li<br>Lithium<br>6.941<br>1s <sup>2</sup> s<br>5.3917 | <sup>4</sup> Be<br>Beryllium<br>9.01218<br>1s <sup>2</sup> s <sup>2</sup><br>9.3227 |   |  |   |  |  |   |  |   |   |   |  |  |   |   |   |   |  |
| 3     | <sup>11</sup> Na<br>Sodium<br>22.98977<br>[Ne]3s<br>5.1391         | <sup>12</sup> Mg<br>Magnesium<br>24.3050<br>[Ne]3s <sup>2</sup><br>7.6462           |   |  |   |  |  |   |  |   |   |   |  |  |   |   |   |   |  |
| 4     | <sup>19</sup> K<br>Potassium<br>39.0983<br>[Ar]4s<br>4.3407        | <sup>20</sup> Ca<br>Calcium<br>40.078<br>[Ar]4s <sup>2</sup><br>6.1132              | <sup>21</sup> Sc<br>Scandium<br>44.95591<br>[Ar]3d4s <sup>2</sup><br>6.5615                                 | <sup>22</sup> Ti<br>Titanium<br>47.867<br>[Ar]3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup><br>6.8281                    | <sup>23</sup> V<br>Vanadium<br>50.9415<br>[Ar]3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup><br>6.7462                 | <sup>24</sup> Cr<br>Chromium<br>51.9961<br>[Ar]3d <sup>5</sup> 4s<br>6.7665                              | <sup>25</sup> Mn<br>Manganese<br>54.93805<br>[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup><br>7.4340             | <sup>26</sup> Fe<br>Iron<br>55.845<br>[Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup><br>7.9024                       | <sup>27</sup> Co<br>Cobalt<br>58.93320<br>[Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup><br>7.8810      | <sup>28</sup> Ni<br>Nickel<br>58.6934<br>[Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup><br>7.6398      | <sup>29</sup> Cu<br>Copper<br>63.546<br>[Ar]3d <sup>10</sup> 4s<br>7.7264                 | <sup>30</sup> Zn<br>Zinc<br>65.39<br>[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup><br>9.3942   | <sup>31</sup> Ga<br>Gallium<br>69.723<br>[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p<br>5.9993                       | <sup>32</sup> Ge<br>Germanium<br>72.61<br>[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup><br>7.8994 | <sup>33</sup> As<br>Arsenic<br>74.92160<br>[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup><br>9.7886 | <sup>34</sup> Se<br>Selenium<br>78.96<br>[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup><br>9.7524   | <sup>35</sup> Br<br>Bromine<br>79.904<br>[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup><br>11.8138  | <sup>36</sup> Kr<br>Krypton<br>83.80<br>[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup><br>13.9996 |  |
| 5     | <sup>37</sup> Rb<br>Rubidium<br>85.4678<br>[Kr]5s<br>4.1771        | <sup>38</sup> Sr<br>Strontium<br>87.62<br>[Kr]5s <sup>2</sup><br>5.6949             | <sup>39</sup> Y<br>Yttrium<br>88.90585<br>[Kr]4d5s <sup>2</sup><br>6.2171                                   | <sup>40</sup> Zr<br>Zirconium<br>91.224<br>[Kr]4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup><br>6.6339                   | <sup>41</sup> Nb<br>Niobium<br>92.90638<br>[Kr]4d <sup>4</sup> 5s<br>6.7589                             | <sup>42</sup> Mo<br>Molybdenum<br>95.94<br>[Kr]4d <sup>5</sup> 5s<br>7.0924                              | <sup>43</sup> Tc<br>Technetium<br>(98)<br>[Kr]4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup><br>7.28                  | <sup>44</sup> Ru<br>Ruthenium<br>101.07<br>[Kr]4d <sup>7</sup> 5s<br>7.3605                               | <sup>45</sup> Rh<br>Rhodium<br>102.90550<br>[Kr]4d <sup>8</sup> 5s<br>7.4589                 | <sup>46</sup> Pd<br>Palladium<br>106.42<br>[Kr]4d <sup>10</sup><br>8.3369                   | <sup>47</sup> Ag<br>Silver<br>107.8682<br>[Kr]4d <sup>10</sup> 5s<br>7.5762               | <sup>48</sup> Cd<br>Cadmium<br>112.411<br>[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup><br>8.9938  | <sup>49</sup> In<br>Indium<br>114.818<br>[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p<br>5.7864                       | <sup>50</sup> Sn<br>Tin<br>118.710<br>[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup><br>7.3439     | <sup>51</sup> Sb<br>Antimony<br>121.760<br>[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup><br>8.6084 | <sup>52</sup> Te<br>Tellurium<br>127.60<br>[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup><br>9.0096 | <sup>53</sup> I<br>Iodine<br>126.90447<br>[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup><br>10.4513 | <sup>54</sup> Xe<br>Xenon<br>131.29<br>[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup><br>12.1298  |  |
| 6     | <sup>55</sup> Cs<br>Cesium<br>132.90545<br>[Xe]6s<br>3.8939        | <sup>56</sup> Ba<br>Barium<br>137.327<br>[Xe]6s <sup>2</sup><br>5.2117              | <sup>72</sup> Hf<br>Hafnium<br>178.49<br>[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>2</sup> 6s <sup>2</sup><br>6.8251     | <sup>73</sup> Ta<br>Tantalum<br>180.9479<br>[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup><br>7.5496 | <sup>74</sup> W<br>Tungsten<br>183.84<br>[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup><br>7.8640 | <sup>75</sup> Re<br>Rhenium<br>186.207<br>[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup><br>7.8335 | <sup>76</sup> Os<br>Osmium<br>195.23<br>[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup><br>8.4382 | <sup>77</sup> Ir<br>Iridium<br>192.2217<br>[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup><br>8.9670 | <sup>78</sup> Pt<br>Platinum<br>195.078<br>[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup> 6s<br>8.9587 | <sup>79</sup> Au<br>Gold<br>196.96655<br>[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s<br>9.2255 | <sup>80</sup> Hg<br>Mercury<br>200.59<br>10.4375  | <sup>81</sup> Tl<br>Thallium<br>204.3833<br>[Hg]6p<br>6.1082  | <sup>82</sup> Pb<br>Lead<br>207.2<br>[Hg]6p <sup>2</sup><br>7.4167   | <sup>83</sup> Bi<br>Bismuth<br>208.98038<br>[Hg]6p <sup>3</sup><br>7.2856                                | <sup>84</sup> Po<br>Polonium<br>(209)<br>[Hg]6p <sup>4</sup><br>6.1843                                    | <sup>85</sup> At<br>Astatine<br>(210)<br>[Hg]6p <sup>5</sup><br>6.417?                                    | <sup>86</sup> Rn<br>Radon<br>(222)<br>[Hg]6p <sup>6</sup><br>10.7485                                      |   |  |
| 7     | <sup>87</sup> Fr<br>Francium<br>(223)<br>[Rn]7s<br>4.0727          | <sup>88</sup> Ra<br>Radium<br>(226)<br>[Rn]7s <sup>2</sup><br>5.2784                | <sup>104</sup> Rf<br>Rutherfordium<br>(261)<br>[Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup><br>6.0? | <sup>105</sup> Db<br>Dubnium<br>(262)  | <sup>106</sup> Sg<br>Seaborgium<br>(263)  | <sup>107</sup> Bh<br>Bohrium<br>(264)  | <sup>108</sup> Hs<br>Hassium<br>(265)  | <sup>109</sup> Mt<br>Meitnerium<br>(268)  | <sup>110</sup> Uun<br>Ununnilium<br>(269)  | <sup>111</sup> Uuu<br>Unununium<br>(272)  | <sup>112</sup> Uub<br>Ununbium  | <input type="checkbox"/> Solids<br><input type="checkbox"/> Liquids<br><input type="checkbox"/> Gases<br><input type="checkbox"/> Artificially Prepared | For a description of the atomic data, visit <a href="http://physics.nist.gov/atomic">physics.nist.gov/atomic</a> |  |   |   |   |   |  |
|       |  |   | <sup>57</sup> La<br>Lanthanum<br>138.9055<br>[Xe]5d6s <sup>2</sup><br>5.5769                                | <sup>58</sup> Ce<br>Cerium<br>140.116<br>[Xe]4f15d6s <sup>2</sup><br>5.5387                                | <sup>59</sup> Pr<br>Praseodymium<br>140.90765<br>[Xe]4f <sup>3</sup><br>5.473                           | <sup>60</sup> Nd<br>Neodymium<br>144.24<br>[Xe]4f <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup><br>5.5250                 | <sup>61</sup> Pm<br>Promethium<br>(145)<br>[Xe]4f <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup><br>5.582                | <sup>62</sup> Sm<br>Samarium<br>150.36<br>[Xe]4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup><br>5.6436                   | <sup>63</sup> Eu<br>Europium<br>151.964<br>[Xe]4f <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup><br>5.6704     | <sup>64</sup> Gd<br>Gadolinium<br>157.25<br>[Xe]4f <sup>7</sup> 5d6s <sup>2</sup><br>6.1501 | <sup>65</sup> Tb<br>Terbium<br>158.92534<br>[Xe]4f <sup>9</sup> 6s <sup>2</sup><br>5.8638 | <sup>66</sup> Dy<br>Dysprosium<br>162.50<br>[Xe]4f <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup><br>5.9389  | <sup>67</sup> Ho<br>Holmium<br>164.93032<br>[Xe]4f <sup>11</sup> 6s <sup>2</sup><br>6.0215                       | <sup>68</sup> Er<br>Erbium<br>167.26<br>[Xe]4f <sup>12</sup> 6s <sup>2</sup><br>6.1077                   | <sup>69</sup> Tm<br>Thulium<br>168.93421<br>[Xe]4f <sup>13</sup> 6s <sup>2</sup><br>6.2542                | <sup>70</sup> Yb<br>Ytterbium<br>173.04<br>[Xe]4f <sup>14</sup> 6s <sup>2</sup><br>6.2542                 | <sup>71</sup> Lu<br>Lutetium<br>174.967<br>[Xe]4f <sup>14</sup> 5d6s <sup>2</sup><br>5.4259               |   |  |
|       |  |   | <sup>89</sup> Ac<br>Actinium<br>(227)<br>[Rn]6d7s <sup>2</sup><br>5.17                                      | <sup>90</sup> Th<br>Thorium<br>232.0381<br>[Rn]6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup><br>6.3067                   | <sup>91</sup> Pa<br>Protactinium<br>231.03588<br>[Rn]5f <sup>2</sup> 6d7s <sup>2</sup><br>5.89          | <sup>92</sup> U<br>Uranium<br>238.0289<br>[Rn]5f <sup>3</sup> 6d7s <sup>2</sup><br>6.1941                | <sup>93</sup> Np<br>Neptunium<br>(237)<br>[Rn]5f <sup>4</sup> 6d7s <sup>2</sup><br>6.2657              | <sup>94</sup> Pu<br>Plutonium<br>(244)<br>[Rn]5f <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup><br>6.0262                   | <sup>95</sup> Am<br>Americium<br>(243)<br>[Rn]5f <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup><br>5.9738      | <sup>96</sup> Cm<br>Curium<br>(247)<br>[Rn]5f <sup>8</sup> 6d7s <sup>2</sup><br>5.9915      | <sup>97</sup> Bk<br>Berkelium<br>(247)<br>[Rn]5f <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup><br>6.1979   | <sup>98</sup> Cf<br>Californium<br>(251)<br>[Rn]5f <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup><br>6.2817  | <sup>99</sup> Es<br>Einsteinium<br>(252)<br>[Rn]5f <sup>11</sup> 7s <sup>2</sup><br>6.42                         | <sup>100</sup> Fm<br>Fermium<br>(257)<br>[Rn]5f <sup>12</sup> 7s <sup>2</sup><br>6.50                    | <sup>101</sup> Md<br>Mendelevium<br>(258)<br>[Rn]5f <sup>13</sup> 7s <sup>2</sup><br>6.58                 | <sup>102</sup> No<br>Nobelium<br>(259)<br>[Rn]5f <sup>14</sup> 7s <sup>2</sup><br>6.65                    | <sup>103</sup> Lr<br>Lawrencium<br>(262)<br>[Rn]5f <sup>14</sup> 7p <sup>1</sup><br>4.9?                  |   |  |

Atomic Number: 58  
Ground-state Level: <sup>1</sup>G<sub>4</sub>  
Symbol: Ce  
Name: Cerium  
Atomic Weight: 140.116  
Ground-state Configuration: [Xe]4f15d6s<sup>2</sup>  
Ionization Energy (eV): 5.5387



Δυναμικό Ιονισμού (I): Ενέργεια που απαιτείται για να αφαιρεθεί ένα ηλεκτρόνιο από ένα άτομο, στη θεμελιώδη κατάσταση.



Ηλεκτραρνητικό ζήτη (χ): "προθυμία" να δεχτεί ένα άτομο ηλεκτρόνιο το άτομο

Ηλεκτρονική Συγγένεια (A): η ενέργεια που ελευθερείται όταν ένα ηλεκτρόνιο προσδεθεί σε ένα άτομο

$$\chi = \frac{1}{2}(I + A) \quad \text{τύπος Mulliken}$$



χ: η τάση ενός ατόμου να αποκτήσει εύκολα μέσο όρος της ευκολίας να δώσει (A) και της δυσκολίας να πάρει (I)

Ατομικές Ακτίνες:

van der Waals: ενέργεια αλληλεπίδρασης ατόμου σε κατάσταση χωρίς δεσμό

ομοιοπολική / ιοντική: ενέργεια αλληλεπίδρασης ατόμου σε ομοιοπολικό / ιοντικό δεσμό.

τιμές των ιοντικών ακτίνων (δίνονται στον Πίνακα 4.7) δεν συμφωνούν με τιμές που υπολογίζονται από μελέτες ακτίνων X σε ιοντικούς κρυστάλλους<sup>2</sup>. Τέτοιου είδους μετρήσεις αποκαλύπτουν ότι, αντίθετα με την γενική πεποίθηση, η ακτίνα ενός ιόντος δεν είναι μία σταθερή ποσότητα.

Πίνακας 4.7 Ατομικές ακτίνες (Å) ορισμένων ατόμων.

|           | Ακτίνα<br>μέγιστης<br>πυκνότητας <sup>a</sup> | Ακτίνα van<br>der Waals<br>(Pauling) <sup>b</sup> | Ομοιοπολική<br>ακτίνα<br>(απλός δεσμός) <sup>c</sup> | Ιοντική<br>ακτίνα <sup>b</sup>   |
|-----------|---|---|--|----------------------------------|
| <i>H</i>  | 0,53  | 1,2   | 0,28   | 1,54 ( <i>H</i> <sup>-</sup> )   |
| <i>He</i> | 0,30  |   |  |                                  |
| <i>Li</i> | 1,50  |   |  | 0,68 ( <i>Li</i> <sup>+</sup> )  |
| <i>Be</i> | 1,19  |   |  | 0,35 ( <i>Be</i> <sup>2+</sup> ) |
| <i>B</i>  | 0,85  |   |  | 0,23 ( <i>B</i> <sup>3+</sup> )  |
| <i>C</i>  | 0,66  |   | 0,77   |                                  |
| <i>N</i>  | 0,53  | 1,5   | 0,70   |                                  |
| <i>O</i>  | 0,45  | 1,40  | 0,66   | 1,32 ( <i>O</i> <sup>2-</sup> )  |
| <i>F</i>  | 0,38  | 1,35  | 0,64   | 1,33 ( <i>F</i> <sup>-</sup> )   |
| <i>Ne</i> | 0,32  |   |  |                                  |
| <i>Na</i> | 1,55  |   |  | 0,97 ( <i>Na</i> <sup>+</sup> )  |
| <i>Mg</i> | 1,32  |   |  | 0,66 ( <i>Mg</i> <sup>2+</sup> ) |
| <i>Al</i> | 1,21  |   |  | 0,51 ( <i>Al</i> <sup>3+</sup> ) |
| <i>Si</i> | 1,06  |   | 1,17   |                                  |
| <i>P</i>  | 0,92  | 1,9   | 1,10   |                                  |
| <i>S</i>  | 0,82  | 1,85  | 1,04   | 1,84 ( <i>S</i> <sup>2-</sup> )  |
| <i>Cl</i> | 0,75  | 1,80  | 0,99   | 1,81 ( <i>Cl</i> <sup>-</sup> )  |
| <i>Ar</i> | 0,67  |   |  |                                  |

<sup>a</sup> J. C. Slater, *Quantum Theory of Atomic Structure*, vol 1, McGraw Hill, New York, 1960.

<sup>b</sup> *Handbook of Chemistry and Physics*, Chemical Rubber Co., 56th Edition.

<sup>c</sup> F. A. Cotton and G. Wilkinson, *Advanced Inorganic Chemistry*, Interscience, Cleveland, Ohio, 1975; New York, 1962.

<sup>2</sup>D. F. C. Morris, *Structure and Bonding*, 4, 63 (1968).