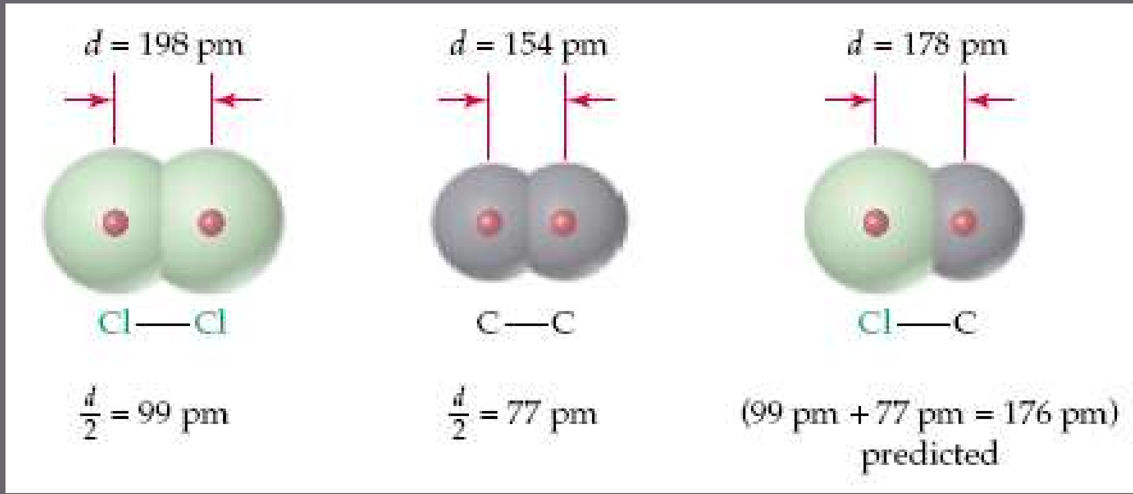
Τμήμα Επιστήμης Τροφίμων & Διατροφής
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας (Καρδίτσα)

Ανόργανη Χημεία

Ενότητα 4η: Περιοδικότητα & Ατομική Δομή

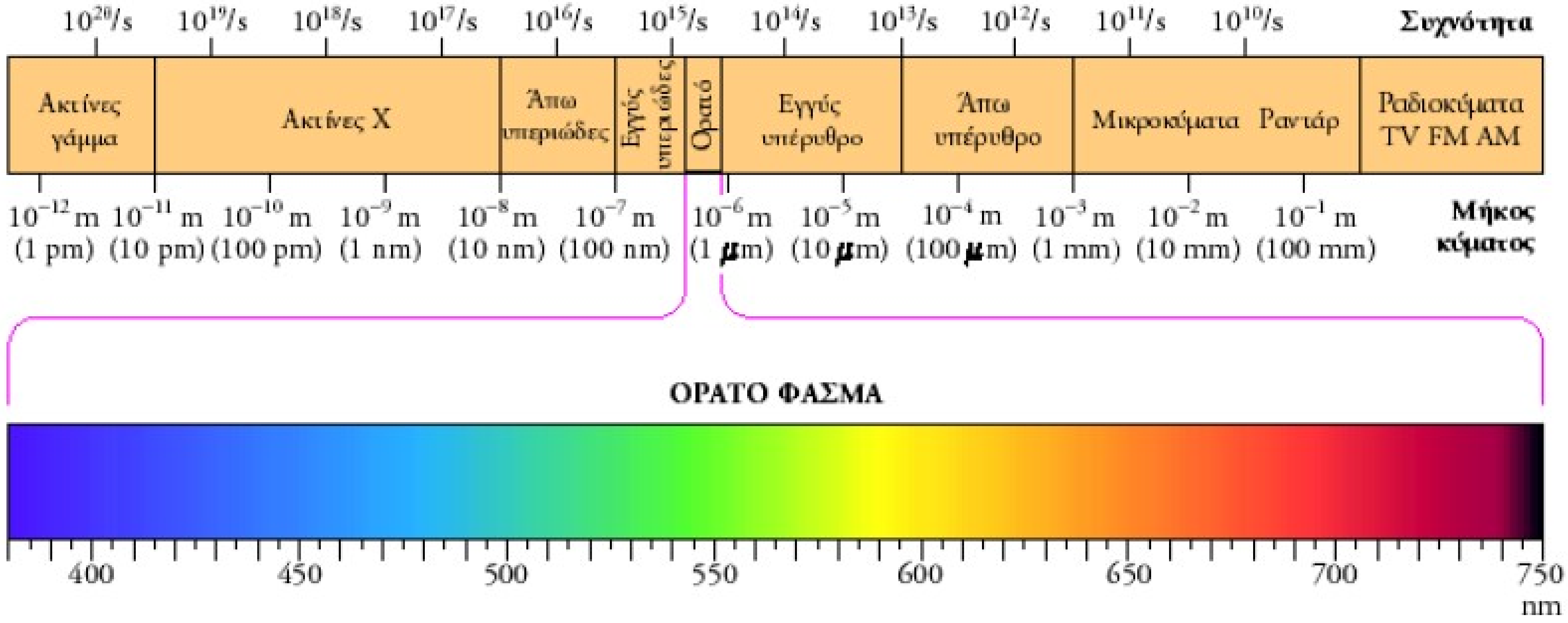


Οκτώβριος 2020

Δρ. Λάκκα Αχιλλεία – ΠΔ 407

Φως & Ηλεκτρομαγνητικό Φάσμα

Το ορατό φως, η υπεριώδης ακτινοβολία, τα μικροκύματα, τα ραδιοκύματα και οι ακτίνες X είναι διάφορες μορφές **ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας**.

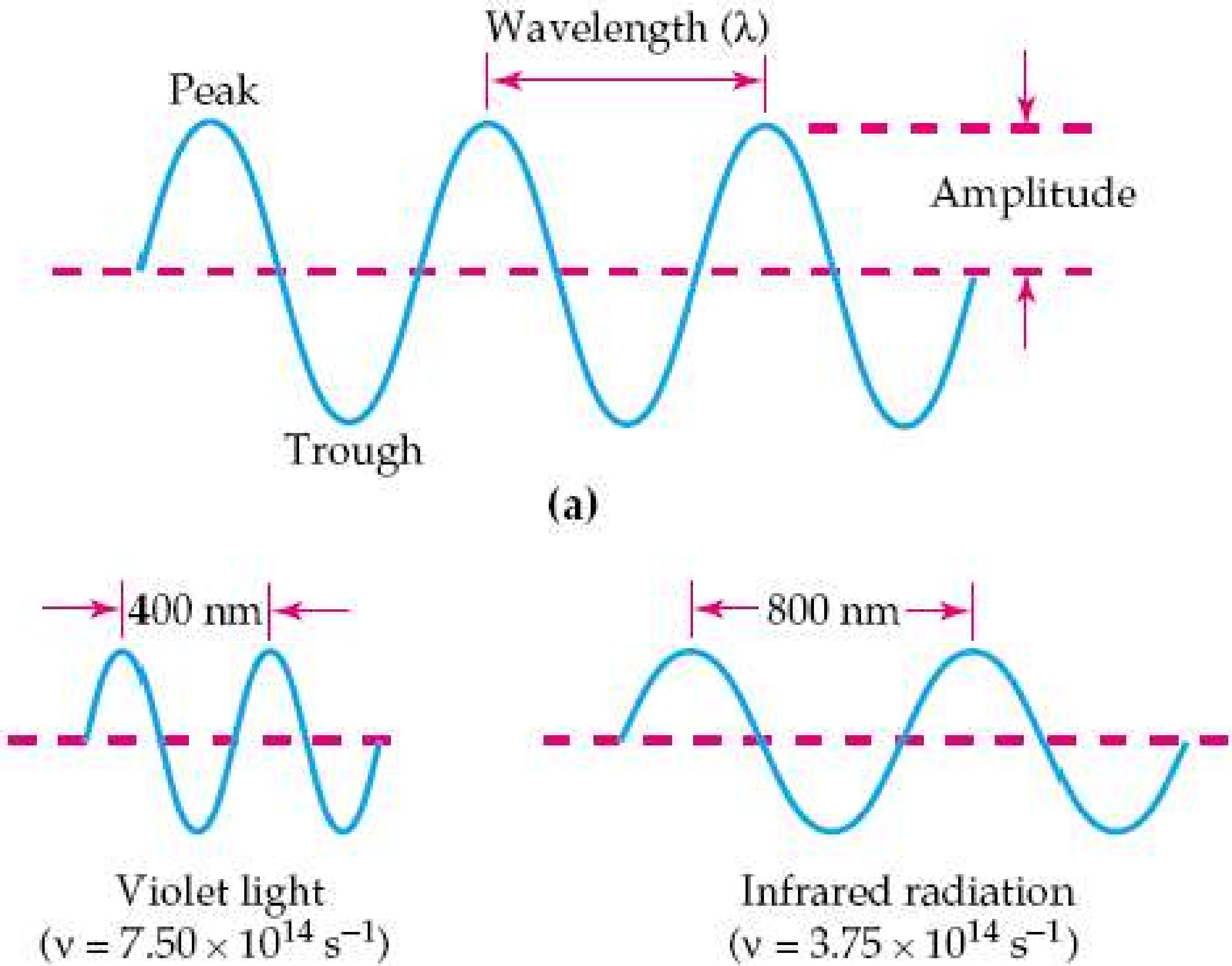


Φως & Ηλεκτρομαγνητικό Φάσμα

Η ηλεκτρομαγνητική (Η/Μ) ακτινοβολία χαρακτηρίζεται από τη *συχνότητα (frequency)*, το *μήκος κύματος (wavelength)* και το *πλάτος (amplitude)*.

Η συχνότητα (*ν*) ενός κύματος είναι ο αριθμός των κυματικών κορυφών που περνάνε από ένα δεδομένο σημείο ανά μονάδα χρόνου και εκφράζεται είτε ως 1/s (s^{-1}) είτε ως **hertz** (1 Hz = 1 s^{-1}).

Το μήκος κύματος (*λ*) είναι η απόσταση της μιας κυματικής κορυφής από την επόμενη και το πλάτος είναι το ύψος που ορίζεται από την απόσταση της κεντρικής γραμμής μεταξύ κορυφής και του κατώτατου σημείου κάμψης.



Wavelength (λ)
Peak
Amplitude
Trough
(a)
400 nm
800 nm
Violet light
($\nu = 7.50 \times 10^{14}\ s^{-1}$)
Infrared radiation
($\nu = 3.75 \times 10^{14}\ s^{-1}$)

Φως & Ηλεκτρομαγνητικό Φάσμα

Πολλαπλασιάζοντας το μήκος κύματος (m) με τη συχνότητα (s^{-1}) ενός κύματος, υπολογίζεται η ταχύτητα του κύματος, εκπεφρασμένη σε m/s. Η ταχύτητα με την οποία όλη η Η/Μ ακτινοβολία διέρχεται μέσα από το κενό είναι σταθερή και ονομάζεται *ταχύτητα του φωτός* (*c*). Η αριθμητική τιμή της είναι 2.997 924 58 $\times$ 10^8 m/s, συνήθως στρογγυλεμένη ως 3.00 $\times$ 10^8.

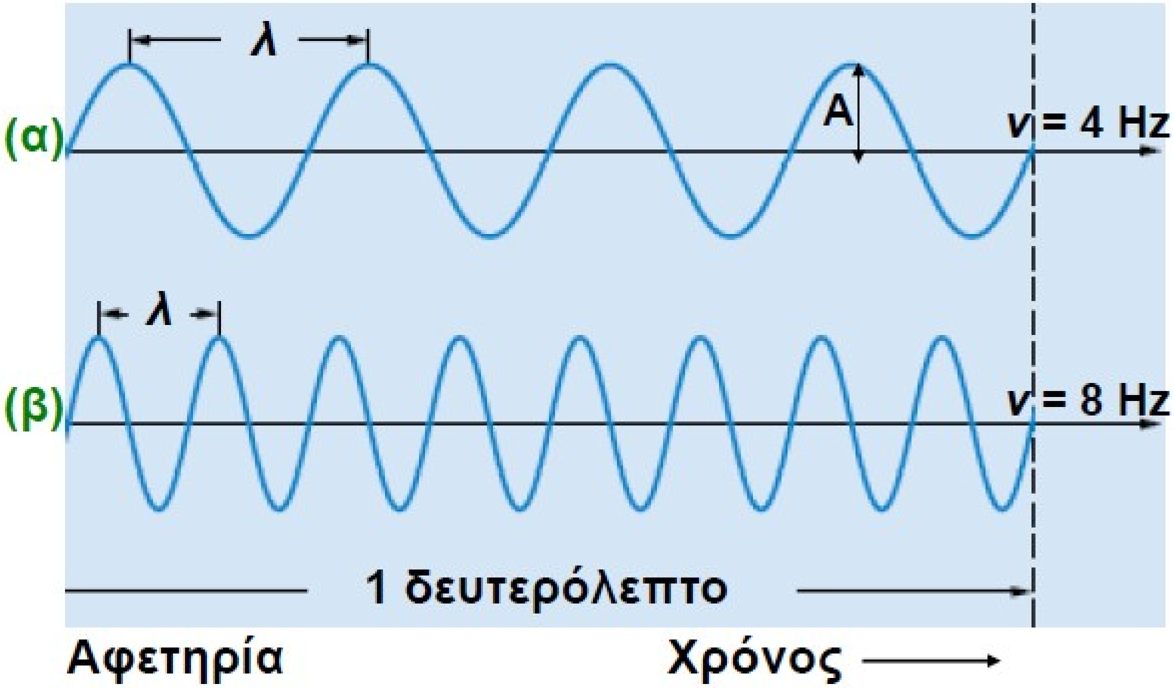
$$\text{Wavelength} \times \text{Frequency} = \text{Speed}$$
$$\lambda(\text{m}) \times \nu(\text{s}^{-1}) = c(\text{m/s})$$

which can be rewritten as:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \qquad \text{or} \qquad \nu = \frac{c}{\lambda}$$

Αυτή η εξίσωση δηλώνει ότι η συχνότητα και το μήκος κύματος σχετίζονται αντίστροφα. Δηλαδή, Η/Μ ακτινοβολία με μεγάλο μήκος κύματος έχει χαμηλή συχνότητα και το αντίστροφο.

Φως & Ηλεκτρομαγνητικό Φάσμα



A = πλάτος του κύματος

Σχέσεις

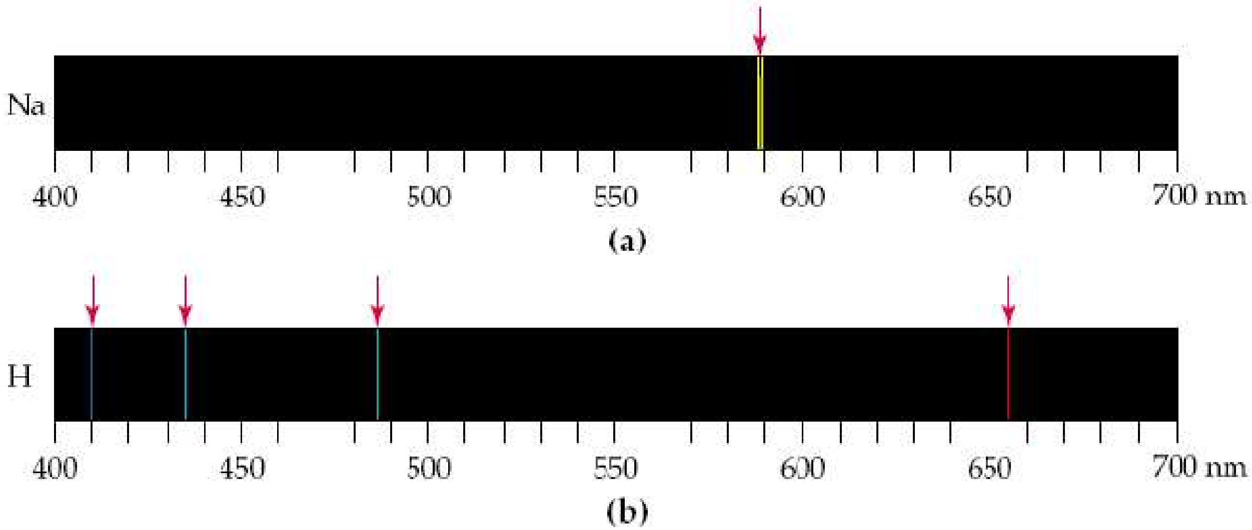
$c_\alpha = c_\beta$
$\lambda_\alpha = 2\lambda_\beta$
$\nu_\beta = 2\nu_\alpha$

Ταχύτητα κύματος (c): $c = \nu\,\lambda$ (στο κενό $c = 2{,}998 \times 10^8$ m s^{-1})

Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία & Ατομικά Φάσματα

Τα άτομα εκπέμπουν φως όταν θερμαίνονται ή διεγείρονται ενεργειακώς με οποιοδήποτε άλλο τρόπο, δίνοντας έτσι πληροφορίες για την ατομική του δομή. Το φως που εκπέμπεται από ένα διεγερμένο άτομο αποτελείται από μερικά μόνο μήκη κύματος και δίνει μια σειρά διακριτών γραμμών, διαχωρισμένων από κενές περιοχές. Αυτό είναι ένα **ατομικό φάσμα**.

Για παράδειγμα, εάν θερμάνουμε ένα άλας Na, όπως το NaCl, τα διεγερμένα άτομα Na παράγουν ένα κίτρινο φως. Τα άτομα του H παράγουν ένα κυανόχρωμο φως, αποτελούμενο από διάφορα χρώματα.



Σωματιδιακές Ιδιότητες της Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας - Η Εξίσωση Planck

Μελετώντας την ακτινοβολία που εκλύεται από αντικείμενα που έχουν θερμανθεί, ο Planck συμπέρανε ότι η ενέργεια που ακτινοβολείται από ένα θερμαινόμενο αντικείμενο δεν μπορεί να μεταβάλλεται μ' ένα συνεχή τρόπο. Αντιθέτως, η ενέργεια εκπέμπεται σε διακριτές ποσότητες, τα **κβάντα**.

Η ποσότητα της ενέργειας, *E*, που συνδέεται με ένα κβάντο Η/Μ ενέργειας εξαρτάται από τη συχνότητα της ακτινοβολίας, *ν*, σύμφωνα με τη εξίσωση:

$$E = h\nu$$

$$\text{or, since } \nu = \frac{c}{\lambda}, \qquad E = \frac{hc}{\lambda}$$

Το σύμβολο *h* αντιπροσωπεύει μια θεμελιώδη φυσική σταθερά, η οποία ονομάζεται σταθερά Planck ($h = 6.626 \times 10^{-34}$ J·s).

Σωματιδιακές Ιδιότητες της Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας
Η Εξίσωση του Planck

Υψηλότερες συχνότητες και βραχεία μήκη κύματος αντιστοιχούν σε ακτινοβολία υψηλότερης ενέργειας, ενώ χαμηλότερες συχνότητες και μακρύτερα μήκη κύματος αντιστοιχούν σε χαμηλή ενέργεια.

Για παράδειγμα, το κυανό φως ($\lambda \approx 450$ nm) έχει βραχύτερο μήκος κύματος και φέρει περισσότερη ενέργεια από το ερυθρό φως ($\lambda \approx 650$ nm). Ομοίως, μια ακτίνα X ($\lambda \approx 1$ nm) έχει μικρότερο μήκος κύματος και φέρει περισσότερη ενέργεια απ’ ότι ένα ραδιοκύμα FM ($\lambda \approx 10^{10}$ nm ή 10 m).

Κυματικές Ιδιότητες της Ύλης - Η Εξίσωση de Broglie

Ο de Broglie πρότεινε ότι εάν το φως μπορεί να συμπεριφέρεται σε ορισμένες περιπτώσεις ως ύλη (υπό τη μορφή σωματιδίων που ονομάζονται φωτόνια), τότε ίσως και η ύλη να μπορεί να συμπεριφερθεί ως φως. Δηλαδή, και το φως και η ύλη μπορούν να συμπεριφέρονται και ως σωματίδια και ως κύματα.

Για την υποστήριξη αυτής της θεωρίας, ο de Broglie χρησιμοποίησε την εξίσωση του Einstein:

$$\text{Since } E = mc^2 \qquad \text{then} \quad m = \frac{E}{c^2}$$

Κυματικές Ιδιότητες της Ύλης - Η Εξίσωση de Broglie

Επειδή $E = hc/\lambda$, σύμφωνα με την εξίσωση Planck, είναι δυνατό ν' αντικατασταθεί το E για να ληφθεί μια παράγωγη εξίσωση, που συνδέει τη μάζα με το μήκος κύματος:

$$m = \frac{E}{c^2} = \frac{hc/\lambda}{c^2} = \frac{h}{\lambda c}$$

Ο de Broglie πρότεινε ότι μια παρόμοια εξίσωση μπορεί να εφαρμοστεί σ' ένα ηλεκτρόνιο, αντικαθιστώντας την ταχύτητα του φωτός (c) με την ταχύτητα του ηλεκτρονίου (u).

Η **εξίσωση de Broglie**, λοιπόν, επιτρέπει τον υπολογισμό του «μήκους κύματος» ενός ηλεκτρονίου ή οποιουδήποτε άλλου σωματιδίου ή αντικειμένου, που έχει μάζα m και κινείται με ταχύτητα u:

DE BROGLIE EQUATION $\quad m = \dfrac{h}{\lambda v} \quad$ or $\quad \lambda = \dfrac{h}{mv}$

Κβαντική Μηχανική & Η Αρχή Αβεβαιότητας του Heisenberg

Ο Heisenberg διατύπωσε ότι είναι αδύνατο να γνωρίζουμε ακριβώς που βρίσκεται ένα ηλεκτρόνιο και ποια πορεία ακολουθεί. Αυτή η διατύπωση ονομάστηκε **Αρχή Αβεβαιότητας του Heisenberg**. Με μαθηματικούς όρους, η αρχή του Heisenberg εκφράζει ότι η αβεβαιότητα της θέσης ενός ηλεκτρονίου, Δ*x*, επί την αβεβαιότητα της ορμής του, Δ*mu*, ισούται ή είναι μεγαλύτερη της ποσότητας *h*/4π.

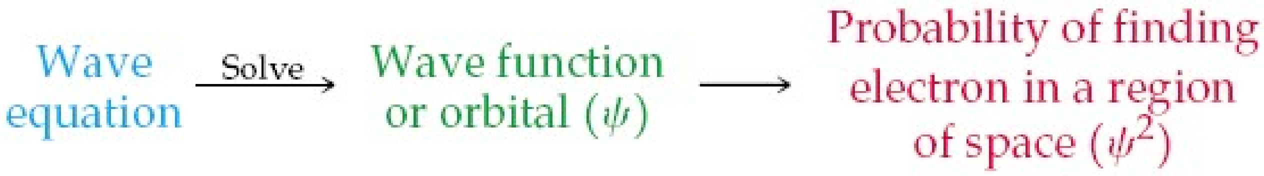
HEISENBERG UNCERTAINTY PRINCIPLE $$(\Delta x)(\Delta mv) \geq \frac{h}{4\pi}$$

Σύμφωνα μ' αυτή την εξίσωση, δεν μπορεί ποτέ να είναι γνωστά και η θέση και η ταχύτητα ενός ηλεκτρονίου (ή οποιουδήποτε άλλου αντικειμένου), πέρα από κάποιο όριο ακρίβειας. Εάν γνωρίζουμε την ταχύτητα με μεγάλο βαθμό βεβαιότητας (μικρή Δ*mu*) , τότε η θέση ενός ηλεκτρόνιου πρέπει να είναι αβέβαιη (η Δ*x* πρέπει να είναι μεγάλη) και αντιστρόφως.

Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

Το μοντέλο κβαντικής μηχανικής της ατομικής δομής του Schrödinger πλαισιώνεται στη μορφή μιας *κυματικής εξίσωσης*, και είναι μια μαθηματική εξίσωση παρόμοιας μορφής με αυτή που χρησιμοποιείται να περιγράψει τα συνήθη κύματα στα ρευστά.

Οι λύσεις αυτής της εξίσωσης (υπάρχουν περισσότερες από μία) ονομάζονται **κυματικές συναρτήσεις** ή **τροχιακά** και αναπαριστώνται με το σύμβολο ψ. Η έκφραση ψ^2 ορίζει την πιθανότητα της παρουσίας ενός ηλεκτρονίου μέσα σ' ένα δεδομένο όγκο γύρω από τον πυρήνα. Όπως ορίζει η αρχή του Heisenberg, δεν υπάρχει απόλυτη βεβαιότητα για τη θέση ενός ηλεκτρονίου. Εντούτοις, μια κυματική συνάρτηση μπορεί να δηλώσει που υπάρχουν περισσότερες πιθανότητες να βρίσκεται ένα ηλεκτρόνιο.



Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

- Μια κυματική συνάρτηση περιέχει τρεις μεταβλητές που ονομάζονται **κβαντικοί αριθμοί** και αναπαριστώνται ως n, l και m_l. Αυτοί οι αριθμοί περιγράφουν το επίπεδο ενέργειας ενός τροχιακού και το τρισδιάστατο σχήμα της περιοχής στο χώρο, όπου βρίσκεται το ηλεκτρόνιο. Ένας τέταρτος κβαντικός αριθμός m_s αναφέρεται σε μία μαγνητική ιδιότητα των ηλεκτρονίων που λέγεται spin.

- Ο **κύριος κβαντικός αριθμός (*n*)** είναι ένας θετικός ακέραιος ($n = 1, 2, 3$ κτλ.) από τον οποίο εξαρτώνται κυρίως το μέγεθος και το ενεργειακό επίπεδο ενός τροχιακού. Όσο μικρότερος είναι ο n τόσο χαμηλότερη είναι η ενέργεια του ηλεκτρονίου σε ένα άτομο. Όσο μεγαλύτερος είναι ο n τόσο μεγαλύτερο και το τροχιακό.

Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

Καθώς αυξάνει η τιμή *n*, αυξάνει και ο αριθμός των επιτρεπόμενων τροχιακών και το μέγεθος αυτών των τροχιακών μεγεθύνεται, επιτρέποντας έτσι στο ηλεκτρόνιο να βρίσκεται σε μεγαλύτερη απόσταση από τον πυρήνα.

Επειδή απαιτείται ενέργεια για την απομάκρυνση ενός αρνητικού από ένα θετικό φορτίο, αυτή η αυξημένη απόσταση μεταξύ του πυρήνα και του ηλεκτρονίου σημαίνει ότι <u>η ενέργεια του ηλεκτρονίου στο τροχιακό αυξάνει, καθώς αυξάνει ο κβαντικός αριθμός *n*.</u>

Τα τροχιακά συχνά αναφέρονται σαν να είναι ομαδοποιημένα, σύμφωνα με τον αριθμό *n* σε διαδοχικά στρώματα, ή φλοιούς / στιβάδες, γύρω από το άτομο. Για παράδειγμα, τα τροχιακά με *n* = 3 βρίσκονται στην τρίτη στιβάδα.

Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

- Τροχιακά της ίδιας κβαντικής κατάστασης n λέμε ότι ανήκουν στην ίδια στιβάδα.

Γράμμα	K	L	M	N	…
n	1	2	3	4	…

- Για άτομα που περιέχουν ένα ηλεκτρόνιο (υδρογόνο), η ενέργεια ενός τροχιακού εξαρτάται μόνο από το *n*. Για άτομα με περισσότερα ηλεκτρόνια εξαρτάται και από το *n* και από το *l*.

Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

- Ο **κβαντικός αριθμός στροφορμής (*l*)** διακρίνει τροχιακά δεδομένου n, τα οποία έχουν διαφορετικά σχήματα. Για ένα τροχιακό του οποίου ο κύριος κβαντικός αριθμός είναι *n*, ο αριθμός *l* μπορεί να πάρει τιμές οποιοδήποτε ακέραιο αριθμό από το 0 έως το *n* – 1. Μέσα σε κάθε στιβάδα, δηλαδή, υπάρχουν *n* διαφορετικά είδη τροχιακών, καθένα με το δικό του σχήμα που υποδηλώνεται από τον κβαντικό αριθμό l.

  If $n = 1$, then $l = 0$
  If $n = 2$, then $l = 0$ or 1
  If $n = 3$, then $l = 0, 1,$ or 2

- Τα τροχιακά ομαδοποιούνται, σύμφωνα με τον αριθμό *l*, σε υποστιβάδες. Οι διαφορετικές υποστιβάδες αναφέρονται με τα γράμματα *s, p, d,* και *f.* Μετά το *f*, οι συμβολισμοί γίνονται με γράμματα του αγγλοσαξονικού αλφάβητου, κατ' αλφαβητική σειρά (*g*, *h*, *i* κτλ.).

Quantum number *l*:	0	1	2	3	4 . . .
Subshell notation:	*s*	*p*	*d*	*f*	*g* . . .

Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

Για παράδειγμα, ένα τροχιακό με $n = 3$ και $l = 2$ είναι ένα *3d* τροχιακό. Το *3* αντιπροσωπεύει την τρίτη στοιβάδα και το *d* τη $l = 2$ υποστιβάδα.

- Ο **μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l)** διακρίνει τροχιακά δεδομένων n και l (ενέργειας και σχήματος), τα οποία όμως έχουν διαφορετικό προσανατολισμό στο χώρο. Για ένα τροχιακό του οποίου ο κβαντικός αριθμός στροφορμής είναι l, η τιμή m_l μπορεί να είναι οποιοσδήποτε ακέραιος αριθμός μεταξύ $-l$ και $+l$. Έτσι, μέσα σε κάθε υποστιβάδα υπάρχουν $2l + 1$ διαφορετικοί χωρικοί προσανατολισμοί γι’ αυτά τα τροχιακά.

$$\text{If } l = 0, \text{ then } m_l = 0$$
$$\text{If } l = 1, \text{ then } m_l = -1, 0, \text{ or } +1$$
$$\text{If } l = 2, \text{ then } m_l = -2, -1, 0, +1, \text{ or } +2$$

Allowed Combinations of Quantum Numbers n, l, and m_l for the First Four Shells

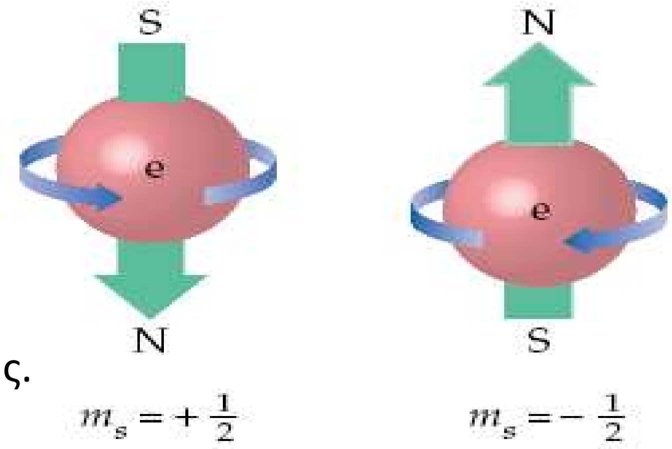
n	l	m_l	Orbital Notation	Number of Orbitals in Subshell	Number of Orbitals in Shell
1	0	0	1*s*	1	1
2	0	0	2*s*	1	4
	1	−1, 0, +1	2*p*	3	
3	0	0	3*s*	1	9
	1	−1, 0, +1	3*p*	3	
	2	−2, −1, 0, +1, +2	3*d*	5	
4	0	0	4*s*	1	16
	1	−1, 0, +1	4*p*	3	
	2	−2, −1, 0, +1, +2	4*d*	5	
	3	−3, −2, −1, 0, +1, +2, +3	4*f*	7	

Κυματικές Συναρτήσεις & Κβαντικοί Αριθμοί

- **Ο κβαντικός αριθμός του spin**, m_s αναφέρεται στους δύο δυνατούς προσανατολισμούς του άξονα αυτοστροφής (spin) του ηλεκτρονίου. Τα ηλεκτρόνια συμπεριφέρονται και ως περιστρεφόμενα γύρω από έναν άξονα, και αυτή η περιστροφή μπορεί να είναι σύμφωνα ή αντίθετα με την κίνηση των δεικτών του ρολογιού. Επειδή τα ηλεκτρόνια είναι φορτισμένα, το περιστροφικό φορτίο δημιουργεί ένα ασθενές μαγνητικό πεδίο, το οποίο περιγράφεται από τον **κβαντικό αριθμό περιστροφής** (ή **κβαντικό αριθμό spin**), m_s.

- Ο αριθμός m_s μπορεί να λάβει δύο τιμές – ½ ή + ½.

Ο αριθμός m_s είναι ανεξάρτητος των τριών άλλων κβαντικών αριθμών, οι οποίοι σχετίζονται μεταξύ τους.



- Εξακριβώστε αν καθεμιά από τις ακόλουθες τετράδες κβαντικών αριθμών είναι επιτρεπτή για ένα ηλεκτρόνιο ατόμου. Αν κάποια δεν είναι επιτρεπτή, εξηγήστε για ποιον λόγο.

α) $n = 1, l=1, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$

β) $n = 3, l= 1, m_l = -2, m_s = -\frac{1}{2}$

γ) $n = 2, l= 1, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$

δ) $n = 2, l= 0, m_l = 0, m_s = 1$

Συσχέτιση χαρακτηρισμού τροχιακών με κβαντικούς αριθμούς

(α) Πώς χαρακτηρίζεται το τροχιακό με τους κβαντικούς αριθμούς n = 4, l= 2 και ml = 0;

(β) Ποιοι είναι οι τρεις κβαντικοί αριθμοί που αντιστοιχούν σε ένα τροχιακό 5p;

(γ) Πόσα τροχιακά έχουν τις τιμές n = 5 και l = 2;

(α) $\ell = 2 \Rightarrow$ *d* τροχιακό $\quad n = 4 \Rightarrow$ **4*d*** τροχιακό

(β) 5*p* $\Rightarrow n = 5$, $p \Rightarrow \ell = 1 \Rightarrow m_\ell = +1$ ή 0 ή -1

(γ) Για $\ell = 2 \Rightarrow m_\ell = +2, +1, 0, -1, -2 \Rightarrow$ 5 τροχιακά

Τα Σχήματα των Τροχιακών

Από τις διάφορες πιθανότητες, τα τροχιακά *s*, *p*, *d* και *f* είναι τα πιο σημαντικά, επειδή μόνο αυτά καταλαμβάνονται από ηλεκτρόνια στα γνωστά στοιχεία.

Τροχιακά *s*

Όλα τα *s* τροχιακά είναι σφαιρικά, που σημαίνει ότι η πιθανότητα εύρεσης ενός ηλεκτρονίου εξαρτάται μόνο από την απόσταση από τον πυρήνα και όχι από την κατεύθυνση. Επιπλέον, επειδή υπάρχει μόνο ένας πιθανός προσανατολισμός μιας σφαίρας στο χώρο, ένα *s* τροχιακό έχει $m_l = 0$ και υπάρχει μόνο ένα *s* τροχιακό ανά στοιβάδα.

Τα Σχήματα των Τροχιακών

Η τιμή ψ^2 για ένα *s* τροχιακό είναι υψηλή κοντά στον πυρήνα και μειώνεται δραστικά καθώς η απόσταση από τον πυρήνα αυξάνει, αν και δεν μηδενίζεται ποτέ, ακόμα και για μεγάλες αποστάσεις.

Αν και όλα τα *s* τροχιακά είναι σφαιρικά, υπάρχουν σημαντικές διαφορές μεταξύ των *s* τροχιακών των διαφόρων στοιβάδων.

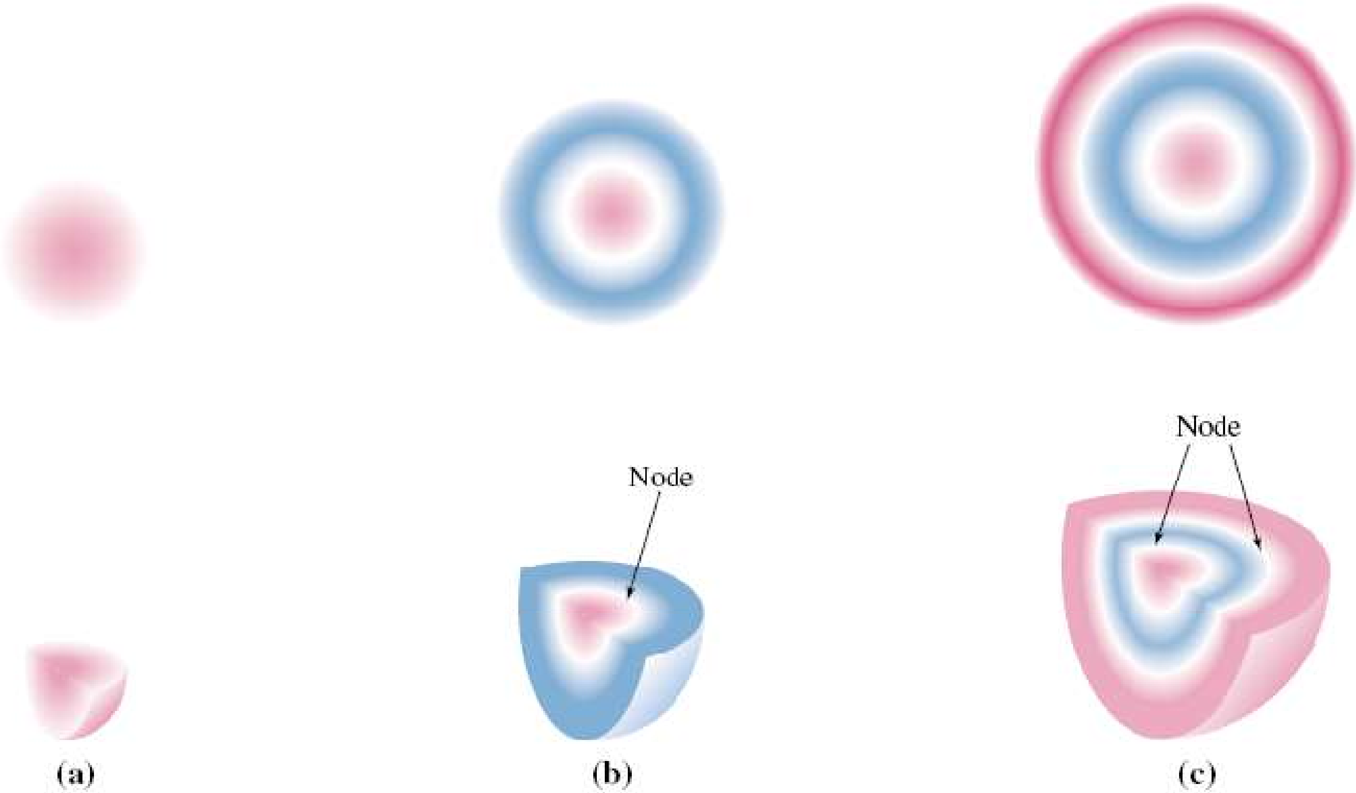
Πρώτον, γιατί το μέγεθος ενός *s* τροχιακού αυξάνει στις διαδοχικές υψηλότερες στοιβάδες, που σημαίνει ότι ένα ηλεκτρόνιο σ' ένα *s* τροχιακό εξώτερης στοιβάδας βρίσκεται μακρύτερα από τον πυρήνα.

Δεύτερον, η ηλεκτρονιακή κατανομή σ' ένα *s* τροχιακό εξώτερης στοιβάδας έχει αρκετές περιοχές υψηλής πιθανότητας.

Τα Σχήματα των Τροχιακών

Για παράδειγμα, ένα 2*s* τροχιακό είναι σαν σφαίρα μέσα σε σφαίρα. Υπάρχουν δύο περιοχές υψηλής πιθανότητας, που διαχωρίζονται από μια επιφάνεια μηδενικής πιθανότητας, που ονομάζεται **κόμβος**.

Ομοίως, ένα 3*s* τροχιακό έχει τρεις περιοχές υψηλής πιθανότητας και δύο σφαιρικούς κόμβους.

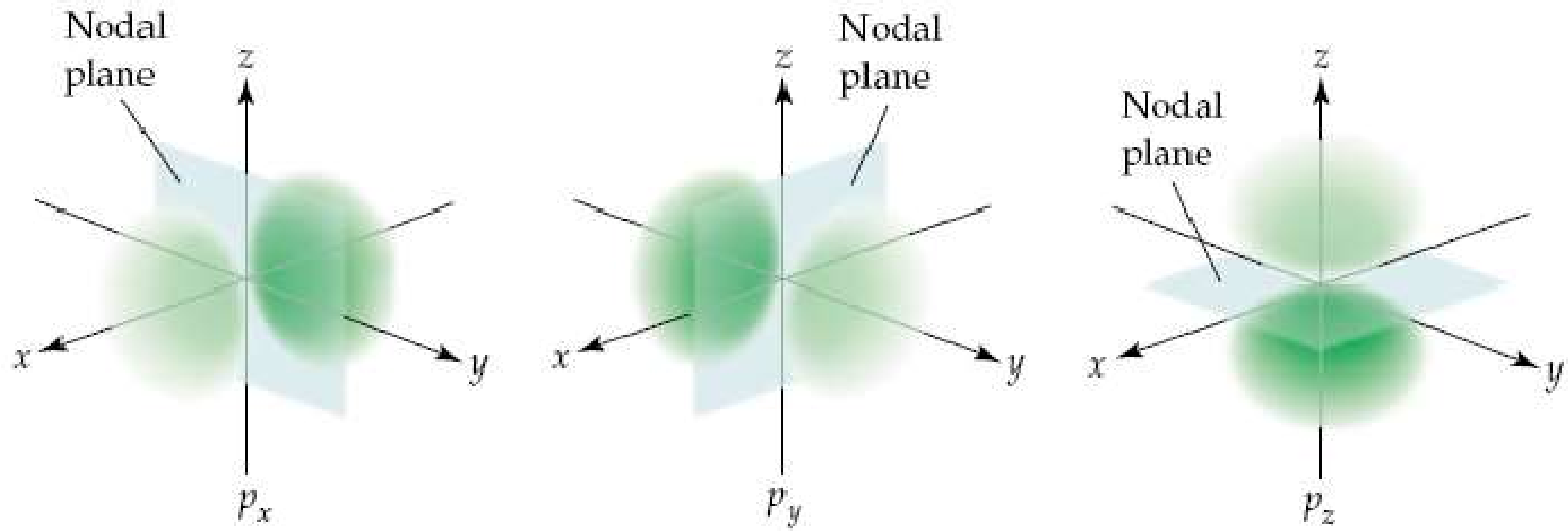

Node
Node
(a)
(b)
(c)

Τα Σχήματα των Τροχιακών

Τροχιακά *p*

Τα *p* τροχιακά έχουν σχήμα «αλτήρα» και η κατανομή των ηλεκτρονίων συγκεντρώνεται σε δύο πανομοιότυπους λοβούς εκατέρωθεν του πυρήνα, που διαχωρίζονται από ένα επίπεδο κόμβο, ο οποίος διαπερνάει τον πυρήνα. Ως αποτέλεσμα, η πιθανότητα να βρίσκεται ένα *p* ηλεκτρόνιο κοντά στον πυρήνα είναι 0.

Υπάρχουν τρεις επιτρεπτές τιμές για τον αριθμό m_l, όταν $l = 1$. Έτσι, κάθε στοιβάδα έχει τρία *p* τροχιακά, τα οποία είναι προσανατολισμένα στο χώρο σε γωνίες 90° μεταξύ τους, κατά μήκος τριών συντεταγμένων *x*, *y*, *z*. Για παράδειγμα, τα τρία *p* τροχιακά της δεύτερης στοιβάδας προσδιορίζονται ως $2p_x$, $2p_y$ και $2p_z$.



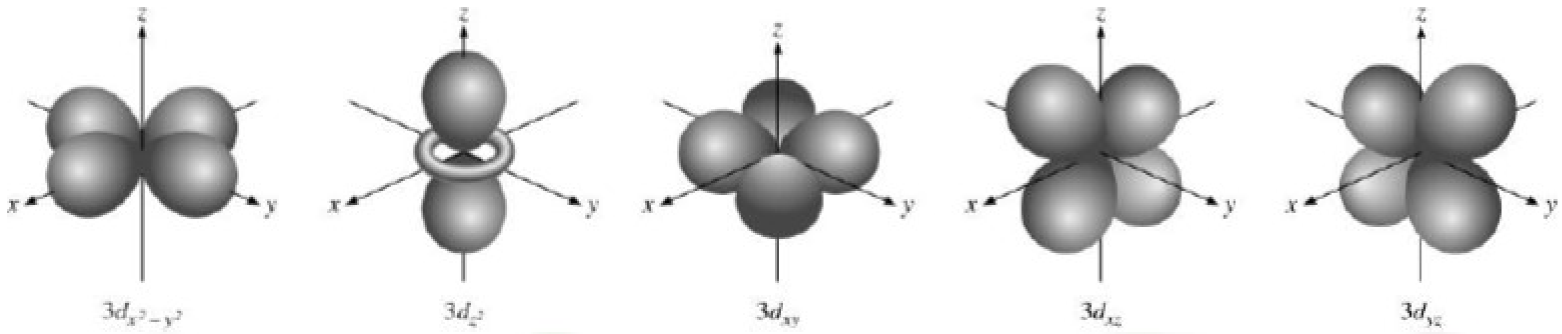
$m_l = -1$ $m_l = 0$ $m_l = 1$

Τα Σχήματα των Τροχιακών

Τροχιακά *d*

Η τρίτη και οι υψηλότερες στοιβάδες έχουν η καθεμία από πέντε *d* τροχιακά, τα οποία διαφέρουν από τα αντίστοιχα *s* και *p*, επειδή έχουν δύο διαφορετικά σχήματα. Τέσσερα από τα πέντε *d* τροχιακά έχουν σχήμα φύλλου τριφυλλιού και έχουν τέσσερεις λοβούς μέγιστης πιθανότητας, οι οποίοι διαχωρίζονται από δύο κομβικά επίπεδα διαμέσων του πυρήνα.

Το πέμπτο *d* τροχιακό είναι όμοιο σε σχήμα μ’ ένα p_z τροχιακό, αλλά έχει μια επιπρόσθετη περιοχή υψηλής πιθανότητας σχήματος donut, με κέντρο το επίπεδο *xy*. Παρά το διαφορετικό σχήμα, όλα τα *d* τροχιακά σε μια στοιβάδα έχουν την ίδια ενέργεια.



$m_l = -2$ $m_l = -1$ $m_l = 0$ $m_l = 1$ $m_l = 2$

Ηλεκτρονικές δομές και διαγράμματα τροχιακών

- Ηλεκτρονιακή δομή: Μία ιδιαίτερη κατανομή των ηλεκτρονίων του ατόμου στις διαθέσιμες υποστιβάδες

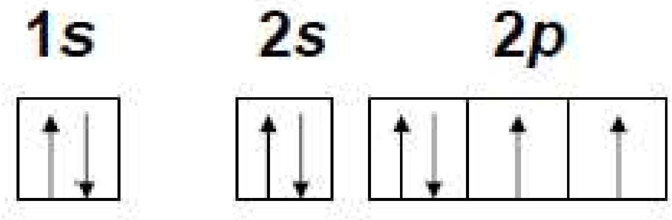
Ομάδα τροχιακών που έχουν τους ίδιους κβαντικούς αριθμούς n και l αλλά διαφορετικές τιμές m_l

- Απεικόνιση ηλεκτρονιακής δομής: Τα σύμβολα των υποφλοιών γράφονται το ένα δίπλα στο άλλο , με έναν εκθέτη που δίνει τον αριθμό των ηλεκτρονίων στην αντίστοιχη υποστιβάδα

Li (Z=3): $1s^2 2s^1$

Ηλεκτρονικές δομές και διαγράμματα τροχιακών

- Διάγραμμα τροχιακών: **Κατανομή των ηλεκτρονίων στα τροχιακά μιας υποστιβάδας**. Κάθε ομάδα τροχιακών μιας υποστιβάδας συμβολίζεται με το ίδιο σύμβολο όπως και η υποστιβάδα. Ένα ηλεκτρόνιο συμβολίζεται με ένα βέλος το οποίο κατευθύνεται προς τα πάνω όταν $m_s = +1/2$ ή προς τα κάτω όταν $m_s = -1/2$



Η Απαγορευτική Αρχή Pauli

- **Απαγορευτική αρχή του Pauli:** Δύο *ηλεκτρόνια σ' ένα τροχιακό δεν μπορούν να έχουν ίδιους και τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς*.

⇓

- Δεν μπορούμε να τοποθετήσουμε δύο ηλεκτρόνια με την ίδια τιμή m_s σε ένα τροχιακό

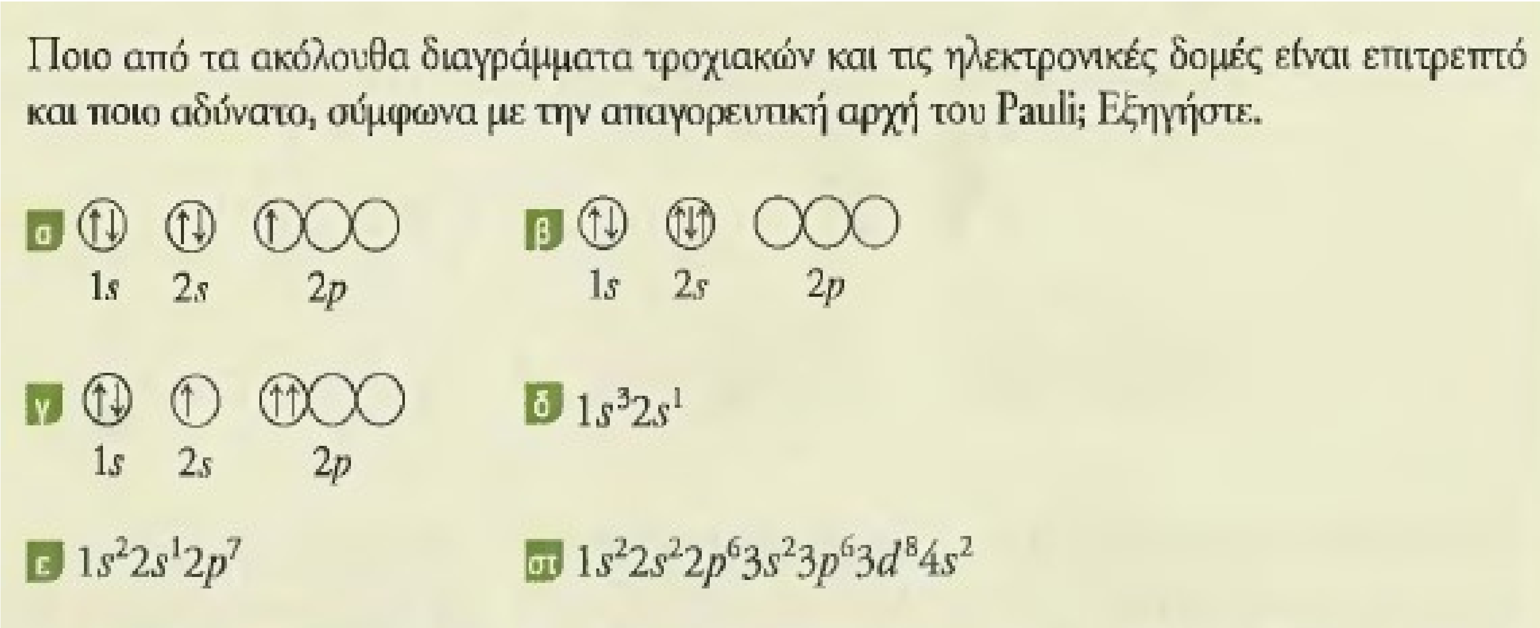
⇓

- Ένα τροχιακό μπορεί να έχει μόνο δύο ηλεκτρόνια, τα οποία πρέπει να έχουν αντιπαράλληλο spin. Άρα, ένα άτομο με χ ηλεκτρόνια, έχει τουλάχιστον χ/2 τροχιακά.

Υποστιβάδα	Αριθμός τροχιακών	Μέγιστος αριθμός ηλεκτρονίων
s (l = 0)	1	2
p (l =1)	3	6
d (l=2)	5	10
f (l=3)	7	14

Εφαρμογή απαγορευτικής αρχής Pauli

- Ποιο από τα ακόλουθα διαγράμματα τροχιακών και τις ηλεκτρονικές δομές είναι επιτρεπτό και ποιο αδύνατο, σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli; Εξηγήστε.


Ποιο από τα ακόλουθα διαγράμματα τροχιακών και τις ηλεκτρονικές δομές είναι επιτρεπτό και ποιο αδύνατο, σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli; Εξηγήστε.

α 1s 2s 2p

β 1s 2s 2p

γ 1s 2s 2p

δ $1s^3 2s^1$

ε $1s^2 2s^1 2p^7$

στ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$

Εφαρμογή απαγορευτικής αρχής Pauli

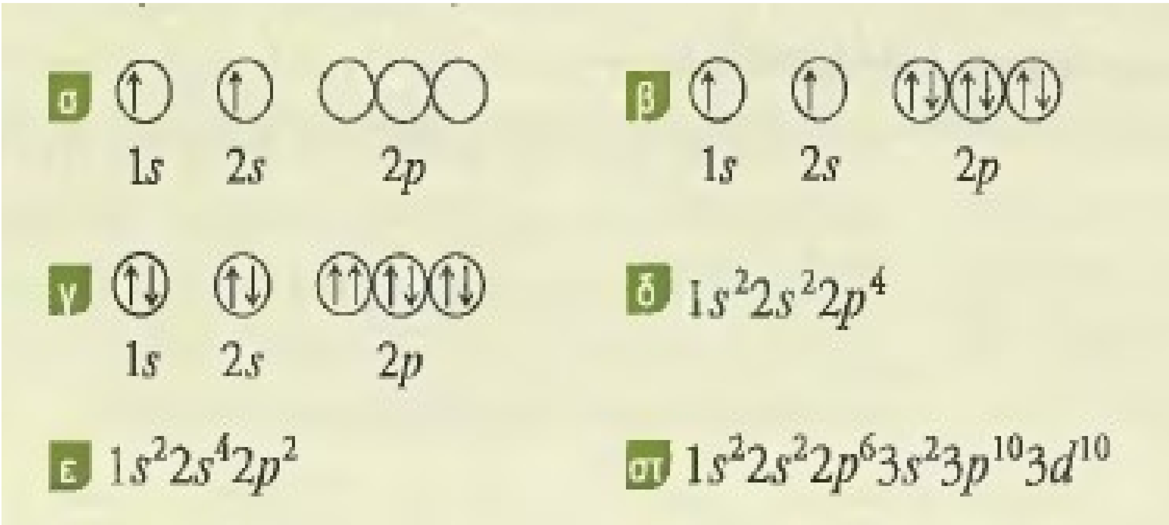
- Ποιο από τα ακόλουθα διαγράμματα τροχιακών και τις ηλεκτρονικές δομές είναι επιτρεπτό και ποιο αδύνατο, σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli; Εξηγήστε.

Λύση

α **Επιτρεπτό** διάγραμμα τροχιακών. **β** **Αδύνατο** διάγραμμα τροχιακών, επειδή υπάρχουν τρία ηλεκτρόνια στο τροχιακό 2*s*. **γ** **Αδύνατο** διάγραμμα τροχιακών, επειδή σε ένα τροχιακό 2*p* υπάρχουν δύο ηλεκτρόνια με το ίδιο spin. **δ** **Αδύνατη** ηλεκτρονική δομή, επειδή υπάρχουν τρία ηλεκτρόνια στον υποφλοιό 1*s* (ένα τροχιακό). **ε** **Αδύνατη** ηλεκτρονική δομή, επειδή υπάρχουν επτά ηλεκτρόνια στον υποφλοιό 2*p* (ο οποίος μπορεί να χωρέσει το πολύ έξι ηλεκτρόνια). **στ** **Επιτρεπτή** δομή. Σημειώνουμε ότι ο υποφλοιός 3*d* μπορεί να χωρέσει μέχρι και δέκα ηλεκτρόνια.

Εφαρμογή απαγορευτικής αρχής Pauli

- Κοιτάξτε τα παρακάτω διαγράμματα τροχιακών και τις ηλεκτρονικές δομές. Ποια από αυτά είναι επιτρεπτά και ποια όχι, σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli; Εξηγήστε.



Δόμηση Ηλεκτρονίων των Πολυ-Ηλεκτρονιακών Ατόμων

- Κάθε άτομο έχει άπειρο αριθμό πιθανών ηλεκτρονικών δομών.

- Θεμελιώδης κατάσταση: κβαντομηχανική κατάσταση που αντιστοιχεί στη δομή με τη χαμηλότερη στάθμη ενέργειας του ατόμου.

- Όλες οι άλλες ηλεκτρονικές δομές αντιστοιχούν σε διεγερμένες καταστάσεις, με ενέργειες διαφορετικές από αυτή της θεμελιώδους.

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 \longleftarrow$ θεμελιώδης κατάσταση του ατόμου του νατρίου

$1s^2 2s^2 2p^6 3p^1 \longleftarrow$ διεγερμένη κατάσταση του ατόμου του νατρίου

Δόμηση Ηλεκτρονίων των Πολυ-Ηλεκτρονιακών Ατόμων

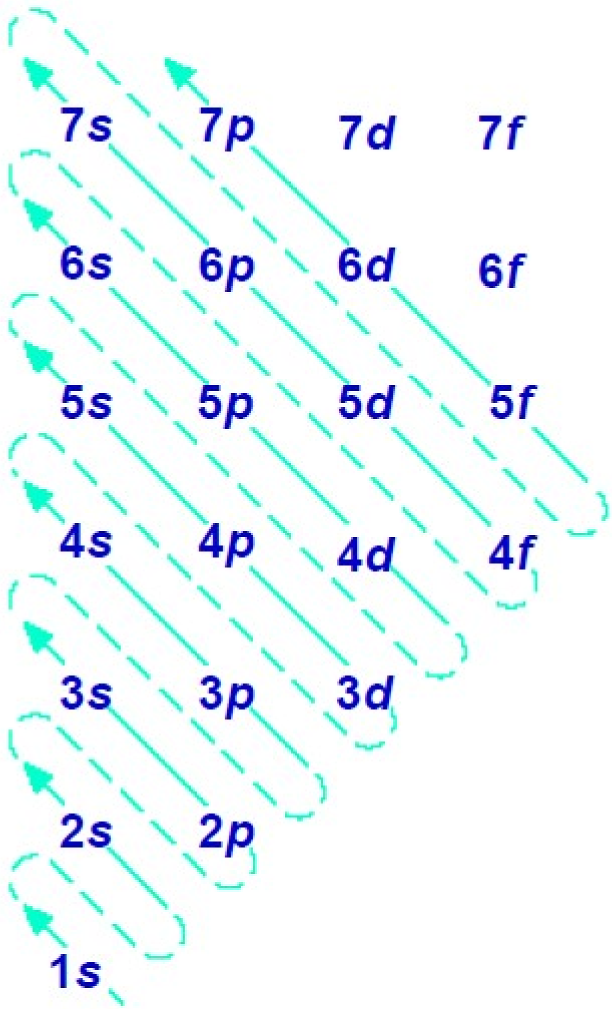
- Αρχή δόμησης: σχήμα που χρησιμοποιείται για αναπαραγωγή των ηλεκτρονικών δομών των θεμελιωδών καταστάσεων των ατόμων, μέσω διαδοχικής συμπλήρωσης υποστιβάδων με ηλεκτρόνια κατά ορισμένη σειρά, τη <u>σειρά δόμησης</u>

Η σειρά κατάληψης των τροχιακών βάσει φασματοσκοπικών και μαγνητικών ερευνών: 1*s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p*

Αντιστοιχεί στο μεγαλύτερο μέρος της σε αυξανόμενη ενέργεια υποστιβάδων. Οι ενέργειες τροχιακών με το ίδιο n, αυξάνονται με αυξανόμενο κβαντικό αριθμό l (ένα τροχιακό 3p έχει ελαφρώς μεγαλύτερη ενέργεια από ένα τροχιακό 3s)

Οι ηλεκτρονικές δομές της θεμελιώδους κατάστασης καθορίζονται από τις συνολικές ενέργειες των ατόμων, οι οποίες με τη σειρά τους εξαρτώνται και από τις ενέργειες αλληλεπίδρασης των διάφορων υποφλοιών μεταξύ τους (3d<4s).

Μνημονικό διάγραμμα για τη σειρά δόμησης



- (α) Γράφουμε τις υποστιβάδες σε οριζόντιες σειρές, με κάθε σειρά να έχει υποστιβάδες του ίδιου *n*.
- *(β) Μέσα σε κάθε σειρά τοποθετούμε τις υποστιβάδες κατά αυξανόμενο l.*
- *(γ) Ξεκινώντας με την υποστιβάδα 1s, κατασκευάζουμε μια σειρά διαγωνίων, όπως δείχνει το σχήμα.*
- *(δ) Η σειρά δόμησης είναι η σειρά κατά την οποία αυτές οι διαγώνιες συναντούν τις υποστιβάδες.*

Δόμηση Ηλεκτρονίων των Πολυ-Ηλεκτρονιακών Ατόμων

Παραδείγματα

Υδρογόνο: Έχει ένα ηλεκτρόνιο, το οποίο πρέπει να τοποθετηθεί στο τροχιακό της πιο χαμηλής ενέργειας, το 1*s*. Σ’ αυτήν την περίπτωση η δόμηση θεμελιώδους κατάστασης χαρακτηρίζεται ως $1s^1$. Ο επιγεγραμμένος άνω δείκτης υποδεικνύει τον αριθμό των ηλεκτρονίων που βρίσκονται στο συγκεκριμένο τροχιακό.

$$\mathrm{H}: 1s^1$$

Λίθιο και βηρύλλιο: Αφού το τροχιακό 1*s* είναι συμπληρωμένο, τα επόμενα δύο ηλεκτρόνια τοποθετούνται στο επόμενο διαθέσιμο, το 2*s*.

$$\mathrm{Li}: 1s^2\,2s^1 \qquad \mathrm{Be}: 1s^2\,2s^2$$

Δόμηση Ηλεκτρονίων των Πολυ-Ηλεκτρονιακών Ατόμων

Παραδείγματα

Χρησιμοποιώντας τη συντομογραφία [He] για το $1s^2$, οι παραπάνω δομές γράφονται:

$Z = 3$	λίθιο	$1s^2 2s^1$	ή	$[He]2s^1$
$Z = 4$	βηρύλλιο	$1s^2 2s^2$	ή	$[He]2s^2$

Με το βόριο ($Z = 5$), τα ηλεκτρόνια αρχίζουν να συμπληρώνουν τον υποφλοιό $2p$. Έτσι έχουμε:

$Z = 5$	βόριο	$1s^2 2s^2 2p^1$	ή	$[He]2s^2 2p^1$
$Z = 6$	άνθρακας	$1s^2 2s^2 2p^2$	ή	$[He]2s^2 2p^2$
⋮				
$Z = 10$	νέο	$1s^2 2s^2 2p^6$	ή	$[He]2s^2 2p^6$

Δόμηση Ηλεκτρονίων των Πολυ-Ηλεκτρονιακών Ατόμων

Παραδείγματα

Με τη συμπλήρωση του υποφλοιού $2p$, προκύπτει πάλι μια ιδιαίτερα σταθερή ηλεκτρονική δομή, με αποτέλεσμα το νέο να είναι χημικά αδρανές.

Με το νάτριο ($Z = 11$), αρχίζει να συμπληρώνεται το τροχιακό $3s$. Χρησιμοποιώντας τη συντομογραφία [Ne] για τη δομή $1s^2 2s^2 2p^6$, έχουμε

$Z = 11$	νάτριο	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	ή	$[Ne]3s^1$
$Z = 12$	μαγνήσιο	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	ή	$[Ne]3s^2$

Μετά αρχίζει η συμπλήρωση του υποφλοιού $3p$.

$Z = 13$	αργίλιο	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	ή	$[Ne]3s^2 3p^1$
⋮				
$Z = 18$	αργό	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	ή	$[Ne]3s^2 3p^6$

Με τη συμπλήρωση του υποφλοιού $3p$, έχει επιτευχθεί εκ νέου μια σταθερή ηλεκτρονική δομή και το αργό είναι ένα αδρανές στοιχείο.

Ηλεκτρονικές δομές της θεμελιώδους κατάστασης των ατόμων με *Z = 1 έως 36*

Z	Στοιχείο	Δομή	Z	Στοιχείο	Δομή
1	H	$1s^1$	19	K	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
2	He	$1s^2$	20	Ca	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
3	Li	$1s^2 2s^1$	21	Sc	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$
4	Be	$1s^2 2s^2$	22	Ti	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$
5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	23	V	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$
6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	24	Cr	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$ ←
7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	25	Mn	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$
8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	26	Fe	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$
9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	27	Co	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$
10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	28	Ni	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$
11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	29	Cu	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$ ←
12	Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	30	Zn	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$
13	Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	31	Ga	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$
14	Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	32	Ge	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$
15	P	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	33	As	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$
16	S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	34	Se	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^4$
17	Cl	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	35	Br	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5$
18	Ar	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	36	Kr	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$

Δόμηση Ηλεκτρονίων & Περιοδικός Πίνακας

Η εξώτερη στοιβάδα ηλεκτρονίων ενός ατόμου ονομάζεται **στοιβάδα σθένους**. Όλα τα στοιχεία μιας ομάδας στον περιοδικό πίνακα έχουν την ίδια δόμηση ηλεκτρονίων στη στοιβάδα σθένους.

Για παράδειγμα, όλα τα στοιχεία της ομάδας 1A έχουν μια s^1 δόμηση στη στοιβάδα σθένους. Τα στοιχεία της ομάδας 2A έχουν δόμηση s^2 και τα στοιχεία της 3A $s^2\,p^1$.

Επιπλέον, επειδή τα ηλεκτρόνια σθένους είναι αυτά που συγκρατούνται λιγότερο ισχυρά, είναι τα πιο σημαντικά στον προσδιορισμό των ιδιοτήτων ενός στοιχείου. Αυτό εξηγεί γιατί τα στοιχεία μιας ομάδας του περιοδικού πίνακα έχουν παρόμοια χημική συμπεριφορά.

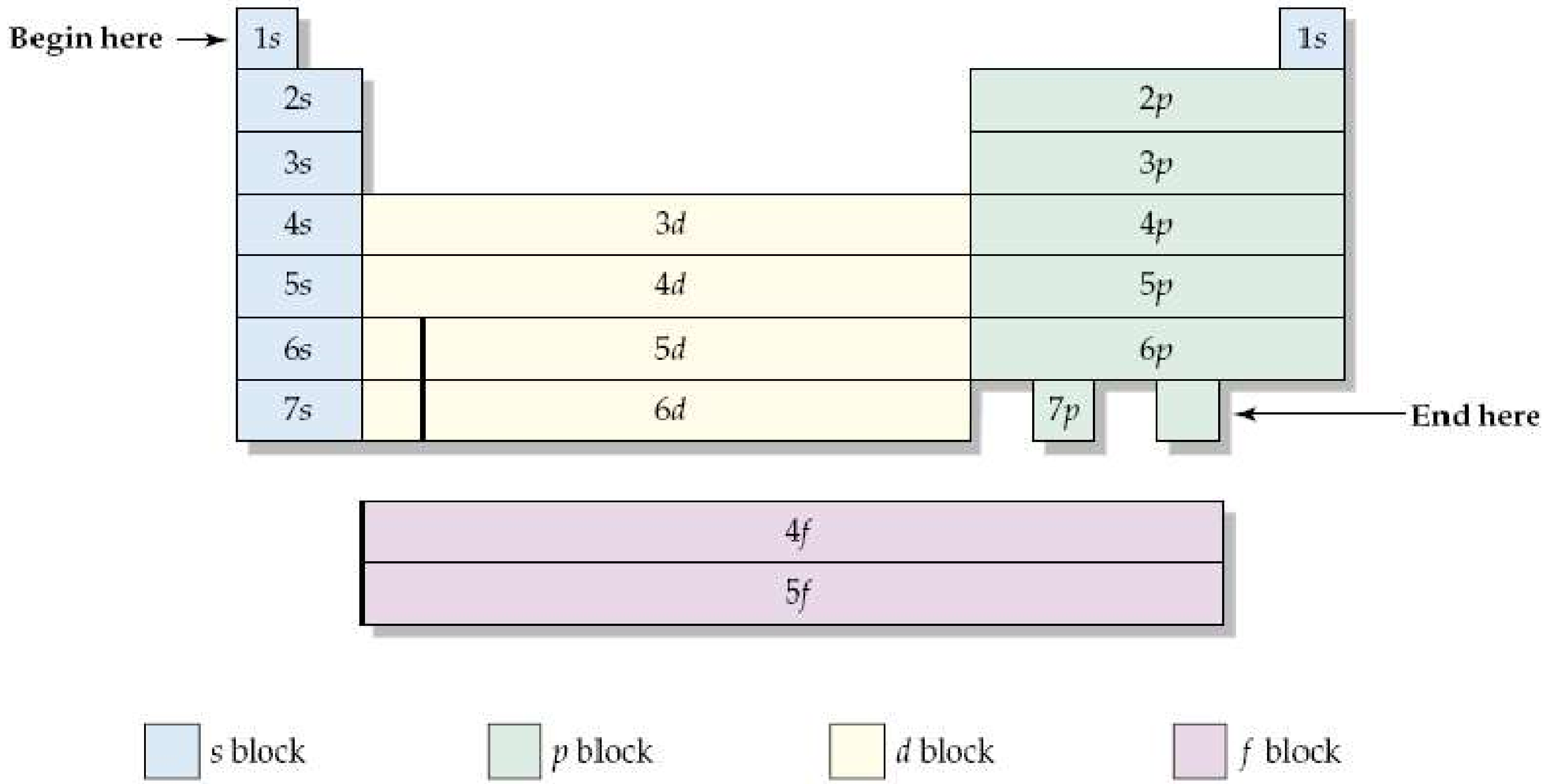
Ο περιοδικός πίνακας μπορεί να διαχωριστεί σε τέσσερεις περιοχές ή *blocks* των στοιχείων, ανάλογα με το ποια τροχιακά είναι συμπληρωμένα.

Οι ομάδες 1A και 2A στ’ αριστερά του πίνακα είναι τα στοιχεία του ***s*-block**, γιατί προκύπτουν από τη συμπλήρωση ενός *s* τροχιακού.

Οι ομάδες 3A – 8A είναι τα στοιχεία του ***p*-block**, γιατί προκύπτουν από τη συμπλήρωση *p* τροχιακών.

Τα μέταλλα μετάπτωσης προκύπτουν από τη συμπλήρωση *d* τροχιακών (***d*-block**).

Οι λανθανίδες / ακτινίδες, στο αποκομένο τμήμα του περιοδικού πίνακα προκύπτουν από τη συμπλήρωση των *f* τροχιακών (***f*-block**).


Begin here
1s
1s
2s
2p
3s
3p
4s
3d
4p
5s
4d
5p
6s
5d
6p
7s
6d
7p
End here
4f
5f
s block
p block
d block
f block

Στοιχεία κύριων ομάδων
συμπληρώνεται ο υποφλοιός *s*

Στοιχεία κύριων ομάδων
συμπληρώνεται ο υποφλοιός *p*

1 H $1s^1$	
Ατομικός αριθμός	
Σύμβολο	
Δομή φλοιού σθένους	

Μεταβατικά μέταλλα
συμπληρώνεται ο υποφλοιός *d*

Περίοδος	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
1	1 H $1s^1$																	2 He $1s^2$
2	3 Li $2s^1$	4 Be $2s^2$											5 B $2s^22p^1$	6 C $2s^22p^2$	7 N $2s^22p^3$	8 O $2s^22p^4$	9 F $2s^22p^5$	10 Ne $2s^22p^6$
3	11 Na $3s^1$	12 Mg $3s^2$											13 Al $3s^23p^1$	14 Si $3s^23p^2$	15 P $3s^23p^3$	16 S $3s^23p^4$	17 Cl $3s^23p^5$	18 Ar $3s^23p^6$
4	19 K $4s^1$	20 Ca $4s^2$	21 Sc $3d^14s^2$	22 Ti $3d^24s^2$	23 V $3d^34s^2$	24 Cr $3d^54s^1$	25 Mn $3d^54s^2$	26 Fe $3d^64s^2$	27 Co $3d^74s^2$	28 Ni $3d^84s^2$	29 Cu $3d^{10}4s^1$	30 Zn $3d^{10}4s^2$	31 Ga $4s^24p^1$	32 Ge $4s^24p^2$	33 As $4s^24p^3$	34 Se $4s^24p^4$	35 Br $4s^24p^5$	36 Kr $4s^24p^6$
5	37 Rb $5s^1$	38 Sr $5s^2$	39 Y $4d^15s^2$	40 Zr $4d^25s^2$	41 Nb $4d^45s^1$	42 Mo $4d^55s^1$	43 Tc $4d^55s^2$	44 Ru $4d^75s^1$	45 Rh $4d^85s^1$	46 Pd $4d^{10}$	47 Ag $4d^{10}5s^1$	48 Cd $4d^{10}5s^2$	49 In $5s^25p^1$	50 Sn $5s^25p^2$	51 Sb $5s^25p^3$	52 Te $5s^25p^4$	53 I $5s^25p^5$	54 Xe $5s^25p^6$
6	55 Cs $6s^1$	56 Ba $6s^2$	57 La* $5d^16s^2$	72 Hf $5d^26s^2$	73 Ta $5d^36s^2$	74 W $5d^46s^2$	75 Re $5d^56s^2$	76 Os $5d^66s^2$	77 Ir $5d^76s^2$	78 Pt $5d^96s^1$	79 Au $5d^{10}6s^1$	80 Hg $5d^{10}6s^2$	81 Tl $6s^26p^1$	82 Pb $6s^26p^2$	83 Bi $6s^26p^3$	84 Po $6s^26p^4$	85 At $6s^26p^5$	86 Rn $6s^26p^6$
7	87 Fr $7s^1$	88 Ra $7s^2$	89 Ac** $6d^17s^2$	104 Rf $6d^27s^2$	105 Db $6d^37s^2$	106 Sg $6d^47s^2$	107 Bh $6d^57s^2$	108 Hs $6d^67s^2$	109 Mt $6d^77s^2$	110 $6d^87s^2$	111 $6d^97s^2$	112 $6d^{10}7s^2$						

Εσωτερικά μεταβατικά μέταλλα
συμπληρώνεται ο υποφλοιός *f*

*Λανθανίδια	58 Ce $4f^15d^16s^2$	59 Pr $4f^36s^2$	60 Nd $4f^46s^2$	61 Pm $4f^56s^2$	62 Sm $4f^66s^2$	63 Eu $4f^76s^2$	64 Gd $4f^75d^16s^2$	65 Tb $4f^96s^2$	66 Dy $4f^{10}6s^2$	67 Ho $4f^{11}6s^2$	68 Er $4f^{12}6s^2$	69 Tm $4f^{13}6s^2$	70 Yb $4f^{14}6s^2$	71 Lu $4f^{14}5d^16s^2$
**Ακτινίδια	90 Th $6d^27s^2$	91 Pa $5f^26d^17s^2$	92 U $5f^36d^17s^2$	93 Np $5f^46d^17s^2$	94 Pu $5f^67s^2$	95 Am $5f^77s^2$	96 Cm $5f^76d^17s^2$	97 Bk $5f^97s^2$	98 Cf $5f^{10}7s^2$	99 Es $5f^{11}7s^2$	100 Fm $5f^{12}7s^2$	101 Md $5f^{13}7s^2$	102 No $5f^{14}7s^2$	103 Lr $5f^{14}6d^17s^2$

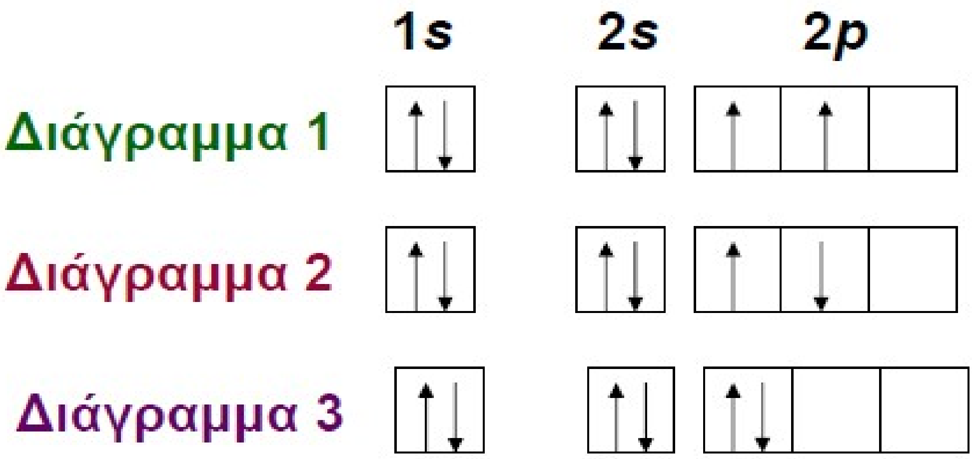
Στοιχεία κυρίων ομάδων

Μεταβατικά μέταλλα

Εσωτερικά μεταβατικά μέταλλα

Ο κανόνας του Hund (ή της μέγιστης πολλαπλότητας του spin)

- Κανόνας του Hund (1927) : Όταν ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας, σταθερότερη είναι εκείνη η ηλεκτρονική διάταξη που δίνει το μέγιστο συνολικό spin. Δηλαδή σε καθένα από τα ίδιας ενέργειας τροχιακά πάει ένα ηλεκτρόνιο, μέχρι να είναι ημικατειλειμένα.. Μόνο τότε ένα δεύτερο ηλεκτρόνιο συμπληρώνει ένα από τα δύο αυτά τροχιακά. Επιπλέον, τα ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τα ημικατειλειμένα τροχιακά θα πρέπει να έχουν τον ίδιο αριθμό spin.
- Για το άτομο C (Z = 6), με δομή θεμελιώδους κατάστασης $1s^2 2s^2 2p^2$, ποιο διάγραμμα εκφράζει τη σταθερότερη κατάσταση του ατόμου C;



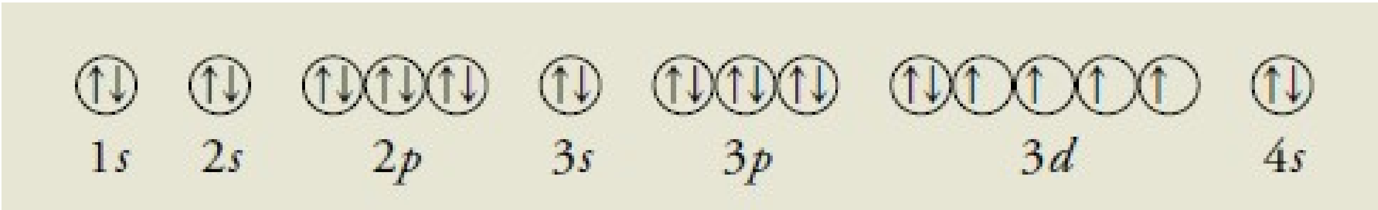
Διαγράμματα τροχιακών για τις θεμελιώδεις καταστάσεις των ατόμων από Z = 1 εως Z = 10

			Διάγραμμα τροχιακών		
Άτομο	Z	**Δομή**	**1*s***	**2*s***	**2*p***
Υδρογόνο	1	$1s^1$	(↑)	( )	( )( )( )
Ήλιο	2	$1s^2$	(↑↓)	( )	( )( )( )
Λίθιο	3	$1s^2 2s^1$	(↑↓)	(↑)	( )( )( )
Βηρύλλιο	4	$1s^2 2s^2$	(↑↓)	(↑↓)	( )( )( )
Βόριο	5	$1s^2 2s^2 2p^1$	(↑↓)	(↑↓)	(↑)( )( )
Άνθρακας	6	$1s^2 2s^2 2p^2$	(↑↓)	(↑↓)	(↑)(↑)( )
Άζωτο	7	$1s^2 2s^2 2p^3$	(↑↓)	(↑↓)	(↑)(↑)(↑)
Οξυγόνο	8	$1s^2 2s^2 2p^4$	(↑↓)	(↑↓)	(↑↓)(↑)(↑)
Φθόριο	9	$1s^2 2s^2 2p^5$	(↑↓)	(↑↓)	(↑↓)(↑↓)(↑)
Νέο	10	$1s^2 2s^2 2p^6$	(↑↓)	(↑↓)	(↑↓)(↑↓)(↑↓)

Ο κανόνας του Hund (ή της μέγιστης πολλαπλότητας του spin)

- Εφαρμογή του κανόνα του Hund. Γράψτε το διάγραμμα τροχιακών για τη θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου του σιδήρου.

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



Τέσσερα ασύζευκτα ηλεκτρόνια