

1. Principiul lui Pauli (1925)
2. Calculul nr. total H-electroni de pe nivelul (n-dat) pt. atom.
3. Model de completare al patunilor (KLMNOPQ...) si subpatunilor (s p d f g...)
4. Regula ~~Hund~~ de completare a patunilor/subpatunilor cu al 2-lea e<sup>-</sup> în ordinea creșterii energiei (1927)
5. Sistemul periodic si organizarea el. chimice

Starea cuantică a oricărui electron (dintr-un atom cu mai multi electroni) este caracterizată de  $(n, l, m_l, m_s)$  - setul de 4-nr. cuantice, în mod unic (osemanător nr. de circulație pt. masini).

### 1. Principiul de excludere Pauli, X (1925)

Def. Într-un atom, într-o anumită stare cuantică, definită de un set de 4-nr. cuantice  $(n, l, m_l, m_s)$  unic, poate exista un singur electron.

### 2. Calculul nr. total H-de electroni de pe un strat/patru, n-dat

$$\left( \begin{smallmatrix} A \\ Z \end{smallmatrix} \bar{X} \right); N = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$$

$(n, l, m_l, m_s)$

ex:  $n=1$  (K)

$l = (n-1) = 1-1 = 0$

$m_l = 2l+1 = 2 \cdot 0 + 1 = 1$

$m_s = \pm 1/2 \rightarrow 2 \text{ electroni K}$

$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 \dots$  - dat  
K L M N O P Q

$l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$  - n-val.

$m_l = 2l+1$  - val =  $\{-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l\}$

$m_s = 2$  - val.  $\uparrow +1/2$   
 $\downarrow -1/2$

$(1, 0, 1, +1/2) \rightarrow 1s^1$   
 $(1, 0, 1, -1/2) \rightarrow 1s^2$

$\begin{matrix} m_s \\ +1/2 & -1/2 \\ \uparrow & \downarrow \\ \text{K} \end{matrix}$

$\left( \begin{smallmatrix} A \\ Z \end{smallmatrix} \bar{X} \right) \rightarrow \bar{X} = \text{H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne} \dots$  simbolul chimic al elem.

$Z = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 \dots$  nr. atomic

$A$  - nr. de masă

Obs. În atomul cu mai multi e<sup>-</sup> electroni, niv. energetice dif. de cele ale atomului de <sup>1</sup>H - hidrogen, datorită faptului că electronii interacționează atât cu nucleul cât și între ei modificându-și energiile față de cele prezise de mod. Bohr - cuantificat pt. el. hidrogenoizi, datorită ecranării

$$E_n^* = E_1 \left( \frac{Z_{\text{eff}}^2}{n^2} \right) = \left( -\frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \right) \frac{(Z_{\text{eff}}^2)^2}{n^2}; \sigma = \text{const. ecran.}$$

3). Modul de completare a patunilor/subpatunilor în atomul cu mai mulți electroni, respectând cele 3 reguli:

a) - regula creșterii energiei

b) - principiul Pauli (de excluziune)

c) - regula Hund pt. completarea cu al 2-lea  $e^-$  pt. subnivela identice ( $p^{1-6}$ ,  $d^{1-10}$ ,  $f^{1-14}$ ...),  $s^{1-2}$

Schematic se utilizează (tabla de Sah.) astfel.  
Ordinea completării este pediagonală.

→ 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p  
→ 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p 8s

1s					
2s					
2p	3s				
3p	4s				
3d	4p	5s			
4d	5p	6s			
4f	5d	6p	7s		
5f	6d	7p	8s		

4). Regula lui Hund (1927)

Orbitalii/substraturile de același tip se completează mai întâi cu primul electron

și apoi se trece la ocuparea cu al 2-lea

cu spin antiparalel.

ex)  $2p^{1-6}$ :  $(\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow)$ ;  $(\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow)$   
 $4f^{1-14}$ :  $(\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow)$   $p_x$   $p_y$   $p_z$   $3d^{1-10}$

s-p → grupe principale

d → grupe secundare

4f → J. Galodiu (1794) - Lanthanide (non-toxice)  
5f - (toxice/radioactive) - Actinide

5). Sistemul periodic al elementelor (~~SP~~ - Mendeleev) (1869)

Elementele chimice ( ${}_Z^AX$ ) - au fost plasate de Mendeleev

cu perioade - orizontale (K L M N O P Q, - n)

grupe - verticale (s-p, d, f)

S.P. cuprinde:

- Elementele din gr. principale ( $s-p^6$ ) ( $Gp1 - Gp8$ )

- Elementele din gr. secundare ( $d^{1-10}$ : 3d, 4d, 5d, 6d)

- Elementele tip: 4f - Lanthanide - pământuri rare/medicament  
(simbi orizontale) 5f - Actinidele - radioactive/toxice

( ${}_{92}^{238}U$ ,  ${}_{92}^{235}U$ ) - izotopii uraniului - ultimul el. chimic natural

- restul sunt artificiale după, U-uraniu