

Atomi in periodni sistem elementov

Atomi se razlikujejo v vrstnem številu (Z , naboju jedra) ter število elektronov v okolici jedra.

Stanje elektrona opisuje valovna funkcija, rečemo tudi, da se elektron nahaja na orbitali. Skupina orbital pa sestavlja lupino. Orbitalo oziroma stanje elektrona določajo glavno (n), stransko (l) in magnetno (m) kvantno število. Orbitale, ki imajo enako glavno kvantno število, sestavljajo lupino, orbitale, ki imajo enako glavno in stransko kvantno število, pa sestavljajo podlupino. Atomske orbitale v večelektronskih atomih so podobne orbitalam v vodikovem atomu. Kvantna števila še vedno določajo iste količine. (Glavno določa energijo lupine, orbitale na podlupini pa niso degenerirane. Degeneracija izgine zaradi odboja med elektroni. Stransko kvantno število določa obliko orbitale, se pravi v koliko smeri prostora je usmerjena orbitala, magnetno kvantno število pa določa, v katere smeri prostora je usmerjena orbitala). Kotna odvisnost je enaka, radialna odvisnost pa je drugačna kot v primeru vodikovega atoma zaradi senčenja drugih elektronov.

Elektronska konfiguracija je seznam orbital, ki jih zasedajo elektroni, in število elektronov na teh orbitalah. Elektronska konfiguracija z najnižjo energijo je elektronska konfiguracija osnovnega stanja atoma.

Pri polnjenju orbital moramo upoštevati Paulijev izključitveni princip, aufbau princip (princip izgradnje) in Hundovo pravilo multiplicitete.

Elektronska gostota v izoliranem atomu je približno enaka vsoti elektronskih gostot posameznih elektronov, ki sestavljajo atom. V približku lahko upoštevamo medelektronski odboj, kot da se elektron giblje v povprečnem polju, ki ga ustvarjajo ostali elektroni. Celoten potencial v katerem se giblje elektron je vsota potenciala jedra in povprečnega polja preostalih elektronov.

Elektronsko konfiguracijo določimo na naslednji način. Ugotovimo vrstno število atoma in s tem število elektronov, ki se nahajajo v atomu. Po principu izgradnje naredimo seznam orbital po vrsti polnjenja. Princip izgradnje pravi, da se orbitale polnijo v zaporedju vsote glavnega in stranskega števila ($n+l$). Energija orbital narašča v tem vrstnem redu. Če imamo pri istem številu več možnosti, se polni naprej orbitala z nižjim glavnim kvantnim številom. Pri isti vrednosti $n+l$ ima orbitala z nižjim n nižjo energijo. Dobimo zaporedje

1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p	5s	...
1	2	3	3	4	4	5	5	5	...

Posamezno orbitalo lahko zasedeta dva elektrona z različnima projekcijama spina na os z .

Zaradi odboja med elektroni izgubimo degeneracijo orbital v lupini. Elektron v orbitali s , p , d itd se giblje drugače v prostoru elektronov na predhodnih lupinah. Elektron s orbitale se giblje več v prostoru drugih elektronov kot elektron v orbitali p . Zaradi tega ima drugačen odboj in drugačno energijo, ki si sledijo v naslednjem vrstnem redu

$$E_{ns} < E_{np} < E_{nd} < E_{nf} \dots$$

Pri polnjenju orbital najprej upoštevamo Paulijevo pravilo, ki pravi, da dva elektrona ne moreta imeti enakih vseh kvantnih števil. To pomeni, da sta lahko na eni orbitali največ dva elektrona. Zaradi Paulijevega principa zunanji elektroni ne morejo biti bližje jedru in atom je stabilen. Upoštevati pa moramo tudi Hundovo pravilo multiplicitete. To pomeni, da v primeru, ko imajo elektroni na voljo več orbital z enako energijo, imajo takšno konfiguracijo, da je skupni spin največji. Elektroni najprej zasedejo vse orbitale posamezno, šele ko to ni več možno pričnejo zasedati orbitale v parih. Skupni spin (S) je kar vsota projekcij spinov v z smeri. Multipliciteta stanja pa je enaka $2S+1$. Se pravi, če je skupni spin enak 0 (vsi elektroni so v parih po orbitalah), potem je multipliciteta stanja enaka 1 in rečemo, da imamo singletno stanje. Če imamo en nesparjen elektron je skupen spin enak $\frac{1}{2}$ in multipliciteta stanja je enaka 2. Imamo dubletno stanje. Če imamo dva nesparjena elektrona je skupen spin enak 1 in multipliciteta 3. Imamo tripletno stanje. Glavni razlog nižje energije stanja za višjo multipliciteto ni manjši odboj med elektroni, ki so v različnih orbitalah, temveč manjše senčenje. Ko je elektron sam v orbitali, se le ta giblje bližje jedru in ima nižjo potencialno energijo, kot bi jo imel v primeru, ko dva elektrona zasedata isto orbitalo. V tem primeru en elektron senči jedro drugemu in se drugi zaradi tega v povprečju zadržuje dlje od jedra in ima višjo potencialno energijo.

Če imamo v atomu (ali molekuli) nasparjene elektrone, potem je ta snov paramagnetna. Paramagnetna snov ojači magnetno polje in jo potegne v magnetno polje. Diamagnetna snov pa magnetno polje oslabi oziroma jo izrine iz magnetnega polja. Vse snovi, ki v konfiguraciji vsebujejo samske elektrone, so paramagnetne. Če pa vsi elektroni tvorijo pare, so diamagnetne. Od naslednjih atomov

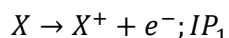
^1H , ^2He , ^3Li , ^4Be , ^5B , ^6C , ^7N , ^8O , ^9F , ^{10}Ne

so ^1H , ^3L , ^5B , ^7N , ^9F paramagnetni, ker vsebujejo liho število elektronov, ^6C in ^8O sta paramagnetna zaradi Hundovega pravila. ^2He , ^4Be in ^{10}Ne pa so diamagnetni.

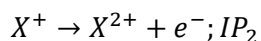
Zadnjo lupino, ki je še zasedena, zasedajo valenčni elektroni. Elektroni v tej lupini so najpomembnejši za kemijske lastnosti elementa. Pri kemijskih reakcijah so udeleženi le zunanji elektroni. Notranji pri reakcijah ne sodelujejo. Elementi v stolpcih periodnega sistema imajo enako število valenčnih elektronov in podobno konfiguracijo le-teh ter zato podobne kemijske lastnosti. Rečemo, da so izoelektronski glede na valenčne elektrone. Elementi v vrsticah pa imajo podobne trende v spreminjanju lastnosti zaradi podobnega spreminjanja konfiguracije valenčnih elektronov.

Energijo elektronov na posameznih orbitalah lahko določimo s fotoelektronsko spektroskopijo, s spreminjanjem ionizacijskih energij ter elektronskih afinitet.

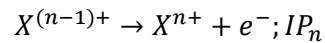
Ionizacijska energija je najmanjša energija, ki jo potrebujemo, da odstranimo najšibkeje vezan elektron v sistemu. Prva ionizacijska energija atoma X je tako energija naslednjega procesa



Druga ionizacijska energija pa je definirana kot

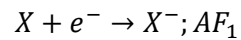


in n-ta kot

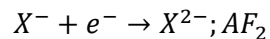


Celotno vezavno energijo atoma lahko dobimo kot vsoto vseh ionizacijskih energij. Za primer litija je celotna eksperimentalna vezavna energija vsota prve, druge in tretje ionizacijske energije.

Elektronska afiniteta je energija, ki se sprosti pri vezavi elektrona v sistem



in je lahko pozitivna ali negativna za razliko od ionizacijske energije, ki je vedno pozitivna. Visoko elektronsko afiniteto imajo atomi, ki jim manjka en elektron do zapolnjene lupine oziroma podlupine, na primer elementi sedme skupine. Elementi osme skupine pa ne želijo sprejeti elektrona, tako da je elektronska afiniteta v tem primeru negativna. Drugi elektronska afiniteta je energija, ki se sprosti pri naslednjem procesu



in je za atome vedno negativna. To pomeni, da noben atom nima tendence da sprejem dva elektrona razen, če nima kakšno dodatno kompenzacijo (če dobi energijo od kakšnega drugega procesa, na primer tvorjenja kristala).