

I.7. Az atomok elektronszerkezete és a periódusos rendszer

I.7.1. A periódusos rendszer

Tört.: 1860-as évek. *Dmitrii Mendeleev*, *Lothar Meyer*, *independently 1868, 1869...* (Már előttük: Két évvel az első nemzetközi vegyészkonferencia után, 1862-ben egy francia geológus *Alexandre Émile Béguyer de Chancourtois* az atomsúlyok szerint sorba rendezett elemek neveit egy **hengerpalástra** írta fel spirális alakban.)

Az atom belső szerkezetéről még semmit nem sejtve, atomsúlyok alapján rakták sorba az elemeket, s *periodicitást* fedeztek fel a tulajdonságokban ...

Ma tudjuk: a periodicitásnak **elektronszerkezeti** alapja van, ld. alább.

A mai ("hosszú") periódusos rendszer s-, p-, d-(ill. f-) mezőre tagolható, el. szerkezetet ld. alább.

Elnevezés: főcsoportok (nA), mellékcsoportok (nB);

(E furcsaság oka: pár évtizeddel ezelőtt, a „rövid” per. r.-ben 1A és 1B, 2A és 2B, stb. egy-egy oszlopban volt, s a „triádok”, mint Fe, Co, Ni 8B-ként a nemesgázok mellett a 8. oszlopban). Az újabb, IUPAC-ajánlás folyamatosan végigszámozza az oszlopokat, pl.: 3B-, 3A-ból lesz 3, ill. 13.

| s block | | d block | | | | | | | | | | p block | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|---------|----|---------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|---------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| 1A | 2A | 3B | 4B | 5B | 6B | 7B | 8B | 8B | 8B | 1B | 2B | 3A | 4A | 5A | 6A | 7A | 8A | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 1s | 2s | 3s | 4s | 5s | 6s | 7s | 3d | 4d | 5d | 6d | 7d | 2p | 3p | 4p | 5p | 6p | 7p | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 11 | 12 | 19 | 20 | 37 | 38 | 55 | 56 | 87 | 88 | 21 | 22 | 23 | 24 | 25 | 26 | 27 | 28 | 29 | 30 | 39 | 40 | 41 | 42 | 43 | 44 | 45 | 46 | 47 | 48 | 71 | 72 | 73 | 74 | 75 | 76 | 77 | 78 | 79 | 80 | 103 | 104 | 105 | 106 | 107 | 108 | 109 | 110 | 111 | 112 | 113 | 114 | 115 | 116 | 117 | 118 |

| f block | | | | | | | | | | | | | | |
|---------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|-----|
| 4f | 57 | 58 | 59 | 60 | 61 | 62 | 63 | 64 | 65 | 66 | 67 | 68 | 69 | 70 |
| 5f | 89 | 90 | 91 | 92 | 93 | 94 | 95 | 96 | 97 | 98 | 99 | 100 | 101 | 102 |

Figyelem: a fenti tábla 'csal': 113, 115, 117 még NEM ismert. Melyik a legnagyobb rendszámú atom? A 118-ast már évekkel ezelőtt jelentette a Lawrence Livermore Lab., de bizonytalan volt. Mára elfogadott. (Előtte levők közül van 112, 114, 116).

I.7.2. Pályák, elektronkonfiguráció

Többelektronos atomokban minőségileg új vonás jelenik meg a H-atomhoz képest: elektron-elektron kölcsönhatás. Az elektronszerkezet leírása sokkal bonyolultabb.

Közelítő modellen alapszik a kémiában többnyire használt kép: független elektron modell: persze az el-el. taszítást nem hanyagolhatjuk el teljesen, de: egy adott elektron a többi átlagos (gömbszimmetrikus) terében mozog.

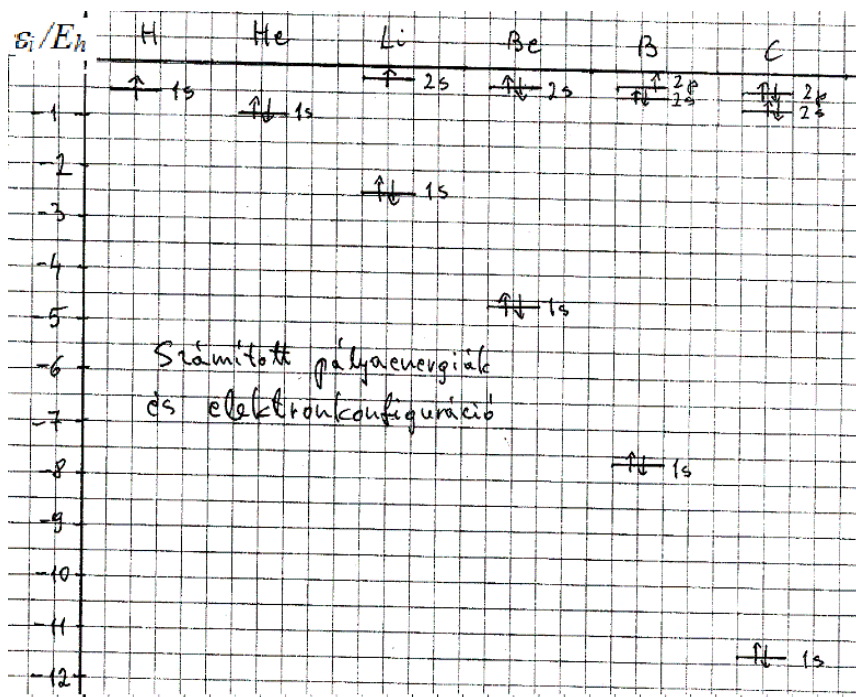
A hullámfv. legegyszerűbb matematikai alakja egy szorzatfüggvény, melynek tényezői a pályák: $\Psi(1,2,3, \dots n) = \psi_1(1)\psi_2(2)\psi_3(3) \dots \psi_n(n)$

{Csak a pontosság kedvéért: a kv. mech. alapelve, hogy azonos részecskék *nem különböztethetők meg*, ezért a fenti szorzatban az indexeket permutálni kell, n! szorzat kombinációja a helyesebb Ψ .}

A ψ_i -k „egyelektron-függvények”, csak egy-egy elektronhoz tartoznak; a H-atom gerjesztett állapotaiaként megismert pályák jellegét (szimmetriáját) mutatják, melyeket itt is *n, l, m* kvantumszámok jellemeznek.

A szokásos jelölés most is: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, stb.

A pályákhoz **pályaenergia** tartozik. Ez - szemben a H-atommal - *n és l* kv.számoktól függ! Egyszerű képlet itt nincs, de pontosan számolhatók (a Schr. egy. közelítő megoldásaként). Figyelem: az atom teljes energiája nem egyszerűen a pályae energiák összege!



Aufbau-elv: Az atomokban, ahogy növekszik a rendszám, az elektronok növekvő energia sorrendjében töltik be a pályákat. A feltöltés során érvényesül a

Pauli elv: két elektronnak nem lehet mind a négy kvantumszáma azonos. Más szóval: ha n , l , m adott, m_s még kétféle lehet, vagyis egy pályán a kétféle spinirányítottságnak megfelelően max. két elektron lehet.

Héj;n; alhéj: n, l . Fentiek szerint, egy alhéjon belül a pályák energiája azonos. (pl. a 3 db p-pálya, p_x, p_y, p_z , azonos energiájú, hasonlóan az 5 db d-pálya, 7 db f-pálya stb..)

Hund-szabály: adott alhéjon lehetőleg maximális számú párosítatlan – azonos spinirányú – elektron legyen.

H: $1s^1$; He: $1s^2$; Li: $1s^2 2s^1$; Be: $1s^2 2s^2$; B: $1s^2 2s^2 2p^1$;

C: $1s^2 2s^2 2p^2$, a két p-elektron spin-iránya azonos! A N-nél 3 párosítatlan el.; az O-nél egy pár már megjelenik, ...

Elektronkonfiguráció: megadjuk az elektronok számát mindenegyed alhéjon.

Figyeljük a periodicitást: a külső (vegyérték-) elektronhéj jellege ismétlődik - az alatta levő (egyre nagyobb) zárt héjak a kémiai tulajdonságokat kevésbé befolyásolják.)

| Z | Symbol | Neutral | Positive ion |
|----|--------|------------------|------------------|
| 1 | H | $1s^1$ | - |
| 2 | He | $1s^2$ | $1s^1$ |
| 3 | Li | [He] $2s^1$ | $1s^2$ |
| 4 | Be | [He] $2s^2$ | [He] $2s^1$ |
| 5 | B | [He] $2s^2 2p^1$ | [He] $2s^2$ |
| 6 | C | [He] $2s^2 2p^2$ | [He] $2s^2 2p^1$ |
| 7 | N | [He] $2s^2 2p^3$ | [He] $2s^2 2p^2$ |
| 8 | O | [He] $2s^2 2p^4$ | [He] $2s^2 2p^3$ |
| 9 | F | [He] $2s^2 2p^5$ | [He] $2s^2 2p^4$ |
| 10 | Ne | [He] $2s^2 2p^6$ | [He] $2s^2 2p^5$ |
| 11 | Na | [Ne] $3s^1$ | [He] $2s^2 2p^6$ |
| 12 | Mg | [Ne] $3s^2$ | [Ne] $3s^1$ |
| 13 | Al | [Ne] $3s^2 3p^1$ | [Ne] $3s^2$ |
| 14 | Si | [Ne] $3s^2 3p^2$ | [Ne] $3s^2 3p^1$ |

| | | | |
|----|----|---|---|
| 15 | P | [Ne] 3s ² 3p ³ | [Ne] 3s ² 3p ² |
| 16 | S | [Ne] 3s ² 3p ⁴ | [Ne] 3s ² 3p ³ |
| 17 | Cl | [Ne] 3s ² 3p ⁵ | [Ne] 3s ² 3p ⁴ |
| 18 | Ar | [Ne] 3s ² 3p ⁶ | [Ne] 3s ² 3p ⁵ |
| 19 | K | [Ar] 4s ¹ | [Ne] 3s ² 3p ⁶ |
| 20 | Ca | [Ar] 4s ² | [Ar] 4s ¹ |
| 21 | Sc | [Ar] 3d ¹ 4s ² | [Ar] 3d ¹ 4s ¹ |
| 22 | Ti | [Ar] 3d ² 4s ² | [Ar] 3d ² 4s ¹ |
| 23 | V | [Ar] 3d ³ 4s ² | [Ar] 3d ⁴ |
| 24 | Cr | [Ar] 3d ⁵ 4s ¹ | [Ar] 3d ⁵ |
| 25 | Mn | [Ar] 3d ⁵ 4s ² | [Ar] 3d ⁵ 4s ¹ |
| 26 | Fe | [Ar] 3d ⁶ 4s ² | [Ar] 3d ⁶ 4s ¹ |
| 27 | Co | [Ar] 3d ⁷ 4s ² | [Ar] 3d ⁸ |
| 28 | Ni | [Ar] 3d ⁸ 4s ² | [Ar] 3d ⁹ |
| 29 | Cu | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹ | [Ar] 3d ¹⁰ |
| 30 | Zn | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹ |
| 31 | Ga | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² |
| 32 | Ge | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ |
| 33 | As | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³ | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² |
| 34 | Se | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴ | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³ |
| 35 | Br | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵ | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴ |
| 36 | Kr | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶ | [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵ |

Megfigyelendő:

1. Atomsúlyokkal együtt halad a rendszám, kivéve Ar - K (és lentebb Te - I). Ezért lehetett sikeres Mengyelejev...

2. A 3d - 4s pálya betöltése megfordulhat ... (hasonlítsuk össze az atomot és az iont ...).

Félreértések számos tankönyvben. Valójában mindig a 3d pályaenergia alacsonyabb a 4s-nél; de az atom teljes energiája szempontjából mégis előnyösebb lehet a 4s betöltése (K, Ca-nál 4s, a 3d csak a Sc-nál indul).