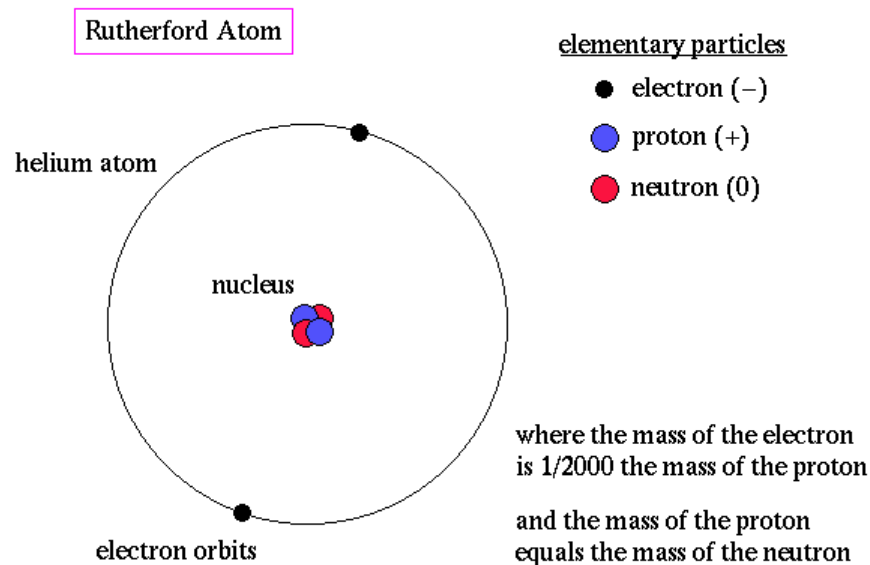


Elektronska struktura atoma

Rutherfordov atomski model – jezgro u sredini – pozitivno naelektrisano – skoro sva masa u jezgru – veoma malo

Elektroni kruže oko jezgra – elektrostatičke interakcije ih drže da ne napuste jezgro – centrifugalna sila ih drži da ne padnu na jezgro – mala masa – velika zapremina



Talasi - elektromagnetno zračenje

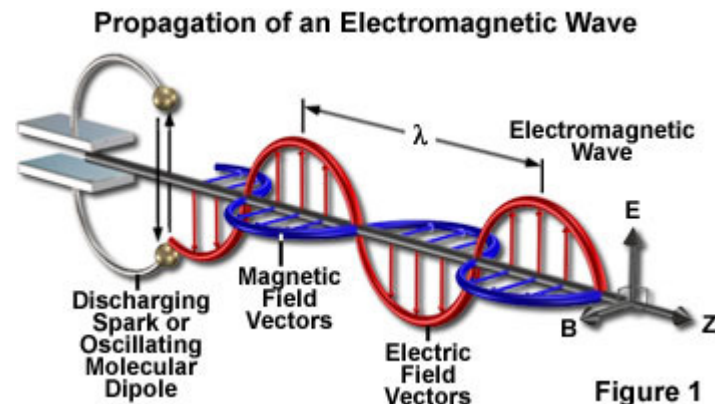
Elektromagnetno zračenje – prenosi energiju kroz prostor

Karakteriše ga talasna dužina (λ) i frekvencija (ν)

Brzina e-m zračenja (c) u vakuumu je $3,00 \times 10^8$ m/s

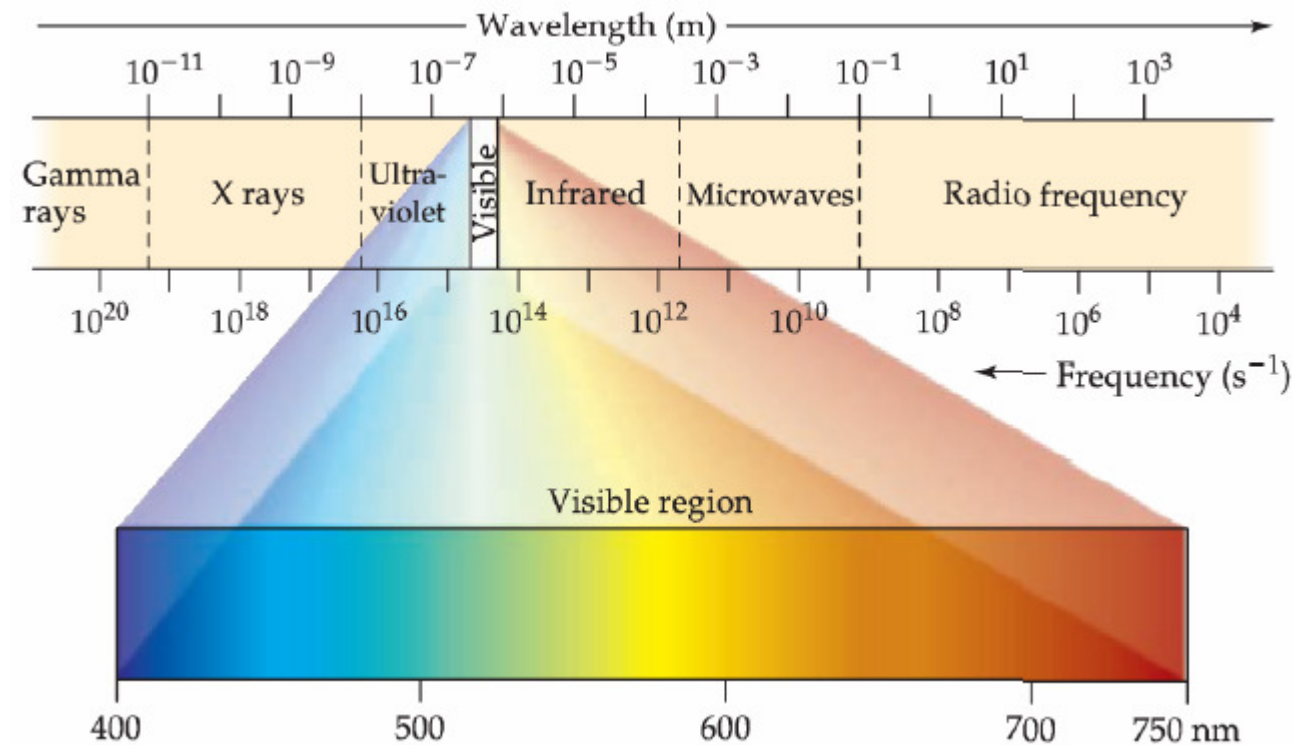
Takođe bitna relacija koja poizilazi iz svega ovoga je:

$$\lambda\nu=c$$



Talasi - elektromagnetno zračenje

Spektar e-m zračenja



Kvantna teorija

Svetlost se ponaša kao talas – interferencija, difrakcija, refleksija... sasvim se lepo uklapa u sve zakone talasne mehanike.

Ipak tri stvari kod svetlosti se nikako nisu mogle objasniti talasnom prirodom:

1. Emisija svetlosti sa usijanih objekata (crno telo)
2. Fotoelektrični efekat – izbijanje elektrona sa površine metala pomoću svetlosti
3. Emisija svetlosti sa pobuđenih atoma gasa – emisijski spektri (neonska lampa)

Emisija svetlosti sa usijanih objekata

Obična sijalica je usijana volframova žica koja kada se zagreje emituje belu svetlost.

Talasna dužina emitovane svetlost zavisi od temperature tela – crveno usijana tela su hladnija od usijanih tela koja emituju belu svetlost

Ovo je objasnio Max Planck i ustanovio prve principe kvantne teorije

On je pretpostavio da atomi mogu da primaju ili otpuštaju energiju samo u malim diskretnim komadima.

Najmanja količina energije koja se može emitovati ili apsorbovati elektromagnetnim zračenjem se zove kvant.

Emisija svetlosti sa usijanih objekata

Energija svakog pojedinačnog kvanta svetlosti je jednaka konstanti puta frekvencija svetlosti

$$E=h\nu$$

h – Plankova konstanta – $6,63 \times 10^{-34}$ J·s

Po kvantnoj teoriji energija se uvek emituje ili apsorbuje kao celobrojni umnožak $h\nu$. Ako neki atom emituje ukupno energiju od $3h\nu$ kažemo da je taj atom emitovao tri kvanta energije.

Takođe kvantna teorija predviđa da će energija svakog tela biti kvantirana – to znači da može da ima samo određene vrednosti.

Emisija svetlosti sa usijanih objekata

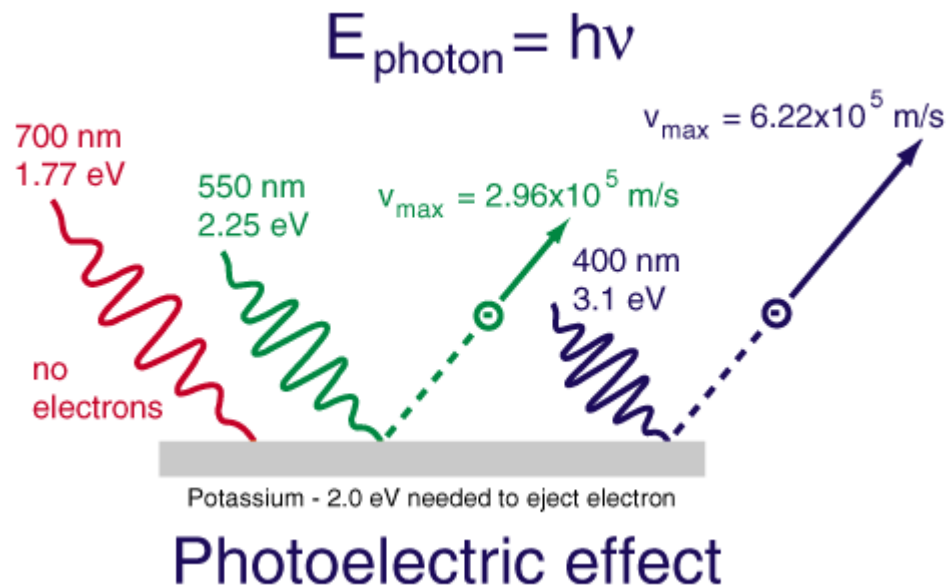
Npr. moja potencijalna energija je kvantirana kada se penjem uz stepenište



Fotoelektrični efekat

Ajnštajn je pomoću Plankove teorije objasnio fotoelektrični efekat

Izbacivanje elektrona sa površine metala pomoću svetlosti

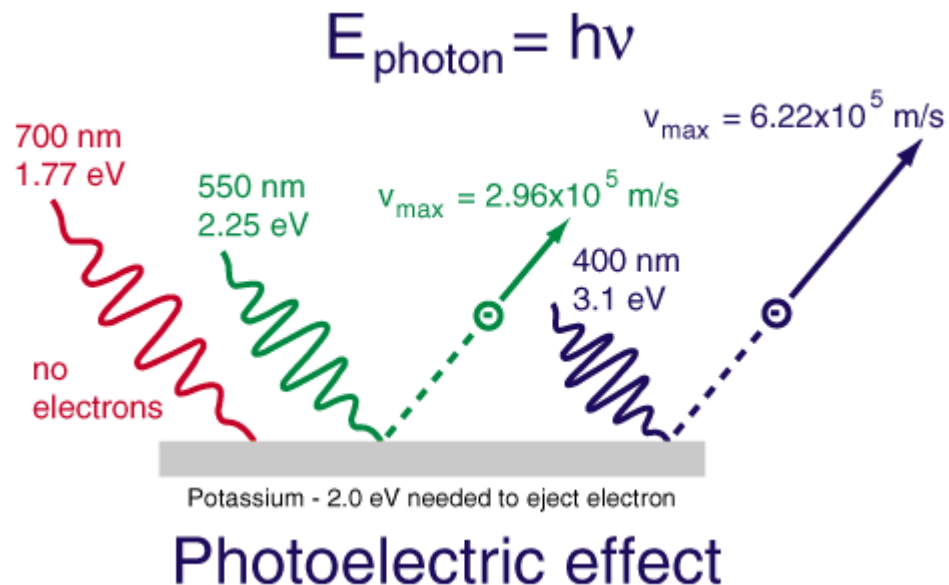


Fotoelektrični efekat

Potrebna je svetlost određene talasne dužine ili kraće.

Brzina izbačenih elektrona ne zavisi od intenziteta svetlosti već samo od talasne dužine

Broj izbačenih elektrona zavisi od intenziteta svetlosti



Fotoelektrični efekat

Ajnštajново objašnjenje – zračenje koje pogađa metal se sastoji od malih paketa energije koje je nazvao foton i koji se ponaša kao čestica

Kada foton pogodi metal on nestane i preda svoju energiju elektronu metala

Jonizaciona energija – energija koja je potrebna da se elektron izbaci iz potencijalne jame jezgra tj. da se odvoji od privlačnog uticaja jezgra

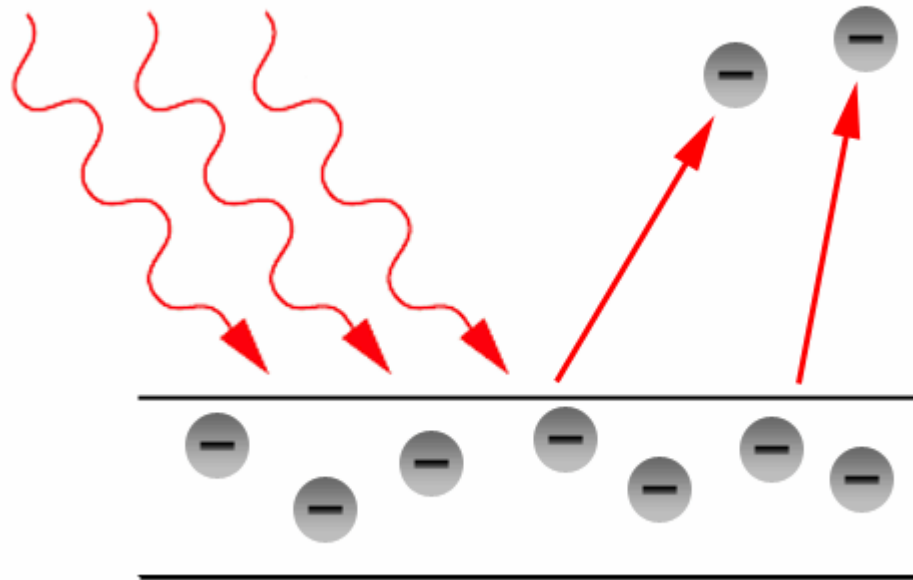
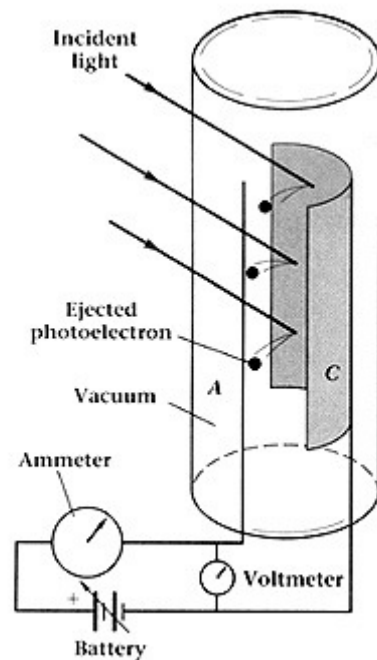
Ukoliko je energija fotona mala elektron ne može da napusti jezgro i ništa se ne dešava

Ako je energija fotona dovoljno velika elektroni napuštaju jezgra

Fotoelektrični efekat

Ako je energija fotona znatno veća višak energije fotona se pretvara u kinetičku energiju tih elektrona

Dvojna priroda svetlosti – i kao talas i kao čestica



Emisija svetlosti sa pobuđenih atoma – linijski emisioni spektri

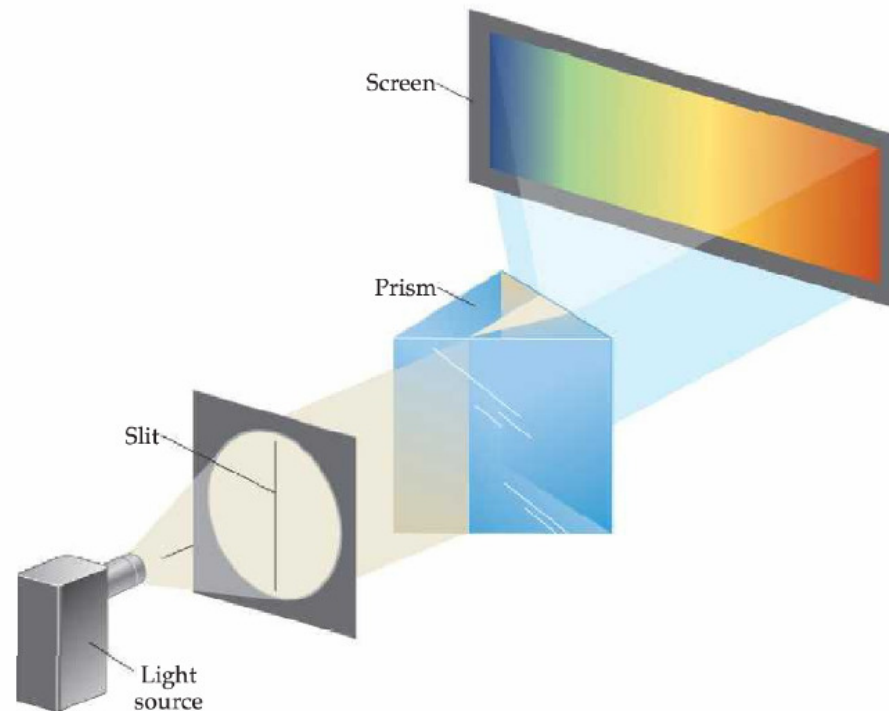
Laser – daje snop svetlosti samo jedne talasne dužine –
monohromatska svetlost

Sijalica daje svetlost različitih talasnih dužina –
polihromatska svetlost

Emisija svetlosti sa pobuđenih atoma – linijski emisijski spektri

Kada svetlost sunca ili volframove sijalice... propustimo kroz prizmu ona se prelama i razlaže po talasnim dužinama (svetlost različitih talasnih dužina se različito prelama)

Sve talasne dužine se nalaze u beloj svetlosti, nema praznih mesta – takvi spektri se zovu kontinualni spektri

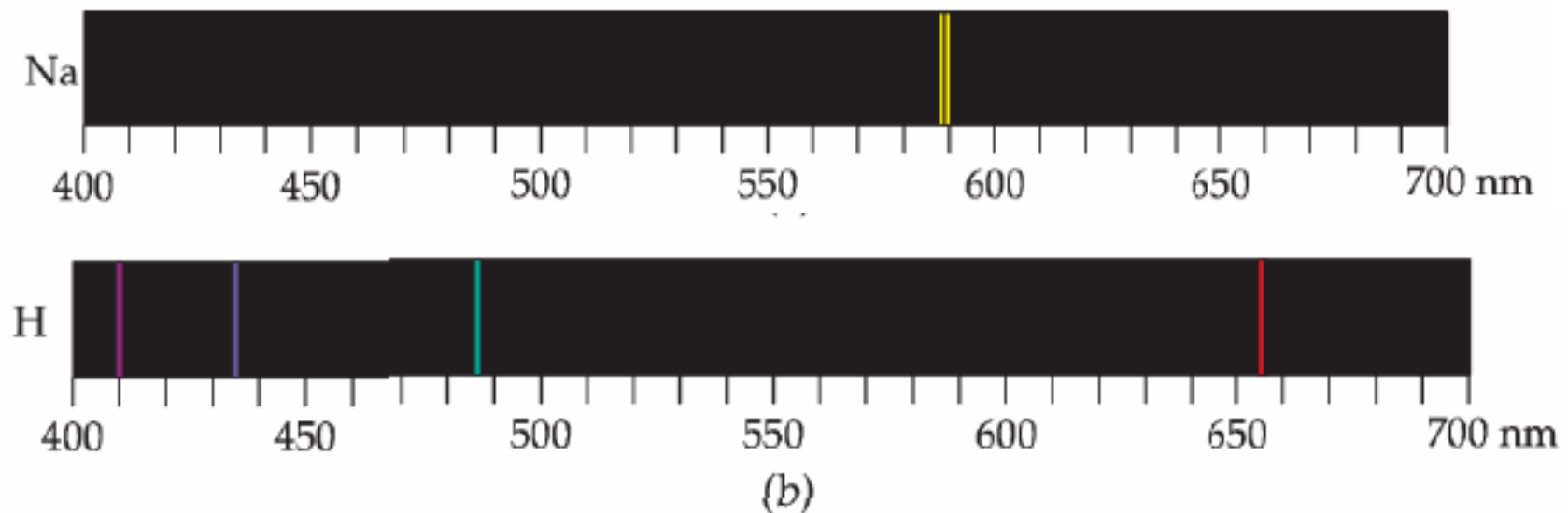


Emisija svetlosti sa pobuđenih atoma – linijski emisijski spektri

Kada se gasovi pod niskim pritiskom stave u zatvorenu staklenu cev i kroz njih propusti struja oni daju nešto drugačiji spektar.

Neon svetli crvenkasto narandžasto, narijum žuto...

Ovakvi spektri se zovu linijski spektri

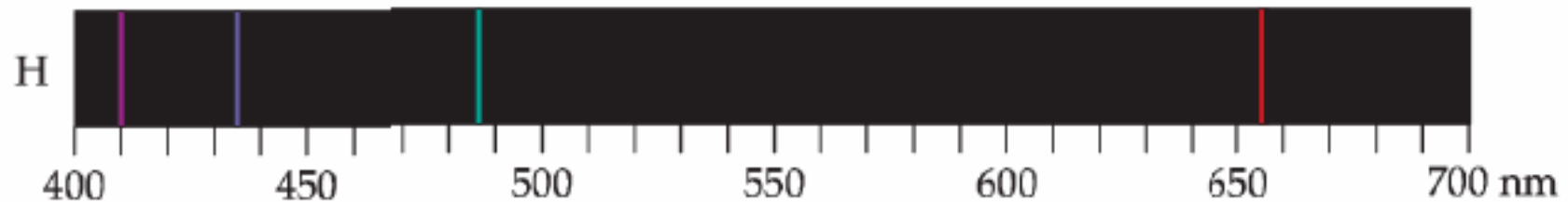


Emisija svetlosti sa pobuđenih atoma – linijski emisijski spektri

Linijski spektar vodonika je jako interesantan. Ima 4 linije i prilično su pravilno raspoređene. Balmer je otkrio (1885.) (a kasnije Ridberg primenio) da talasne dužine tih traka se mogu izraziti pomoću formule

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$R_H = 1,096776 \times 10^{-7} \text{ m}^{-1}$$



(b)

Borov atomski model

Na odgovor zašto je ovo tako jednostavno se čekalo 30 godina

Pretpostavka:

“Elektroni se kreću po kružnim putanjama oko jezgra”

Po klasičnoj fizici ako bi se tako kretali morali bi konstantno da emituju zračenje i gube energiju i veoma brzo bi pali na jezgro

Bor je pretpostavio da poznati zakoni fizike ne važe na atomskom nivou

Borov atomski model

Borov atomski model se zasniva na tri postulata

1. Samo orbite određenog radijusa, koje odgovaraju određenim energijama elektrona su dozvoljene da ih zauzimaju elektroni u atomu
2. Elektron koji se nalazi u dozvoljenoj orbiti ima odgovarajuću energiju i nalazi se u "dozvoljenom" energetsom stanju. Elektron koji se nalazi u "dozvoljenom" energetsom stanju neće otpuštati energiju i neće pasti na jezgro
3. Elektron apsorbuje i emituje energiju samo kada prelazi iz jednog "dozvoljenog" stanja u drugo. Ova energija se emituje ili apsorbje u vidu elektromagnetnog zračenja tj. fotona energije $E=h\nu$

Borov atomski model

Polazeći od ova tri postulata i koristeći klasične jednačine kretanja i interakcije između naelektrisanja Bor je izračunao energije koje odgovaraju svakoj orbiti **vodonikovog atoma**

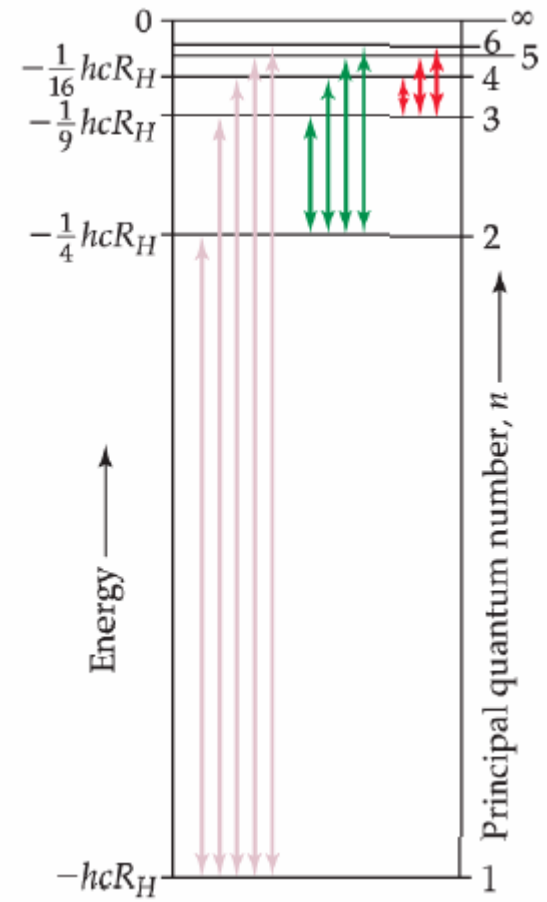
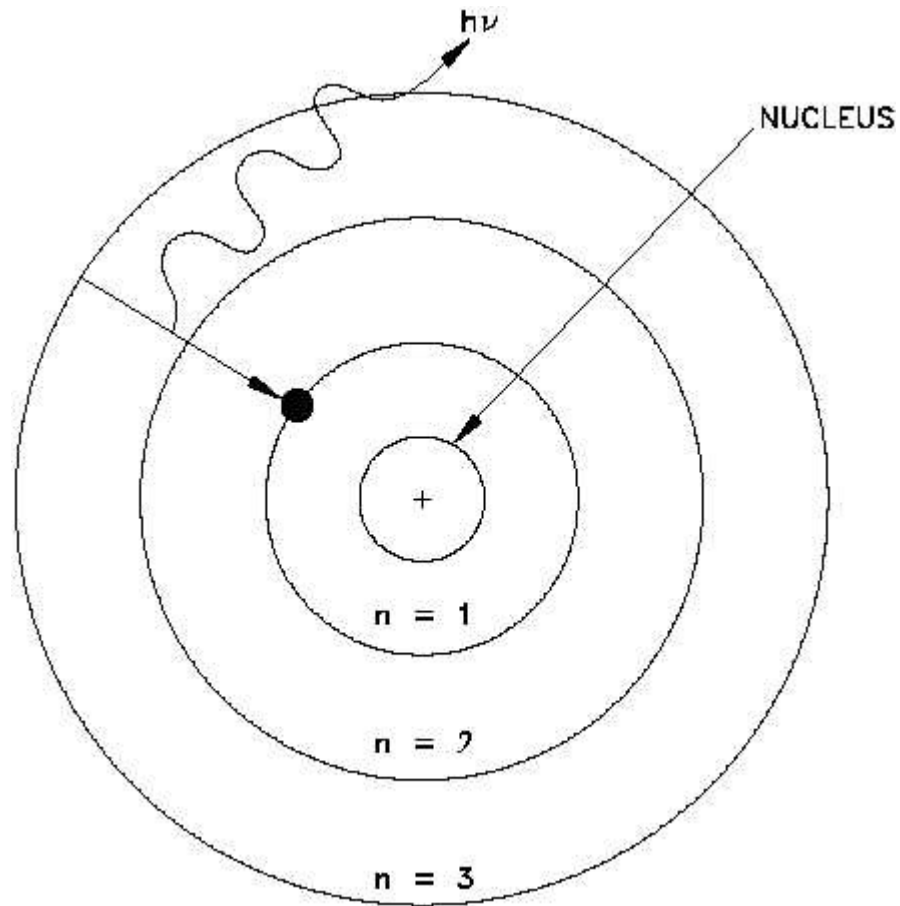
$$E = -2,15 \times 10^{-18} J \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

n – kvantni broj, označava broj orbite

Energija orbita je negativna i što je negativnija atom će biti stabilniji ukoliko se elektron nalazi u toj orbiti

Stanje najniže energije n=1 se zove **osnovno stanje**, ako se elektron nalazi u nekoj višoj orbiti n=2,3... atom se nalazi u **pobuđenom stanju**

Borov atomski model



Borov atomski model

Kada n postane beskonačno energija elektrona je nula. Tada se elektron nalazi izvan uticaja jezgra – jonizovan je

$$E = -2,15 \times 10^{-18} J \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

Treći postulat – apsorpcija i emisija elektromagnetnog zračenja kada elektron prelazi sa jedne na dugu “dozvoljenu” orbitu.

Emisija emitovanog ili apsorbovanog zračenja će biti jednaka razlici u energiji između dve orbite

$$\Delta E = E_f - E_i = h\nu$$

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = -2,18 \times 10^{-18} J \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Borov atomski model

Talasni dužina emitovanog ili apsorbovanog fotona će biti:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{\Delta E}$$

Ako zamenimo ΔE i izrazimo sve kao $1/\lambda$ dobijamo:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{-2,18 \times 10^{-18} \text{ J}}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Što odgovara Ridbergovoj jednačini za talasne dužine traka u spektru vodonika

Limiti Borovog atomskog modela

Odlično radi samo prilikom objašnjavanja spektra atomskog vodonika, za sve ostale atome postoje značajne greške

Opisuje elektron samo kao česticu ne uzima u obzir njegovu talasnu prirodu

Danas značajan samo kao korak u pravom smeru ka otkrivanju prave prirode atoma

Jedino što je preživelo od Borovog atomskog modela je:

1. Elektroni postoje samo na određenim diskretnim (diskretno - ima jednu vrednost) energetskim nivoima, koji su opisni kvantnim brojevima
2. Pri prelasku elektrona sa jednog nivoa na drugi emituje se ili se apsorbuje energija

Talasna priroda materije

Zračenje se ponaša i kao čestica i kao talas

Luj de Brojli proučavao da li se onda i materija možda u nekim okolnostima ponaša kao talas

Da li se elektron koji kruži oko jezgra može posmatrati kao talas?

De Brojli predložio da se elektronu (ili svakoj materiji) može pridružiti odgovarajući talas sa talasnom dužinom koja zavisi od mase i brzine te čestice (materije)

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

mv – impuls

Ovi talasi se zovu talasi materije

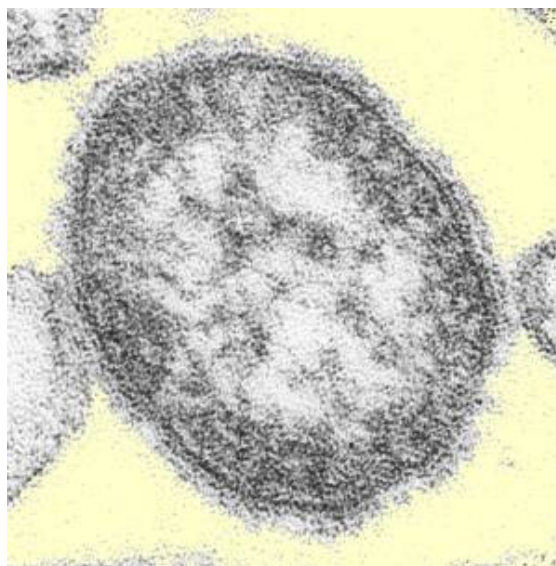
Talasna priroda materije

Za elektrone koji se kreću oko jezgra talasna dužina pridruženih talasa se nalazi negde u oblasti X zraka.

Za velike objekte (npr tenisku lopticu) talasna dužina pridruženog talasa je tako mala da je daleko od bilo čega što možemo eksperimentalno opaziti (izračunajte i uverite se)

De Brojijeva teorija je i eksperimentalno potvrđena – elektroni se ponašaju kao talasi – difraktuju se, interferiraju...

Elektronski mikroskop



Hajzenbergov princip neodređenosti

Problem sa talasnom prorodom materije – talas se prostire kroz prostor i njegva lokacija nije tačno definisana

Ako elektronu pridružimo talas da li onda možemo precizno odrediti njegovu lokaciju?

Hajzenberg je zaključio da dvojna priroda materije postavlja fundamentalna ograničenja o tome koliko precizno možemo odrediti lokaciju i impuls nekog objekta

Ovo ograničenje postaje bitno jedino kad radimo sa subatomskim česticama (i atomima na temperaturi blizu 0 K)

Hajzenbergov princip neodređenosti primenjen na elektrone u atomu :

"fundamentalno je nemoguće znati tačan impuls elektrona i njegov položaj u prostoru"

Hajzenbergov princip neodređenosti

Hajzenberg je matematički predstavio neodređenost položaja elektrona Δx i neodređenost njegovog impulsa Δmv kao:

$$\Delta x \cdot \Delta mv \geq \frac{h}{4\pi}$$

Implikacije principa neodređenosti:

Masa elektrona je $9,11 \times 10^{-31}$ kg a prosečna brzina u H atomu 5×10^6 m/s. Neka je neodređenost brzine 1% - $\Delta v = 5 \times 10^4$ m/s i da je to jedina neodređenost u impulsu tada je neodređenost položaja elektrona:

$$\Delta x \geq \frac{h}{4\pi m \Delta v} \geq \frac{6,63 \times 10^{-34} \text{ Js}}{4\pi (9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}) (5 \times 10^4 \frac{\text{m}}{\text{s}})} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}$$

Hajzenbergov princip neodređenosti

Prečnik vodonikovog atoma je $2 \times 10^{-10} \text{m}$ to znači da je neodređenost položaja elektrona pet puta veća od samog atoma. Mi nemamo pojma gde se taj elektron nalazi u atomu.

Kvantna mehanika i atomske orbitale

1926. godine Šredingerova jednačina

$$H\Psi = E\Psi$$

Uključena i talasna i čestična priroda elektrona.

Ψ je **talasna funkcija** elektrona i ona potpuno opisuje talas koji je pridružen elektronu i nema fizički smisao

Rešenja Šredingerove jednačine za atom vodonika daju iste rezultate kao i Borove jednačine

Ipak rešavanjem Šredingerove jednačine ne možemo da dođemo do saznanja o položaju elektrona

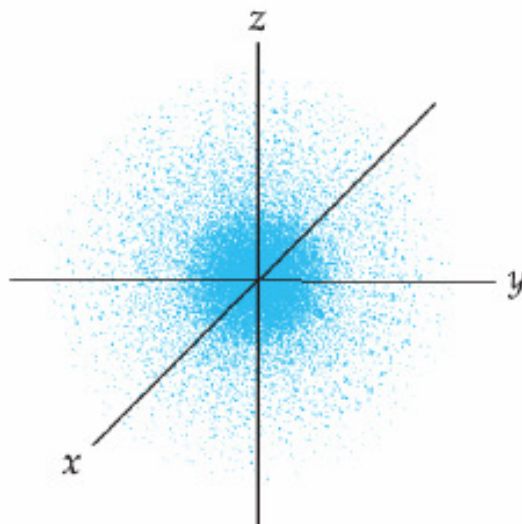
Jedino do čega možemo da dođemo je verovatnoća da će elektron biti u određenom delu prostora tog trenutka

Kvantna mehanika i atomske orbitale

Ajnštajn predložio da je Ψ^2 mera verovatnoće nalaženja elektrona u odgovarajućem delu prostora.

Zato se i Ψ^2 zove gustina verovatnoće

Računanjem Ψ^2 za razne delove prostora oko atomskog jezgra dolazi se do mape **elektronske gustine** oko jezra



Mapa elektronske gustine za elektron vodonikovog atoma u svom osnovnom stanju

Kvantna mehanika i atomske orbitale

Borov atomski model koristi orbite i jedan kvantni broj – n koji određuje energiju elektrona u tim orbitama

Kvantno mehanički pristup se zasniva na **talasnoj funkciji** Ψ koja samo opisuje talas pridružen elektronu

Te talasne funkcije se još zovu i orbitale i one zajedno sa energijom elektrona predstavljaju rešnje Šredingerove jednačine

Da bi mogli da napišemo ispravnu talasnu funkciju koja će pravilno reprezentovati talas pridružen elektronu treba nam 3 (4) kvantna broja

Kvantna mehanika i atomske orbitale

1. Glavni kvantni broj (n) uvek ima pozitivne vrednosti (1,2,3,4...). On nam generalno govori o veličini orbitale i energiji elektrona u toj orbitali
2. Azimutalni (sporedni) kvantni broj (l) ima vrednosti od 0 do $n-1$ (ima tačno n vrednosti). On definiše oblik orbitale. Vrednost l se ne piše prilikom predstavljanja orbitale već se koriste slova $s, p, d, f...$

l vrednost	0	1	2	3	4	5
Slovna oznaka	s	p	d	f	g	h

3. Magnetni kvantni broj (m_l) definiše orijentaciju orbitale u prostoru. Ima vrednosti od $-l$ do $+l$ uključujući nulu

Npr za $l=2$ m_l će imati vrednosti -2, -1, 0, 1, 2

m_l uvek ima $2l+1$ vrednosti

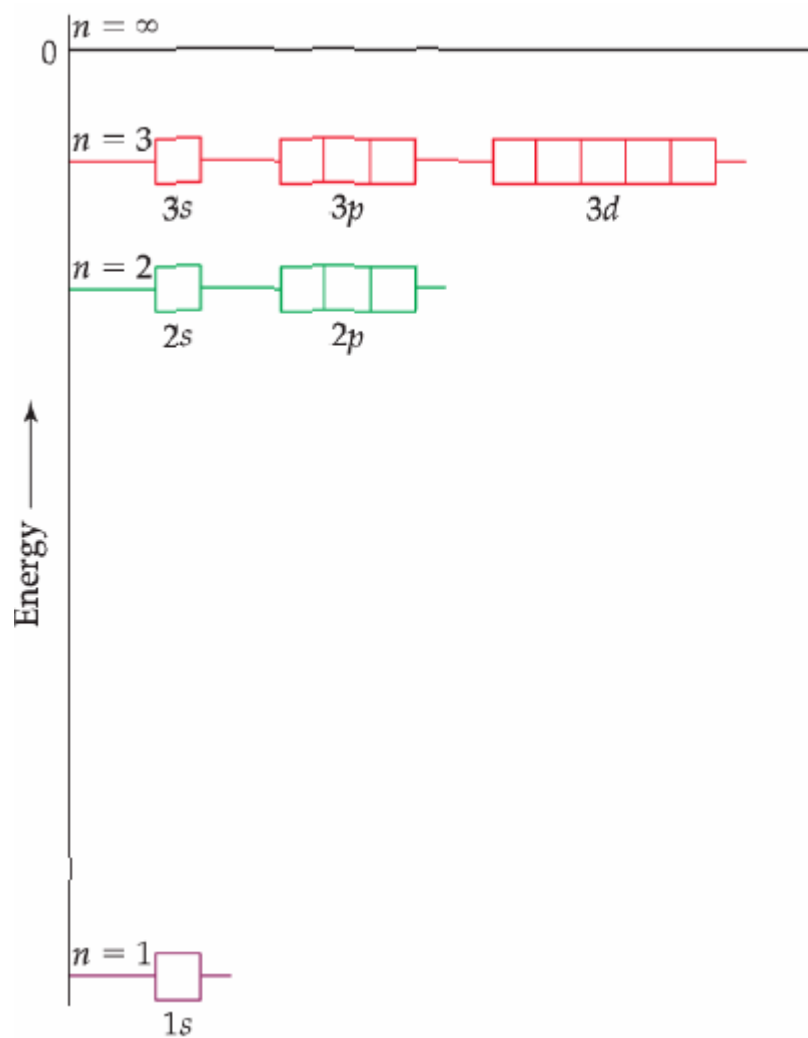
Kvantna mehanika i atomske orbitale

Sve orbitale sa istom vrednošću n čine jednu **elektronsku ljusku** ili **elektronski nivo**

Sve orbitale sa istom n i l vrednošću čine jedan **elektronski podnivo** (npr 2p podnivo, 3d podnivo..)

n	Possible Values of l	Subshell Designation	Possible Values of m_l	Number of Orbitals in Subshell	Total Number of Orbitals in Shell
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	1, 0, -1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	1, 0, -1	3	
	2	3d	2, 1, 0, -1, -2	5	
4	0	4s	0	1	16
	1	4p	1, 0, -1	3	
	2	4d	2, 1, 0, -1, -2	5	
	3	4f	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3	7	

Kvantna mehanika i atomske orbitale



Energije orbitala atoma vodonika

Izgled orbitala

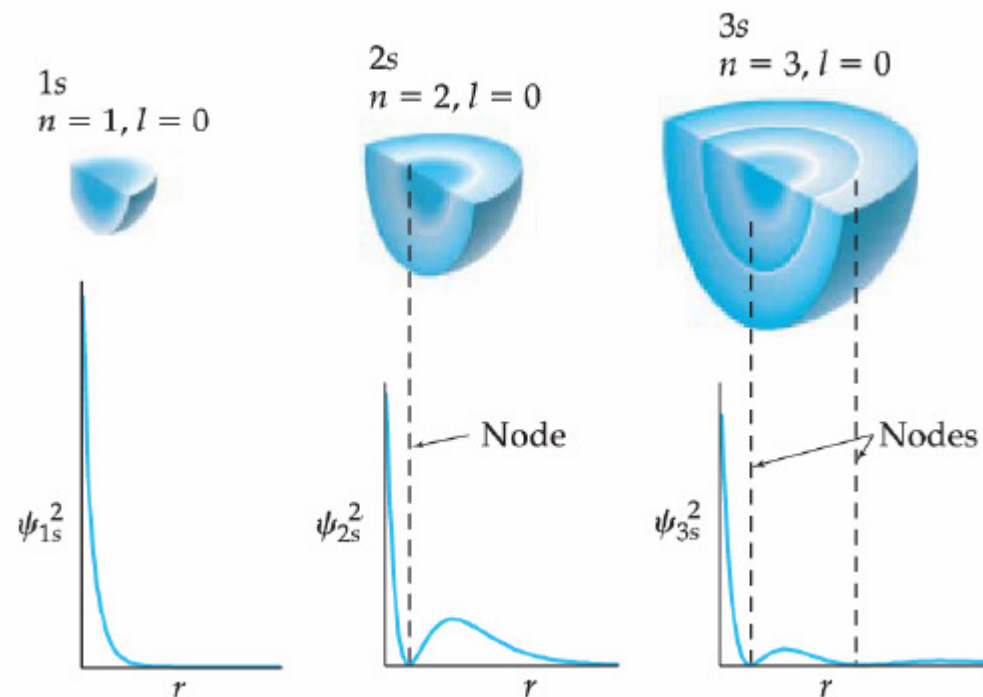
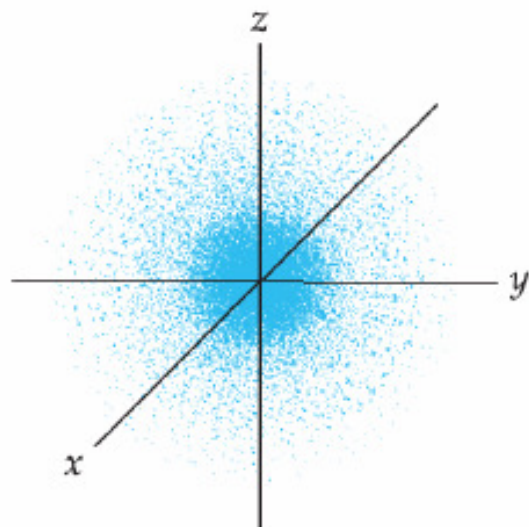
Sve s orbitale su sfernog oblika (jer je $l=0$ i $m_l=0$)

Čvorovi mesta u kojima je verovatnoća nalaženja elektrona jednaka nuli

1s orbitala nema čvorova (osim onog na jezgru)

2s ima jedan sferni čvor

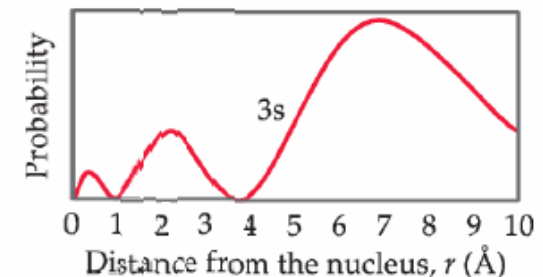
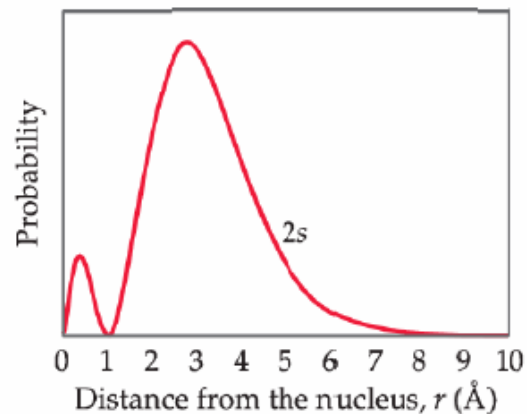
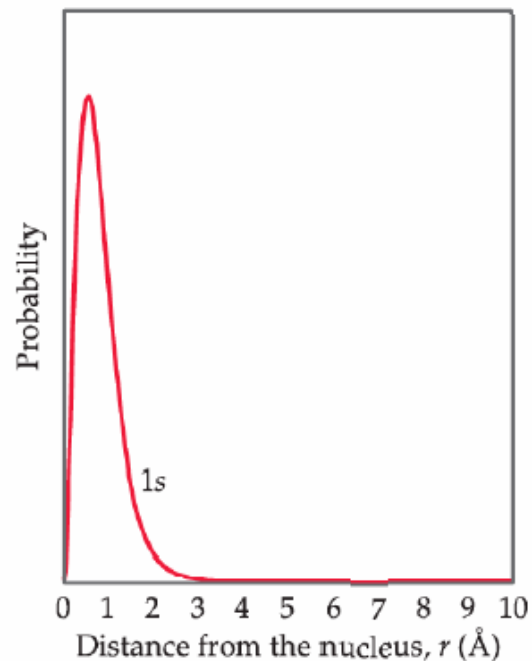
3s ima dva sferna čvora



Izgled orbitala

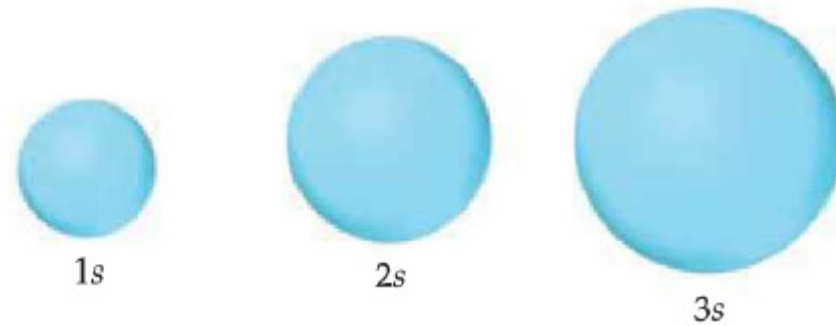
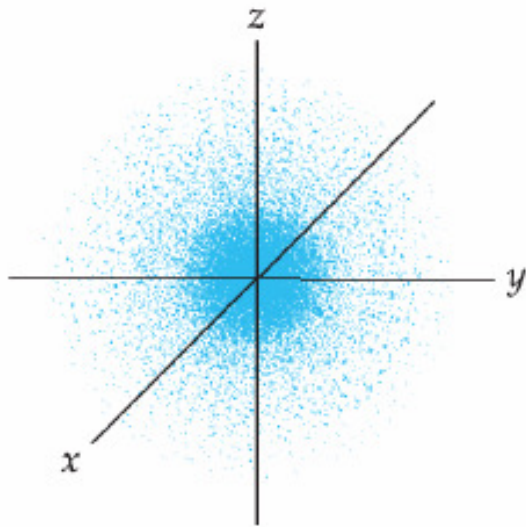
Verovatnoća nalaženja elektrona se definiše kao Ψ^2 podeljena sa kvadratom rastojanja od jezgra r^2

$$p \propto \frac{\Psi^2}{r^2}$$



Izgled orbitala

Standardan način prikazivanja orbitala je kao granična površina koja obuhata (najčešće) 90% verovatnoće nalaženja elektrona unutar nje



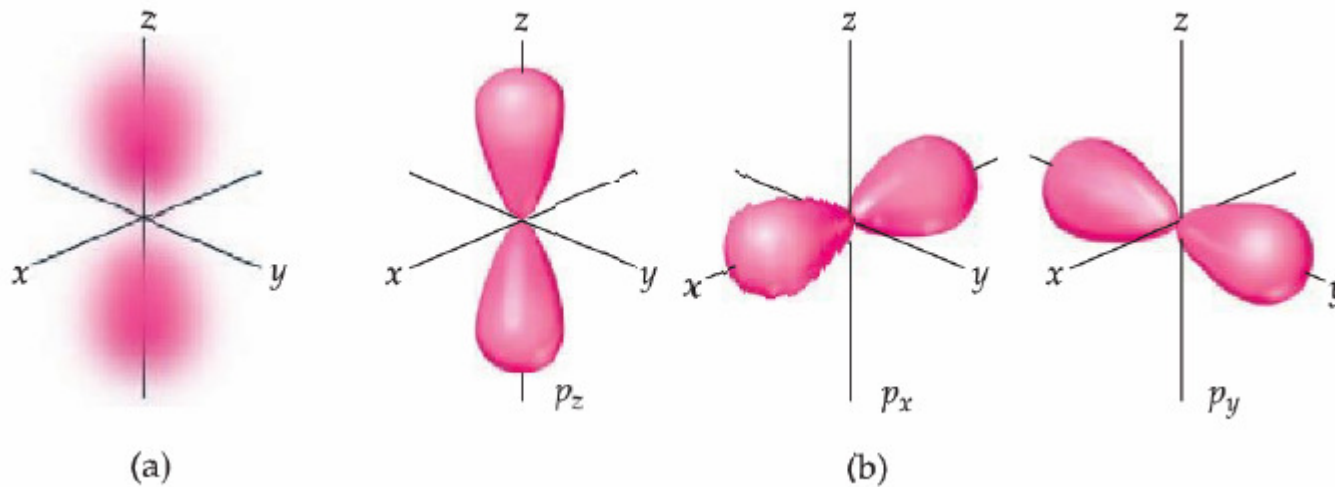
Izgled orbitala

p orbitale se javljaju tek na nivoima sa $n \geq 2$

Za sve njih $l=1$ a m_l može imati vrednosti -1, 0, 1

Znači ima ukupno tri p orbitale u podnivou

Umesto da se obeležavaju kao $2p_{-1}$, $2p_0$, $2p_1$ usvojene su oznake $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$



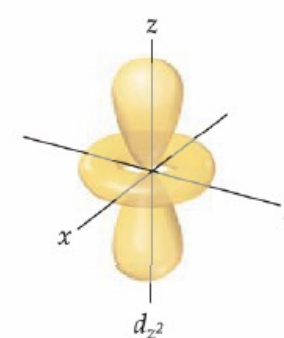
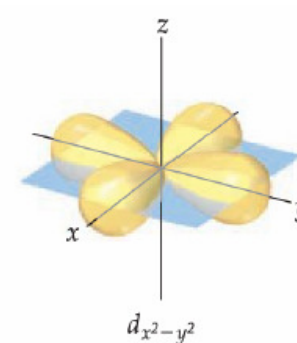
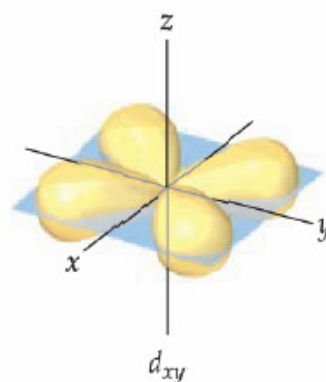
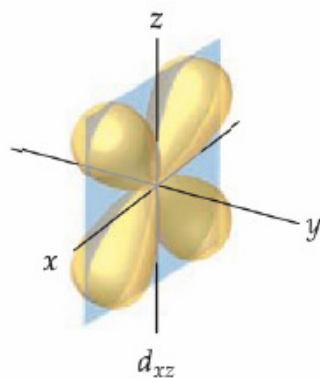
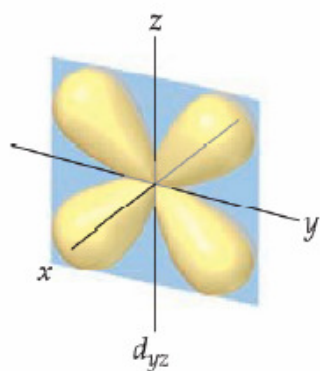
Izgled orbitala

d orbitale se javljaju tek na nivoima sa $n \geq 3$

Za sve njih $l=2$ a m_l može imati vrednosti $-2, -1, 0, 1, 2$

Znači ima ukupno pet d orbitala u podnivou

Umesto da se obeležavaju kao $3d_{-2}, 3d_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_2$
usvojene su oznake $3d_{xz}, 3d_{yz}, 3d_{xy}, 3d_{x^2-y^2}$ i $3d_{z^2}$



Izgled orbitala

f orbitale se javljaju tek na nivoima sa $n \geq 4$

Za sve njih $l=3$ a m_l može imati vrednosti $-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$

Znači ima ukupno sedam f orbitala u podnivou

Višeelektronski atomi

Svi ovi rezultati do sada su se odnosili na vodonikov atom

Kod vodonika energija elektrona u nekoj orbitali je određena samo glavnim kvantnim brojem n

Znači elektron u $2s$ i $2p$ orbitali ima istu energiju

*Ne može se govoriti o energiji orbitale već samo o energiji elektrona kada se nalazi u odgovarajućoj orbitali – *mada se često koristi izraz energija orbitale ali se uvek misli na energiju elektrona u toj orbitali*

*Kada se u orbitali ne nalazi elektron ona ne postoji i zove se prazna ili virtuelna orbitala – prazne orbitale su veoma zgodne kada se rade izračunavanja i zato ću ih često pominjati tokom predavanja ali u prirodi one ne postoje

Višeelektronski atomi

Kada u atomu postoji više elektrona situacija se bitno menja jer u razmatranje ulazi još jedan bitan član – međuelektronsko odbijanje

Da bi u datom trenutku mogli da izračunamo međuelektronsko odbijanje dva elektrona moramo znati gde se ti elektroni nalaze, a kvantna mehanika nam ne daje taj podatak

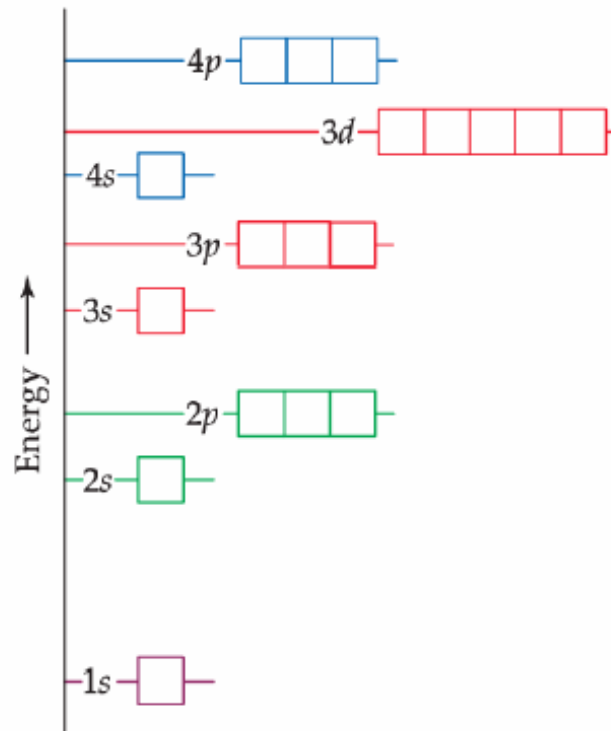
$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e_1 e_2}{r}$$

Danas postoji veliki broj načina na koji se računa međuelektronsko odbijanje – to je pravac u kome se danas razvija kvantna hemija

Višeelektronski atomi

Međuelektronsko odbijanje utiče na to da se energije orbitala unutar jednog nivoa razdvoje po podnivoima, sada više 2s i 2p orbitale nemaju istu energiju

Na svu sreću međuelektronsko odbijanje ne utiče na izgled i oblik orbitala (već samo na njihovu energiju) tako da orbitale višeelektronskih atoma imaju isti izgled orbitala kao i atom vodonika



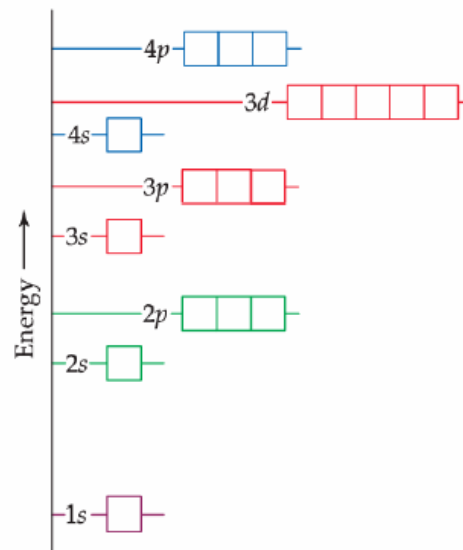
Višeelektronski atomi

"U višeelektronskim atomima energija orbitala sa istim glavnim kvantnim brojem n raste sa porastom azimutalnog kvantnog broja l "

Tako je raspored orbitala na četvrtom nivou ($n=4$):

$$4s (l=0) < 4p (l=1) < 4d (l=2) < 4f (l=3)$$

Ovde je bitno naglasiti da orbitala koje pripadaju istom podnivou (npr. 3d) ostaju degenerisane tj. iste energije

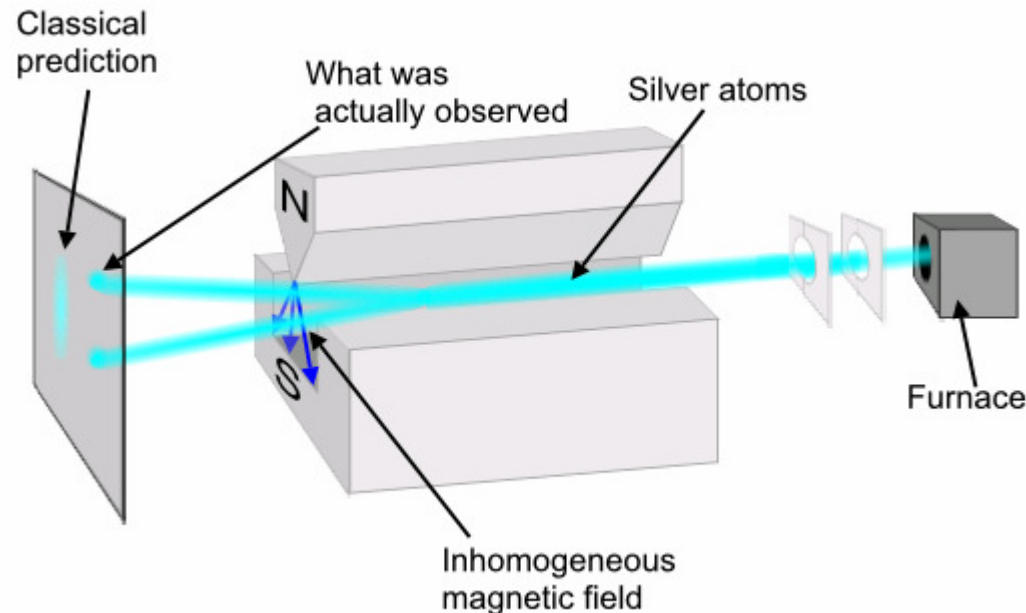


Četvrti kvantni broj - spin

Štern – Gerlahov ogled (1921. godine) otkriće spina elektrona

Zrak atoma srebra ($[\text{Kr}]4d^{10}5s^1$) propuštao je kroz nehomogeno magnetno polje. Zrak se podelio na dva dela. Znači atomi srebra nisu identični, postoji neka mala razlika između njih

Ta razlika je magnetne prirode



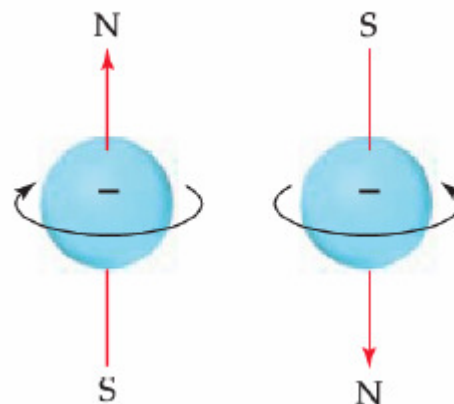
Četvrti kvantni broj - spin

Objašnjenje Štern-Gerlahovih rezultata dali Ulenbek i Goudsmit uvodeći da elektron ima specijalnu osobinu koja se zove spin.

"Spin je inherentno svojstvo materije"

Objašnjenje spina za studente prve godine (klasična fizika):

Elektron je naelektrisana čestica sfernog oblika koja se okreće. Kada se u klasičnoj fizici neka naelektrisana sfera okreće oko svoje ose tada ona indukuje magnetno polje. Smer magnetnog polja zavisi od smera okretanja sfere.

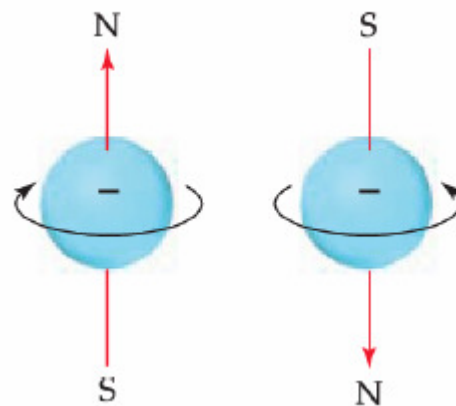


Četvrti kvantni broj - spin

Objašnjenje spina za studente prve godine (klasična fizika):

Pošto elektron može da se okreće oko svoje ose na samo dva načina (sa leva na desno i sa desna na levo) onda će imati i samo dve moguće vrednosti spina. Znači spin elektrona je kvantiran. Spin elektrona se predstavlja spinskim kvantnim brojem m_s i može imati samo dve vrednosti $+1/2$ i $-1/2$

Danas se zna da sve elementarne čestice imaju svoj spin ali je danas prihvaćeno objašnjenje spina previše komplikovano za ovaj kurs. *Spin je inherentno svojstvo materije*



Kratko obnavljanje - kvantni brojevi

Svaki elektron u atomu (uvek se nalazi u nekoj orbitali tog atoma, jer nema kud drugde) je potpuno opisan sa 4 kvantna broja:

1. Glavni kvantni broj (n) govori o veličini orbitale i energiji elektrona u toj orbitali
2. Azimutalni (sporedni) kvantni broj (l) definiše oblik orbitale i kod višeelektronskih atoma utiče na energiju elektrona (orbitale). Energija elektrona je potpuno određena sa n i l
3. Magnetni kvantni broj (m_l) definiše orijentaciju orbitale u prostoru. Ne određuje energiju elektrona (orbitale)
4. Spinski kvantni broj – definiše spin elektrona. Ima samo dve vrednosti

Paulijev princip isključivosti

Wolfgang Pauli – veliki teoretičar

Princip – opisuje svojstvo prirode, ne može se prekršiti **nikada**

Paulijev princip:

“dva elektrona u istom atomu ne mogu imati ista sva četiri kvantna broja”

Sam Paulijev princip je mnogo komplikovaniji i govori o svojstvu antisimetričnosti talasne funkcije prilikom izmene elektrona ali je za sada dovoljno ovoliko.

Posledice Paulijevog principa su te da se u jednu orbitalu (definisanu sa prva tri kvantna broja n , l i m_l) mogu smestiti samo dva elektrona različitih spinova

Elektronska konfiguracija

Da bi mogli da odredimo raspored elektrona u svakom atomu dovoljno je znamo relativne energije orbitala i Paulijev princip

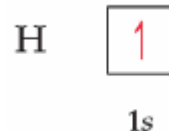
Raspored elektrona u atomu nekog elementa se zove još i **elektronska konfiguracija** tog elementa

Osnovno stanje nekog atoma je najstabilnije stanje i karakteriše se time što su svi elektroni u najnižem mogućem energetsom stanju

Kada pišemo elektronsku konfiguraciju nekog atoma popunjavamo orbitale po porastu energije sa najviše po dva elektrona u svakoj orbitali

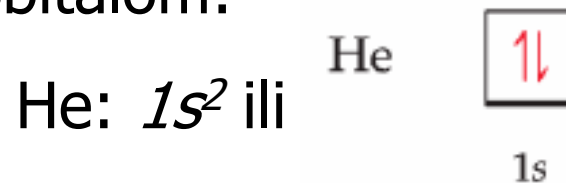
Tako će osnovno stanje vodonika biti jedan elektron u 1s orbitali i to se piše kao:

H: $1s^1$ ili



Elektronska konfiguracija

Sledeći je helijum. On ima dva elektrona i oba mogu da "stanu" u istu orbitalu (ako su im spinovi različiti) tako da će elektronska konfiguracija helijuma biti sa potpuno popunjenom 1s orbitalom:



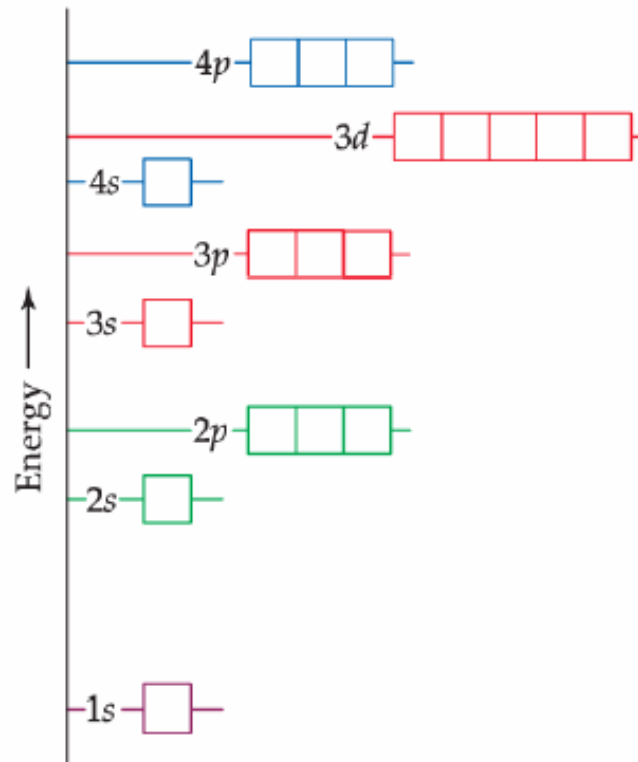
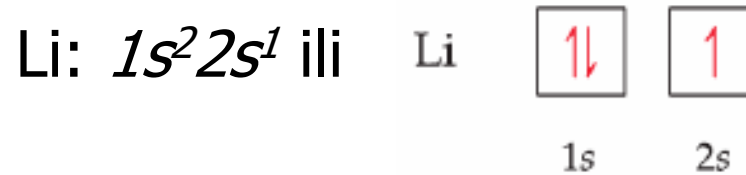
Prvo se piše ime orbitale (1s) pa onda u njenom superskriptu se navodi broj elektrona u toj orbitali

Strelica na gore predstavlja elektron sa spinom $+1/2$ a na dole sa spinom $-1/2$

Kada se u nekoj orbitali nalaze dva elektrona različitih spinova (a samo takvi mogu biti u istoj orbitali) onda se ona zove popunjena. Orbitala sa jednim elektronom se zove polupopunjena (po konvenciji se uzima da je u njoj elektron sa spinom $+1/2$) a bez elektrona - prazna

Elektronska konfiguracija

Litijum ima tri elektrona. Treći elektron ne može u 1s orbitalu već mora u prvu sledeću po energiji. To je 2s orbitala pa je elektronska konfiguracija litijuma:

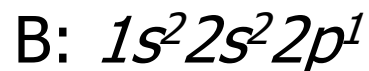


Elektronska konfiguracija

Berilijum ima četiri elektrona i četvrti elektron popunjava 2s orbitalu:



Bor ima pet elektrona i pošto su i 1s i 2s pune peti elektron mora da ide u neku (bilo koju od tri postojeće) 2p orbitalu:



Ugljenik ima šest elektrona i šesti elektron opet ide u 2p orbitalu. Ali pošto ima tri 2p orbitale pitanje je da li će šesti elektron ići u polupopunjenu 2p orbitalu (u kojoj se već nalazi peti elektron) ili u jednu (bilo koju) od dve prazne 2p orbitale.

Ovaj problem se rešava primenom Hundovog pravila

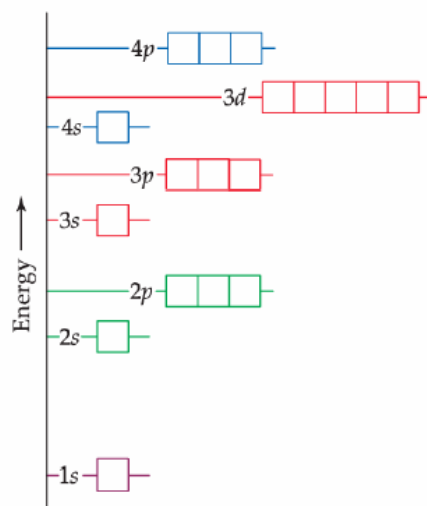
Elektronska konfiguracija – Hundovo pravilo

Hundovo pravilo kaže:

"Za degenerisane orbitale najniže energetske stanje je ono u kome je broj elektrona sa istim spinom maksimalan"

To znači da će šesti elektron ugljenika ići u jednu od dve prazne 2p orbitale.

Hundovo pravilo se zasniva na činjenici da se elektroni međusobno odbijaju jer su istorodno naelektrisani. Zbog toga teže da budu što je dalje moguće jedan od drugog.



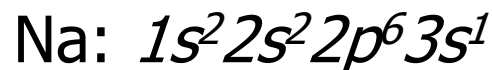
Elektronska konfiguracija – Hundovo pravilo

Poštujući Hundovo pravilo popunjavamo dalje 2p orbitale do neona:

Element	Total Electrons	Orbital Diagram				Electron Configuration
		1s	2s	2p	3s	
Li	3	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\square \square \square	\square	$1s^2 2s^1$
Be	4	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\square \square \square	\square	$1s^2 2s^2$
B	5	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \square \square	\square	$1s^2 2s^2 2p^1$
C	6	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow \square	\square	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	7	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow \uparrow	\square	$1s^2 2s^2 2p^3$
Ne	10	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	\square	$1s^2 2s^2 2p^6$
Na	11	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	\uparrow	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Elektronska konfiguracija – valentni i unutrašnji elektroni

Posle neona ($1s^2 2s^2 2p^6$) ide natrijum sa 11 elektrona. Nema više mesta u prvoj i drugoj ljusci pa moramo otvoriti treću ljusku koja počinje sa 3s orbitalom pa je natrijum:



Ovo se može i skraćeno napisati kao



$1s^2 2s^2 2p^6$ elektroni su zamenjeni sa [Ne] jer predstavljaju elektronsku konfiguraciju neona – plemenitog gasa. Ovi elektroni sa hemijske tačke gledišta nisu posebno zanimljivi i ne utiču značajno na hemijske osobine natrijuma. Ovi elektroni se zovu unutrašnji elektroni

$3s^1$ elektron je mnogo zanimljiviji za hemičare i on se zove valentni elektron.

Trenutno važeći IUPAC-ov periodni sistem elemenata

1																	18
1 H 1.0079																	2 He 4.0026
3 Li 6.941	4 Be 9.0122											13 B 10.811	14 C 12.011	15 N 14.007	16 O 15.999	17 F 18.998	18 Ne 20.180
11 Na 22.990	12 Mg 24.305	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.723	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.798
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.96	43 Tc -	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.21	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po -	85 At -	86 Rn -
87 Fr -	88 Ra -	89-103	104 Rf -	105 Db -	106 Sg -	107 Bh -	108 Hs -	109 Mt -	110 Ds -	111 Rg -							
			57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm -	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.05	71 Lu 174.97
			89 Ac -	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np -	94 Pu -	95 Am -	96 Cm -	97 Bk -	98 Cf -	99 Es -	100 Fm -	101 Md -	102 No -	103 Lr -

Elektronska konfiguracija i periodni sistem

Svi pripadnici iste grupe imaju istu elektronsku konfiguraciju valentne ljuske, samo se glavni kvantni broj menja.

Zato elementi koji pripadaju istoj grupi imaju veoma slične hemijske osobine

Group 2

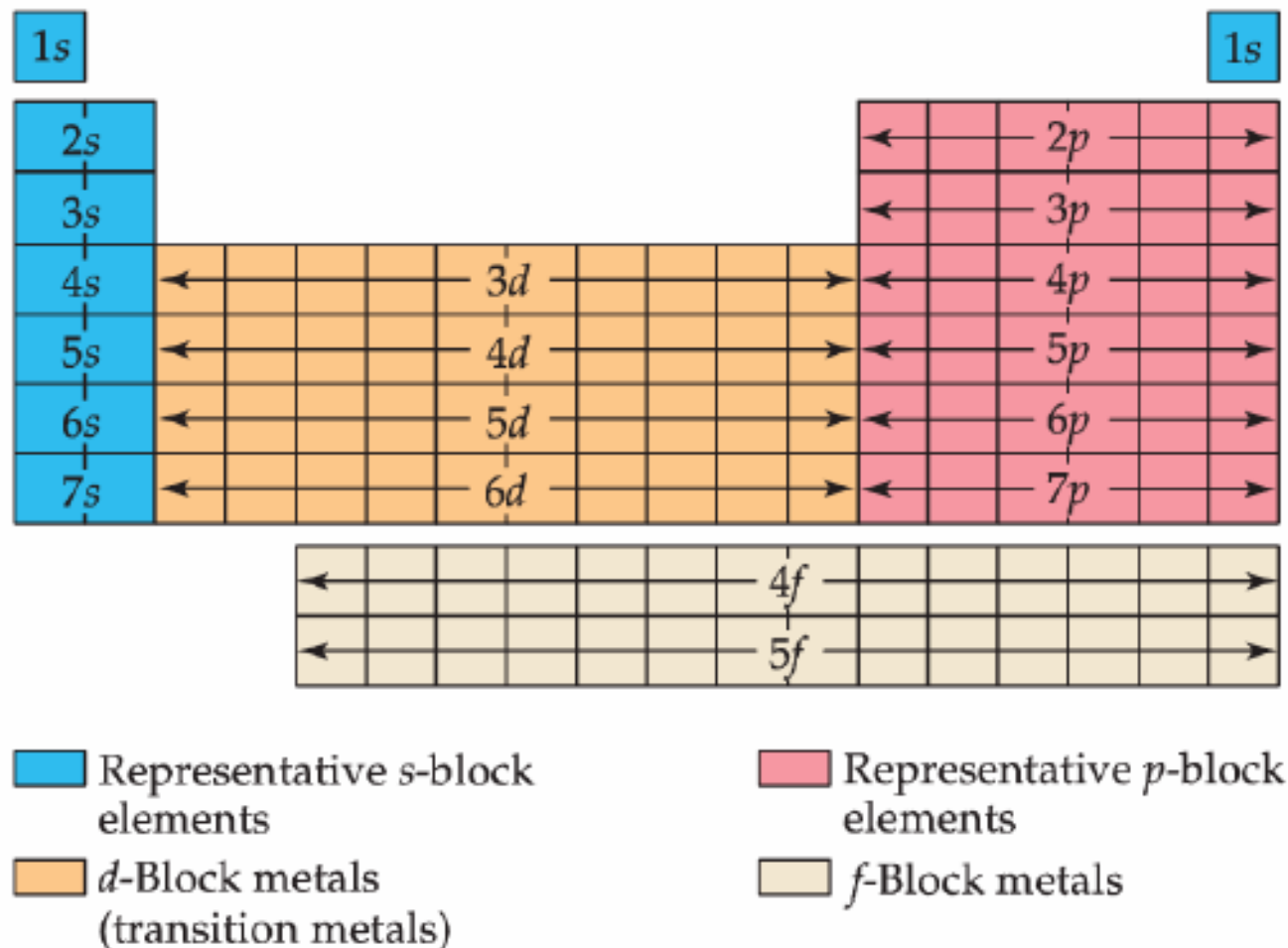
Be	[He] $2s^2$
Mg	[Ne] $3s^2$
Ca	[Ar] $4s^2$
Sr	[Kr] $5s^2$
Ba	[Xe] $6s^2$
Ra	[Rn] $7s^2$

Group 13

B	[He] $2s^2 2p^1$
Al	[Ne] $3s^2 3p^1$
Ga	[Ar] $3d^{10} 4s^2 4p^1$
In	[Kr] $4d^{10} 5s^2 5p^1$
Tl	[Xe] $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^1$

Elektronska konfiguracija i periodni sistem

U periodnom sistemu postoji podela na s, p, d i f elemente u zavisnosti od toga u kojem se podnivou nalaze valentni elektroni



Efektivno naelektrisanje jezgra

Koliku privlačnu silu jezgra oseća svaki elektron?

Za atom vodonika odgovor je prilično jasan – elektron oseća privlačnu silu $1+$ jezgra koja zavisi samo od elektron-jezgro rastojanja

Ali šta je sa višeelektronskim atomima? Kod njih osim jezgro-elektron privlačne sile postoje i elektron-elektron odbojne sile. Da bi odredili koliko je jako svaki elektron vezan za jezgro i ove odbojne sile se moraju uzeti u obzir.

Privlačenje između jezgra i valentnih elektrona raste po periodi.

Valentni elektron litijuma "oseća" slabije privlačenje jezgra od valentnih elektrona berilijuma, a ovi opet slabije od valentnih elektrona bora...

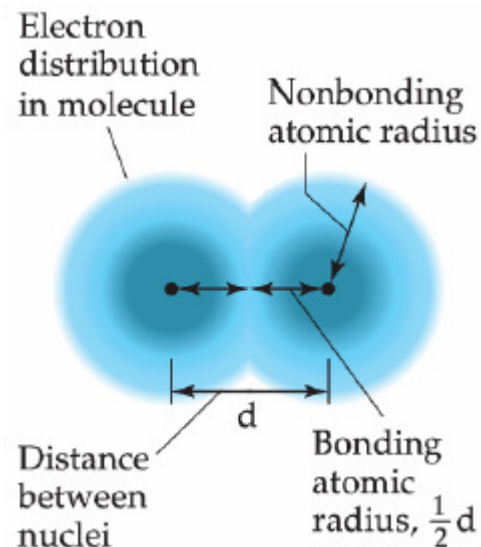
Veličine atoma

Veličine atoma se najlakše izražavaju atomskim poluprečnicima

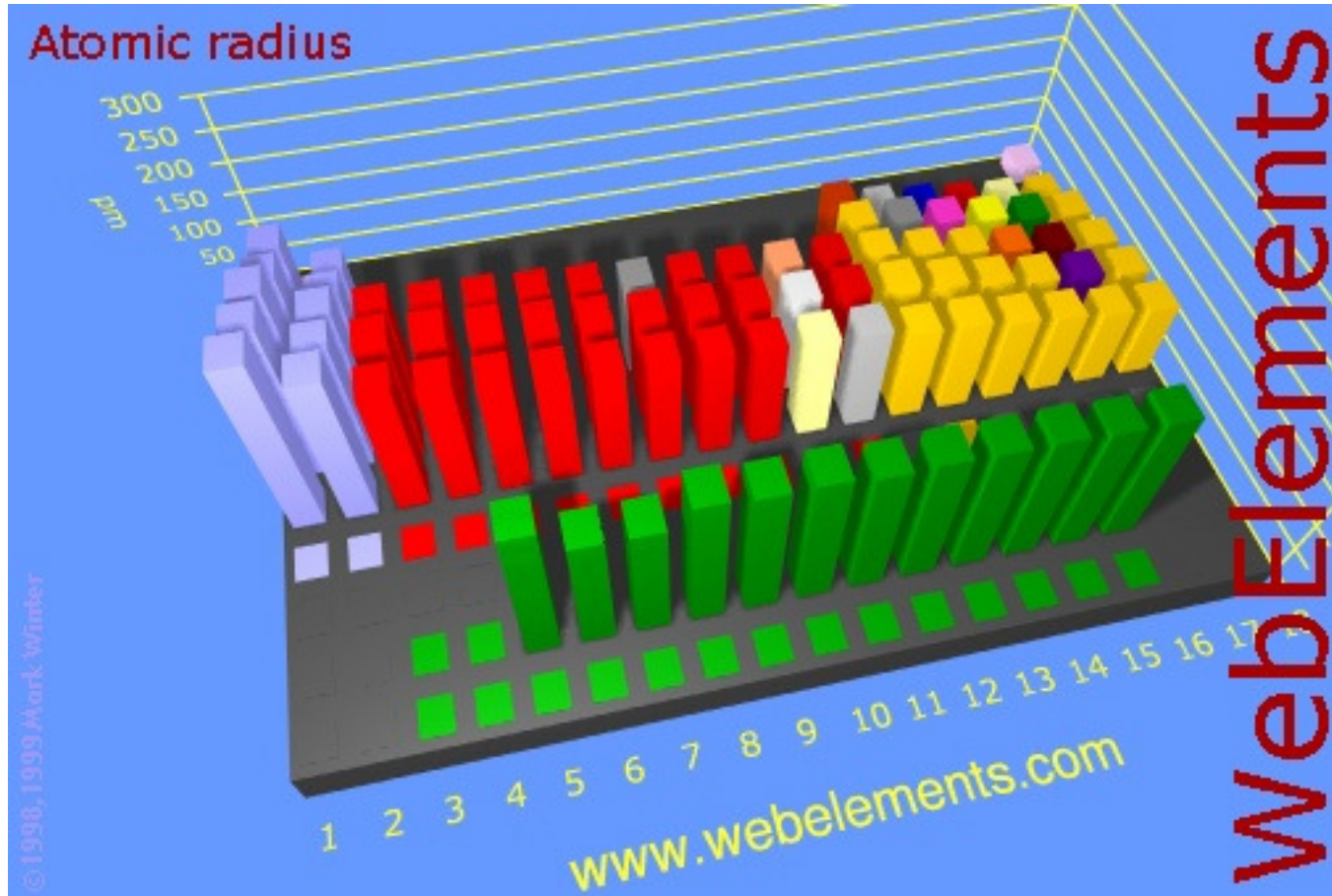
Postoje dve vrste atomskih poluprečnika:

Nevezivni (van der Waalsovi) – rastojanje do koga atomi mogu da priđu jedan drugome dok elektronski oblaci ne počnu da im se odbijaju

Veživni (kovalentni) – polovina rastojanja između jezgara kada su atomi kovalentno vezani



Veličine atoma

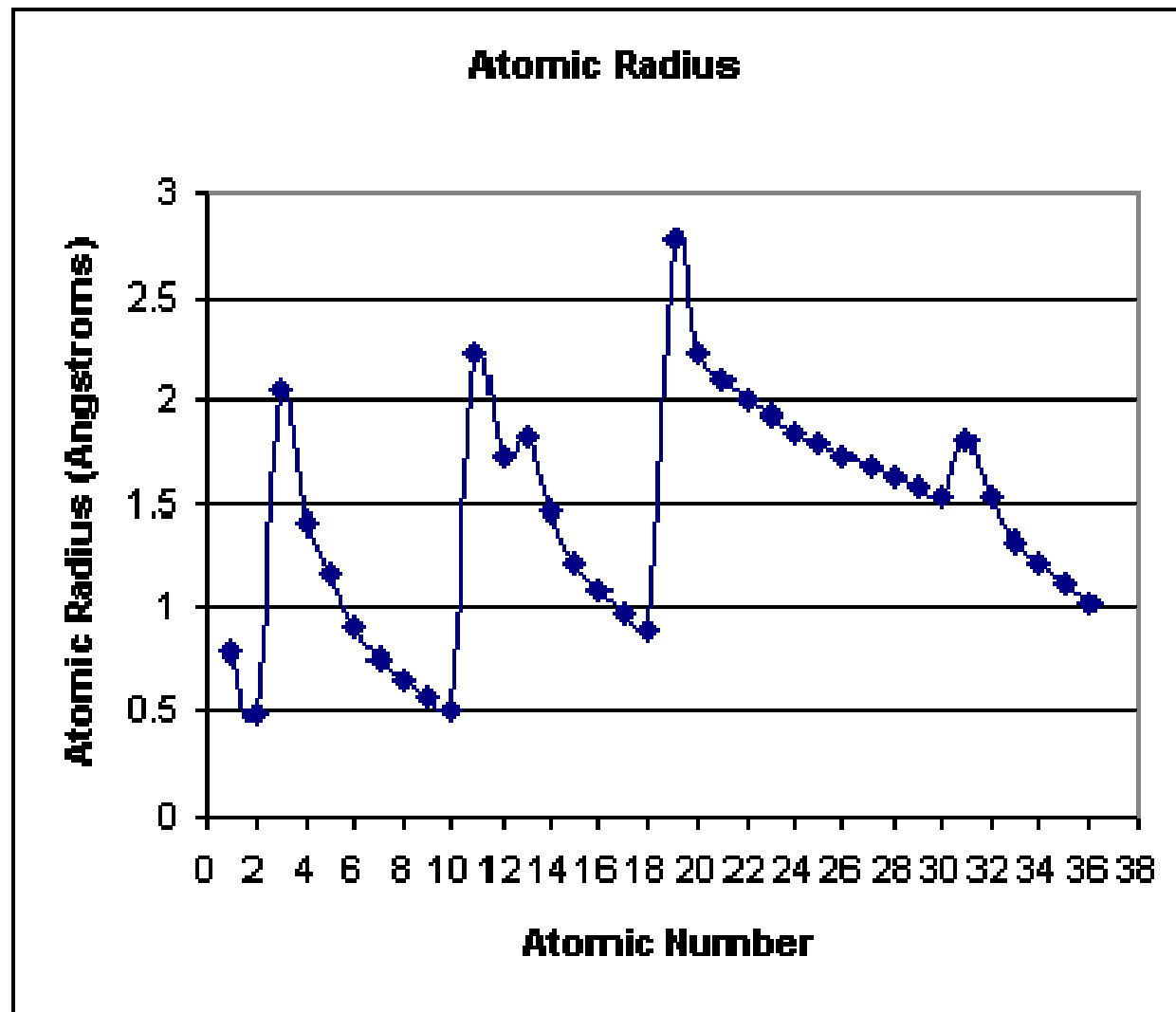


Veličine atoma

Atomic Radii (pm)

1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A
Li 152	Be 112	B 85	C 77	N 75	O 73	F 72	Ne 71
Na 186	Mg 160	Al 143	Si 118	P 110	S 103	Cl 100	Ar 98
K 227	Ca 197	Ga 135	Ge 122	As 120	Se 119	Br 114	Kr 112
Rb 248	Sr 215	In 167	Sn 140	Sb 140	Te 142	I 133	Xe 131
Cs 265	Ba 222	Tl 170	Pb 146	Bi 150	Po 168	At (140)	Rn (141)

Veličine atoma



Periodični trendovi atomskih poluprečnika

1. Atomski poluprečnici opadaju sa leva nadesno u istoj periodi. Ovo se najlakše objašnjava preko povećanja efektivnog neelektrisanja jezgra na valentne elektrone
2. Atomski poluprečnici rastu odozgo nadole u grupi. Ovo se objašava povećanjem glavnog kvantnog broja valentnih elektrona. Što je veći glavni kvantni broj elektron provodi više vremena na većem rastojanju od jezgra a time je i atomski poluprečnik veći.

Jonski poluprečnici

Svi jonski poluprečnici su eksperimentalno određeni na osnovu rastojanja između jona u kristalnim rešetkama jonskih jedinjenja.


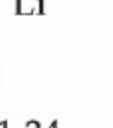





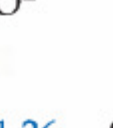
































Katjoni su uvek manji od atoma od kojih su nastali jer se izbacuje elektron iz najudaljenije orbitale a i smanjuje se elektron-elektron odbijanje tj. povećava se efektivno naelektrisanje jezgra

Što je katjon više naelektrisan jonski poluprečnik će biti manji

Anjoni su uvek veći od atoma od kojih su nastali jer dodatak elektrona neutralnom atomu povećava elektron-elektron odbijanje i tera elektrone da se rasprostru na veću zapreminu

Što je anjon više naelektrisan jonski poluprečnik mu je veći

Jonski poluprečnici

Group 1A		Group 2A		Group 3A		Group 6A		Group 7A	
Li ⁺	Li	Be ²⁺	Be	B ³⁺	B	O	O ²⁻	F	F ⁻
									
0.90	1.34	0.59	0.90	0.41	0.82	0.73	1.26	0.71	1.19
Na ⁺	Na	Mg ²⁺	Mg	Al ³⁺	Al	S	S ²⁻	Cl	Cl ⁻
									
1.16	1.54	0.86	1.30	0.68	1.18	1.02	1.70	0.99	1.67
K ⁺	K	Ca ²⁺	Ca	Ga ³⁺	Ga	Se	Se ²⁻	Br	Br ⁻
									
1.52	1.96	1.14	1.74	0.76	1.26	1.16	1.84	1.14	1.82
Rb ⁺	Rb	Sr ²⁺	Sr	In ³⁺	In	Te	Te ²⁻	I	I ⁻
									
1.66	2.11	1.32	1.92	0.94	1.44	1.35	2.07	1.33	2.06

Jonizaciona energija

"Jonizaciona energija nekog atoma ili jona je minimalna energija koja je potrebna za uklanjanje elektrona iz osnovnog stanja tog atoma ili jona u gasovitom stanju"

Dva energetska suprotna procesa:

1. Uklanjanjem elektrona se on odvaja od pozitivnog jezgra i energija sistema raste
2. U nastalom katjonu smanjuju se elektron-elektron odbojne interakcije i energija sistema opada

Jonizaciona energija je uvek pozitivna jer se uvek više energije izgubi zbog uklanjanja elektrona iz orbitale nego što se oslobodi zbog smanjenja elektron-elektron odbijanja

Jonizaciona energija

Prva jonizaciona energija I_1 je energija potrebna za uklanjanje prvog elektrona iz neutralnog atoma:



Druga jonizaciona energija I_2 je energija potrebna za uklanjanje drugog elektrona iz jedanput naelektisanog katjona



Jonizaciona energija

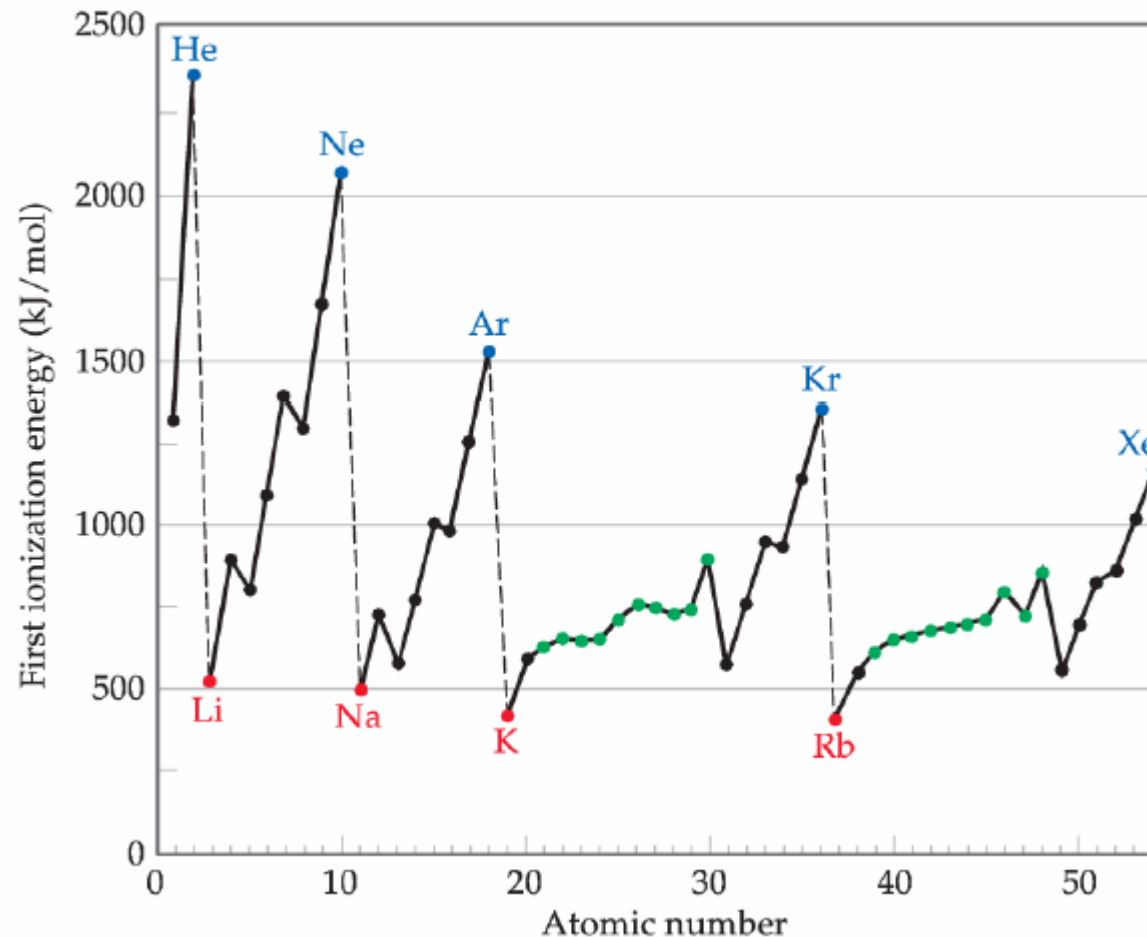
Druga jonizaciona energija je uvek veća od prve jer se uklanja elektron iz već pozitivno naelektrisanog jona

Veliki skok u vrednosima jonizacione energije nastaje kada počnu da se jonizuju unutrašnji elektroni

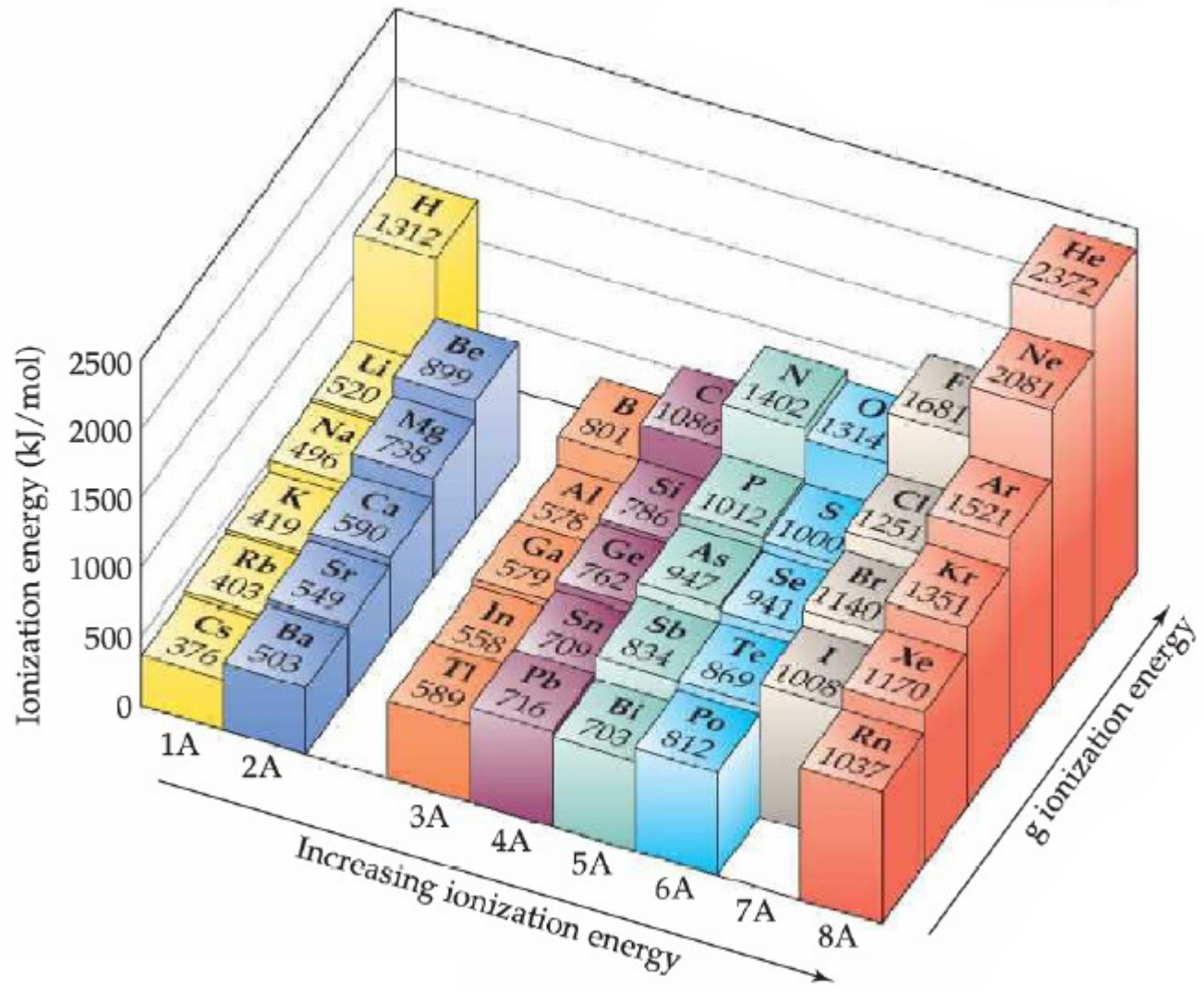
Element	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7
Na	495	4562					
Mg	738	1451	7733				
Al	578	1817	2745	11,577			
Si	786	1577	3232	4356	16,091		
P	1012	1907	2914	4964	6274	21,267	
S	1000	2252	3357	4556	7004	8496	27,107
Cl	1251	2298	3822	5159	6542	9362	11,018
Ar	1521	2666	3931	5771	7238	8781	11,995

Jonizaciona energija u periodnom sistemu

Prva jonizaciona energija raste po periodi i opada po grupi. To je potpuno u skladu sa podacima o atomskim radijusima – što je atom manji elektron je jače vezan i teže se jonizuje



Jonizaciona energija u periodnom sistemu



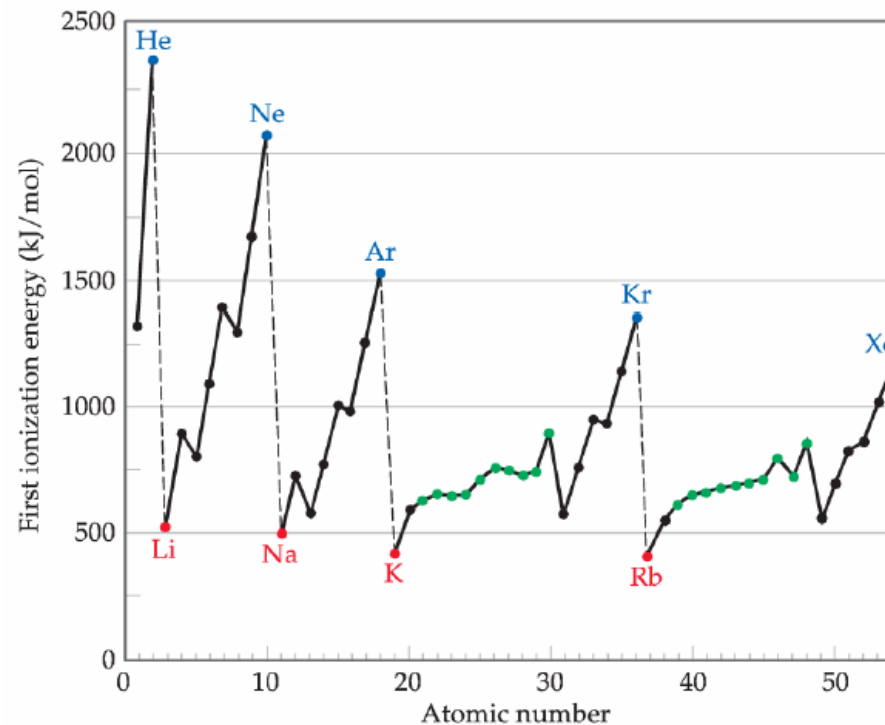
Jonizaciona energija u periodnom sistemu

Par odstupanja

Be ima veću I_1 od B

N ima veću I_1 od O

OBJASNITE pomoću elektronskih konfiguracija za date atome!!!



Afinitet prema elektronu

Suprotno od energije jonizacije afinitet prema elektronu je energija koja se oslobodi ili veže kada se jedan elektron doda neutralnom atomu u gasovitom stanju.

Ovde opet imamo dva energetska suprotna procesa:

1. Energija sistema se snižava jer se dodati elektron nalazi blizu pozitivnog jezgra atoma
2. Energija sistema raste jer se dodatkom novog elektrona povećava elektron-elektron odbijanje

Ukoliko je 1 veće od 2 afinitet prema elektronu će imati negativnu vrednost (češći slučaj) a ukoliko je 2 veće od 1 onda će imati pozitivnu vrednost (ređi slučaj)



Afinitet prema elektronu

Afinitet prema elektronu raste (negativniji je) u periodi (sa leva na desno) a opada u grupi (odozgo nadole)

Svi plemeniti gasovi imaju afinitet prema elektronu veći od nula. Zašto?

Be, Mg imaju isto veći od nula a svi ostali elementi iz druge grupe (Ca i Sr) veoma male negativne vrednosti. Zašto?

Azot takođe ima afinitet prema elektronu veći od nule.

H -73							He > 0
Li -60	Be > 0	B -27	C -122	N > 0	O -141	F -328	Ne > 0
Na -53	Mg > 0	Al -43	Si -134	P -72	S -200	Cl -349	Ar > 0
K -48	Ca -2	Ga -30	Ge -119	As -78	Se -195	Br -325	Kr > 0
Rb -47	Sr -5	In -30	Sn -107	Sb -103	Te -190	I -295	Xe > 0
1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A

Afinitet prema elektronu

Uputstva za rešavanje problema sa prethodnog slajda:

Dobro razmislite u koju orbitalu se dodaje novi elektron (ako je orbitala prazna lakše ćemo dodati elektron nega ako je polupopunjena – zašto).

Pokušajte da predvidite (izračunajte) efektivno naelektrisanje jezgra koje će osećati novododati elektron.

Da li se razlikuje efektivno naelektrisanje jezgra koje osećaju ostali elektroni u atomu i u anjonu

Šta se dešava sa elektron-elektron odbijanjima prilikom dodatka novog elektrona?

Po čemu su karakteristični svi elementi kod kojih je afinitet prema elektronu veći od nule?

Odgovore obavezno dostaviti na terminu obnavljanja

Podela periodnog sistema – metali, nemetali i metaloidi

Svi elementi periodnog sistema se mogu podeliti u tri grupe – metali, nemetali i metaloidi (plemeniti gasovi ne pripadaju nijednoj od ovih grupa)

Metali se nalaze levo u periodnom sistemu i oko $\frac{3}{4}$ elemenata su metali. Nemetali su sa desne strane a metaloidi između njih

Periodic Table

1A 1 H 1.008	2A 4 Be 9.012											3A 5 B 10.81	4A 6 C 12.01	5A 7 N 14.01	6A 8 O 16.00	7A 9 F 19.00	8A 2 He 4.003		
11 Na 23.00	12 Mg 24.31	3B	4B	5B	6B	7B	8B					1B	2B	13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95
19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.90	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.70	29 Cu 63.55	30 Zn 65.38	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	36 Kr 83.80		
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.1	45 Rh 102.9	46 Pd 106.4	47 Ag 107.9	48 Cd 112.4	49 In 114.8	50 Sn 118.7	51 Sb 121.8	52 Te 127.6	53 I 126.9	54 Xe 131.3		
55 Cs 132.9	56 Ba 137.3	57 La 138.9	72 Hf 178.5	73 Ta 180.9	74 W 183.9	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.1	79 Au 197.0	80 Hg 200.6	81 Tl 204.4	82 Pb 207.2	83 Bi 209.0	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)		
87 Fr (223)	88 Ra 226.0	89 Ac 227.0	104 Rf (261)	105 Ha (262)	106 Unh (263)	107 Uns (262)	109 Une (267)												

Lanthanides	58 Ce 140.1	59 Pr 140.9	60 Nd 144.2	61 Pm (145)	62 Sm 150.4	63 Eu 152.0	64 Gd 157.3	65 Tb 158.9	66 Dy 162.5	67 Ho 164.9	68 Er 167.3	69 Tm 168.9	70 Yb 173.0	71 Lu 175.0
Actinides	90 Th 232.0	91 Pa 231.0	92 U 238.0	93 Np 237.0	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)

Metali

Osobine metala:

Imaju specifičan metalni sjaj, uglavnom srebrnaste boje

Kovnost – mogu da se kuju tj. izvlače u listove

Elastični su – mogu da se izvlače u žice

Dobri provodnici toplote i elektriciteta

Uglavnom su čvrstog agregatnog stanja na sobnoj temperaturi
– osim žive koja mrzne na $-39\text{ }^{\circ}\text{C}$

Imaju veoma male jonizacione energije i relativno lako grade pozitivne jone

U hemijskim reakcijama se oksiduju (gube elektrone)

Metali

Osobine metala:

Sa nemetalima uglavnom daju jonska jedinjenja

Jedinjenja metala sa metalima se zovu legure

Većina oksida metala je bazna, reaguju sa vodom dajući baze,
reaguju sa kiselinama dajući soli

Nemetali

Osobine nemetala:

Nemaju neku uniformnu pojavu, sedam njih postoje kao dvoatomni molekuli od čega pet kao gasovi (H_2 , N_2 , O_2 , F_2 , Cl_2), jedan kao tečnost (Br_2) a jedan kao čvrsta supstanca (I_2). Svi ostali nemetali postoje kao čvrste supstance koje mogu biti veoma tvrde (dijamant) ili veoma meke (sumpor)

Tačke topljenja su im generalno niže nego metalima mada ima izuzetaka (dijamant se topi na $3570^\circ C$)

Loše provode toplotu i struju

Imaju znatno veću energiju jonizacije od metala i veoma retko grade pozitivne jone

Imaju negativne afinitete prema elektronu i lako grade anjone da bi postigli elektronsku konfiguraciju plemenitog gasa

Nemetali

Osobine nemetala:

Sa metalima daju uglavnom jonska jedinjenja

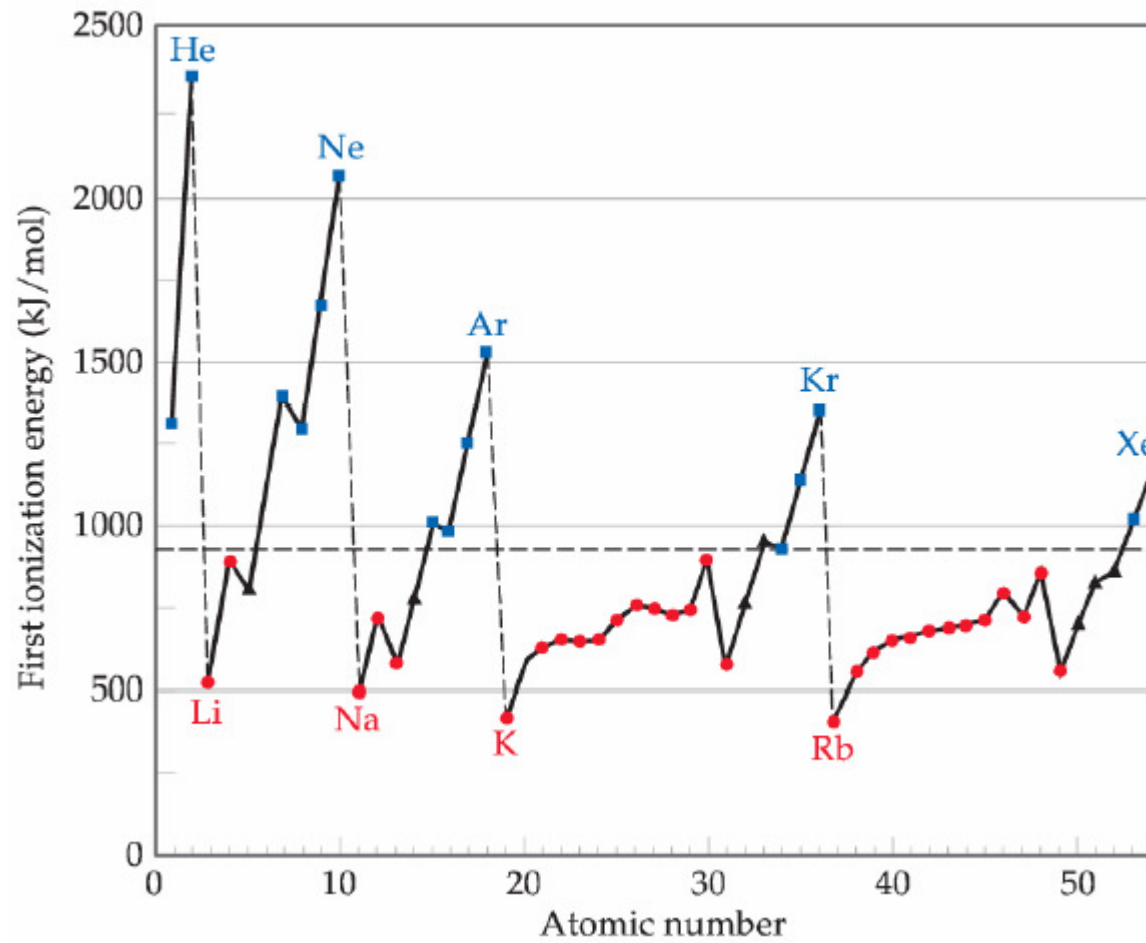
Sa drugim nemetalima daju isključivo kovalentna jedinjenja

Njihovi oksidi, halidi, hidridi su ili gasovi ili tečnosti ili čvrsta jedinjenja niske tačke topljenja

Oksidi metala su kiseli, sa vodom daju kiseline, sa bazama daju soli

Nemetali

Razlika u jonizacionim energijama metala i nemetala



Metaloidi

Metaloidi imaju osobine koje se nalaze između osobina metala i nemetala. Na primer elementarni silicijum izgleda kao metal ali ne može da se kuje i loše provodi toplotu i elektricitet.

Neki nemetali (pogotovo silicijum) su poluprovodnici i koriste se za izradu čipova

