

Az atom

Atomelméletek (történeti áttekintés, elég csak a lényege)

A tudományos felfedezéseknek köszönhetően tudjuk, hogy a különféle anyagok apró részecskékből állnak. Ezeket a parányi részecskéket szaknyelven atomoknak nevezzük. Az idők során több elmélet is született az anyag szerkezetéről. Vajon hogyan jutottak el a tudósok a folytonos anyag elgondolásától egészen a mai bonyolult atommodellekig? Az atomok vizsgálatával és azok szerkezetének megfejtésével már az ókorban elkezdtek foglalkozni. Az első atomelmélet megalkotása a görög filozófus, **Démokritosz** (i.e. kb. 460 – 370) nevéhez fűződik. Elmélete szerint az atomok az anyag legparányibb, tovább már nem osztható részei (részecskéi), melyek végtelen üres térben mozognak, és méretük, valamint alakjuk határozza meg, hogy összeállva milyen anyagot alkotnak.

Arisztotelész (i. e. 384 – 322) ezzel az elmélettel nem értett egyet. Úgy vélte, hogy az atomok nem léteznek; ő az anyagok folytonosságát vallotta, továbbá megalkotta a **négy őselem elméletét**. Az anyagok folytonosságát évszázadokon át nem kérdőjelezték meg az emberek, melynek számtalan társadalmi (és vallási) oka is volt.

A XVIII.sz. végén, XIX.sz. elején számtalan kísérletet végeztek (többek között gázokkal; Avogardo, Gay-Lussac, Boyle, Proust...), melyekből az angol természettudós, **John Dalton** (1766 – 1844) arra a megfontolásra jutott, hogy az arisztotelészi őselem elmélet nem pontos, és számtalan eredmény nem magyarázható vele. A modern kémia szempontjából igen lényeges megfontolásaival visszatért az atomelmülethez, vagyis a démokritoszi tanokat újragondolva, megkezdte elfogadtatni a kor tudósaival, hogy az atomok igenis léteznek. Az atomokat kicsi, –szintén- oszthatatlan gömböknek képzelte el. Később atomtömeg-táblázatot is alkotott, és kijelentette, hogy a különböző elemeket eltérő (méretben, formában...) atomok alkotják. John Dalton atomelmélete a XIX. század végére megbukott, mivel a kutatási eredmények azt bizonyították, hogy az atom nem oszthatatlan (ez a tény azonban a tudomány előmenetelének érdekében tett erőfeszítéseit, s munkássága összességét egyáltalán nem minősíti).

Joseph John Thomson (1856 – 1940) katódsugarak (áramforrásban a katódnak nevezett elektródból kilépő sugárzást nevezték katódsugárzásnak) tanulmányozása során kimutatta, hogy az atomok kisméretű, negatív töltésű részecskékből állnak. Végző soron **1897-ben felfedezte az**

elektront. Nyilvánvaló volt, hogy az atom elektromosan semleges kell, hogy legyen, hiszen az anyagoknak (alapállapotban) nincs töltése. Ezért olyan atommodellt javasolt, melyben a negatív töltésű elektronok egy – a negatív töltést éppen kompenzáló – pozitív töltésű térrészben, „masszában” helyezkednek el. Ezért is szokták „mazsolás pudinghoz” hasonlítani ezt a modellt. Kiemelkedő munkásságáért Thomson 1906-ban Nobel-díjat kapott.

Thomson egyik tanítványa, **Ernest Rutherford** (1871 – 1937) pozitív töltésű alfa-részecskékkel (hélium atommagok) végzett vizsgálatok során **fedezte fel az atommagot, majd a protont** 1918-ban. Egyik kísérlete során egy radioaktív sugárforrásból származó alfa-részecskékkel (alfa-sugárzással) bombázott egy igen vékony aranyfóliát (ez a híres szórás kísérlet). Azt vette észre, hogy az alfa-részecskék legnagyobb része zavartalanul átjutott az aranyfólián, de egy kis részük visszapattant róla, vagy eltérült. Thomson atomelmélete szerint a negatív és pozitív részecskék (később ezeket nevezi protonnak) egyenlő számban fordulnak elő az atomban. Azonban ez a tény nem magyarázza, hogy miért nem képes az –így semleges töltésű- atomon minden alfa-részecske zavartalanul áthaladni. Rutherford a jelenséget azzal magyarázta, hogy az atom belsejében egy pozitív töltésű ún. **atommag** kell, hogy elhelyezkedjen (1910), amely csaknem az atom teljes tömegét teszi ki, s az atommagot maguk a protonok alkotják. Az atomot alkotó pozitív töltések, a protonok tehát az atommagban koncentrálódnak (tehát amikor a –szintén- pozitív töltésű alfa-részecskék közel haladnak el az atommag közelében, akkor a taszító kölcsönhatás miatt eltérülnek, ha nekiütköznek az atommagnak, akkor pedig visszapattannak). Az atommag körüli üres térben pedig elektronok keringenek, ezért ezt elektronfelhőnek, elektronburoknak nevezte. Sir Ernest Rutherfordot 1908-ban –fizikus létére- kémiai Nobel-díjjal tüntették ki.

A tudomány fejlődése azonban megkérdőjelezhetővé tette Rutherford modelljét is. **Niels Bohr** (1885 – 1962) a hidrogénatom színeképe (spektrumának) tanulmányozása során új állításokkal egészítette ki Rutherford elméletét. Bohr úgy vélte, hogy az elektron nem lehet akárhol az atomban, illetve az elektronfelhőben, hanem **az atommagtól meghatározott távolságban, körpályákon kering.** Állítása szerint az elektron csakis meghatározott „adagokban”, ún. **energiakvantumok** formájában képes felvenni az energiát, mindig annyit, amennyi éppen ahhoz szükséges, hogy egy-egy magasabb energiaszintű (vagyis a magtól távolabb elhelyezkedő) pályára jusson.

Bohr atommodelljét **Arnold Sommerfeld** (1868 – 1951) gondolta tovább, illetve pontosította azzal, hogy a pályák, amelyeken az elektronok mozognak, nem csak kör, hanem ellipszis alakúak is lehetnek, melyek gyújtópontjában az atommag helyezkedik el. A későbbiekben rájöttek, hogy ezek a pályák sem magyarázzák pontosan az összes energiaátmenetet, ami egy atomban megtalálható.

A ma is használt atommodell megalkotása **Werner Heisenberg** és **Erwin Schrödinger** nevéhez fűződik. Ez az úgynevezett **kvantummechanikai modell**: kimondja, hogy az elektron helye az atomban nem adható meg pontosan, csak az, hogy mekkora valószínűséggel fordul elő egy adott térrészben. A kvantummechanikai atommodell egy tisztán matematikai formalizmus, mely posztulátumokra (matematikában: axióma) épülve igazán pontos képet a mindenséget alkotó mikrovilágról.

Az atomban, azokat a helyeket, ahol az elektron 90%-os valószínűséggel tartózkodik, **atompályának** nevezzük. Az előbbi definíció máshogy is megfogalmazható: az atommag körül azt a térrészt, ahol az elektron tartózkodási valószínűsége maximális (hozzávetőlegesen 90%-os), atompályának nevezzük.

A teljesen azonos energiatartalmú atompályák ún. **alhéjakat**; a közel azonos energiatartalmú alhéjak pedig ún. **elektronhéjakat** alkotnak.

Az elektronburok legalapvetőbb „építőköve” tehát az elektronok tartózkodási valószínűségével megadható atompályák, melyek energiájuk alapján különböző alhéjakba ill. elektronhéjakba csoportosíthatók.

Az atom felépítése

Az atom az a legkisebb részecske, amely kémiai módszerekkel tovább már nem bontható, de még őrzi az elemek tulajdonságait.

Az **atomok két egységre** bonthatók: **atommagra** és **elektronfelhőre**. Az atommagokat felépítő **elemi részecskék a protonok és neutronok (p^+ , n^0)**, az elektronfelhőt alkotók pedig az **elektronok(e^-)**. A **protonok és neutronok**, közös néven nukleonok **adják az atom tömegének**

meghatározó részét [a nukleonok tömegéhez képest az **elektronok tömege elhanyagolhatóan kicsi**, ha pl. a proton tömegét egységnyinek (1) vesszük, akkor az elektron tömege hozzávetőlegesen: $\frac{1}{1840}$. **A protonok és a neutronok tömege szinte megegyezik** (a valóságban a neutron egész picit nehezebb, de – számunkra – elhanyagolható a különbség). Az első táblázatban látható, hogy még a nukleonok valódi tömege is elképzelhetetlenül kis érték. Egy-egy atom valódi tömege tehát szintén nagyon kicsi, bonyolult volna számolni vele. A protonok és neutronok tömegét praktikusán egységnyinek (1) vesszük. A **tömegszám (A) az atomban található protonok és neutronok relatív tömegeinek** (tehát gyakorlatilag darabszámainak) **összege**.

A proton töltése **pozitív**, az elektroné **negatív**, a neutron pedig **semleges**. A proton és elektron töltésének abszolút értéke egyenlő, de előjele ellentétes (az ún. elemi töltés (e) az elektron valódi töltését jelenti). **Mivel az atomban a protonok és elektronok a száma azonos, maga az atom semleges töltésű.**

név	jel	helye az atomban	valódi tömege	relatív (viszonyított) tömege	valódi töltése	relatív (viszonyított) töltése
PROTON	p^+	atommag	$1,672 \cdot 10^{-27}$ kg	1	$1,602 \cdot 10^{-19}$ C	+1
NEUTRON	n^0	atommag	$1,674 \cdot 10^{-27}$ kg	1	-	0
ELEKTRON	e^-	elektronfelhő	$9,109 \cdot 10^{-31}$ kg	$\frac{1}{1840}$	$-1,602 \cdot 10^{-19}$ C	-1

1. táblázat

Egy atomot úgy lehet elképzelni, mint egy gömböt, amelynek a közepén egy nagyon kicsi, nehéz golyó található. A gömb sugara körülbelül százezerszerese a kicsi golyóénak, viszont tömege szinte ugyanakkora. A gömb **az atom**, melynek **átmérője hozzávetőlegesen 10^{-10} m**, a golyó pedig **az atommag**, melynek **átmérője öt nagyságrenddel kisebb, körülbelül 10^{-15} m**.

Mi tartja össze az atomot?

Az atomban vonzó és taszító kölcsönhatás egyaránt megtalálható. **A vonzó kölcsönhatások** közé tartozik az **ellentétes elektromos töltéssel rendelkező protonok** (ill. az atommag) és **elektronok között lévő elektrosztatikus vonzás**, illetve a **nagyon erős magerők** (nukleáris kölcsönhatás proton-proton, neutron-proton, neutron-neutron között, melyek azonban csak nagyon-nagyon kis távolságban hatnak). **Taszítás az egyforma elektromos töltéssel rendelkező részecskék** (proton-proton, elektron-elektron) **között** lép fel.

Az atommag

A korábban említettek alapján már tudjuk, hogy az **atommagot protonok és neutronok alkotják**, és **tömege szinte az egész atom tömegével egyezik meg**. Tehát az atommag az atomon belül egy apró, nehéz, **pozitív töltésű** rész. Egy vegyész vagy kémiával foglalkozó ember számára az atommagból és így az atomról nyerhető egyik legfontosabb információ az az, hogy hány protont tartalmaz, ugyanis ez szabja meg, hogy melyik elemről van szó. **A protonszám tehát meghatározza egy atom kémiai minőségét**. A protonszám – mely egy atom esetében az elektronszámmal is megegyezik – **megadja a rendszámot (Z)**, ami az atomok/elemek periódusos rendszerbeli sorszáma. **A neutronszám ($N_{neutron}$) és a rendszám (Z) összege a tömegszámot (A) adja.**

$$N(e^-) = N(p^+), \text{ az atomban.}$$

$$A = Z + N_{neutron}$$

Lévén az atommagban lévő protonok száma határozza meg az atomok kémiai minőségét (tehát, hogy milyen atomról is beszélünk) a neutronszám megváltozása nem jelenti azt, hogy másik elem atomjával lenne dolgunk, de a kapott atom mégsem lehet az előzővel teljesen megegyező. Gondoljunk bele, ha pl. egy hidrogénatom atommagjában egyetlen proton van és nincs benne neutron (ezt az atomot nevezzük hidrogénatomnak, illetve *prócium*nak), akkor tömegszáma 1! Azonban, ha az egyetlen proton mellé behelyezünk egy neutront, akkor egy kétszer akkora tömegű részecskét kapunk (melynek neve deutérium), ami nem is lehet teljes egészében eltérő, de azonos sem az előzővel.

Azokat az atomokat, melyek protonszáma megegyezik, de neutronszámuk, és így tömegszámuk eltér, izotópoknak nevezzük.

Az izotópok jelölése: A_ZX

Az elnevezés görög eredetű, s arra utal, hogy az elemek egyes izotópjai a periódusos rendszer ugyan azon helyén találhatóak.

Az **egyes elemek izotópjainak kémiai tulajdonságai gyakorlatilag megegyeznek** (ez arra vezethető vissza, hogy adott elem különböző izotópjainak elektronszerkezete azonos), **azonban a kisebb tömegszámú atomok esetében a fizikai tulajdonságok között lényegesebb** eltérések is lehetnek. Valamint fontos, hogy **bár az atommag stabilitásához alapvetően szükségesek a neutronok, ha túlságosan sok kerül meghatározott számú proton mellé, akkor az atommag ismét instabillá válik.** A – relatív – sok neutronot tartalmazó atomból álló elemek jellemzően **radioaktívak**, tehát atommagjuk különböző sugárzások kibocsátása közben elbomlik, és más-más atomok jönnek létre.

Például a **hidrogén** természetben fellelhető **izotópjai: hidrogén** (prócium, ${}^1\text{H}$), **deutérium** (D, vagy ${}^2\text{H}$) és **trícium** (T, vagy ${}^3\text{H}$) tartozik. A hidrogén és az egy neutronot is tartalmazó deutérium tulajdonságai hasonlóak. Ha azonban a vízmolekula hidrogénatomját deutérium helyettesíti (azaz úgynevezett **nehézvíz**, D_2O jön létre), annak élettani hatása, fizikai tulajdonságai már mások, mint a vízé: pl. igen mérgező és nagyobb molekulatömege miatt forráspontja is magasabb. A nehézvíz alkalmazási területei is eltérőek: leginkább atomreaktorokban moderátor-ként (neutronfogó közegként) használják. A trícium nem stabil, radioaktív izotópja a hidrogénnek.

Az **izotópokat** tehát a **különböző neutronszámból eredő eltérő tömegszám** különbözteti meg egymástól. A **tömegszám mindig egész szám**, de ez magától értetődő, hiszen fél vagy negyed proton, illetve neutron nem létezhet. **Az elemek rendszámának növekedésével a protonok és neutronok számának az aránya tart a nullához, vagyis minél nagyobb a rendszám, annál több neutron szükséges az atommag és így az atom stabilitásának – viszonylagos - megtartásához.** Az igen nagy rendszámú elemeknek azonban már minden egyes izotópja radioaktív (a bizmut a legnagyobb rendszámú olyan elem, aminek még van stabil izotópja). Példaként vegyük az oxigént és a bizmutot! Az oxigén leggyakoribb izotópja a 16-os tömegszámú oxigén izotóp (${}^{16}\text{O}$). Ebben 8 proton ($Z=8$) és 8

neutron ($N = A - Z = 8$) található, tehát a $\frac{Z}{N}$ értéke éppen 1. A bizmut a 83-as rendszámú elem a periódusos rendszerben. A természetben előforduló (egyébként egyetlen) stabil izotópja a 209 tömegszámú bizmut izotóp (^{209}Bi). Ebben 83 proton és 126 ($209 - 83$) neutron található, vagyis az $\frac{Z}{N} = 0,66$ ami a kisebb rendszámú oxigén értékéhez képest kisebb érték.

Elektronfelhő

Az atommag körül lévő **elektronfelhőben** találhatóak a negatív töltésű **elektronok**. Az **elektronok száma megegyezik a magban lévő protonok számával**, így az atomok semlegesek. Egy elektront nehéz elképzelni. Az a sajátos **kettős tulajdonság** jellemzi, hogy **egyszerre részecske és egyszerre hullám** is. Erre a kettős természetre számtalan kísérleti bizonyíték ismeretes.

Az atomok **elektronszerkezetét** számos tényező **befolyásolja**:

- **elektronok közötti taszító erő**
- **proton és elektron közötti vonzerő**
- **energiaminimumra való törekvés**
- **Pauli-elv**
- **Hund szabály**

A **modern atomelméletben az atomok elektronszerkezetét** az igen bonyolult matematikai alapokon nyugvó **kvantummechanika írja le**. A kvantummechanika szerint az **elektronok pontos helye nem meghatározható**, ellenben az igen, hogy egy adott térrészben egy adott elektron mekkora valószínűséggel található meg, ez az ún. **tartózkodási valószínűség**.

Az atomban, azt a helyet, ahol az elektron 90%-os valószínűséggel tartózkodik, atompályának nevezzük. Az előbbi definíció máshogy is megfogalmazható: az atommag körül azt a térrészt, ahol az elektron tartózkodási valószínűsége maximális (hózzávetőlegesen 90%-os), atompályának nevezzük.

Kvantumszámok

Az atompályák és az elektronok jellemzésében az ún. kvantumszámok (kvantum=meghatározott) segítenek. Egy atompályát akkor ismerünk, ha tudjuk az atommagtól való távolságát, alakját, és a mágneses térbeli irányultságát.

Négy kvantumszámmal ismerkedünk meg:

- főkvantumszám,
- mellékkvantumszám,
- mágneses kvantumszám,
- spinkvantumszám.

A **főkvantumszám** jellemzi az atompályák méretét, és **közvetlenül megadja az elektron átlagos távolságát az atommagtól**. Jele n , értéke $n=1, 2, 3...$ pozitív egész szám. A főkvantumszámot **betűkóddal** is szokás jelölni, ami rendre $n=K, L, M...$. Egy atomban az **azonos főkvantumszámmal rendelkező pályák** alkotnak egy **elektronhéjat**. Elsődlegesen ez szabja meg az adott héjon található **elektron(ok) energiáját**.

Minél közelebb van egy elektron a **maghoz**, vagyis minél kisebb főkvantumszámú atompályán helyezkedik el, **annál kedvezőbb** (alacsonyabb) **energiaállapoton van** (hiszen az atommagtól távolabb a pozitív töltésű mag vonzóereje kisebb mértékben hatna rá¹, s ezt a vonzóerőt még a beljebb lévő elektronok is árnyékolnák).

Lévén a K héjon lévő elektron(ok) energetikailag kedvezőbb helyen vannak, mint az L héjon levő(k), ezért pl. a K héjról nehezebben lehet eltávolítani elektront, mint az atommagtól távolabbi az L-héjról.

A mellékkvantumszám az atompályák térbeli alakját jellemzi. Jele l , értéke $l=0,1,2,3...,n-1$. Adott elektronhéjon belül, tehát az atommagtól azonos távolságra lévő atompályák közül, melyek **alakja azonos**, azaz a főkvantumszám mellett, a mellékkvantumszámuk is megegyezik, ún. alhéjakat alkotnak. Látszik, egy adott elektronhéjon (n) található alhéjak száma meghatározott!

Ha $n=2$, akkor $l=0$ és $l=1$ lehet; tehát az L-héjon két különböző alakú atompálya található, egy amit $l=0$ -val és egy amit $l=1$ -el jellemezünk.

¹ Oka a Coulomb-törvény: $F = \frac{Q_1 \cdot Q_2}{r^2}$, ahol r a Q_1 és Q_2 nagyságú töltések közötti távolság, F a közöttük fellépő vonzó vagy taszító erő.

A mellékkvantumszámot is szokás betűkóddal jelölni (2. táblázat):

<i>l</i> értéke	0	1	2	3
betűkód	s	p	d	f
pálya alakja	gömb	súlyzó, nyolcas	nagyon bonyolult	

2.táblázat

Az **s-pályák gömbszimmetrikusak**, a **p-pályák pedig tengelyszimmetrikusak** (súlyzó alakúak). A d-és f-pályák alakja igen összetett.

Az előbbieket alapján tehát beszélhetünk s-, p-, d-, f-alhéjakról, annak megfelelően, hogy milyen szimmetriájú (alakú) atompályákból állnak.

Az s-alhéjon csupán egy, a p-alhéjon három, a d-alhéjon öt, és az f-alhéjon pedig hét atompálya található.

Minden pályán maximum két elektron tartózkodhat (lásd később a magyarázatot!). Következésképpen pl. egy p-alhéjakon minden esetben maximálisan $2 \times 3 = 6$ db elektron tartózkodhat.

A **mágneses kvantumszám az atompálya térbeli irányultságát jellemzi**, vagyis azt, hogy az adott pályának milyen az iránya a mágneses térben². **jele *m***, értéke a **$m = [-l, 0, +l]$ közötti egész számok**. Például, ha $l=2$, akkor $m = -2, -1, 0, 1, 2$. (Az s-pályák mellékkvantumszáma: $l=0$, így mágneses kvantumszámuk értéke szintén 0, ami könnyen belátható hiszen a gömbszimmetrikus töltéeloszlásnak nem lehet kitüntetett iránya a mágneses térben: akárhogy is forgatunk egy gömböt, az mindig ugyanarra fog nézni.)

Egy adott szimmetriával rendelkező (vagyis adott mellékkvantumszámú) **atompályából, a mágneses kvantumszámok által meghatározott darabszámú különböző atompálya létezik**. Ez alapján érthetjük meg, hogy pl. a d-alhéjak miért éppen 5 db d-atompályából épülnek fel ($l=2$ esetén m lehetséges értékei: $-2, -1, 0, 1, 2$; vagyis 5 db más-más irányultságú, különböző atompálya).

² Az atompályákon töltéssel rendelkező elektronok mozognak. A mozgó töltés maga körül pedig mágneses teret kelt. Ez az a mágneses tér, mely a külső mágneses térrel kölcsönhatva az atompályákat meghatározott irányba kényszeríti.

A fentiek alapján belátható, hogy egy adott atomon belüli konkrét atompálya determinálásához, három kvantumszámának ismerete szükséges: a fő-, a mellék- és a mágneses kvantumszámoké.

Példa:

Az alábbi szimbólum a 3. elektronhéjon (M-héj, $n=3$) lévő, p-alhéj ($l=1$), $m=+1$ -es mágneses kvantumszám által meghatározott térbeli irányú atompályát jelöli:



Az elektron is rendelkezik saját mágneses tulajdonsággal. *Homogén mágneses térben az azonos atompályán lévő elektronok bizonyos nagyságú, de egymáshoz képest ellentétes irányú szöggel eltérülnek a síkba fektetett egyenestől.* **A spinquantumszám az elektron saját mágneses tulajdonságaira utal. Jele: m_s értéke mindig $m_s = +\frac{1}{2}$ vagy $-\frac{1}{2}$.**

Összefoglalva: Az atompályákat 3 kvantumszám jellemzi. A főkvantumszám a pálya méretét, a mellékkvantumszám a pálya alakját, a mágneses kvantumszám pedig a pálya mágneses térbeli irányát adja meg. Ahhoz, hogy egy elektront teljesen jellemezni lehessen, az atompályáján kívül még saját mágneses tulajdonságát is számításba kell venni, erre szolgál tehát a spinquantumszám.

Egy atomban az elektronok energiáját formálisan a **pályaenergia** jellemzi. A pályaenergia **az az energia, amely akkor szabadul fel, amikor egy elektron végtelen távolságból az adott pályára zuhan. Értéke negatív előjelű**, hiszen az atomban kedvezőbb az elektronnak, mint az atommagtól végtelen távol, mértékegysége **kJ/mol**.

A pályaenergia azonos fő- és mellékkvantumszámú atompályák esetén azonos. Például bármely elektronhéj p-alhéjának (kivéve természetesen a K-héjat, hiszen annak nincs is p-alhéja) 3 atompályájának az energiaszintje teljesen azonos. *A teljesen azonos energiájú atompályákat szaknyelven degenerált atompályáknak nevezzük. Kifejezhetjük magunkat tehát így is: a p-alhéjak háromszorosan degeneráltak.*

Az elektronszerkezet kiépülése

Az atomok elektronszerkezetének az ismerete nélkülözhetetlen a kémikusok számára, ugyanis a kémiai reakciók a vegyértékelektron-szerkezet átalakulásával jönnek létre. A **vegyértékhéj** (engl. *valence shell*) az atomok legkülső, telítetlen héja, a ezen lévő elektronok, az ún. **vegyértékelektronok**. A már lezárt (telített) elektronhéjakat és az atommagot együtt **atomtörzsnek** szokás nevezni.

Az elektronszerkezet kiépülésének megértéséhez elsőként fontos néhány szabállyal megismerkedni (Pauli-elv, Hund-szabály, energiaminimum elve).

Pauli-elv (tilalmi-elv)

A Pauli-elv szerint egy atomban nem lehet még két olyan elektron sem, amelynek mind a négy kvantumszáma megegyezik.

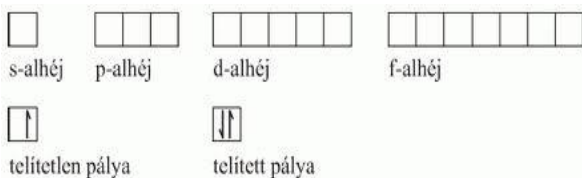
Érdekes fejezet ez, ugyanis több kérdést is felvet. Korábban olvashattuk, hogy egy atompályán maximálisan két elektron tartózkodhat egyszerre. Felvetődik a kérdés, miért? Miért kettő? Vagy még inkább: **Hogy lehetséges az, hogy ugyan azon a helyen, azonos atompályán két negatív töltésű, teljesen azonos elektron tartózkodjon?**

A válasz: **sehogy!** Éppen ez a Pauli-elv lényege. A Pauli-elv és a józan gondolkodás értelmében ugyanis nem lehetséges, hogy két teljesen azonos elektron ilyen közel kerüljön egymáshoz, hiszen a taszító erők távolabb löknék őket. Azonban ne feledjük, hogy **a természet két különböző mágneses sajátsággal rendelkező elektronnal szolgál!** A spinkvantumszámok lehetséges értékei: $+\frac{1}{2}$ illetve $-\frac{1}{2}$. Ha két elektron legalább ebben a tulajdonságában különbözik, akkor – szükségképpen – lehetőség van rá, hogy azonos atompályán helyezkedjenek el.

Vagyis még egyszer: egy atomban két elektron tartózkodhat azonos elektronhéjon (megegyezik a főkvantumszámuk), tartózkodhatnak azonos alhéjon (azonos mellékvantumszám), sőt akár még ennek az alhéjnak azonos atompályáján (azonos mágneses kvantumszám) is tartózkodhatnak, de ebben az esetben a spinkvantumszámuknak el kell térni.

Ez a – látszólag – parányi különbség lehetőséget ad arra, hogy ezek az elektronok az adott atompályán párt, **elektronpárt** képezzenek, ami nélkül gyönyörű, makroszkopikus világunk változatossága elképzelhetetlen volna; hiszen ez, az elektronok „párkeresése” a kémiai reakciók lelke, a kémia és így a világ meghatározó fundamentuma!

Hund-szabály



A Hund-szabály szerint egy alhéjon az atompályákon elektronok úgy próbálnak elhelyezkedni, hogy közöttük maximális legyen a párosítatlanok, azonos spinkvantumszámúak száma.

Párosítatlan elektronnak azokat az elektronokat nevezzük, amelyek **egyedül vannak egy adott atompályán**. A Hund-szabály gyakorlatilag az energiaminimumra törekvés elvének atomi világban történő egyik megvalósulása. Hiszen ne feledjük, bár az elektronok képesek – ellentétes spinkvantumszámmal – elektronpárokat alkotni, de **alapvetően ők mégis csak negatív töltésű elektronok, akik az atommaghoz minél közelebb, de egymástól minél távolabb szeretnének elhelyezkedni**. A Hund-szabály értelmezésében illetve az elektronszerkezet átlátható ábrázolásában az úgynevezett cellás ábrázolás nyújt segítséget (1.ábra).

Az energiaminimum elve

Az energiaminimum elve szerint egy ún. alapállapotú atomban **az elektronok mindig úgy helyezkednek el, hogy a lehető legkisebb energiaszinten legyenek**, vagyis a lehető legközelebb az atommaghoz.

Mi az **alapállapotú atom**? Egy atomnak az alapállapota **a számára legkedvezőbb energiaállapot**, ebben „szeret” lenni a leginkább, és ebben is marad mindaddig, amíg nem bolygatja meg és készíti valami arra, hogy elhagyja ezt a helyzetet, és ún. **gerjesztett állapotba** kerüljön. **Gerjesztett állapotból végtelen sok**, míg alapállapotból minden atom esetében egyetlen egy létezik, vagyis az, amikor az atomban lévő elektronok a lehetséges legalacsonyabb energiaszinten tartózkodnak. **Gerjesztett állapotot úgy lehet létrehozni, hogy** valamilyen formában

(például fény segítségével) **energiát közlünk** (gerjesztés) az atommal. Ilyenkor egy alacsonyabb energiaszinten lévő elektron átugrik egy magasabb energiaszinten lévő atompályára. A gerjesztett állapot természetesen nem tart a végtelenségig, ugyanis az atom a gerjesztés megszűnése után, a befektetett **energia kibocsátásával** (relaxáció) visszatér az alapállapotába (kísérleti háttér: lángfestés).

Az **elektronszerkezet kiépülése a megfelelő jelölésrendszer ismeretében leírható**. A jelölésrendszerben három dolgot tüntetnek fel. Az **első szám** azt mutatja meg, hogy az adott **elektron melyik elektronhéjon van** (vagyis a főkvantumszámot adja meg). Az ezután **következő betű definiálja az alhéjat**, ahol az elektronok tartózkodnak. Végül **a betű jobb-felsőindexébe írt szám az adott alhéjon lévő elektronok számát** tünteti fel.

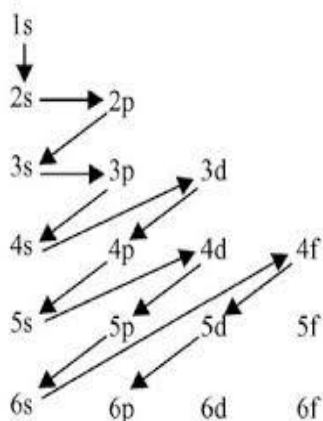
Példaképp vizsgáljuk meg, mit is mutat, ha ezt látjuk: $2p^4$!

A jelölés jelentése az, hogy a második héjon (L-héj) lévő p-alhéjon, 4db elektron tartózkodik. Ha egy alhéjon annyi elektron helyezkedik el, amennyi maximálisan ráfér, akkor azt **telített alhéjnak** nevezzük. **Ha egy elektronhéj összes alhéja telített**, akkor az elektronhéj is telítetté válik, melyet **zárt héjnak** is szokás nevezni.

Elektronhéj	Alhéj	Atompályák száma (db)	Elektronok száma (db)	
1. (K)	1s	1	2	2
2. (L)	2s	1	2	8
	2p	3	6	
3. (M)	3s	1	2	18
	3p	3	6	
	3d	5	10	
4. (N)	4s	1	2	32
	4p	3	6	
	4d	5	10	
	4f	7	14	
...	...			

Az első elektronhéjon csak két elektron tud elhelyezkedni (csak s-alhéj van). A második héjon már megjelenik az s mellett a p-alhéj is, ezért ott $2+6=8$ elektron lehet. stb... (3.táblázat)

3. táblázat



A **elektronok feltöltődése**, az egyes alhéjakra olyan sorrendben megy végbe, hogy az elektronok **minél kisebb energiaállapotba kerüljenek** (2.ábra). A sorrend a következő:

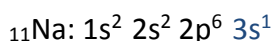
1s, 2s, 2p 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d stb..

Ha a fenti sorrendet figyelmesen megvizsgáljuk, akkor észrevehetünk egy-két érdekességet. Látható, hogy 3p-alhéjig úgy töltődnek fel az atompályák, ahogy az várható, azonban ez után a 3d helyett a 4s lép a tettek mezejére.

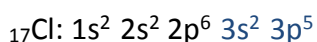
Mi ennek az oka? Az s-atompályája gömbszimmetrikus, míg a d-alhéj atompályái igen bonyolultak. Az atom elektronjainak számára energetikailag kedvezőbb az, ha a 3d atompályák előtt elsőnek a 4s atompályára kerülnek, mert bár ennek a főkvantumszáma (így magtól mért távolsága) nagyobb, de gömbszimmetrikus alakja miatt – adott számú elektron esetén – kedvezőbb az energiaszintje, mint a 3d atompályák bármelyikének.

Néhány atom teljes elektronszerkezete

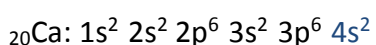
Az alábbi példákban néhány atom teljes elektronszerkezetét láthatjuk, feketével a törzselektronok, kékkel a vegyértékelektronok szerkezete lett jelölve. A **törzselektronok** a lezárt héjakon helyezkednek el, azonban ide a legkülső héj nem tartozik. Az **atom legkülső héj nélküli részét** szokás **atomtörzsnek** is nevezni. **Vegyértékhéjnak** az atomok **legkülső elektronhéját** nevezzük. Az **ezen elhelyezkedő elektronok a vegyértékelektronok**. A **kémia szempontjából a vegyértékelektronok a legfontosabbak**, ugyanis ezek vesznek részt a kémiai reakcióban.



párosítatlan elektronjainak száma: 1.



párosítatlan elektronjainak száma: 1.

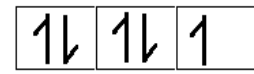


párosítatlan elektronjainak száma: 0.

A párosítatlan elektronok száma a cellás ábrázolás segítségével nagyon jól megállapítható, mondhatni annyi van, ahány olyan cella, ahol csak egy elektron található. Ne feledjük el, hogy az atomok úgy töltik fel az alhéjakat, hogy **minél több legyen a párosítatlan elektron** (Hund-szabály), emiatt gondolkodjunk el, hogy például az oxigén esetében miért van kettő, a nitrogén esetében miért van három párosítatlan elektron!



Na



Cl



Ca

