

Elektronik Konfigürasyon

Dr. Öğr. Üyesi Akar KARAKOÇ

ELEKTRONLARIN DÜZENLENMESİ

- Herhangi bir atomdaki elektron dizilimini belirlemek için **üç kuantum sayısı** kullanılır. Bunlar,
 1. **baş kuantum sayısı,**
 2. **açısai momentum kuantum sayısı**
 3. **magnetik kuantum sayısı**

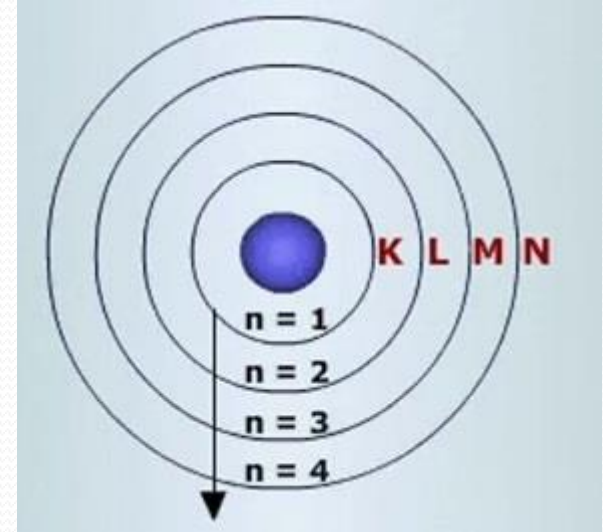
Bu üç kuantum sayısı belirli bir orbitali tanımlar.

- Elektronun atomdaki konumunun yanında orbitaldeki **durumunu da tam olarak tanımlamak için bu kuantum sayılarına** dördüncü bir kuantum sayısı olan **spin kuantum sayısı** eklenmiştir.
- Kısaca kuantum sayılarını kullanarak atomdaki bir elektronun hangi orbitalde olduğunu veya hangi elektrondan bahsettiğimizi kolaylıkla ifade ederiz

Baş Kuantum Sayısı (n)

- **Baş kuantum sayısı**, atomda elektronun bulunduğu temel enerji seviyesini (kabuğunu) ifade eder.
- Baş kuantum sayısı **n** ile gösterilir ve 1,2,3,4... gibi tam sayılı değerler alır.
- Baş kuantum sayısının büyüklüğü arttıkça elektronun çekirdeğe olan uzaklığı artar, içinde bulunduğu orbitalin boyutu büyür ve enerjisi artar.
- Bir başka ifade ile n arttıkça elektron çekirdek tarafından daha zayıf çekilir. Baş kuantum sayılarının gösterdiği temel enerji seviyeleri (kabuklar) için bazen harf sembollerde kullanılır.

n	:	1	2	3	4
Kabuk	:	K	L	M	N



Açısal Momentum (Alt Kabuk, ikincil) Kuantum Sayısı

- **Açısal momentum kuantum sayısı(ℓ)** orbitalin şeklini tanımlar ve ℓ ile gösterilir.
- Bu kuantum sayısının alabileceği değerler baş kuantum sayısının değerine bağlı olup 0' dan $n-1$ e kadar tam sayılı değerlerdir.
 - $n=1$ ise ℓ ' nin alabileceği değer yalnızca 0' dır ($\ell=1-1=0$).
 - $n=2$ ise ℓ ; 0 ve 1 olmak üzere iki değer alabilir
 - $n=3$ ise ℓ ; 0, 1 ve 2 olmak üzere üç değer alabilir.
- Bir kabuktaki açısal momentum kuantum sayılarının toplamı, o kabuktaki alt enerji seviyelerinin sayısını verir. Örneğin $n=3$ iken ℓ ' nin üç değeri (0, 1 ve 2) mümkündür. O halde $n=3$ temel enerji seviyesinde (kabuğunda) 3 alt enerji seviyesi vardır.
- Açısal momentum kuantum sayılarının sayısal değerleri elektron dizilimlerinde veya orbitalleri tanımlamada pek kullanılmaz bunların yerine küçük harf semboller kullanılır.

- Açısal momentum kuantum sayıları ve karşılığı harf semboller şu şekildedir

ℓ	:	0	1	2	3	4	5
Harf sembol	:	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>b</i>

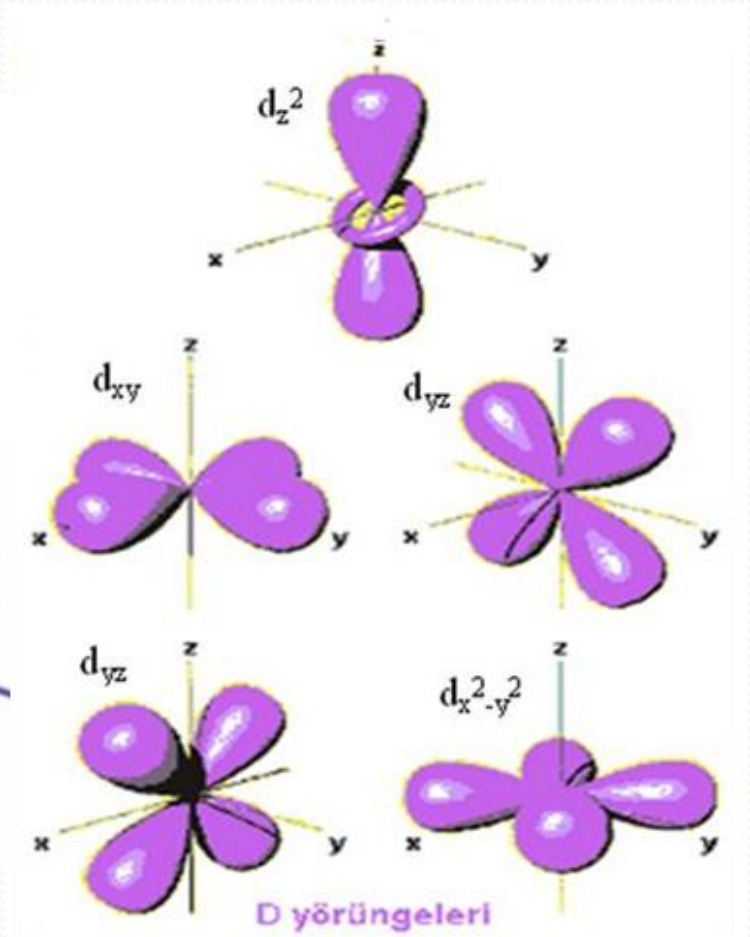
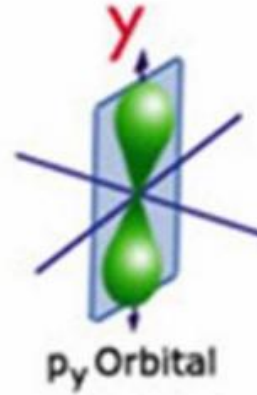
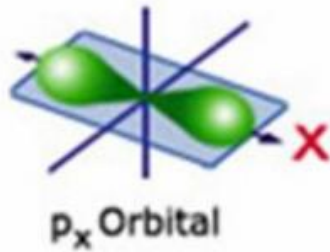
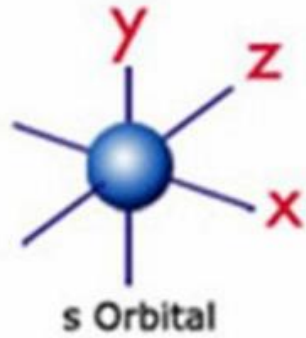
Bunu örnekleyecek olursak $n=3$ kabuğu $\ell=0$, $\ell=1$ ve $\ell=2$ şeklinde üç alt kabuktan (alt enerji seviyesinden) oluşmaktadır. Bunlar sırasıyla $3s$, $3p$ ve $3d$ alt kabukları (alt enerji seviyeleri) dir. 3 sayısı elektronun 3. kabukta (enerji seviyesinde) bulunduğunu, s , p ve d sembolleri ise elektronun bulunduğu alt enerji seviyelerini dolayısıyla orbitallerin şekillerini belirtmektedir.

Orbitallerin alabileceği max. elektron sayısı:

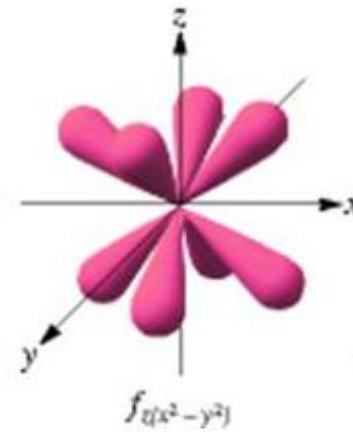
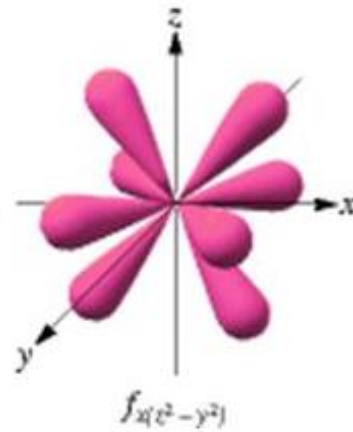
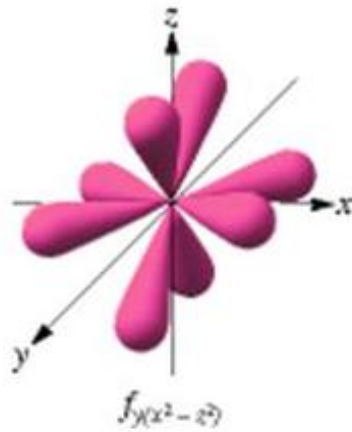
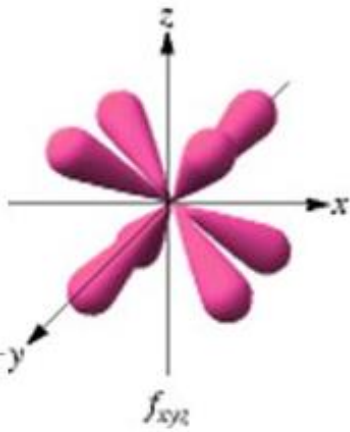
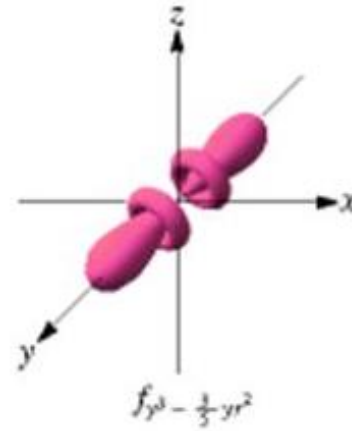
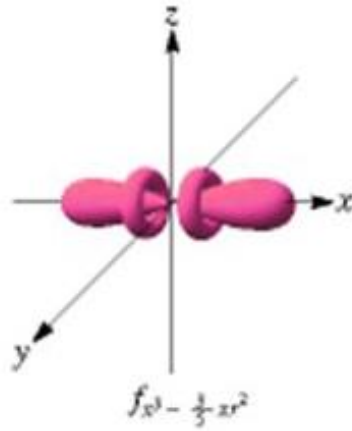
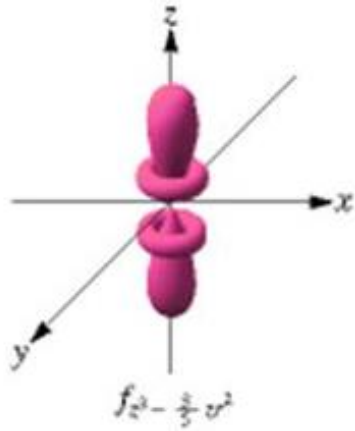
<i>s</i>	2	<i>d</i>	10
<i>p</i>	6	<i>f</i>	14

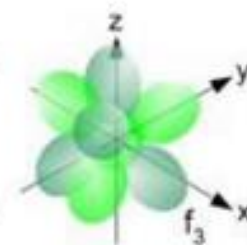
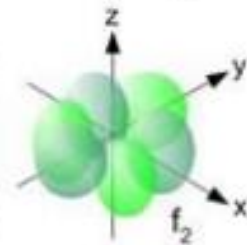
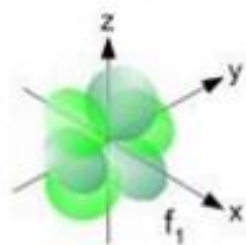
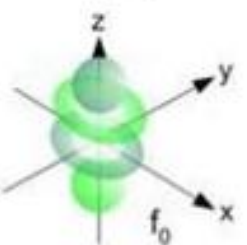
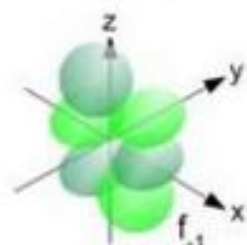
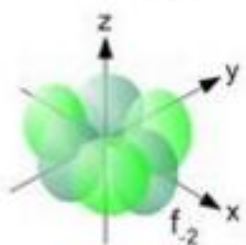
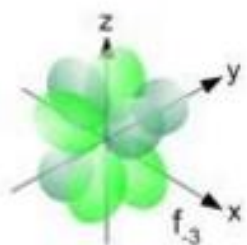
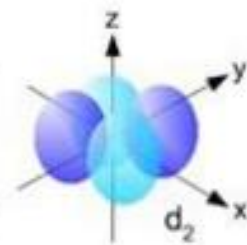
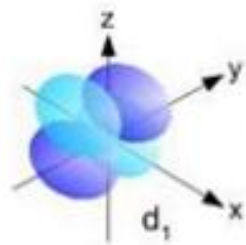
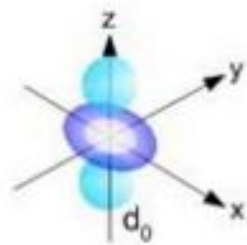
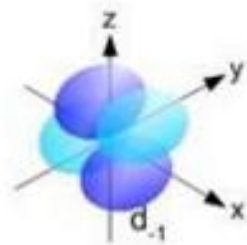
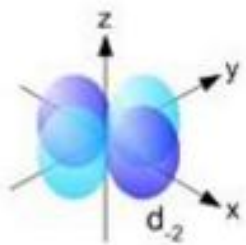
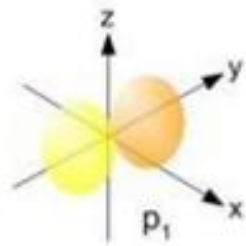
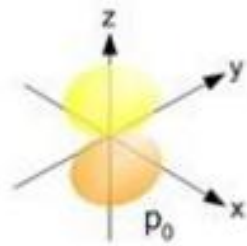
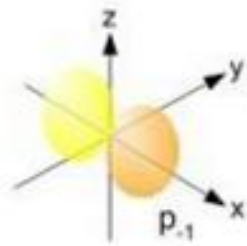
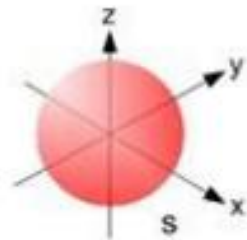
Manyetik Kuantum Sayısı m_ℓ

- m_ℓ ile gösterilir.
- $2\ell+1$ kadardır.
- $\ell=0$ olursa $m_\ell=1$ olur (s).
- $\ell=1$ olursa $m_\ell=3$ olur. $m=-1, 0, 1$ değerlerini alır. (p_x, p_y, p_z)
- $\ell=2$ olursa $m_\ell=5$ olur. $m=-2, -1, 0, 1, 2$ değerlerini alır. ($d_{x^2-y^2}, d_{z^2}, d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}$)



f orbitalleri





Çizelge 4.1
Atomik Orbitaller ve
Kuantum Sayıları
Arasındaki İlişki

Baş kuantum sayısı (n)	Açısıl momentum kuantum sayısı (ℓ)	Alt kabuk gösterimi	Magnetik kuantum sayısı (m_ℓ)	Orbital sayısı	Atomik orbitaller
1	0	1s	0	1	1s
2	0	2s	0	1	2s
	1	2p	-1,0,+1	3	$2p_x, 2p_y, 2p_z$
3	0	3s	0	1	3s
	1	3p	-1,0,+1	3	$3p_x, 3p_y, 3p_z$
	2	3d	-2,-1,0,+1,+2	5	$3d_z^2, 3d_{x^2-y^2}, 3d_{xy}, 3d_{xz}, 3d_{yz}$
4	0	4s	0	1	4s
	1	4p	-1,0,+1	3	$4p_x, 4p_y, 4p_z$
	2	4d	-2,-1,0,+1,+2	5	$4d_z^2, 4d_{x^2-y^2}, 4d_{xy}, 4d_{xz}, 4d_{yz}$
	3	4f	-3,-2,-1,0,+1,+2,+3	7	(verilmemiştir)

n sayısı aynı olan orbitaller aynı temel enerji seviyesindedir (kabuktur). Aynı şekilde n ve ℓ değerleri aynı olan orbitaller ise aynı alt enerji seviyesinde (alt kabukta) yer alırlar.

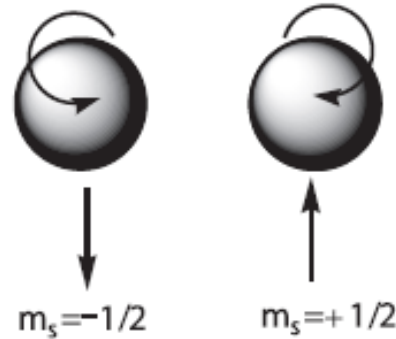
Kuantum sayıları ve orbitaller

Baş Kuantum Sayısı		Açısal Kuantum Sayısı		Magnetik Kuantum Sayısı m_l	Alt Tabakadaki Yörünge sayısı	elektron sayısı
n	Tabaka	l	Alt tabaka			
1	K	0	1s	0	1	2
2	L	0	2s	0	1	2
		1	2p	-1 0 +1	3	6
3	M	0	3s	0	1	2
		1	3p	-1 0 +1	3	6
		2	3d	-2 -1 0 +1 +2	5	10
4	N	0	4s	0	1	2
		1	4p	-1 0 +1	3	6
		2	4d	-2 -1 0 +1 +2	5	10
		3	4f	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	7	14

Spin Kuantum Sayısı (m_s)

Atomik orbitalleri belirlemek için şimdiye kadar üç kuantum sayısı kullandık. Bu sayılara ek olarak elektronun kendi eksenini etrafında iki yöne de dönebilmesi nedeniyle dördüncü bir kuantum sayısı önerilmiştir. Bu dönme hareketine spin denir (Şekil 4.8). Hidrojen spektrumunda görülen ve açıklanamayan bazı izlerin elektron spin hareketinden kaynaklandığı anlaşılmıştır. Diğer üç kuantum sayısından bağımsız olan **spin kuantum sayısı (m_s)** $+1/2$ ve $-1/2$ değerlerine sahiptir. Bu durumda atomda n , ℓ ve m_ℓ sayıları aynı ancak spin kuantum sayıları farklı en fazla iki elektron bulunabilir. O halde bir orbital içinde en fazla iki elektron bulunabilir.

Bir kişi yaşadığı evi tarif ederken ülke, şehir, mahalle, cadde ve apartman numarası vermesi gibi elektronların hangi orbitalde bulunduğu dört kuantum sayısı ile belirtilir. Örneğin 3s'deki bir elektronun kuantum sayıları $n=3$, $\ell=0$, $m_\ell=0$ ve $m_s=+1/2$ veya $-1/2$ dir. Basit bir şekilde (n , ℓ , m_ℓ , m_s) sıralamasıyla (3, 0, 0, $+1/2$ veya $-1/2$) şeklindedir.



Şekil 4.8

Elektronun Spin Hareketleri

Elektron Dizilimi

- Atomdaki bütün elektronların orbitallere (alt kabuklara) dağılımına **elektron dizilimi** denir ve bu diziliş, atomda en düşük enerjili (temel) hale karşılık gelecek şekilde olmalıdır.
- Elektron dizilimini doğru yazabilmek için **üç ilke veya kural vardır:**
 1. Aufbau ilkesi
 2. Hund kuralı
 3. Pauli dışarlama ilkesi,

Aufbau Kuralı

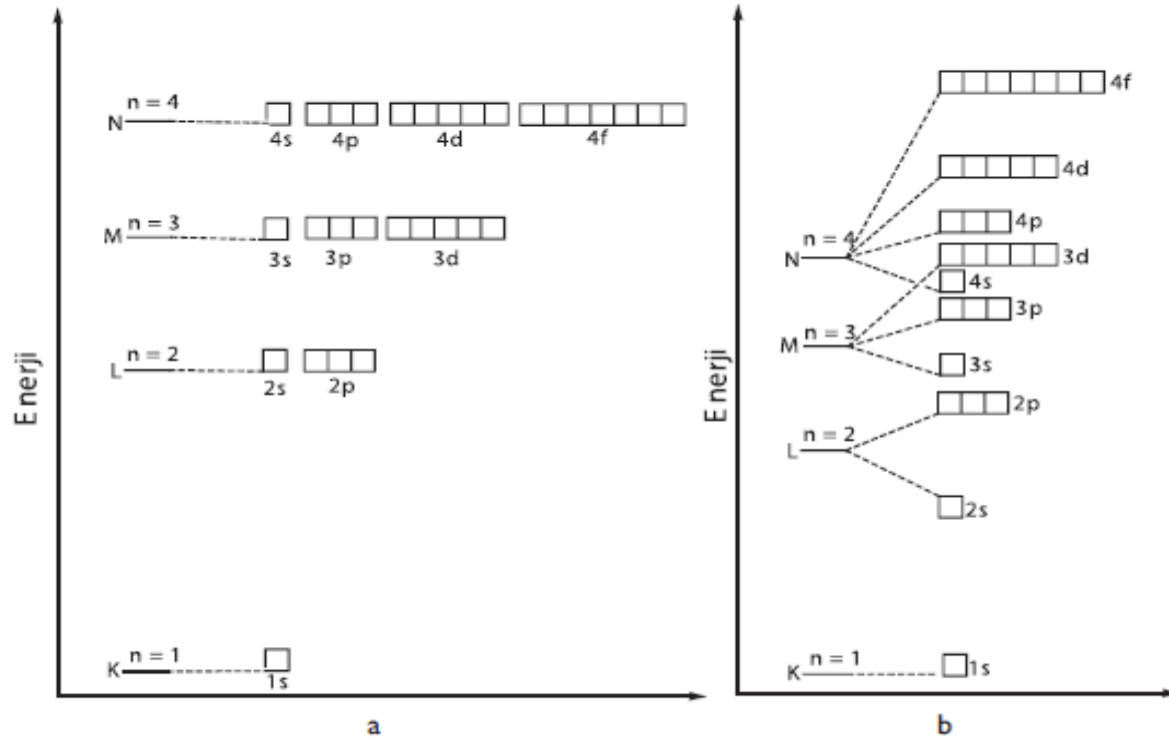
Elektronlar orbitallere yerleştirilirken düşük enerjili orbitalden başlanarak verleştirilir.

ORBİTALLERİN ENERJİ SEVİYELERİ

Şekil 4.9

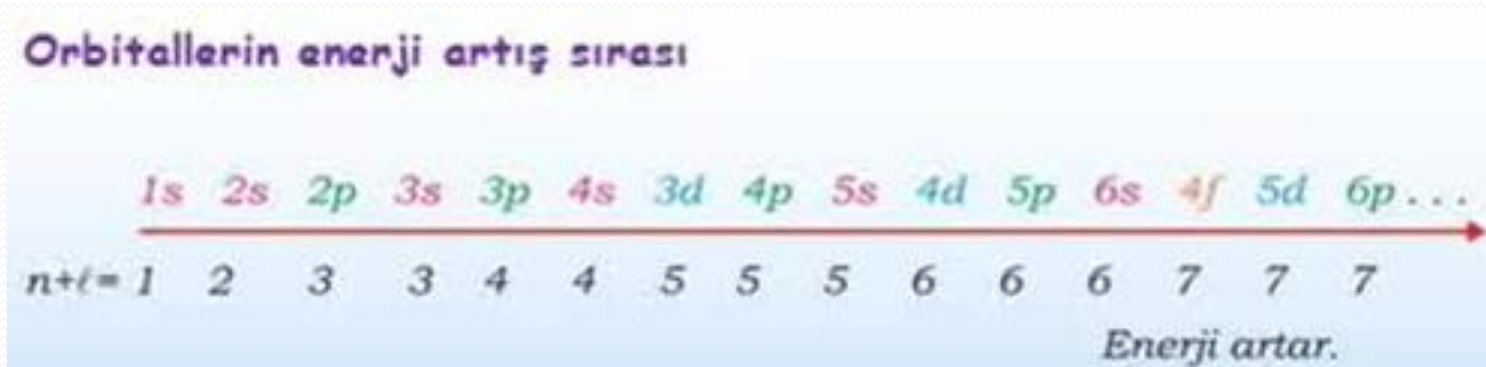
a) Hidrojen Atomundaki Orbitallerin Enerji Düzeyleri

b) Çok Elektronlu Sistemlerde Orbitallerin Enerji Düzeyleri (Çözümler ölçekli değildir)



Bir atomda elektronlar en düşük enerjili orbitalden başlayarak orbitallere yerleşirler

- Aufbau kuralı ile bugün bildiğimiz orbital sıralaması oluşmuştur

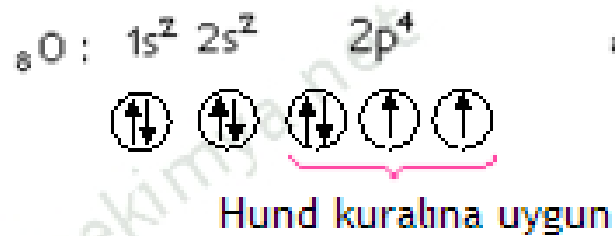


$1s\ 2s\ 2p\ 3s\ 3p\ 4s\ 3d\ 4p\ 5s\ 4d\ 5p\ 6s\ 4f\ 5d\ 6p\ 7s\ 5f\ 6d\ 7p\ldots$

K	1s				
L	2s	2p			
M	3s	3p	3d		
N	4s	4p	4d	4f	
O	5s	5p	5d		5f
P	6s	6p	6d		
Q	7s	7p			

Hund Kuralı

Elektronlar orbitallere yerleştirilirken, eş enerjili orbitallere önce tek tek yerleştirilir. Sonra ikinci elektronlar yerleştirilir.



Pauli Dışarlama ilkesi

Pauli dışarlama ilkesine göre

bir atomda herhangi iki elektron aynı dört kuantum sayısına sahip olamaz. Bir atomun ilk üç kuantum sayısı n , ℓ ve m_ℓ aynı olan iki elektronunun

m_s değerleri farklı olmak zorundadır. Yani bir orbitaldeki iki elektron zıt yönlü spinlere sahip olmak zorundadır. Pauli dışarlama ilkesine göre yukarıda gösterilen üç olasılıktan sadece “b” doğrudur.



a



b



c

Elektronik konfigürasyon

Bir atomun elektronlarının hangi yörüngede olduğu ve orbitallerinin cinsinin belirtildiği yazma düzenine **Elektronik konfigürasyon** denir.

n : Baş kuant sayısı olup 1, 2, 3, ... gibi tam sayılardır. Elektronun hangi yörüngede olduğunu belirtir.

l : Yan kuant sayısı olup, orbital adı olarak bilinir, s, p, d, f gibi harflerle anılır.

Elektronlar önce düşük potansiyel enerjili orbitallere yerleşirler. Dört değişik enerji düzeyi vardır.

s : Enerji seviyesi en düşük orbitaldir. 2 elektron alabilir.

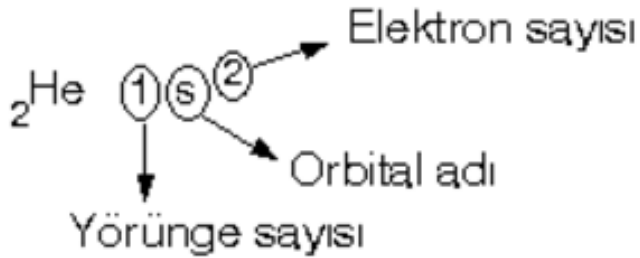
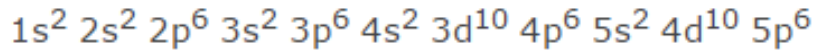
p : s orbitalinden sonra elektronlar p orbitallerine yerleşir. p_x , p_y , p_z olmak üzere 3 tanedir. p orbitalleri toplam 6 elektron alabilir.

d : 10 elektron alır ve toplam 5 tanedir. p orbitallerinden sonra elektronlar d orbitallerine yerleşirler.

f : f orbitalleri toplam 14 elektron alır ve 7 tanedir. Enerji düzeyi en yüksek olan orbitaldir.

Yörünge Sayısı (n)	Yörüngedeki orbital sayısı(n^2)	Yörüngedeki elektron sayısı ($2n^2$)
1.....	1 (1 tane s)	2
2.	4 (1 tane s, 3 tane p)	8
3.	9 (1 tane s, 3 tane p, 5 tane d)	18
4.	16 (1 tane s, 3 tane p, 5 tane d, 7 tane f)	32

Bir atomun elektronları yörüngelere yerleştirilirken okların sırası takip edilir. Bunlar bu sıra ile yazılırsa aşağıdaki gibi olur.



K	1s				
L	2s	2p			
M	3s	3p	3d		
N	4s	4p	4d	4f	
O	5s	5p	5d	5f	
P	6s	6p	6d		
Q	7s	7p			

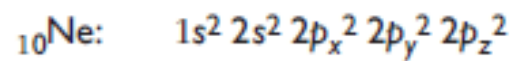
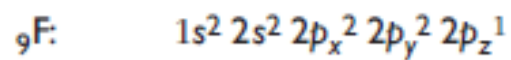
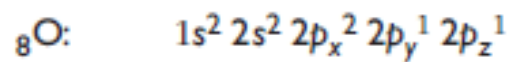
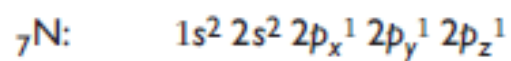
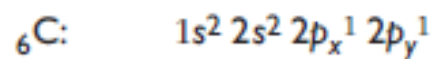
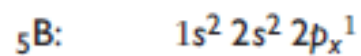
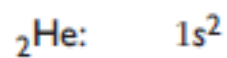
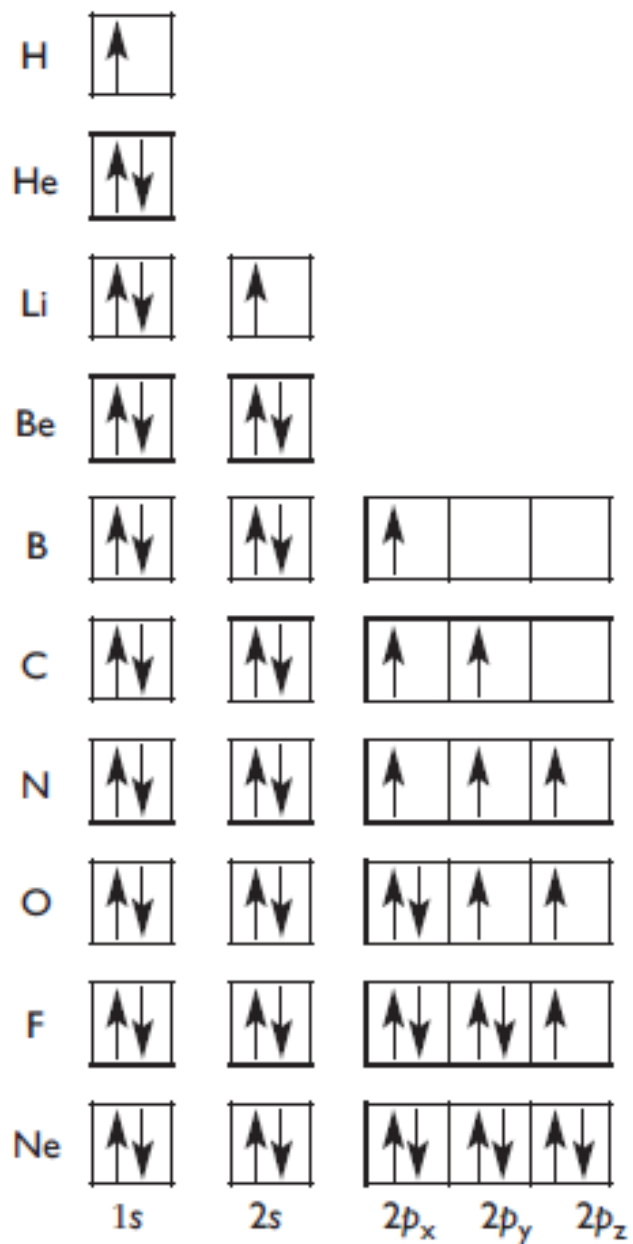
Periyot : Dizilişi yapılan elementin en son yazılan s orbitalinin başındaki sayıya periyot denir.

Grup : Son yörünge orbitalleri s ve p ile bitiyorsa A grubu, d ve f ile bitiyorsa B grubu elementidir.

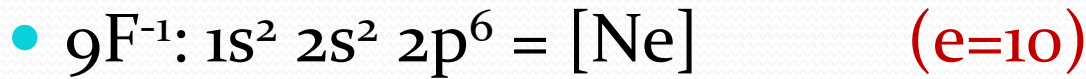
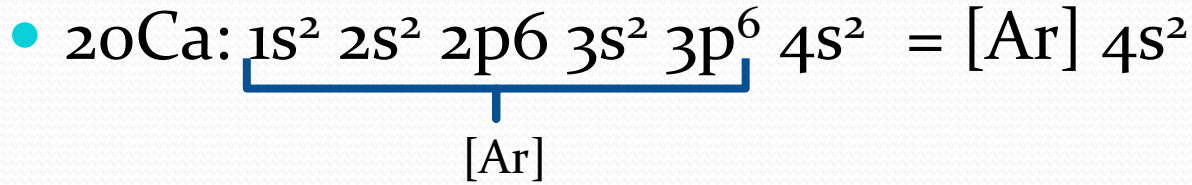
- A grupları son yörüngelerindeki s ve p orbitallerindeki elektronların toplamıyla bulunur.

X: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ dizilişine göre atom 3. periyot, 8A grubundandır.

Bir atomda elektronlar en düşük enerjili orbitalden başlayarak orbitallere yerleşirler



• $_{20}\text{Ca}$, $_{19}\text{K}$, $_{19}\text{K}^{+1}$, $_{9}\text{F}^{-1}$, $_{21}\text{Sc}$, $_{24}\text{Cr}$, $_{29}\text{Cu}$ 'nun elektronik konfigürasyonu nasıldır?



Küresel Simetri nedir?

- Bir atomun elektron dizilişindeki en son orbital tam dolu yada yarı dolu ise atom küresel simetri özelliği gösterir.
- Küresel simetri gösteren atomlarda elektronlar çekirdek tarafından simetrik çekilirler. Daha karardır. Simetrik çekilen elektronu koparmak fazla enerji gerektirir.

Orbitaller yarı dolu veya tam dolu olması durumunda daha kararlı bir yapıya ulaşır.

Nötr atom için (p=e), yüklü atom için (p=e + yük) eşitliklerinde elektron sayısı hesaplanır