

ћи. Данас су састојци чаробних напитака хемијски окарактерисани, активне супстанце су изоловане и њихова структура потврђена хемијском синтезом. Те активне супстанце, у малим и контролисаним дозама, примењују се за лечење разних болести и још понегде.

Али свеједно, татула и даље расте на нашим сметлиштима и крај сеоских путева. И чека да је убере неки вештак, који ће знати шта с њом и од ње треба урадити.

Abstract

THE MOST TOXIC PLANTS OF OUR COUNTRY - STRAMONIUM

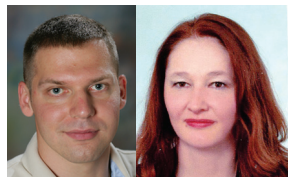
Gorica DJELIĆ, Ivan GUTMAN, Aca MARKOVIĆ,
University of Kragujevac, Faculty of Science

In the article is described stramonium – one of the most toxic plants of our country (Serbia) – with emphasis on the chemical compounds that it contains and on their action on humans.

ЛИТЕРАТУРА

1. О. Гашић, И. Кањо, *Хем. иреплед* 32 (1991) 64.

2. Р. Бурковић, О. Гашић, М. Поповић, *Хем. иреплед* 32 (1991) 86.
3. О. Гашић, Н. Чанак, *Хем. иреплед* 33 (1992) 23.
4. О. Гашић, Н. Калин, В. Будак, *Хем. иреплед* 34 (1993) 22.
5. М. Поповић, О. Гашић, *Хем. иреплед* 34 (1993) 50.
6. Ж. Симић, *Хем. иреплед* 46 (2005) 126.
7. Ј. Матић, *Хем. иреплед* 47 (2006) 126.
8. Д. В. Величковић, *Хем. иреплед* 48 (2007) 43.
9. В. Петровић, *Хем. иреплед* 49 (2008) 126.
10. Ј. Туцаков, *Фармакогнозија*, Завод за издавање уджбеника СР Србије, Београд, 1964.
11. М. Јосифовић (Ед.), *Флора СР Србије ВИ*, САНУ, Београд, 1974.
12. Ј. Туцаков, М. Михајлов, *Медицинска флора Овчара, Каблара и Јелице*, САНУ, Београд, 1977.
13. М. Р. Сарић, *Лековите биљке Србије*, САНУ, Београд, 1989.
14. М. Горуновић, П. Лукић, *Фармакогнозија*, Фармацеутски факултет, Београд, 2001.
15. Р. Karrer, *Lehrbuch der Organischen Chemie*, Thieme, Stuttgart, 1959.
16. М. Љ. Михаиловић, *Основи теоријске органске хемије и стереохемије*, Грађевинска књига, Београд, 1970.
17. В. Видаковић, *Хем. иреплед* 45 (2004) 110.



Ивица МИЛОВАНОВИЋ, Тексас А&М Универзитет, САД
Снежана ЗАРИЋ, Хемијски факултет, Београд, Србија (e-mail: szaric@chem.bg.ac.rs)

ОБЈАШЊЕЊЕ ЕЛЕКТРОНСКИХ КОНФИГУРАЦИЈА АТОМА И ЈОНА ПРЕЛАЗНИХ МЕТАЛА

Електронске конфигурације атома и јона прелазних метала су неочекиване и збуњујуће, те их није лако схватити. Ове електронске конфигурације се не могу објаснити на основу једноставног попуњавања орбитала електронима, идући од орбитала нижих енергетских нивоа и поднивоа, ка орбиталама виших нивоа и поднивоа, као што је то случај са свим осталим елементима периодног система. Веома је збуњујуће то што електронске конфигурације атома (табела 1) указују да су 3d орбитале више енергије, док, насупротив томе, електронске конфигурације јона (табела 2) указују да су 4s орбитале више енергије. Необично понашање атома и јона прелазних метала је објашњено у овом чланку. Ово понашање је последица тога што су енергије s и d орбитала блиске, а електронска конфигурација не зависи само од енергија s и d орбитала у атомима, већ и од одбијања између електрона.

Кад се говори о електронским конфигурацијама прелазних метала најчешће се као изузеци наводе примери електронских конфигурација атома хрома ($[Ar]3d^5 4s^1$) и бакра ($[Ar]3d^{10} 4s^1$), и нуде се објашњења да су полупопуњене и потпуно попуњене 3d орбитале изузетно стабилне. Међутим, електронске конфигура-

ције са једним електроном у s орбиталама ($5s^1$), или без електрона у s орбиталама ($5s^0$), се јављају код већег броја 4d елемената, ниобијум, $[Kr]4d^4 5s^1$; молибден, $[Kr]4d^5 5s^1$; рутенијум, $[Kr]4d^7 5s^1$; родијум, $[Kr]4d^8 5s^1$; паладијум, $[Kr]4d^{10} 5s^0$; сребро, $[Kr]4d^{10} 5s^1$. За све ове атоме се не може употребити објашњење о великој стабилности полупопуњених и попуњених d орбитала.

Међутим, циљ овог чланка није да објасни електронске конфигурације наведених елемената, који се могу сматрати изузецима, већ да прикаже објашњења опште слике електронских конфигурација атома и јона прелазних елемената, која је веома неочекивана.

Електронске конфигурације s- и d-метала су приказне у табели 1. Ово су електронске конфигурације које су у складу са експерименталним спектроскопским подацима. Електронске конфигурације прелазних метала овде ће бити објашњене на примеру прве прелазне серије, односно 3d метала. Подаци у табели 1 указују да се прво попуњавају 4s орбитале, па после тога 3d орбитале. На основу ових електронских конфигурација може се закључити да 4s орбитале имају нижу енергију од 3d орбитала.

Табела 1 Електронске конфигурације основних стања s и d елемената

	Електронска конфигурација	М	Електронска конфигурација	М	Електронска конфигурација
Калијум	[Ar]3d ⁰ 4s ¹	Рубидијум	[Kr]4d ⁰ 5s ¹	Цезијум	[Xe]5d ⁰ 6s ¹
Калцијум	[Ar]3d ⁰ 4s ²	Стронцијум	[Kr]4d ⁰ 5s ²	Баријум	[Xe]5d ⁰ 6s ²
Скандијум	[Ar]3d ¹ 4s ²	Итријум	[Kr]4d ¹ 5s ²	Лантан	[Xe]5d ¹ 6s ²
Титан	[Ar]3d ² 4s ²	Цирконијум	[Kr]4d ² 5s ²	Хафнијум	[Xe]4f ¹⁴ 5d ² 6s ²
Ванадијум	[Ar]3d ³ 4s ²	Ниобијум	[Kr]4d ³ 5s ¹	Тангал	[Xe]4f ¹⁴ 5d ³ 6s ²
Хром	[Ar]3d ⁵ 4s ¹	Молибден	[Kr]4d ⁵ 5s ¹	Волфрам	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ²
Манган	[Ar]3d ⁵ 4s ²	Технецијум	[Kr]4d ⁵ 5s ²	Ренијум	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ²
Гвожђе	[Ar]3d ⁶ 4s ²	Рутенијум	[Kr]4d ⁷ 5s ¹	Осмијум	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ²
Кобалт	[Ar]3d ⁷ 4s ²	Родијум	[Kr]4d ⁸ 5s ¹	Иридијум	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ²
Никал	[Ar]3d ⁸ 4s ²	Паладијум	[Kr]4d ¹⁰ 5s ⁰	Платина	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ¹
Бакар	[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹	Сребро	[Kr]4d ¹⁰ 5s ¹	Злато	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹
Цинк	[Ar]3d ¹⁰ 4s ²	Кадмијум	[Kr]4d ¹⁰ 5s ²	Жива	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ²

Табела 2 Електронске конфигурације двовалентних и тровалентних 3d метала

	M ²⁺	M ³⁺		M ²⁺	M ³⁺
Скандијум		[Ar]3d ⁰ 4s ⁰	Гвожђе	[Ar]3d ⁶ 4s ⁰	[Ar]3d ⁵ 4s ⁰
Титан		[Ar]3d ¹ 4s ⁰	Кобалт	[Ar]3d ⁷ 4s ⁰	[Ar]3d ⁶ 4s ⁰
Ванадијум	[Ar]3d ³ 4s ⁰	[Ar]3d ² 4s ⁰	Никал	[Ar]3d ⁸ 4s ⁰	[Ar]3d ⁷ 4s ⁰
Хром	[Ar]3d ⁴ 4s ⁰	[Ar]3d ³ 4s ⁰	Бакар	[Ar]3d ⁹ 4s ⁰	[Ar]3d ⁸ 4s ⁰
Манган	[Ar]3d ⁵ 4s ⁰	[Ar]3d ⁴ 4s ⁰	Цинк	[Ar]3d ¹⁰ 4s ⁰	

На основу електронских конфигурација атома, које указују да су 4s орбитале ниже енергије, електронске конфигурације јона прелазних метала су неочекиване. Електронске конфигурације M²⁺, и M³⁺ јона 3d-метала које су у складу са експерименталним подацима дате су у табели 2. Све конфигурације су [Ar]3dⁿ и указују да метал губи електроне из 4s орбитала, а не из 3d, као што би се очекивало, на основу закључка изведеног на основу конфигурација атома одговарајућих метала, односно да су 3d- орбитале више енергије. Дакле, електронске конфигурације јона, за разлику од електронских конфигурација атома указују да су 4s орбитале више енергије.

Ово необично понашање атома и јона прелазних метала је последица тога што су енергије 4s и 3d орбитала блиске, а електронска конфигурација не зависи само од редоследа енергија 4s и 3d орбитала у атомима, већ и од одбијања између електрона.

Интересантно је напоменути да одбијање између електрона утиче и на енергије орбитала, као што је касије у тексту показано.

Да би се објасниле електронске конфигурације атома и јона прелазних метала потребно је анализирати појам орбитала и факторе који утичу на електронску енергију атома. Појам орбитале у хемију је уведен преко решења Шредингерове једначине за атом водоника. Једноелектронске таласне функције које се добијају као решења ове једначине називамо атомским орбиталама. Овако добијене орбитале за атом водоника се користе за све елементе периодног система. Ово представља апроксимацију, али је апроксимација добра, јер је познато да се попуњавањем орбитала добијених за атом водоника може објаснити периодни систем елемената.

Код великог броја елемената електронима се попуњавају орбитале редом од нижих енергетских нивоа и поднивоа ка вишим. Необично понашање се јавља само код прелазних елемената. Дакле, први разлог за неочекиване електронске конфигурације је чињеница да је коришћење орбитала, које представљају решења Шредингерове једначине за атом водоника, апроксимација. Други разлог су фактори који утичу на електронску енергију атома. Код атома са једним електроном нема никакве забуне - енергија одговарајуће орбитале је уједно и укупна електронска енергија атома. Међутим, код атома са већим бројем електрона на укупну енергију утиче и међуелектронско одбијање, односно енергија зависи и од међусобних одбојних интеракција електрона.

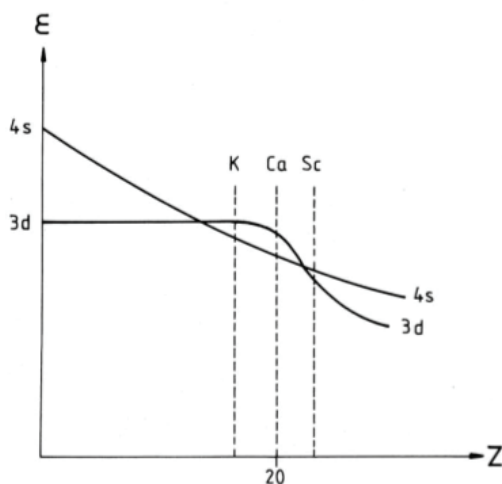
Да би се добиле тачне електронске енергије било ког вишелектронског атома потребно је решити Шредингерову једначину за одговарајући атом. Када атом садржи више електрона, онда је Шредингерову једначину немогуће решити аналитички, јер се тада појављују чланови 1/r_{ij} услед Кулоновог одбијања између електрона i и j на растојању r_{ij}. С обзиром да није могуће одредити ове чланове, неопходно је увести апроксимацију. Апроксимација се своди на то да користимо орбитале добијене решавањем Шредингерове једначине за атом водоника и електроне смештамо у ове орбитале. Затим укупну вишелектронску таласну функцију представљамо као Слејтерову детерминанту, која представља антисиметризовани производ једноелектронских функција. Решавање Шредингерове једначине се своди на минимизовање енергија Слејтерове детерминанте [1, 2]. У овом поступку, који се назива Hartree-Fock метода, међуелектронско одбијање се третира та-

ко да један електрон осећа просечно одбијање електрона из свих осталих орбитала. Самим тим енергија једне орбитале зависи од попуњености осталих орбитала. Атомске орбитале вишеелектронских атома и њихове енергије се добијају тако што се минимизује енергија Слејтерове детерминанте, па се може десити да редослед попуњавања орбитала није исти као код атома водоника. Решавање Шредингерове једначине за вишеелектронске атоме не омогућава да се прво израчуна неки редослед енергија празних орбитала, у које би се онда накнадно смештали електрони. Напротив, увек се прво претпостави одговарајућа конфигурација, а затим се орбитале оптимизују на тај начин да енергија Слејтерове детерминанте буде минимална.

Узимајући у обзир шта су орбитале и чињеницу како се одређује енергија атома, можемо објаснити конфигурације атома и јона прелазних метала и изградњу периодног система елемената која из тога следи. Напоменимо још да ћемо разматрати само просечну конфигурацију, не узимајући у обзир појединачне термове (тј. уколико је у питању нпр. конфигурација $3d^3$, занемарићемо различите могуће распореде ова три електрона у пет d орбитала)

ЕЛЕКТРОНСКА КОНФИГУРАЦИЈА НЕУТРАЛНИХ АТОМА ПРВЕ СЕРИЈЕ ПРЕЛАЗНИХ МЕТАЛА

Дијаграм који се често користи у квалитативним објашњењима конфигурација које садрже $4s$ и $3d$ поднивоа дат је на слици 1.



Слика 1. Релативне енергије $4s$ и $3d$ орбитала у зависности од редног броја атома. Енергија $4s$ орбитала опада са растућим редним бројем и пада испод енергије $3d$ орбитале која се све до редног броја 19 не мења значајно са порастом наелектрисања језгра.

Овај дијаграм је делимично потврђен Hartree-Fock прорачунима побуђених $4s^1$ односно $3d^1$ конфигурација одговарајућих атома^{а)}. Енергија $4s$ орбитала опада са растућим редним бројем и пада испод енергије $3d$ орбитале која се све до редног броја 19 не мења значајно са порастом наелектрисања језгра.

Пошто је за редни број 19, тј. атом калијума, енергија $4s$ орбитале испод енергије $3d$ орбитале, јасно је зашто се после попуњеног $3p$ поднивоа следећи електрон калијума смешта у $4s$, а не у $3d$ орбиталу. Тиме се начиње нова љуска односно нова периода. Исти је случај са атомом калцијума ($Z=20$) који има конфигурацију $4s^2$. Проблем настаје у случају атома скандијума ($Z=21$).

Конфигурација атома скандијума је $3d^1 4s^2$. Објашњење које се најчешће среће је следеће: додатни електрон нужно мора да буде у $3d$ орбитали (јер је енергија $4p$ орбитале знатно виша). Али, истовремено енергија $3d$ орбитале пада испод $4s$ према дијаграму на слици 1. Поставља се питање због чега онда конфигурација скандијума није $3d^3 4s^0$? Одговор на ово питање не можемо добити са слике 1, јер је она неадекватна за описивање конфигурација прелазних метала. Дијаграм на слици 1, као што смо већ рекли, може да се добије применом Hartree-Fock методе на побуђене $4s^1$ односно $3d^1$ конфигурације одговарајућих атома. Међутим, у случају конфигурације $3d^1 4s^2$ атома Sc, један $3d$ електрон се креће у просечном пољу унутрашњих електрона и два $4s$ електрона. Енергија $3d$ орбитале у овој конфигурацији ће бити различита него у конфигурацији $3d^2 4s^1$ или $3d^3 4s^0$, јер, као што смо навели, енергија орбитале зависи од попуњености других орбитала. Такође ће и енергија $4s$ орбитале бити различита за различите конфигурације, за $3d^1 4s^2$ и $3d^2 4s^1$ (за $3d^3 4s^0$ нема смисла да говоримо о енергији $4s$ орбитале јер је енергија орбитале дефинисана само ако се у њој налазе електрони). Стога, за разумевање конфигурације атома прелазних метала, морамо разматрати све ове случајеве, а не само конфигурације $4s^1$ односно $3d^1$ на основу којих је конструисана слика 1.

Енергију орбитале, и електрона у њој, одређују интеракције са језгром, унутрашњим електронима (испод $3d$ и $4s$ поднивоа) и електронима у $3d$ и $4s$ поднивоима.

За случај атома Sc (конфигурације $3d^1 4s^2$), енергије $3d$ и $4s$ орбитала се могу изразити на следећи начин:

$$\varepsilon_{3d} = \omega_{3d} + 0 \cdot rep_{3d,3d} + 2 \cdot rep_{3d,4s}$$

$$\varepsilon_{4s} = \omega_{4s} + 1 \cdot rep_{4s,4s} + 1 \cdot rep_{3d,4s}$$

Једначина 1.

У општем случају, за $3d^p 4s^q$ конфигурацију важи:

$$a) \varepsilon_{3d} = \omega_{3d} + (p-1) \cdot rep_{3d,3d} + q \cdot rep_{3d,4s}$$

а) Пошто атоми главних група елемената немају електроне у $3d$ и у $4s$ орбиталама, није их могуће директно поредити, тј. немогуће је укључити их у једну Слејтерову детерминанту (тако да заједнички минимизују њену енергију), већ је потребно посебно рачунати енергије Слејтерових детерминанти за случај када је електрон у $4s$ односно у $3d$ орбитали. Због овога неки аутори (видети нпр. [2]) доводе у питање овај резултат и сматрају сасвим могућим да је енергија $4s$ орбитала заправо увек виша него енергија $3d$. Конфигурација калијума и калцијума би се у том случају објашњавала на исти начин као и конфигурација прелазних метала у овом раду.

$$b) \epsilon_{4s} = \omega_{4s} + (q-1) \cdot rep_{4s,4s} + p \cdot rep_{3d,4s}$$

Једначина 2.

где су ϵ_{4s} и ϵ_{3d} енергије одговарајућих орбитала, ω_{4s} и ω_{3d} су ефективне енергије валентних 4s односно 3d електрона који се крећу у просечном пољу унутрашњих електрона и језгра; $rep_{3d,3d}$ је просечно одбијање два електрона у 3d поднивоу, $rep_{3d,4s}$ је просечно одбијање када се један електрон налази у 3d поднивоу и један електрон у 4s поднивоу, а $rep_{4s,4s}$ је одбијање два електрона у 4s поднивоу.

Hartree-Fock прорачуни за било коју конфигурацију, било ког прелазног метала показују да је $\epsilon_{4s} > \epsilon_{3d}$. Дакле 4s орбитале увек имају вишу енергију, те редослед орбитала не може објаснити електронске конфигурације и зато је неопходно узети у обзир и међуелектронско одбијање. Треба узети у обзир да је 4s орбитала много већа и дифузнија него 3d орбитале. Због тога се два електрона распоређена у пет 3d орбитала много јаче одбијају него два електрона у 4s орбитали. Из овога следи, а што је потврђено и Hartree-Fock прорачунима да је:

$$rep_{4s,4s} < rep_{4s,3d} < rep_{3d,3d}$$

Једначина 3.

Дакле, енергије орбитала зависе од међуелектронског одбијања које је различито у различитим електронским конфигурацијама. С обзиром да је међуелектронско одбијање веће ако су електрони у 3d орбиталама, следи да 3d орбитале, као и 4s орбитала имају вишу енергију када су електрони у 3d орбиталама. Из једначина 1. и 3. узимајући у обзир и да 4s орбитале имају вишу енергију, за атом Sc енергије 3d и 4s орбитала су различите за различите електронске конфигурације:

$$\begin{aligned} \epsilon_{3d}(3d^1 4s^2) &< \epsilon_{3d}(3d^2 4s^1) < \\ &< \epsilon_{3d}(3d^3 4s^0) < \epsilon_{4s}(3d^1 4s^2) < \\ &< \epsilon_{4s}(3d^2 4s^1) \end{aligned}$$

Једначина 4.

За већину атома прве серије прелазних метала из једначина 2. и 3. следи:

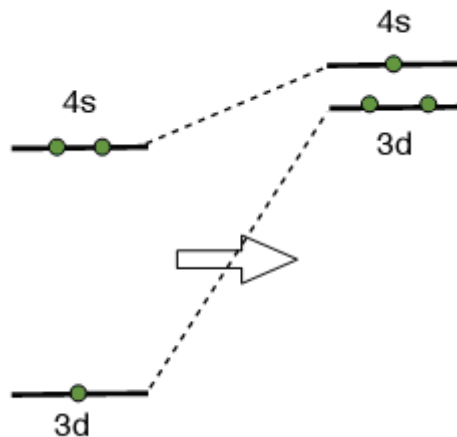
$$\begin{aligned} \epsilon_{3d}(4s^2 3d^n) &< \epsilon_{3d}(4s^1 3d^{n+1}) < \\ &< \epsilon_{3d}(4s^0 3d^{n+2}) < \epsilon_{4s}(4s^2 3d^n) < \\ &< \epsilon_{4s}(4s^1 3d^{n+1}) \end{aligned}$$

Једначина 5.

Енергије и 4s и 3d орбитала расту како се попуњава 3d подниво. Ако се има на уму да је разлика између 4s и 3d орбитала мала, повољније је да електрони буду у вишој 4s орбитали, са мањим међуелектронским одбијањем, него у нижој 3d орбитали са већим међуелектронским одбијањем. Због тога је конфигурација основног стања скандијума $3d^1 4s^2$, а не $3d^2 4s^1$ или $3d^3 4s^0$. И уопште, сви прелазни метали четврте периоде

из истог разлога имају конфигурацију $3d^n 4s^2$ осим атома Ni и Cu, чија је конфигурацију $3d^{n+1} 4s^1$ из разлога које овде нећемо разматрати (за објашњење је потребно разматрати појединачне термове).

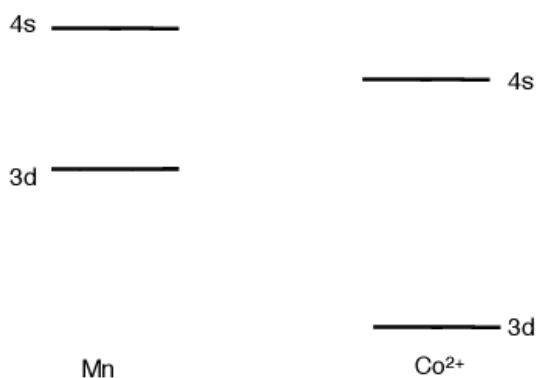
На слици 2. је приказано да је прелазак електрона из 4s у 3d орбиталу енергетски неповољан процес, јер се приликом овог процеса мењају и енергије орбитала, тако да целом систему порасте енергија.



Слика 2. Прелазак електрона из 4s у 3d орбиталу је енергетски неповољан процес јер енергије орбитала не остају исте током овог процеса, већ се мењају услед повећаног међуелектронског одбијања у 3d орбиталама, тако да целом систему порасте енергија.

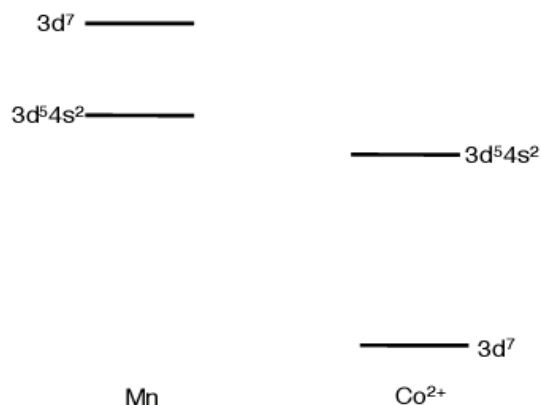
ЕЛЕКТРОНСКА КОНФИГУРАЦИЈА ЈОНА ПРВЕ СЕРИЈЕ ПРЕЛАЗНИХ МЕТАЛА

Најчешће објашњење конфигурације јона прелазних метала које срећемо базира се такође на слици 1. Пошто је 4s орбитала више енергије, електрон ће јонизовати управо из ове орбитале. Ово је формално тачно и може се користити за објашњење јонизације атома прелазних метала и у складу је са Koopmans-овом теоремом, али из тога не можемо да изведемо закључак о самој електронској конфигурацији јона. Ако бисмо на основу чињенице о већој енергији 4s орбитале објашњавали конфигурацију јона, тада бисмо могли да очекујемо да и у неутралном атому електронска конфигурација буде $3d^{n+1} 4s^1$ или $3d^{n+2} 4s^0$. Видели смо да ово није случај, и објаснили разлоге за то. Тачно је, међутим, да M^+ јони прелазних метала имају конфигурацију $3d^n 4s^1$. Поставља се питање због чега је ова конфигурација стабилнија у случају јона, а не $3d^{n-1} 4s^2$ као што бисмо могли да закључимо из нашег досадашњег разматрања о конфигурацијама атома? И за јоне, као и за неутралне атоме важи да је енергија 4s виша од енергије 3d орбитале ($\epsilon_{4s} > \epsilon_{3d}$). Међутим, у случају јона много је веће ефективно наелектрисање језгра које осећају и 4s и 3d орбитале. Због тога енергије 4s и 3d орбитала постају ниже, а разлика у енергији између 4s и 3d орбитала постаје већа. Слика 3 квалитативно приказује енергије 4s и 3d орбитала на примеру изоелектронских атома Mn и јона Co^{2+} .



Слика 3. Квалитативно приказане енергије 4s и 3d орбитала на примеру изоелектронских атома Mn и јона Co^{2+} . У случају јона прелазног метала (Co^{2+}) много је веће ефективно наелектрисање језгра које осећају и 4s и 3d орбитале у односу на ситуацију у неутралном атому (Mn). Енергије орбитала у јону бивају стабилизоване, а њихова разлика постаје већа

Енергетска разлика између 3d и 4s орбитала постаје довољно велика да надвлада веће међуелектронско одбијање у 3d-орбиталама. Упркос већем одбијању електрона у 3d поднивоу, електрони ће бити у 3d-орбиталама, јер би било потребно више енергије да они пређу у 4s орбитале које имају знатно вишу енергију од 3d-орбитала. Прорачуни показују да је ово случај за све M^{+} јоне прелазних метала четврте периоде, те с тога они имају конфигурацију $3d^{n}4s^1$. Релативне енергије конфигурација за атоме и јоне приказане су за пример изоелектронских атома Mn и Co^{2+} јона који могу имати $3d^7$ или $3d^5 4s^2$ конфигурације; Mn атом ће имати нижу енергију са конфигурацијом $3d^5 4s^2$ док ће јон Co^{2+} имати нижу енергију са електронском конфигурацијом $3d^7$ (слика 4).



Слика 4. Релативне енергије конфигурација $3d^7$ и $3d^5 4s^2$ изоелектронских атома Mn и Co^{2+} јона. Mn атом ће имати нижу енергију са конфигурацијом $3d^5 4s^2$ док ће јон Co^{2+} имати нижу енергију са електронском конфигурацијом $3d^7$

ЗАКЉУЧАК

Експериментално одређене конфигурације атома и јона прелазних метала није лако разумети. Електронске конфигурације атома 4s (на пример: Ca $4s^2$) и 3d метала (на пример: Sc $3d^1 4s^2$) указују да се 4s орбитале пр-

во попуњавају, те да су ниже енергије од 3d орбитала. Насупрот томе, електронске конфигурације јона прелазних метала (на пример: Sc $3d^1 4s^0$) указују да се електрони отпуштају из 4s орбитала, што би значило да су 4s орбитале више енергије од 3d орбитала. Ове супротстављене чињенице се могу објаснити на основу квантно механичких прорачуна. Прорачуни указују да 4s орбитале увек више енергије, али и да су разлике у енергији између 4s и 3d орбитала веома мале. Због тога на електронске конфигурације не утичу само енергије орбитала, већ и одбојне интеракције између електрона, међуелектронско одбијање. Међуелектронско одбијање је веће у 3d орбиталама, јер су 3d орбитале мање од 4s орбитала. Ако се узме у обзир да је разлика у енергији између 3d и 4s орбитала мала, а да је одбијање између електрона веће у 3d орбиталама, атом има нижу енергију ако су електрони у 4s орбиталама. Електронске конфигурације јона се могу објаснити на следећи начин. У јонима је веће ефективно наелектрисање језгра, због чега су енергије 3d и 4s орбитала ниже. За објашњење електронских конфигурација јона је битно да је услед већег ефективног наелектрисања у јонима разлика у енергији између 3d и 4s орбитала већа него у атомима, па је јонима енергија 3d орбитала значајно нижа од енергије 4s орбитала. Стабилизација услед мањег међуелектронског одбијања у 4s орбиталама није довољна да надокнади велику разлику у енергији између 3d и 4s орбитала, па су код јона електрони у 3d орбиталама.

Abstract

EXPLANATION OF ELECTRONIC CONFIGURATIONS OF TRANSITION METAL ATOMS AND IONS

Ivica MILOVANOVIĆ, Texas A&M University, USA
Snežana ZARIĆ, Faculty of Chemistry, Belgrade

Electronic configurations of transition metal atoms and ions are unexpected and confusing. These electronic configurations can not be explained on the basis of electrons filling orbitals, starting from the energy lowest orbitals and going to energy higher orbitals, as is the case of all other elements in the periodic table. Unusual behavior of transition metal atoms and ions is discussed in this article. The behavior is a result of similar energy of s and d orbitals in transition metal atoms, causing that electronic configuration does not depend only on the energy of s and d orbitals, but also on electron-electron repulsion.

ЛИТЕРАТУРА

1. Atkins P.; Friedman R. *Molecular Quantum Mechanics*, 4th ed.; Oxford University Press: Oxford, 2005.
2. Pilar F.L. *Elementary Quantum Chemistry*; Dover Publications Inc.: New York, 2001.
3. Cotton, F.A.; Wilkinson, G. *Advanced Inorganic Chemistry*, 6th ed.; Wiley-Interscience, 1999.
4. Vanquickenborne, L.G.; Pierloot K.; Devoghel D. *J. Chem. Educ.* **1994**, 71, 469
5. Scerri, E.R. *J. Chem. Educ.* **1992**, 69, 602
6. Claydon, C. R.; Carlson, K. D. *J. Chem. Phys.* **1968**, 49, 1331
7. Carton, T.S. *J. Chem. Educ.* **1979**, 56, 767
8. Vanquickenborne, L.G.; Pierloot K.; Devoghel D. *Inorg. Chem.* **1989**, 28, 1805
9. Pilar F.L. *J. Chem. Educ.* **1978**, 55, 3
10. Pilar F.L. *J. Chem. Educ.* **1979**, 56, 767
11. Brink C.P. *J. Chem. Educ.* **1991**, 88, 376.