

I. ÜNİTE: MODERN ATOM TEORİSİ

ATOMUN KUANTUM MODELİ

Bilim insanları atomu anlamak için araştırmalar yapmış, araştırmaları sonucunda çeşitli modeller geliştirmişlerdir. Bu modellerden biri olan Bohr atom modelinde elektronlar belirli yarıçaplı yörüngelerde bulunur. Modern atom kuramında ise elektronun bulunma ihtimalinin yüksek olduğu bölgeler vardır. Bu bölgelere orbital (dalga fonksiyonu) denir. Elektronun bulunma ihtimalinin yüksek olduğu bölgelerin sayılarının ve bu bölgelerde bulunan elektronların belirlenmesinde kuantum sayıları kullanılır.

Elektronun enerji düzeyine ve elektronun çekirdeğe olan ortalama uzaklığına bağlı olarak değişen kuantum sayısına baş (birincil) kuantum sayısı denir ve n ile gösterilir. Pozitif tam sayı değerlerini alır. Enerji düzeyleri kabuk olarak da adlandırılır. Enerji düzeyleri harflerle ($n=K, L, M, N...$) ya da sayılarla ($n=1, 2, 3, 4...$) ifade edilir.

Orbitalin şeklini ve bir enerji düzeyinde kaç tane alt enerji düzeyi olduğunu veren kuantum sayısına açısall momentum (ikincil-yan) kuantum sayısı denir ve ℓ ile gösterilir. Açısall momentum kuantum sayısı, enerji düzeylerinin de alt enerji düzeyine ayrıldıklarını gösterir ve ℓ sıfırdan $n-1$ 'e kadar olan tüm değerleri alır. $\ell=0, 1, 2, \dots, (n-1)$ Açısall momentum kuantum sayısı ve karşılık gelen orbital türü aşağıdaki şekildedir.

Açısall Momentum Kuantum Sayısı (ℓ)	0	1	2	3
Orbital Türü	s	p	d	f

Orbitaler farklı şekillerde bulunur ve manyetik alanda s orbitali hariç çeşitli yönelişlere sahiptir. Alt enerji düzeyinde kaç tane orbital olduğunu gösteren kuantum sayısına manyetik kuantum sayısı denir ve m_ℓ ile gösterilir. m_ℓ sıfır da dâhil olmak üzere $-\ell$ ile $+\ell$ arasındaki bütün tam sayı değerlerini alabilir. Verilen ℓ değeri için $m_\ell=2\ell+1$ alt orbital sayısını verir.

Elektronun kendi eksenini etrafında dönme hareketi spin olarak adlandırılır ve elektron 2 spine sahiptir. Elektronun saat yönünde ($+1/2$) veya ters yönde ($-1/2$) hareketi ile belirli bir hızda döndüğü düşünülebilir. Bu durum spin kuantum sayısı ile ifade edilir ve m_s ile gösterilir.

PERİYODİK SİSTEM VE ELEKTRON DİZİLİMLERİ

Elementlerin elektron dizilimi belli kurallara göre yapılır.

Hund Kuralı: Elektronlar eş enerjili orbitallere doldurulurken önce aynı spinli olacak şekilde birer birer yerleştirilir. Daha sonra elektron sayısı zıt spinli olacak şekilde ikiye tamamlanır. Kısaca elektronlar, orbitallere doldurulurken var olan elektronlarla eşleştirilmeden önce eş enerjili orbitaler yarı dolu olacak şekilde doldurulur.

Pauli İlkesi: Pauli İlkesi, bir atomda iki elektronun aynı 4 kuantum sayısına sahip olamayacağını belirtir çünkü 4 kuantum sayısının aynı olması tek bir elektronu ifade eder. Başka bir ifadeyle n, ℓ, m_ℓ değerleri aynı olsa bile m_s değeri farklı olmalıdır. Pauli İlkesi'ne göre bir orbital en fazla 2 elektron alabilir.

Aufbau Kuralı: Atomdaki elektronlar orbitallere Aufbau Kuralı'na göre doldurulur. Bir atomun çevresindeki elektronlar orbitallere düşük enerjili orbitalden yüksek enerjili orbitale doğru yerleştirilir.

Elektron diziliminde en yüksek enerji düzeyindeki orbitallere değerlik orbitali, değerlik orbitallerinde bulunan elektrona değerlik elektronu denir. Değerlik elektronları en yüksek enerji düzeyindeki elektronlar olduğundan atom çekirdeğinin çekim gücünden daha az etkilenir. Tepkimeye katılan, kimyasal bağ oluşturan; bağ oluşturmak için alınan, verilen, ortaklaşa kullanılan elektronlar değerlik elektronlarıdır.

Bu nedenle aynı değerlik elektron sayısına sahip olan elementler, benzer kimyasal özellikleri gösterir. Periyodik sistem bu özellikler göz önünde bulundurularak düzenlendiği için elementin değerlik elektronunun sayısı periyodik sistemdeki grup numarasını verir. Elementlerin bulunduğu en yüksek enerji düzeyi ise periyodik sistemdeki periyodunu belirtir. Elektron dizilimindeki en son orbital türü elementin periyodik cetveldeki blokunu belirtir. Elektron dizilimindeki son orbital s ise s blok, p ise p blok, d ise d blok, f ise f blok elementi olduğunu gösterir. Aynı zamanda elektron dizilimi s veya p ile bitiyorsa A grubu, d ile bitiyorsa B grubu, f ile bitiyorsa elementin lantanit-aktinit serisinde olduğu anlaşılır.

PERİYODİK ÖZELLİKLER

Atomik yarıçap genellikle atom çekirdeğinden en dış katmandaki elektrona olan uzaklık olarak tanımlanabilir. Elektronlar bulunma ihtimalinin yüksek olduğu bölgelerde bulunur. En dıştaki elektronun yeri tam olarak belirlenemediği için atom çekirdeğinden en dış katmandaki elektrona olan uzaklığın saptanması mümkün değildir. Bu nedenle atom yarıçapı, bağlı iki atom çekirdeği arasındaki mesafeden yararlanılarak ölçülür. Dolayısıyla atomların yarıçapları, yaptıkları bağlarla belirlenir.

Kovalent Yarıçap: İki atom arasında kovalent bağ oluşuyorsa kovalent yarıçap belirlenebilir. Aynı elementin iki atomu kovalent olarak bağlandığında her bir atom, elektronları eşit şekilde çeker. Kovalent yarıçap (aynı iki atom bağlı ise) iki atom çekirdeği arasındaki mesafenin yarısıdır.

Van der Waals Yarıçapı: Soy gazlar yüksek basınç ve düşük sıcaklıkta katı hâle gelir. Van der Waals yarıçapı, apolar moleküller ve soy gazların katı hâle geçerken aralarında oluşan etkileşimlerden yararlanılarak hesaplanır. Van der Waals yarıçapı birbirine bağlı olmayan iki atomun en yakın çekirdekleri arasındaki uzaklığın yarısıdır.

İyonik Yarıçap: Bir iyonik bileşiğin fiziksel ve kimyasal özellikleri iyonların yarıçapı (büyüklüğü) ile ilgilidir çünkü nötr bir atom iyon hâline geçtiğinde yarıçapı değişir. İyonik yarıçap, iyonik bağlı bileşikteki bir iyonun yarıçapıdır. İyonik bağlı bileşiklerde iyonlar aynı büyüklükte değildir. Bu nedenle iyon yarıçapı iyonlar arasındaki uzaklığın yarısı değildir. Çekirdekler arasındaki uzaklık katyon ve anyon arasında uygun şekilde paylaştırılarak ayrı ayrı hesaplanır.

ATOM VEYA İYON YARIÇAPI: Periyodik sistemde aynı grupta yukarıdan aşağıya doğru atom yarıçapı artar çünkü yukarıdan aşağıya doğru atomun elektron diziliminde baş kuantum sayısı ve katman sayısı artar. Aynı periyotta soldan sağa doğru baş kuantum sayısı değişmez. Elektronlar aynı enerji seviyesine yerleştiği hâlde proton sayısı (çekirdek yükü) arttığı için çekirdeğin değerlik elektronlarının çekim gücü artar. Atom yarıçapı genellikle küçülür.

METALLİK VEYA AMETALLİK ÖZELLİĞİ: Metaller elektron verme eğilimi yüksek olan elementlerdir. Elektron verme eğilimi atom yarıçapı büyüdükçe artar. Atom yarıçapı büyüdükçe değerlik elektronları çekirdekten uzaklaşır. Elektron çekirdekten uzaklaştıkça elektron başına düşen çekim kuvveti azalır, elektron vermek kolaylaşır, metalik aktiflik artar.

Periyodik sistemde aynı grupta yukarıdan aşağıya doğru atom çapı arttığı için metalik aktiflik de artar.

Ametaller son enerji düzeyinde genellikle 4, 5, 6 ya da 7 elektron bulunduran ve elektron alma eğilimi yüksek olan elementlerdir. Elektron alma eğilimi atom yarıçapı küçüldükçe artar. Bir elementin yarıçapı ne kadar küçük olursa aldığı elektronlar da çekirdek tarafından o kadar kolay çekilir, elektron alma eğilimi ve ametallik özelliği artar.

Periyodik sistemde aynı periyotta soldan sağa doğru atom yarıçapı azaldığı için ametallik özellik artar. Aynı grupta yukarıdan aşağıya doğru atom yarıçapı büyüdüğü için ametallik özellik azalır.

Periyodik sistemde aynı grupta yukarıdan aşağıya doğru atom çapı arttığı için metalik aktiflik artar, ametallik aktiflik azalır.

Aynı periyotta soldan sağa doğru atom yarıçapı genellikle azaldığı için metalik özellik azalır, ametallik özellik artar.

İYONLAŞMA ENERJİSİ: Temel hâldeki nötr bir gaz atomundan bir elektronun uzaklaştırılması için gerekli olan minimum enerjiye **iyonlaşma enerjisi** denir.

Periyodik sistemde aynı grupta yukarıdan aşağıya doğru inildikçe atom yarıçapı artarken iyonlaşma enerjisi azalır. Periyodik sistemde aynı periyotta sağa doğru gidildikçe atom yarıçapı küçülür. Bu nedenle iyonlaşma enerjisi genellikle artar. 2A grubu (toprak alkali metalleri) ve 5A grubu (azot grubu) elementleri için iyonlaşma enerjisinde sapmalar olduğu gözlenmektedir. Periyodik cetvelde aynı periyotta soldan sağa doğru giderken 1. iyonlaşma enerjisi değişimi şu şekilde olur: $1A < 3A < 2A < 4A < 6A < 5A < 7A < 8A$

ELEKTRON İLGİSİ: Gaz hâldeki bir atomun bir elektron alması sırasında oluşan enerji değişimine denir. Periyodik sistemde aynı periyotta soldan sağa doğru gidildikçe (8A hariç) elektron ilgisi genellikle artar. Aynı grupta yukarıdan aşağıya inildikçe elektron ilgisi genellikle azalır.

ELEKTRONEGATİFLİK: Elektronegatiflik bir atomun kimyasal bağdaki elektronları kendine doğru çekme yeteneğinin ölçüsüdür. Periyodik sistemde aynı periyotta soldan sağa doğru gidildikçe elektronegatiflik artar. Aynı grupta yukarıdan aşağıya doğru inildikçe elektronegatiflik azalır.

OKSİT VE HİDROKSİT BİLEŞİKLERİNİN ASİT VE BAZLIK ÖZELLİĞİ: Elementlerin oksijenle yaptıkları bileşikler bazik oksit, asidik oksit, amfoter oksit ve nötr oksit olarak sınıflandırılabilir.

Amfoter metaller hariç, metallerin oksitlerinin sulu çözeltisi bazik karakter gösterir.

Ametal oksitlerinin genellikle oksijence zengin olanlarına (ametal atomu sayısından daha fazla oksijen atomu içeren CO_2 , N_2O_5 vb.) asidik oksit denir.

Ametal oksitlerinin genellikle oksijence fakir olanlarına (ametal atomu sayısına eşit veya daha az oksijen atomu içeren CO , NO , N_2O vb.) nötr oksit de denir.

Amfoter metallerin (Zn , Pb , Cr , Be , Sn , Al) oksitleri de amfoter özellik gösterir. Asitlere karşı baz, baza karşı asit gibi davranır.

Periyodik sistemde **oksitlerin ve hidroksitlerin** soldan sağa bazik özelliği azalır (asidik özelliği artar) yukarıdan aşağıya bazik özelliği artar (asidik özelliği azalır).

YÜKSELTGENME BASAMAKLARI VE ELEKTRON DİZİLİMLERİ

Ametaller metallerle oluşturdukları bileşiklerde elektron alarak anyon hâline gelir. Ancak ametaller kovalent bağla oluşturdukları bileşiklerde NaCl bileşiğinde olduğu gibi net bir yüke sahip değildir. Çünkü kovalent bağlı bileşiklerde elektron alışverişi değil, elektronların ortaklaşa kullanımı vardır. Bu nedenle iyon yükü yerine yükseltgenme basamağı daha uygundur.

Bir atomun moleküldeki veya iyonik bileşikteki yük sayısına **yükseltgenme basamağı (yükseltgenme sayısı)** denir. İyon yükü sadece iyonik bileşikte bulunan iyonların yükü için kullanılabilir. Atomların bileşiklerinde alabileceği yükseltgenme basamakları elektron dizilimi ile ilgilidir.

Elektron dizilimi ns^1 şeklinde sonlanan H hariç 1A grubu elementleri ve geçiş metallerinden Ag'nin yükseltgenme basamağı yalnızca $1+$ 'dir. H'nin yükseltgenme basamağı genellikle $1+$ 'dir. Fakat metallerle oluşturduğu hidrür bileşiklerinde 1- yükseltgenme basamağını alır.

Elektron dizilimi ns^2 şeklinde sonlanan 2A grubu metalleri ve Zn'nun yükseltgenme basamağı $2+$ 'dir.

Elektron dizilimi $ns^2 np^1$ şeklinde sonlanan 3A grubu elementlerinin yükseltgenme basamağı $3+$ 'tür.

Elektron dizilimi $ns^2 np^2$ şeklinde sonlanan 4A grubu metalleri p orbitalindeki 2 elektronunu vererek $2+$, değerlik elektronlarının tamamını vererek $4+$; gruptaki ametaller ise $4-$ ile $4+$ arasındaki değerlerde yükseltgenme basamağında bulunabilir.

Elektron dizilimi $ns^2 np^3$ şeklinde sonlanan 5A grubu metalleri p orbitalindeki 3 elektronunu vererek $3+$, değerlik elektronlarının tamamını vererek $5+$; gruptaki ametaller ise 3 elektron alarak $3-$ yükseltgenme basamağında bulunabilecekleri gibi $3-$ ile $5+$ arasındaki yükseltgenme basamağı değerlerini alabilir.

Elektron dizilimi $ns^2 np^4$ şeklinde sonlanan 6A grubu, p orbitalindeki 4 elektronunu vererek $4+$, değerlik elektronlarının tamamını vererek $6+$; gruptaki ametaller ise ayrıca 2 elektron alarak $2-$ yükseltgenme basamağında bulunabilir. O'nin yükseltgenme basamağı genellikle $2-$ 'dir. Oksijen 1A ve 2A grubu elementleriyle oluşturduğu peroksitlerde (H_2O_2 , Na_2O_2 , K_2O_2 , MgO_2 , CaO_2 ,...) 1- ve florla oluşturduğu OF_2 bileşiğinde $2+$ yükseltgenme basamağındadır.

Elektron dizilimi $ns^2 np^5$ şeklinde sonlanan 7A grubu, p orbitalindeki 5 elektronunu vererek $5+$, değerlik elektronlarının tamamını vererek $7+$ değerlik alabilir. F hariç gruptaki ametaller 1- ile $7+$ arasında yükseltgenme basamağında bulunabilir. F bütün bileşiklerinde 1- yükseltgenme basamağındadır. Diğer 7A grubu elementlerinin (Cl, Br, I gibi) yükseltgenme basamağı genellikle $1-$ 'dir. Ancak 1- ile $7+$ arasında yükseltgenme basamağı da görülür.

K, Mg, Al, Cl_2 , O_2 , O_3 , P_4 , S_8 gibi serbest element durumunda bileşik yapmamış her bir atomun yükseltgenme basamağı 0'dır. Örneğin Cl_2 molekülündeki iki Cl atomu da 0 yükseltgenme basamağına sahiptir.

Tek atom içeren iyonlarda atomun yükseltgenme basamağı iyon yüküne eşittir. Örneğin K^+ iyonu $1+$, Mg^{2+} iyonu $2+$, O^{2-} iyonu $2-$, N^{3-} iyonu $3-$ yükseltgenme basamağına sahiptir.

Çok atomlu iyonlarda atomların yükseltgenme basamakları toplamı iyon yüküne eşittir. Örneğin SO_4^{2-} iyonundaki atomların yükseltgenme basamakları toplamı $2-$ 'dir. Oksijenden gelen yük $4(-2) = -8$ 'dir. Toplam yükün $2-$ olabilmesi için S atomunun yükü $6+$ olmalıdır.

Bileşiklerde atomların yükseltgenme basamakları toplamı 0'dır. Örneğin SO_3 bileşiğindeki atomların yükseltgenme basamakları toplamı 0'dır. Oksijenden gelen yük $3(-2) = -6$ 'dır. Toplam yükün 0 olabilmesi için S atomunun yükü $6+$ olmalıdır.