

Atomok elektronszerkezete

Az atomok elektronállapotát leíró fizikai mennyiségek

Nemrelativisztikus eset

Hamilton operátor

Tekintsünk egy Z töltésű M tömegű atommagot és N elektront tartalmazó atomot. A Hamilton operátor nemrelativisztikus közelítésben:

$$H' = T'_n + T'_e + V'_{ee} + V'_{ne}$$

A magok és elektronok kinetikai energia operátora

$$T'_n = -\frac{1}{2} \frac{\Delta'_n}{M} \quad T'_e = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \Delta'_i,$$

ahol Δ'_n a mag, az Δ'_i az elektron koordinátákra ható Laplace operátor. Az elektron-elektron és a mag-elektron kölcsönhatás potenciális energia operátora

$$V'_{ee} = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{1}{r'_{ij}} \quad V'_{ne} = - \sum_{i=1}^N \frac{Z}{r'_{ni}},$$

ahol $r'_{ij} = |\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_j|$ az elektron koordináták különbségének abszolút értéke, $r'_{ni} = |\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_n|$ az elektron és magkoordináta különbségek abszolút értéke. Az elektronátmenetek szempontjából érdektelen a rendszer haladó mozgása ezért ezt válasszuk le. Rögzítjük a koordináta rendszerünk origóját a maghoz. Ez az alábbi koordináta transzformációt jelenti

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}'_i - \mathbf{r}_n.$$

Az új koordinátákban a potenciális energia alakja változatlan marad (csak a vesszőt kell elhagyni), mivel csak a koordináta különbségektől függ. Ugyanez igaz a mag kinetikai energiára is. Az elektron kinetikai energia viszont módosul

$$\begin{aligned} T_n &= -\frac{1}{2} \frac{\Delta_n}{M} \\ T_e &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \Delta_i - \frac{1}{2M} \sum_{i=1}^N \Delta_i - \frac{1}{2M} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \nabla_i \nabla_j. \end{aligned}$$

Ezzel a teljes Hamilton operátor

$$H = H_K + H_B$$

alakú, ahol

$$\begin{aligned} H_K &= T_n = -\frac{1}{2M} \Delta_n \\ H_B &= T_e + V_{ee} + V_{ne} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \Delta_i - \frac{1}{2M} \sum_{i=1}^N \Delta_i - \frac{1}{2M} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \nabla_i \nabla_j + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^N \frac{Z}{r_{ni}}. \end{aligned}$$

A Hamilton operátornak ez az alakja lehetővé teszi a mag mozgásának leválasztását. Ugyanis a

$$(H_K + H_B) \Psi = E \Psi$$

sajátérték egyenlet megoldását kereshetjük szorzat alakban $\Psi = \Phi g(\mathbf{r}_n)$, ahol Φ csak az elektron g csak a magkoordinátától függ. Beírva a sajátérték egyenletbe

$$\begin{aligned}(H_K + H_B)\Phi g &= E\Phi g \\ (H_K g)\Phi + (H_B\Phi)g &= E\Phi g.\end{aligned}$$

Φg -vel való osztás után

$$\frac{H_K g}{g} + \frac{H_B \Phi}{\Phi} = E.$$

Ez csak úgy teljesülhet, ha mindkét tag konstans, azaz

$$\frac{H_K g}{g} = E_K \quad \frac{H_B \Phi}{\Phi} = E_B$$

és $E = E_K + E_B$. Ebből

$$H_K g = E_K g \quad H_B \Phi = E_B \Phi.$$

A mag mozgását leíró egyenlet

$$-\frac{1}{2} \frac{\Delta_n}{M} g = E_K g,$$

aminek a megoldása egy síkhullám

$$g(\mathbf{r}_n) = e^{i\mathbf{p}_n \mathbf{r}_n},$$

ahol $\mathbf{p}_n$ a mag impulzusa. Ez lesz az az energia járulék, ami a spektrum vonalak gázokban megfigyelhető kinetikai kiszélesedését írja le.

A H_B második és harmadik tagja eltűnik, ha a mag áll vagy tömegét végtelennek vesszük. A továbbiakban ettől a két tagtól eltekintünk

$$H_B \approx -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{1}{r'_{ij}} - \sum_{i=1}^N \frac{Z}{r'_{ni}}.$$

Megmaradó mennyiségek

Amint azt láttuk a kvantummechanika kurzus során az állapottér egy bázisát a megmaradó mennyiségek segítségével jelöljük ki. Ha a megmaradó mennyiségeket úgy választjuk ki, hogy azok sajátértékei egyértelműen azonosítják az állapottér egy elemét akkor felcserélhető operátorok teljes rendszeréről beszélünk (az angol rövidítés alapján CSCO). Megmaradó mennyiségeknek azokat a fizikai mennyiségeket nevezzük, amelyek operátora felcserélhető a Hamilton operátorral. Keressük meg, hogy egy atom esetében melyek ezek a fizikai mennyiségek.

- Teljes pályamomentum

Az egyes elektronok pályamomentuma ($\mathbf{l}_i = \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i$) nem cserélhető fel H_B -vel de

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N \mathbf{l}_i$$

már igen. Ehhez az alábbi kommutátorok eltűnését kell belátni:

$$[\mathbf{p}_i^2, \mathbf{l}_i] = 0, \quad \left[\mathbf{l}_i, \frac{1}{r_i} \right] = 0, \quad \left[\sum_{i=1}^N \mathbf{l}_i, \frac{1}{r_{ij}} \right] = 0.$$

- Teljes spin

$$S = \sum_{i=1}^N \mathbf{s}_i$$

- Teljes impulzusmomentum

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

- Paritás

A koordináta inverzióval szembeni viselkedés. A Hamilton operátor érzéketlen az $\mathbf{r} \iff -\mathbf{r}$, így a paritás operátor felcserélhető a H_B -vel.

Relativisztikus eset

A tapasztalat szerint elsősorban a nagyobb rendszámú elemek esetében igen jelentős relativisztikus hatások jelennek meg. Ezek közül mi csak a spin pálya kölcsönhatással foglalkozunk.

Kvantummechanika tanulmányainkból tudjuk hogy az elektronok saját impulzusmomentummal, spinnel ($\mathbf{s}$) rendelkeznek), amelyhez mágneses momentum ($\mathbf{m}_s$) társul. Ennek nagysága

$$\mathbf{m}_s = g_e \gamma_e \mathbf{s},$$

ahol $g_e = 2.002319314$ az ú.n. *g-faktor*, $\gamma_e = -e/2m$ az ú.n. *giromágneses arány*, e , m az elektron töltés és tömeg. Szintén megtanultuk, hogy a mozgó töltött részecske mágneses teret kelt. Az $\mathbf{l}$ impulzusmomentumú pályán lévő elektronhoz tartozó mágneses momentum $\mathbf{m} = \gamma_e \mathbf{l}$. Természetes a gondolat, hogy ez a két mágneses momentum egymással kölcsönhat. A Dirac egyenlet alapján a Φ potenciál térben mozgó elektron spin-pálya kölcsönhatás operátora

$$H^{SO} = \xi(r) \mathbf{s} \mathbf{l}$$

ahol

$$\xi(r) = -\frac{e}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r},$$

c a fénysebesség.

Z rendszámú hidrogénszerű ion esetében a $\Phi = Ze/4\pi\epsilon_0 r$, amivel

$$\xi(r) = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 m^2 c^2} \frac{1}{r^3}.$$

A spin-pálya kölcsönhatás nagyságát elsőrendű perturbáció számítás segítségével kaphatjuk meg. Legyen a teljes Hamilton operátorunk

$$H = H_0 + H^{SO},$$

és legyen H_0 a perturbálatlan probléma Hamilton operátora. Amint tudjuk a H_0 , E_n energia sajátértékei degeneráltak (n a főkvantumszám), így az elsőrendű energia korrekciók a degenerált perturbációszámítás szabályai szerint a

$$\det(H_{ij}^{SO} - E_n^{(1)}) = 0$$

szekuláris egyenletből adódnak, ahol

$$H_{ij}^{SO} = \langle \psi_{ni} | H^{SO} | \psi_{nj} \rangle.$$

ψ_{ni} az E_n degenerált sajátértékhez tartozó i -edik sajátállapot. Könnyen belátható, hogy H^{SO} felcserélhető az $\mathbf{s}^2$ és $\mathbf{l}^2$ operátorokkal de nem felcserélhető az s_z l_z -vel. Viszont felcserélhető a $\mathbf{j}^2$, j_z operátorokkal ($\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$). Célszerű bázisnak választani az $\mathbf{l}^2, \mathbf{s}^2, \mathbf{j}^2, j_z$ operátorok közös sajátállapotait ($|lsjm\rangle$) mert ebben (a felcserélhetőségek miatt) a H_{ij}^{SO} mátrix diagonális és közvetlenül az energia korrekciókat kapjuk.

Használjuk ki, hogy

$$\mathbf{j}^2 = \mathbf{l}^2 + \mathbf{s}^2 + 2\mathbf{s} \mathbf{l}$$

amiből

$$\mathbf{s} \mathbf{l} = \frac{1}{2} (\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2).$$

Ezzel

$$\begin{aligned}\mathbf{s}\mathbf{l}|lsjm\rangle &= \frac{1}{2}(\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2)|lsjm\rangle \\ &= \frac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]|lsjm\rangle.\end{aligned}$$

Így az integrálunk az alábbi formára egyszerűsödik

$$\langle lsjm|\xi(r)\mathbf{s}\mathbf{l}|lsjm\rangle = \frac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\langle lsjm|\xi(r)|lsjm\rangle.$$

Az utolsó integrálban csak a radiális részre kell integrálnunk

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \xi(r) R_{nl}^2 r^2 dr &= \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 m^2 c^2} \int_0^\infty \frac{1}{r} R_{nl}^2 dr \\ &= \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 m^2 c^2} \frac{(Z/a_0)^3}{n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me}\end{aligned}$$

Így

$$\begin{aligned}E_n^{(1)} &= E^{SO} = \frac{Z^4 e^2}{16\pi\epsilon_0 a_0^3 m^2 c^2} \frac{[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]}{n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \\ &= \alpha^2 Z^4 \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^3 c} \frac{[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]}{n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)},\end{aligned}$$

ahol

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137.03604}$$

a *finomszerkezeti állandó*. Látható hogy a spin-pálya kölcsönhatáshoz tartozó energia a magtöltés (rendszám) negyedik hatványával arányos és fordítva arányos a főkvantumszám köbével. Bár a fenti korrekció indefinit $l=0$ esetben, részletesebb megfontolásokból látható, hogy ez a kifejezés eltűnik $l=0$ esetben. Azaz s-pálya esetén nincs spin pálya kölcsönhatás.

Több elektront tartalmazó atomok esetében a spin-pálya kölcsönhatás operátora

$$H^{SO} = \sum_i \tilde{\xi}(r_i) \mathbf{s}_i \mathbf{l}_i$$

alakú lesz, ahol $\tilde{\xi}(r_i)$ alakja eltér a fent látottól. Ha a többi relativisztikus járulék elhanyagolható akkor a Hamilton operátor

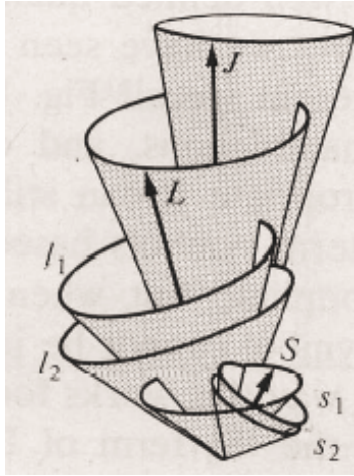
$$H_R = H_B + H^{SO}$$

alakú lesz. Ez az operátor már nem cserélhető fel az $\mathbf{L}$ és $\mathbf{S}$ operátorokkal, de a $\mathbf{J}^2$ -vel és J_z -vel igen. Így a megmaradó mennyiségek a $H, \mathbf{J}^2, J_z$ és p .

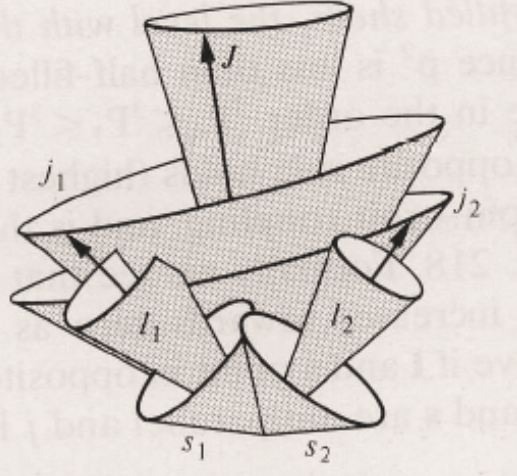
Csatolási sémák

Ha az atomunk kis rendszámú akkor a relativisztikus korrekciók elhanyagolhatóak. Ebben az esetben, ahogy azt láttuk a Hamilton operátorral felcserélhető (megmaradó mennyiségek) $\mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{S}^2, S_z, p$, vagy $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, p$. Ahol $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Hagyományosan az impulzusmomentum klasszikus modelljére alapozva ezt *Russel-Saunders* vagy *LS csatolásnak* nevezik. Az elnevezés arra utal, hogy az elektronok pályamomentumai eredő pályamomentummá, spinjei eredő spinné csatolódnak (adódnak) össze és a teljes impulzusmomentum ennek a két mennyiségnek a csatolódásából áll elő.

Relativisztikus esetben a H -val a $\mathbf{J}^2, J_z$ és p cserélhető fel. Az iménti terminológiát követve: az elektronok pálya és spinmomentuma eredő $\mathbf{j}$ impulzusmomentummá csatolódik össze majd ezek az eredő $\mathbf{J}$ -vé. Ezt hívjuk *jj* csatolásnak.



Az LS csatolás vektor sémája



A jj csatolás vektor sémája

Az atomok elektronállapotainak osztályozása

Az atom elektronállapotait a megmaradó mennyiségekhez tartozó kvantumszámok alapján osztályozzuk.
Nemrelativisztikus esetben (LS csatolás) ezek:

- A teljes pályamomentum mégyzetének ($\mathbf{L}^2$) sajátértékeire ($L(L+1)$) az alábbi elnevezéseket vezetjük be

$$\begin{array}{cccccc} L: & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & \dots \\ & S & P & D & F & G & \end{array}$$

- A teljes pályamomentum z -komponenséhez (L_z) tartozó sajátértékek (M) adott L esetén

$$M: -L, -L+1, \dots, L-1, L \quad \text{összesen: } 2L+1 \text{ db}$$

- A teljes spinmomentum négyzetének ($\mathbf{S}^2$) sajátértékeire ($S(S+1)$)

$$S: 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

- A teljes spinmomentum z -komponenséhez (S_z) tartozó sajátértékek (M_s)

$$M_s: -S, -S+1, \dots, S-1, S \quad \text{összesen: } 2S+1 \text{ db}$$

A $\mathbf{J}^2$ sajátértékei ($J(J+1)$) az impulzusmomentum összeadás szabályai szerint:

$$J: L+S, L+S-1, \dots, |L-S|$$

Ha $L \geq S$ akkor J $2S+1$ különböző értéket vehet fel, ha $L \leq S$ akkor $2L+1$ -et. Ennek megfelelően az állapot jelölése

$$|\alpha, L, S, M, M_s, p\rangle \quad \text{vagy} \quad |\alpha, L, S, J, M_J, p\rangle$$

lesz. Az α szolgál azon állapotok megkülönböztetésére, amelyek esetében a többi kvantumszám megegyezik. Nemrelativisztikus esetben és külső tér hiányában az energia nem függ a J, M_J (vagy M, M_s) értékektől, a sajátértékek $(2L+1)(2S+1)$ -szeresen degeneráltak. Relativisztikus esetben és külső tér jelenlétében ez a degeneráció felhasad, a különböző J -hez tartozó nívók szétválnak. Ezt nevezzük *finomszerkezetnek*. Az adott L, S -hez de különböző J -het tartozó nívókat multipletteknek nevezzük. A multiplettekhez tartozó nívók száma $2L+1$ vagy $2S+1$. A $2S+1$ -et szokás *multiplicitásnak* nevezni.

Relativisztikus esetben (jj) csatolás

- A teljes impulzusmomentum négyzetének ($\mathbf{J}^2$) sajátértékei ($J(J+1)$)

$$J: \quad 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad \dots$$

- A teljes impulzusmomentum z -komponenséhez (J_z) tartozó sajátértékek (M_J) adott L esetén

$$M_J: \quad -J, \quad -J+1, \quad \dots, \quad J-1, \quad J \quad \text{összesen: } 2J+1 \text{ db}$$

Atomi termek

Az Hamilton operátorának sajátérték problémáját megoldva rendelkezésünkre állnak az atom stacionárius állapotai és a hozzá tartozó energia nívók. A spektroszkópiában használatos elnevezést átvéve ezeket az energia nívókat *atomi termeknek* nevezzük (cm^{-1} egységekben). A spektrumvonalakhoz tartozó hullámszámot ($\tilde{\nu}$) két ilyen term (T_1, T_2) különbségeként kapjuk meg.

$$\tilde{\nu} = T_1 - T_2.$$

Az alábbiakban az átmenetek jelölésére a következő konvenciót vezetjük be: a $T_1 \longrightarrow T_2$ emissziót, a $T_1 \longleftarrow T_2$ abszorpciót jelöl, azaz az elől álló term energiája a nagyobb. Korábban láttuk, hogy melyek azok a megmaradó mennyiségek, amelyekkel egy stacionárius állapotot címkézhetünk. Az atomi energianívók megkülönböztetésére is ezeket a mennyiségeket használjuk. Nevezetesen egy atomi termék jelölésére az alábbi szimbólumot használjuk

$$^{2S+1}L_J^{\text{paritás}}.$$

Itt L a teljes pályamomentum (betűjelével adva), J a teljes impulzusmomentum, S a teljes spin. A $2S+1$ az ún. multiplicitás.

Atomok tárgyalása függetlenszecske közelítésben

Egy sokelektronos atom Hamilton operátora:

$$\hat{H} = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} - \sum_a \frac{Z_a}{r_{ia}} \right] + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}},$$

Ez a Hamilton operátor (mint azt már láttuk a HF módszernél) közelíthető egyrészesecske operátorok összegével, ha az elektronok kölcsönhatását valamilyen átlagolt potenciállal helyettesítjük:

$$\sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \longrightarrow \sum_i v(i).$$

Ekkor a Hamilton operátorunk

$$\hat{H}_{\text{független}} = \sum_i h(i)$$

alakú lesz, ahol

$$h(i) = \frac{p_i^2}{2m} - \sum_a \frac{Z_a}{r_{ia}} + v(i)$$

A független részesecske Hamilton operátor sajátérték problémájának megoldását kereshetjük antiszimmetrizált szorzat alakban (Slater determináns). A

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \hat{A}[\psi_1(\mathbf{x}_1) \psi_2(\mathbf{x}_2) \dots \psi_N(\mathbf{x}_N)]$$

szorzat sajátállapota a $\hat{H}_{\text{független}}$ Hamilton operátornak, ha a $\psi_1, \dots, \psi_N$ függvények sajátállapotai a $h(i)$ operátornak $h\psi_i(\mathbf{x}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{x})$.

Centrális tér közelítés

Atomok esetében kézenfekvő feltételezés, hogy a v potenciál gömbszimmetrikus, azaz csak az elektronnak az atommagtól mért r_i távolságától függ $v = v(r_i)$.

Anélkül hogy a potenciál explicit alakját megadnánk pusztán a szimmetriából (a H szerű atomok analógiáját felhasználva) következtethetünk az energia sajátátértékek és sajátállapotok néhány fontos tulajdonságára.

A gömbszimmetria miatt polár koordinátákban a változók szeparálhatóak és az egyrészecske egyenlet megoldásai

$$\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

alakban vehetők fel. Itt $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ a jól ismert gömbfüggvény. n, l, m a H atomnál megismert fő- és mellék- és mágneseskvantumszámok. A sajátérték egyenletbe helyettesítve a radiális részre az alábbi egyenletet kapjuk:

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{nl}(r)}{dr} + \left[2\varepsilon_{nl} + \frac{2Z}{r} + 2v(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl} = 0$$

ahol ε_{nl} az egyelektron pálya energiája. A kapott egyenlet általánosítása a hidrogén-szerű atomokra kapott egyenletnek. A $v(r)$ megjelenése miatt megszűnik a H atomnál kapott m szerinti degeneráció azaz az energiát a fő és mellekkvantumszám határozza meg. $R_{nl}(r)$ nem az asszociált Laguere polinom mint a H-nál. Ebben a közelítésben az atomok leírására használhatjuk azokat a kvantumszámokat amelyeket a H atom esetében vezettünk be.

főkvantumszám	$n :$	1	2	3	4	...	<i>héj</i>
		K	L	M	N	...	
mellekkvantumszám	l	0	1	2	3	...	<i>alhéj</i>
		s	p	d	f	...	
mágneseskvantumszám	$m :$	$-l,$	$-l+1,$	...	$l-1,$	l	összesen $2l+1$

Természetesen ez még kiegészül a spinkvantumszámmal is.

Elektron konfiguráció, felépítési elv, periódusos rendszer

Láttuk, hogy egy atom egyrészecske energiáit centrális tér közelítésben meghatározza a fő és mellekkvantumszám. Így ebben a közelítésben az atom energiaszintjeit az határozza meg, hogy mely pályákból építjük fel a Slater determinánst, azaz mely pályákat töltünk be elektronokkal. Tudjuk, hogy a Pauli elv miatt minden pályán legfeljebb két ellentétes spinű elektron lehet. Az elektronpályák betöltöttségét elektron *konfiguráció*nak nevezzük és úgy adjuk meg, hogy sorban leírjuk, hogy a különböző fő és mellekkvantumszámhoz tartozó állapotok hányszorosan vannak betöltve $(nl)^{\text{betöltöttség}}$. Az alábbiakban megadjuk néhány elem elektronkonfigurációját

H	$(1s)^1$
He	$(1s)^2$
Li	$(1s)^2 (2s)^1$
Be	$(1s)^2 (2s)^2$
B	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^1$
C	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^2$
N	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^3$
O	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^4$
F	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^5$
Ne	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6$

Abban az esetben, ha minden alhéj zárt, egy konfigurációhoz egyetlen atomi állapot tartozik, ha van az atomban nyitott alhéj akkor általában több (ezek egymástól mágneses és spinkvantumszámban különböznek.)

A *felépítési elv* azt mondja ki, hogy az atom állapotát az elektronok állapotaiból építjük fel úgy, hogy a pályák betöltésénél teljesüljön a Pauli elv.

"Az atomok alapállapotában rendszerint a legmélyebb enegiájú pályák vannak betöltve. A rendszám és az elektronszám növekedésével egyre magasabb fő és mellekkvantumszámú pályák töltődnek be a pályae energiák $\varepsilon_{1s} \leq \varepsilon_{2s} \leq \varepsilon_{2p} \leq \varepsilon_{3s} \leq \varepsilon_{3p}$ sorrendje szerint. Az 1s (al)héj betöltése

Noha a pályaenergiák rohamosan mélyülnek a rendszám növekedésével, a megegyező elektronkonfigurációjú külső héjakkal bíró atomok külső (al)héjainak pályaenergiái hasonló nagyságúak, függetlenül a rendszámtól. Mivel a kémiai sajátosságokat a külső(al)héjak lazábban kötött elektronjai határozzák meg, az azonos elektronkonfigurációjú külső (al)héjakkal bíró atomok kémiai tulajdonságai nagymértékben hasonlóak. Ez az alapja az elemek periódusos rendszerének." ¹

1. ábra. Az elemek periódusos rendszere

¹Kapuy Ede, Török Ferenc, Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975.