

B I O K E M I J A

O R G A N S K I D E L

dr. Črtomir STROPNIK

izr. prof. za Organsko in splošno kemijo

20 ur predavanj, 10 ur seminarja

1.) UVOD; od (al)kemije preko organske do biokemije

bio- gr. življenje,

organon- nlat. organ (živega organizma)

Človek je hitro spoznal, da se vsa snov, iz katerih so razne stvari v njegovem življenju, bolj ali manj hitro spreminja; to seveda velja tudi za njega samega. Umrljivost mu ni bila in mu še danes ni povšeči: išče svojo eksistenco v nečem trajnemšem, v nečem, če le mogoče, večnem. V (politični) ekonomiji, ki praktično določa družbo, se je do nedavnega, v načelu pa še danes, zanašalo na zlato in po obstojnosti njemu podobnim snovem: ves denar je imel "zlato podlago". Poenostavljeno predstavljeno: za zlato si lahko zamenjal (si dobil, torej kupil) karkoli. Zlato je zaradi svoje "kemijske stabilnosti" (njegova redkost, torej to, da ga v naravi ni v velikih količinah, je tudi botrovala k njegovi "ekonomski uspešnosti") postalo univerzalno sredstvo menjave. In tako je nastala želja, da bi zlato napravili iz snovi, ki je je v naravi v izobilju: **alkemija** se je razvijala (tudi) pod vplivom te ideje. Alkemiki so poskušali narediti tudi "eliksir večne mladosti" (neskončno življeneje pa še mlad povrhu) pa tudi "kamen modrosti". Zelo konkretno in mnogokrat učinkovito pa so alkemiki pripravljali tudi snovi, s katerimi so zdravili ljudi (iatro-kemija oz. zdravilska kemija) in tudi živali. Zdi se, da iskanje kamna modrosti vedno ostaja pastorek v človekovih prizadevanjih saj bi danes najverjetneje daleč bolje prodali "postopek za izdelavo zlata iz kamenja" ter "kozmetiko (zares) večne mladosti" kot pa "kamen modrosti", recimo v obliki odlične univerze z vso moderno informacijsko, laboratorijsko itd. infrastrukturo. Farmaceutvska industrija pa je danes ena od najpropulzivnejših vej človekove (ekonomske ?) aktivnosti; verjetno je v njeni posesti vsaj pesek, ki je nastal iz kamna modrosti.

Konzerviranje hrane, recimo s soljo ali s sušenjem, je bila ena prvih kemijskih aktivnosti človeka. Obvladovanje ognja je omogočila termično obdelavo hrane ali povedano po domače pečenje in kuhanje, ki je, predstavljeno z današnjimi pojmi, kemijska aktivnosti človeka. Metalurgija se je razvila pri izdelavi orodja in v veliki meri tudi orožja. Priprava zdravilnih napitkov in praškov s pomočjo snovi, pridobljenih iz izbranih (delov oz. organov) rastlin ter nekaterih (delov oz. organov) živali, je bila uporaba kemije pri zdravljenju bolezni in poškodb. Kemijska predelava rud v kovine, torej snovi iz nežive, an-organske narave, (je) poteka(la) pri temperaturah, pri katerih snovi iz žive, organske narave hitro razpadejo. To je bil razlog, da se je poznavanje in kemijsko znanje o organskih snoveh razvilo precej kasneje, kot znanje o anorganskih snoveh, saj je bilo treba razviti nove (subtilnejše) metode raziskav navedenih snovi. Verjetno ni naključje, da je bil mož, ki je prvi "znan delati" raziskave s temi občutljivimi snovmi po znanstvenih metodah, lekarnar Scheele. 1810 je Jacob Berzelius, švedski znanstvenik, izdal prvi učbenik do takrat zbranega kemijskega znanja o snoveh iz žive narave; naslov učbenika je bil "Organska kemija". Berzelius bi to znanje lahko poimenoval tudi bio-kemija, če bi se mu zdelo, da je treba vsebino tega znanja predstaviti s (staro) grškim (bios -

življenej) ne pa z (neo)latinskim (organon - organ živega bitja) jezikom. Berzelius je vsebino svoje knjige poleg še drugih idej utemeljil na ideji "vitalistične sile": iz snovi iz nežive narave ni mogoče narediti snovi iz žive narave; vedno je potrebno nekaj "vitalistične sile", da smo kos takšni nalogi. Kar hitro (1828) pa je nemškemu kemiku Woehler-ju uspelo iz čistih anorganskih snovi, nedvoumno za vso znanstveno javnost, sintetizirati sečnino (urea), ki je tipična snov iz živega sveta. Berzeliusu na čast pa je še treba povedati, da se je njegov termin "organska kemija" z nekoliko spremenjenim vsebinskim pomenom ohranil do danes, pa tudi nekatere ideje iz njegovega učbenika (recimo ideja, da je izomerija, v nasprotju z anorgansko kemijo, pravilo v organski kemiji) veljajo še danes.

Z razvito metodologijo in razjasnjenimi osnovnimi pojmi je bil razvoj organske kemije v 19. stoletju hiter in obsežen. Znanje o fizikalnih in kemijskih lastnostih "malih" organskih spojin je rastlo, število poznanih organskih snovi je vedno znova prešlo še tako optimistične ocene o njihovi množičnosti. Ta proces odkrivanja in sintetiziranja novih in novih organskih snovi traja še danes, ko poznamo že preko 20 milijonov organskih snovi. Kombinatorna (organska) kemija, ko z "eno potezo" sintetiziramo na tisoče organskih snovi ("knjižnjica snovi"), je ta proces kumuliranja empiričnih dejstev o organskih snoveh izredno pospešila, konca ali pa izčrpanja te znanstvene aktivnosti, torej organske kemije, pa kljub temu ni videti. Računalniki so seveda v veliko pomoč pri urejanju in pri dostopnosti informacij o tej ogromni količini (empiričnih) podatkov. Pri predstavitvi silne rasti empirične osnove organske kemije je vedno potrebno vključiti izjemen razvoj metod ločevanja oziroma čiščenja organskih snovi z vrstami modernih metod (razne kromatografije in –foreze) ter določanje njihove strukture z vrsto spektroskopskih metod. Tudi za ti dve področji znanosti obstajajo jasne vizije njunega nadaljnega razvoja. Iz vsega tega je nastala tudi kemijska tehnologija, ki v večjih, tržnih količinah, proizvaja snovi, ki jih ljudje množično uporabljajo. Barvila (začetek moderne kemijske industrije ob koncu 19. stoletja), plastične mase in površinsko aktivne snovi (čistila vseh mogočih vrst) ter proizvodnja zdravil so osnova današnje, ekonomsko zelo uspešne, kemijske in farmacevtske industrije.

Intenzivni empirični razvoj organske kemije v 19. stoletju je prinesel tudi na teoretičnem področju dve veliki novosti. Strukturna teorija Kekule-ja (1856) je s pomočjo valence (črtice med atomoma) ogljika pojasnila vrsto vprašanj povezanih s strukturo organskih spojin: štirivalentnost ogljika ter njegova zmožnost vezave s samim seboj (med elementi periodnega sistema jih ni dosti, ki to "znajo"; med tistimi, ki to znajo (recimo silicij, žveplo, fosfor), pa je ogljik res še poseben mojster) na razne načine (enojna, dvojna in trojna vez), sta še danes osnova organske kemije. Drugo veliko novost pa je prineslo gledanje na organske molekule kot objekte v tridimenzionalnem prostoru. Tako sta na eni strani van't Hoff na drugi strani pa LeBell istega leta 1874 neodvisno drug od drugega pokazala, da ima štirivalentni ogljik, ki je vezan s štirimi enojnimi vezmi (in ne s kakšno dvojno ali trojno vezjo) tetraedrično strukturo. Tudi to spoznanje ima še danes popolno domovinsko pravico v moderni organski kemiji. Iz povedanega postaja razvidno, da je ogljik centralni atom organske kemije. Tako se je Berzeliusova definicija organske kemije razširila; danes je organska kemija veda o spojinah ogljika (izvzete so soli ogljikove kisline, recimo karbonati, ki jih obravnava anorganska kemija). Polietilena, danes zelo razširjene plastične mase (vrečke, prosojnice, embalaža itd.), v naravi ni in po Berzeliusovi definiciji ne bi bil organska snov. Seveda je k poglobljanju poznavanja strukture organskih molekul svoje dodalo tudi 20. stoletje. Odkritje elektrona je valenčno črtico spremenilo v dve pikici in tako omogočilo kvalitativno razlago kemijske (kovalentne)

vezi; tudi predstava o ionih, nabitih atomih in molekularnih delcih, je elektron napravil precej bolj jasno. Kvantna mehanika s svojim opisom strukture atoma (to so naredili fiziki, Heisenberg in Schroedinger) je v kemijo prinesla vrsto novosti: z resonanco je pojasnila vrsto do takrat teoretično nepojasnjenih lastnosti raznih molekul, tako anorganskih kot organskih, pojasnila je strukturno razliko med molekulo dušika in molekulo kisika, omogočeno je bilo računanje kemijske vezi, pojasnila je nenavadne lastnosti aromatskih snovi, s hibridizacijo atomskih orbital (preprosta operacija znotraj kvantne kemije) je pojasnila vso bogatstvo tridimenzionalnih struktur vseh vrst molekul, uporabo simetrijske lastnosti molekularnih orbital kot izhodišče pojasnitve nenavadnih, danes jih imenujemo "periciklične", reakcij nekaterih organskih spojin itd. itd.

Zdaj pa še o "rojstvu" biokemije v današnjem pomenu besede. Bezelius-ov izraz "organska kemija" brez problema tolmačimo tudi kot "biokemija", vendar še zdaleč ne v današnjem smislu. Za takratnega organskega- ali bio-kemika je bila snov, dobljena naravnost iz narave, prezahtevna oziroma prezapletena; zato jo je, po kemijsko (s pirolizo (suha destilacija), močna kislina in/ali močan lug) pretvoril v bolj preproste snovi, ki pa jim je s takratnimi metodami lahko, v nekaterih primerih samo v obrisih, določil strukturo. Od današnje organske kemije se je današnja biokemija začela ločevati konec 19. stoletja, ko je eden največjih organskih kemikov Emil Fischer začel snovi, ki jih je dobil naravnost iz narave in jih ni predhodno obdelal, raziskovati z metodami, ki jih je imel na razpolago. Njegovo briljantno določanje strukture sladkorjev ter nekatere njihove kemijske presnove so še danes temelj kemije ogljikovih hidratov. Sintetiziral je tudi oligopeptide. Tako se je današnja biokemija ločila od organske kemije, ko so se metode organske kemije toliko razvile, da je bilo mogoče začeti delo na zapletenih (kompleksnih) snoveh iz živih organizmov. Ta smer razvoja je torej potekala od atoma do organskih molekul v okviru (organske) kemije ter se na neki razvojni stopnji osamosvojila. Sodobni učbeniki organske kemije vsebujejo (običajno na koncu) poglavja o sladkorjih, proteinih, nukleinskih kislinah, steroidih ipd., torej o snoveh, s katerimi se običajno začno poglavja v sodobnih učbenikih biokemije. Današnja biokemija pa ima svoj drugi izvir v delu znanstvenikov, ki so proučevali delovanje in strukturo tkiv rastlin živali in človeka z metodami biologije, torej v smeri iz navadnega, makro sveta, proti mikro svetu molekularne strukture. Bolj in bolj podrobno proučevanje življenja in življenjskih funkcij organizmov in njihovih delov ter tkiv je pripeljalo do njihovega proučevanja na molekularnem nivoju. Cilji so zelo zahtevni: na molekularnem nivoju pojasniti dobesedno "vse živo"!

Danes živimo v dobi "bio-"! Temu se ob bok postavlja tudi "nano-". Na področju "bio-" se bodo zgodile stvari, ki bodo v temelju spremenile našo civilizacijo. Medicina bo "v prvih bojnih vrstah" na področju samih raziskav, enaka pionirska vloga pa jo bo doletela tudi na področju etike. Globoko v reševanju slednjih zapletenih vprašanj je že danes.

2.) NEKAJ SPLOŠNEGA O SNOVI

Snov ali materija, tudi substanca, je vse, iz česar je vesolje; torej tudi živa bitja in seveda mi, ljudje, kot "krona stvarstva", kar si mnogokrat, nekateri manj ali pa sploh ne, drugi pa več ali celo preko vsake mere, domišljamo. Biokemija se v načelu ukvarja, kot smo že rekli, s snovjo iz živega sveta.

Znanost je v nepregledni množici sila različnih manifestacij (oblika, vonj, okus, barva, agregatno stanje, vrelišče, tališče trdota, gorljivost in zmožnost še drugih reakcij, sposobnost rasti oziroma živost itd. ipd.) raznih snovi našla in uvedla neko urejenost. Iz predstavljene "zmešnjave" ji je s posebnimi postopki, ki jih je bilo treba prav tako še dognati, uspelo izolirati **čisto snov (homogena snov; iz istega rojena snov)**: njene lastnosti se z nadaljnjimi postopki čiščenja več ne spreminjajo. Lastnosti čiste snovi so torej konstantne (invariantne na nadaljnje postopke čiščenja) ter praviloma značilne zanjo; tako lahko čisti snovi enoznačno določimo tališče, vrelišče, infra rdeči spekter, reaktivnost z NaOH oziroma s H₂SO₄, pa še marsikaj; s tem jo nedvoumno operdelimo. Preko navedenih lastnosti lahko torej vedno preverimo ali imamo opravka s snovjo, o kateri nam je kolega, znanstvenik na drugem kontinentu, sporočil, da je ta snov odlično zdravilo za... Čisti snovi znanost določi "strukturno"; danes to pomeni, da ugotovimo, kateri atomi tvorijo molekulo te čiste snovi in natančno kako so ti atomi med seboj povezani (še to: tudi posanezni element je čista snov; elementi so lahko monoatomarni ali pa v raznih večatomnih oblikah). S poznavanjem strukture čista snov dobi svoje "nomenklaturno ime", iz katerega (poznavalec) enoznačno sestavi strukturo imenovane snovi. Poleg slednjega lahko ima še druga imena. Trivialno ime (ocetna in vinska kislina; penicilin itd), ki je nastalo v obdobju raziskav, ko struktura te čiste snovi še ni bila poznana; to ime se te čiste snovi običajno drži zelo dolgo, čeprav bi ga naj nadomestilo nomenklaturno, ki pa je res "nemogoče" pri snovi z malo bolj zapleteno strukturo. Snov, ki se izkaže kot koristna na nekem področju, postane predmet ekonomije (proizvodnja, prodaja) in si pri tem običajno pridobi vsaj še eno dodatno, recimo mu "komercialno ime". Izvora čiste snovi sta v načelu dva: izolacija iz naravnih virov ter sinteza v laboratoriju. Danes je pridobljenih in karakteriziranih več kot 15×10^6 različnih čistih snovi, dnevna bera novih pa gre v stotine. O končnosti ali brezkončnosti števila čistih snovi pa še tečejo filozofske razprave. Druga oblika snovi, s katero pa imamo v vsakodnevem življenju res mnogo opravka, je **zmes (heterogena snov; iz različnega rojena snov)**. Zmes (izvor besede "zmešnjava") je sestavljena iz vsaj dveh ali pa večih čistih snovi ter mnogokrat še iz ene ali več "**nedefiniranih snovi**". Čisto snov smo z njenimi natančno definiranimi lastnostmi na kratko že predstavili in jo lahko pridobimo iz zmesi; temu procesu pridobivanja čiste snovi rečemo tudi "izolacija" (izločanje) čiste snovi, "čiščenje" čiste snovi ipd. Ta proces je običajno zapleten in zahteva mnogo obrtnega znanja in spretnosti. "Nedefinirana snov" pa je snov, kateri ne moremo enoznačno določiti nekih "fizikalnih konstant", kot to lahko storimo pri čisti snovi. Recimo kruh je taka snov, ki ji ne moremo določiti tališča, kaj šele vrelišča, topnosti v H₂SO₄ in podobno. Meso, zemlja, koža, možgani itd. itd. so nadaljnje take "nedefinirane snovi". V strogem smislu, kot pri čistih snoveh, "nedefinirani snovi" ne moremo (ali pa še ne znamo) določiti strukture. S kvantitativno določitvijo vsebnosti elementov ("povprečna elementna sestava") običajno ni težav; mnogokrat tako lahko izračunamo "empirično formulo" neki "nedefinirani snovi" (recimo škrobi iz raznih vrst rastlin in glikogeni iz živalskega sveta imajo, kljub precejšnji razliki v lastnostih, enako "empirično formulo" C₆H₁₀O₅; tudi beljakovine imajo neko splošno "empirično formulo"). Glavna težava pri določanju strukture "nedefinirane snovi" pa je v tem, da ji ne moremo določiti "molekulske mase". To pomeni določiti število "osnovnih gradnikov oz. enot" - molekul v, recimo, enem gramu ali mililitru preiskovane snovi. Iz zgornjega nabora naštetih "nedefiniranih snovi" je večina tkiv iz živih organizmov, tudi človeka. Struktura tkiv je običajno zelo zapletena.

Histologija je veda, ki opisuje strukturo tkiv na z mikroskopom opaznem nivoju. Biokemijski pristop pa teži k temu, da se iz tkiva izolira "čisto snov" (rekli smo že, da je to izredno zahtevno opravilo) in se ji nato z metodami določanja strukture za čisto snov določi strukturo. Tako iz nekega tkiva, ki ima svoje ime (recimo maščobnega tkiva) izoliramo vrsto čistih snovi, ki nato, ko jim določimo strukturo (natančno kateri atomi in kako so povezani v molekulo te čiste snovi) dobijo svoja strukturna in/ali trivialna imena (tripalmitat, holesterol,... iz maščobnega tkiva). Strukturo tkiva nato (poskusimo) sestavi(ti)mo iz čistih snovi in rečemo, da je snov, ki ji rečemo maščobno tkivo, sestavljeno iz nadmolekulskih (supramolekulskih) struktur raznih čistih snovi. Supramolekularna struktura je v bioloških sistemih izrednega pomena: holesterol, ena sama vrsta čiste snovi, je lahko v eni supramolekularni obliki telesu potrebna, v drugi supramolekularni obliki pa škodljiva ("dober" in "slab" holesterol). V kruhu pa vemo, da imamo "prepraženi škrob" ali razne vrste dekstrinov, katerih strukturo v globalu poznamo (na razne načine skupaj spete glukoze), kakšne pa so v podrobnostih molekule dekstrina pa ne vemo. Vsaki spečeni kruh ima svojo, edinstveno nepoznano strukturo dekstrinov; slednji so v skorji oziroma v sredici kruha seveda različni. Iz predstavljenih primerov (maščobno tkivo, kruh) je (verjetno) razvidna vsebina pojma "nedefinirana snov"; ni pa odveč opozorilo, da pojma "nedefinirana snov" ni treba jemati dobesedno, saj od primera do primera o njej (že) kar nekaj vemo.

Če povzamemo: s stališča znanosti imamo v biokemiji in seveda tudi v medicini opravka tako s čistimi snovmi kot z zmesmi in s tkivi; slednja so mnogokrat v obliki, ki jim, ne glede na to koliko poznamo njihovo strukturo, lahko rečemo "nedifinirana snov".

3.) KRATKO O ATOMIH

Ideja, da je snov zgrajena iz nedeljivih ($\alpha\theta\omicron\mu\omicron\sigma$) najmanjših delcev - atomov, se je porodila v Antični Grčiji. Seveda v tistem času ni imela znanstvene verifikacije, saj Stari Grki niso poznali raziskovalnega dela v današnjem smislu in niso imeli laboratorijev (stiskalnice grozdja in oliv nekako ne štejejo). Dva zakona, namreč "zakon o konstantnih utežnih razmerjih" ter "zakon o mnogokratnih utežnih razmerjih", odkrita koncem 18. stoletja, sta bila Daltonu eksperimentalna podlaga za ponovno ožvitev, tokrat pa že v okviru znanosti, zamisli o atomih kot osnovnih, nadalje nedeljivih enot snovi. Celo 19. stoletje je ta ideja, pri nekaterih sicer sprejeta s skepso, poganjala razvoj naravoslovja, še posebej kemije. Odkritje elektrona okoli leta 1900, delca, ki je skoraj $2000\times$ lažji od najlažjega atoma elementa vodika, je (hipo)tezo o nedeljivosti atoma odpravilo ter odprlo nove poti v razvoju predstav o zgradbi materije. Rutherfordov poskus sipanja α -delcev na foliji zlata (najtanjša oblika snovi v takratnem času) je prinesel "planetarni model" atoma, ki ga še danes največkrat uporabljamo v pedagoške namene, čeprav je ob nastanku imel v sebi protislovje (Rutherford ga je seveda poznal) iz klasične elektrodinamike; slednja "zahteva", da pospešeno se gibajoči nabiti delec (okoli jedra krožeči elektron se giblje pospešeno) s sevanjem oddaja energijo. Tako bi elektron izgubljal energijo ter se zrušil v jedro. Bohr-ovo postuliranje stacionarnega stanja v gibanju elektrona v atomu s kvantiziranjem vrtilne količine je s stališča nove, kvantne mehanike, odpravilo protislovje s klasično elektrodinamiko. V svet atoma je vstopila kvantna ideja Planck-a, s katero je Bohr z do takrat daleč največjo natančnostjo izračunal spekter atoma vodika. DeBroglie-jeva ideja o delcu-valovanju je zbrisala mejo med svetom valovanja in po trajektoriji gibajočega se delca.

Leta 1926 sta W. Heisenberg in E. Schroedinger z matrično oziroma valovno mehaniko odprla pomembno novo poglavje v človekovem poznavanju strukture snovi. Mi bomo v kvalitativnem smislu uporabljali Schroedingerjev pristop oziroma njegovo valovno mehaniko za površen opis atomov ter njihovega kovalentnega povezovanja v molekule.

Schroedinger je s svojo stacionarno enačbo gibanja elektrona v atomu vodika postavil izhodišče predstave o strukturi atomov. Njegova enačba (E3.1. oziroma E3.2.) predstavlja atomske sisteme z enim elektronom; ψ je valovna funkcija sistema, x , y in z so kartezijske koordinate, \hbar je Planck-ova konstanta deljena s π , m je masa elektrona (pri večji natančnosti je treba vzeti reducirano maso jedra in elektrona), Z je število protonov v jedru sistema, e je naboj elektrona, E je (celotna) energija sistema oziroma elektrona, V pa je potencialna energija sistema (v E3.1. je to drugi člen enačbe). Seveda se ne bomo ukvarjali z reševanjem

$$E3.1. \quad -\frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) - \left(\frac{Ze^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} \right) \Psi = E\Psi$$

oziroma

$$E3.2. \quad \nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} (E - V) \Psi = 0$$

predstavljene parcialne diferencialne enačbe. V kvalitativnem smislu bomo privzeli rešitve oziroma njihovo interpretacijo do mere, kot jih bomo rabili za naše predstave o atomu ter o njihovem (kovalentnem) povezovanju v molekule (kemijska vez).

Parcialna diferencialna enačba ima mnogo rešitev; ustrezne rešitve našega sistema jedra z enim elektronom so tiste valovne funkcije Ψ , ki so zvezne in neskončno krat

odvedljive ter morajo iti proti ničli, ko gre posamezna koordinata v neskončnost. Poleg navedenega so tudi ortogonalne ter normirane.

V primeru atoma vodika, ko imamo opravka s protonom (pozitivno nabiti delec) in elektronom (negativno nabiti delec), ki se giblje okoli protona, dobimo vrsto lastnih funkcij Ψ z diskretnimi vrednostmi E za energijo sistema oziroma elektrona. Lastne funkcije Ψ si predstavljamo kot orbitale: to je del prostora, kjer je končno velika verjetnost, da se nahaja elektron oziroma da ga tam najdemo (navedeno verjetnost predstavlja Ψ^2). Preko rekurzivskih formul se pri reševanju Schroedingerjeve enačbe "pojavi" kot naravni del rešitev števila, ki določajo posamezno orbitalo oziroma njeno valovno funkcijo Ψ . Med temi števili, rečemo jim kvantna števila, so točno določene relacije:

$n \rightarrow$ glavno kvantno število, ki "meri" energijo elektrona (sistema) na določeni orbitali; slednje tudi pomeni oddaljenost elektrona od jedra oziroma protona; zavzame lahko vse vrednosti od 1 do ∞ (vrednost $n = \infty$ pomeni, da je elektron "odtrgan" od atoma, ko dobimo ion oziroma kation);

$l \rightarrow$ stransko kvantno število, ki določa vrtilni moment elektrona oziroma, slikovito povedano, določa obliko orbitale: okrogle orbitale imajo $l = 0$ (to so s-orbitale), orbitale kot ročke (pentlje, "osmičke") imajo $l = 1$ (to so p-orbitale), orbitale v obliki "štiriperesne detelje" imajo $l = 3$ (to so d-orbitale); l lahko zavzame samo vrednosti od 0 (nič) do $(n-1)$;

$m \rightarrow$ magnetno kvantno število, ki določa orientacijo orbitale v prostoru; slednja se lahko odrazi le v primeru, ko je sistem v nekem zunanjem polju (magnetno oziroma električno polje); zavzame lahko samo vrednosti od $-l$ (minus l) preko 0 (nič) do $+l$ (plus l).

$s \rightarrow$ spinsko kvantno število bi naj predstavljalo vrtenje elektrona okoli svoje osi; ni sestavni del rešitve Schroedingerjeve enačbe temveč ga bomo kar pridjali k ostalim trem kvantnim številkam (pri Dirac-ovi enačbi, ki je Schroedingerjeva enačba z relativističnim dodatkom, je "naravni" del njene rešitve); s lahko zavzame samo dve vrednosti, namreč $\pm 1/2$.

Valovne funkcije za vodik imajo naslednjo obliko (reševanje Schroedinger-jeve enačbe za vodikov atom zaradi centralne simetrije sistema poteka v krogelnih koordinatah r , θ in φ):

$$E3.3. \quad \psi(r, \theta, \varphi) = A \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho) P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

pri čemer je A konstanta, določena z normalizacijo Ψ , ρ pa je

$$E3.4. \quad A = \left[\left(\frac{2Z}{n} \right)^3 \frac{(n-l-1)!(2l+1)!(l-|m|)!}{2n[(n+l)!]^3 2(l+|m|)!} \frac{1}{2\pi} \right]^{1/2} \quad E3.5. \quad \rho = 2r\sqrt{-2E}$$

L_{n+l}^{2l+1} so Laguerre-jeve polinomi, $P_l^{|m|}$ pa so Legendre-jeve funkcije. V tabeli T1.1. so za ilustracijo predstavljeni radialni deli valovnih funkcij, v enačbi E3.6. pa je predstavljena odvisnost energije (sistema oziroma elektrona) od vrednosti glavnega kvantnega števila n :

$$E3.6. \quad E = -\frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

Na sliki S3.1. so predstavljeni energetske nivoje v atomu vodika; dobro je razvidna recipročna kvadratna odvisnost energetske nivojev, ki se od zelo širokega hitro ožijo v zelo male energetske razlike. Na isti sliki je tudi predstavljena Balmerjeva serija spektralnih črt iz spektra vodika. Valovna dolžina posamezne spektralne črte je v energetskih nivojih predstavljena kot prehod iz nekega višjega nivoja na energetski nivo z glavnim kvantnim številom $n = 2$.

RADIAL PARTS OF THE HYDROGEN ATOM WAVE FUNCTIONS

$$R_{nl} = - \left[\frac{2Z^3}{n} \frac{(n-l-1)!}{2n [(n+l)!]^3} \right]^{1/2} \left(\frac{2Zr}{n} \right)^l L_{n+l}^{2l+1} (2Zr/n) e^{-Zr/n}$$

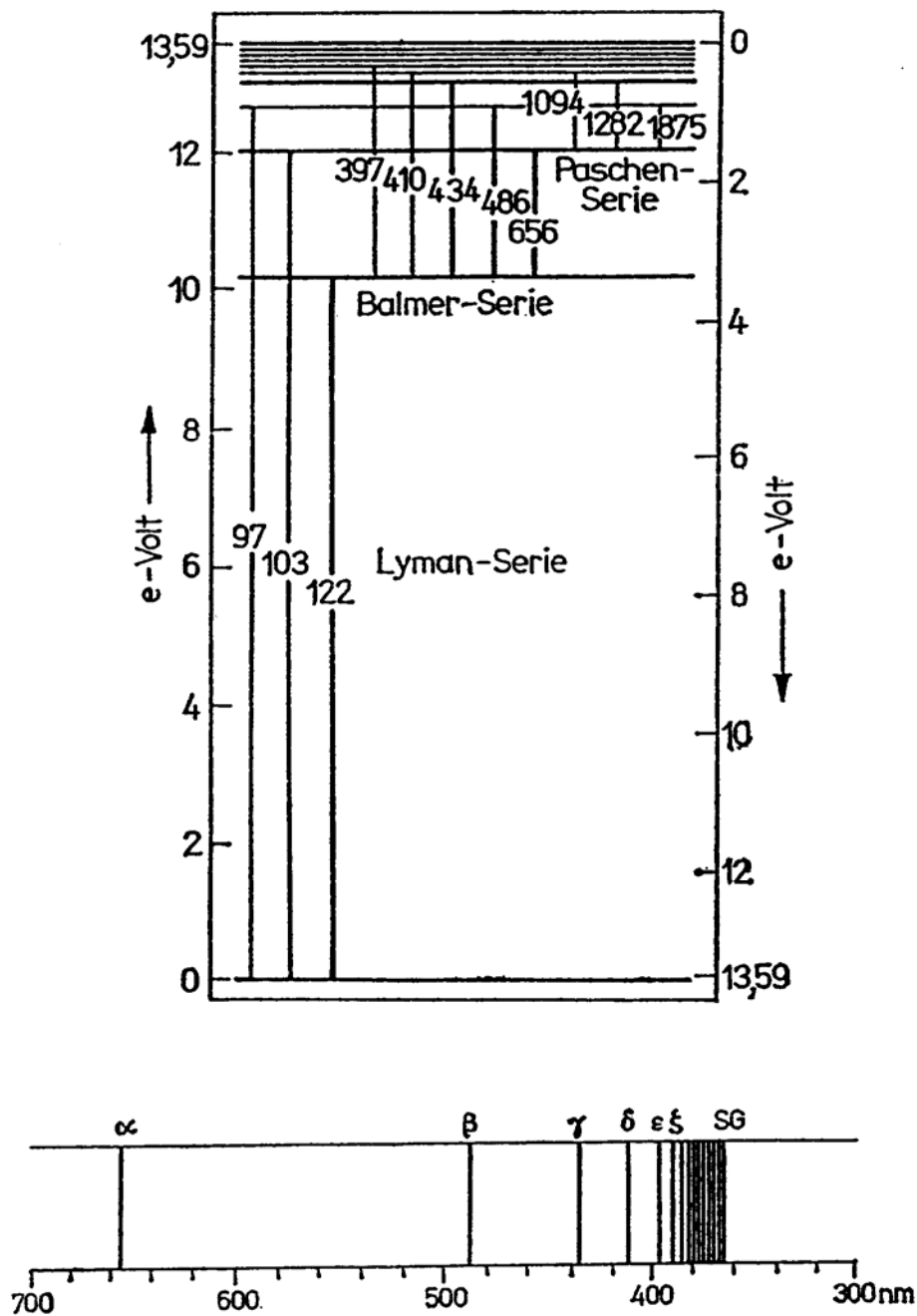
(These functions are normalized so that $\int_{-\infty}^{\infty} R_{nl}^2 r^2 dr = 1$)

n	l	R_{nl}
1	0	$2Z^{3/2} e^{-Zr}$
2	0	$(1/\sqrt{2}) Z^{3/2} (1 - \frac{1}{2} Zr) e^{-Zr/2}$
2	1	$(1/2\sqrt{6}) Z^{3/2} r e^{-Zr/2}$
3	0	$(2/3\sqrt{3}) Z^{3/2} (1 - \frac{2}{3} Zr + \frac{2}{27} Z^2 r^2) e^{-Zr/3}$
3	1	$(8/27\sqrt{6}) Z^{3/2} (Zr - \frac{1}{6} Z^2 r^2) e^{-Zr/3}$
3	2	$(4/81\sqrt{30}) Z^{3/2} r^2 e^{-Zr/3}$
4	0	$\frac{1}{4} Z^{3/2} (1 - \frac{3}{4} Zr + \frac{1}{8} Z^2 r^2 - \frac{1}{192} Z^3 r^3) e^{-Zr/4}$
4	1	$\frac{1}{16} \sqrt{\frac{5}{3}} Z^{3/2} (Zr - \frac{1}{4} Z^2 r^2 + \frac{1}{80} Z^3 r^3) e^{-Zr/4}$
4	2	$(1/64\sqrt{5}) Z^{3/2} (Z^2 r^2 - \frac{1}{12} Z^3 r^3) e^{-Zr/4}$
4	3	$(1/768\sqrt{35}) Z^{3/2} r^3 e^{-Zr/4}$

Tabela T3.1.: Analitično zapisan radialni del valovnih funkcij do $n = 4$.

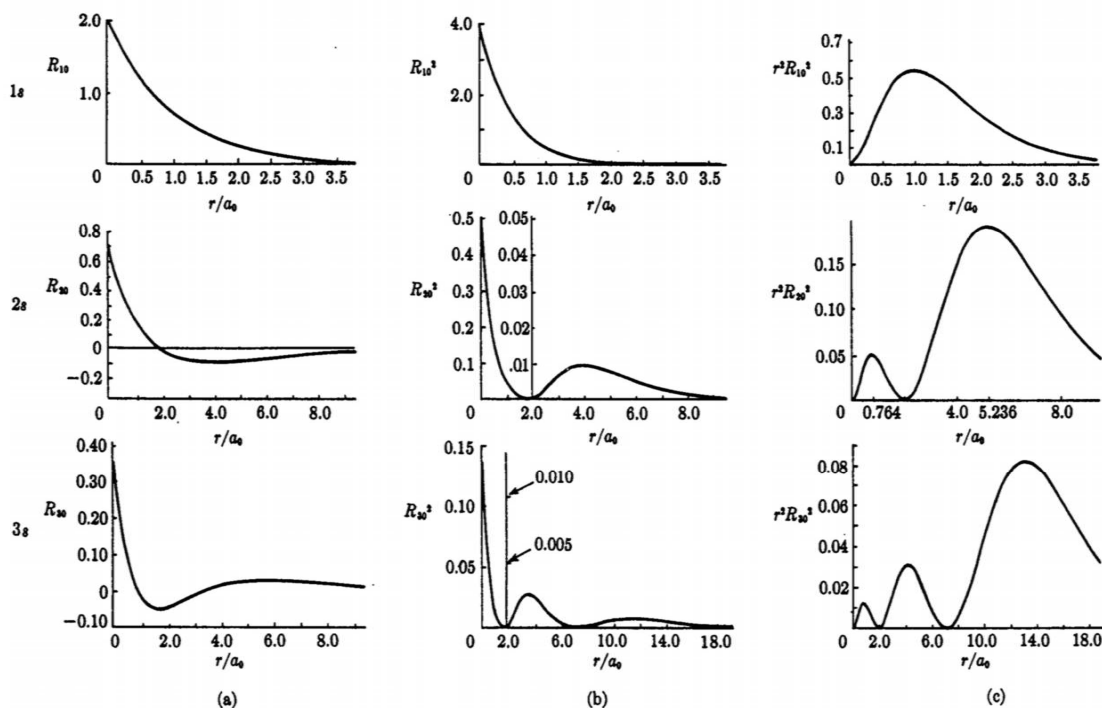
Sliki S3.2. in S3.3. pod a) predstavljata grafe radialnega dela valovnih funkcij, katerih analitična oblika je predstavljena v tabeli T3.1; pod b) so predstavljeni kvadrati teh istih valovnih funkcij, ki predstavljajo verjetnost nahajanja določenega elektrona na razdalji, ki je merjena kot mnogokratnik borovega radija a_0 . Ena, torej točno Borov radij 52,9 pm (piko metrov) je pri 1s orbitali v maksimumu radialne porazdelitvene funkcije, ki je predstavljena

pod c). Jasno je razvidno "valovanje" praktično vseh predstavljenih funkcij in spreminjanje števila valov s spreminjanjem kvantnih števil.

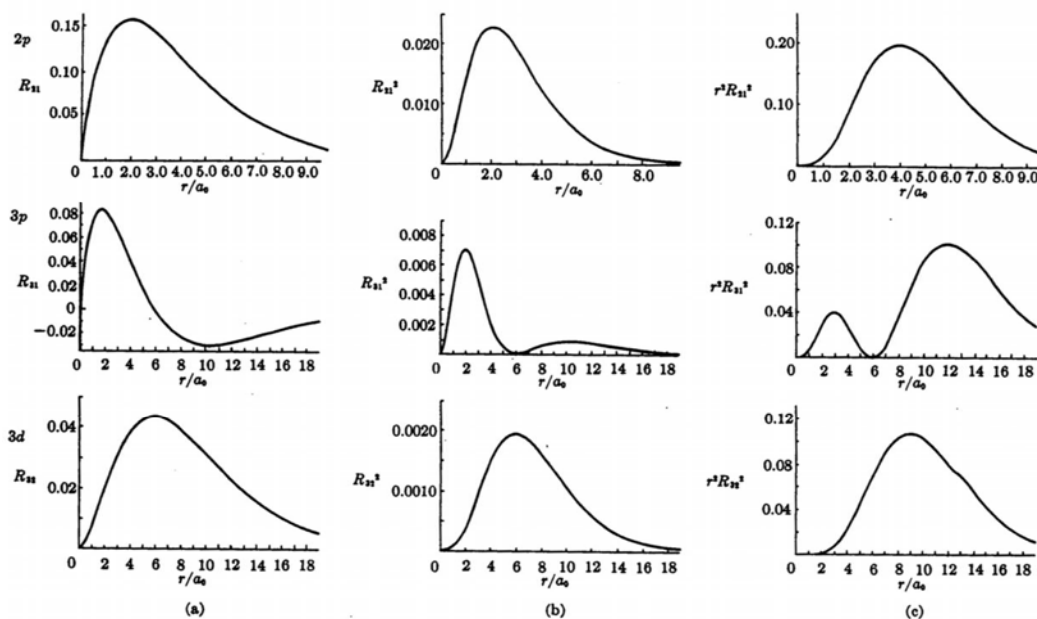


Slika S3.1.: Energetski nivoji v atomu vodika; Balmerjeva serija.

Sliki S3.4. in S3.5. predstavljata kotno (angular) odvisnost valovnih funkcij. Okrogli s-tip orbital ter tip ročke pri p- orbitalah bodo za nas daleč najbolj zanimive oblike verjetnosti nahajanja elektronov. Štiriperesna deteljica (razen pri enem tipu) predstavlja d-tip orbital, f-orbitale pa so predstavljene iz razloga, ker jih v učbenikih običajno ni najti.

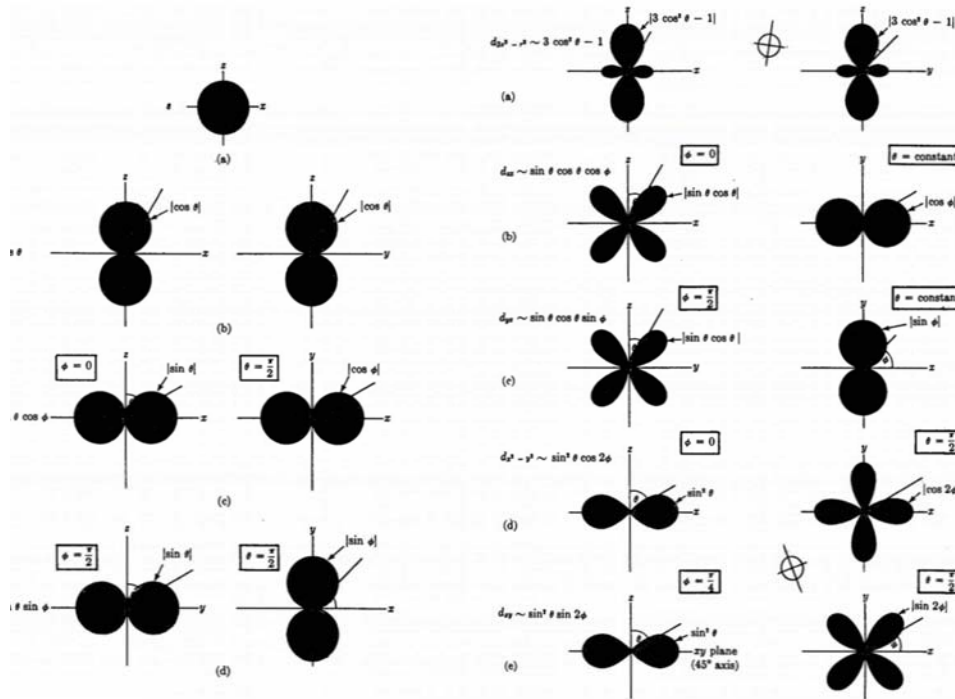


Slika S3.2.: Radialni del valovnih funkcij s-orbital za n = 1, 2 in 3.

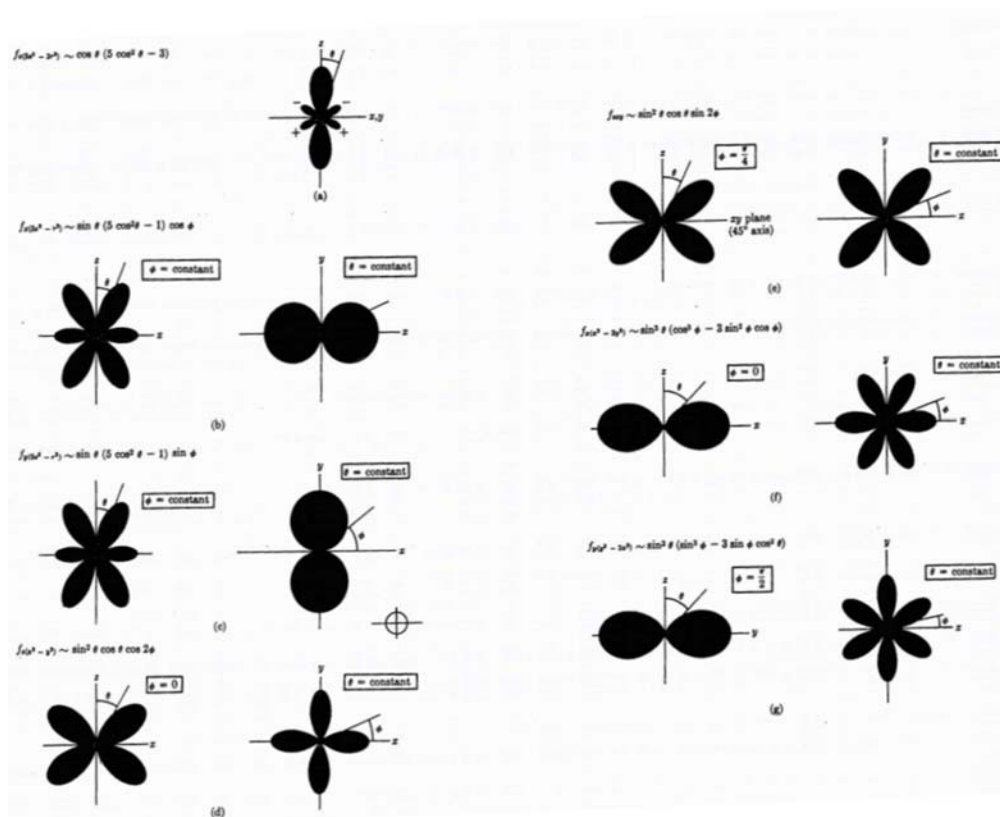


Slika S3.3.: Radialni del valovnih funkcij p- in d-orbital za n = 2 in 3.

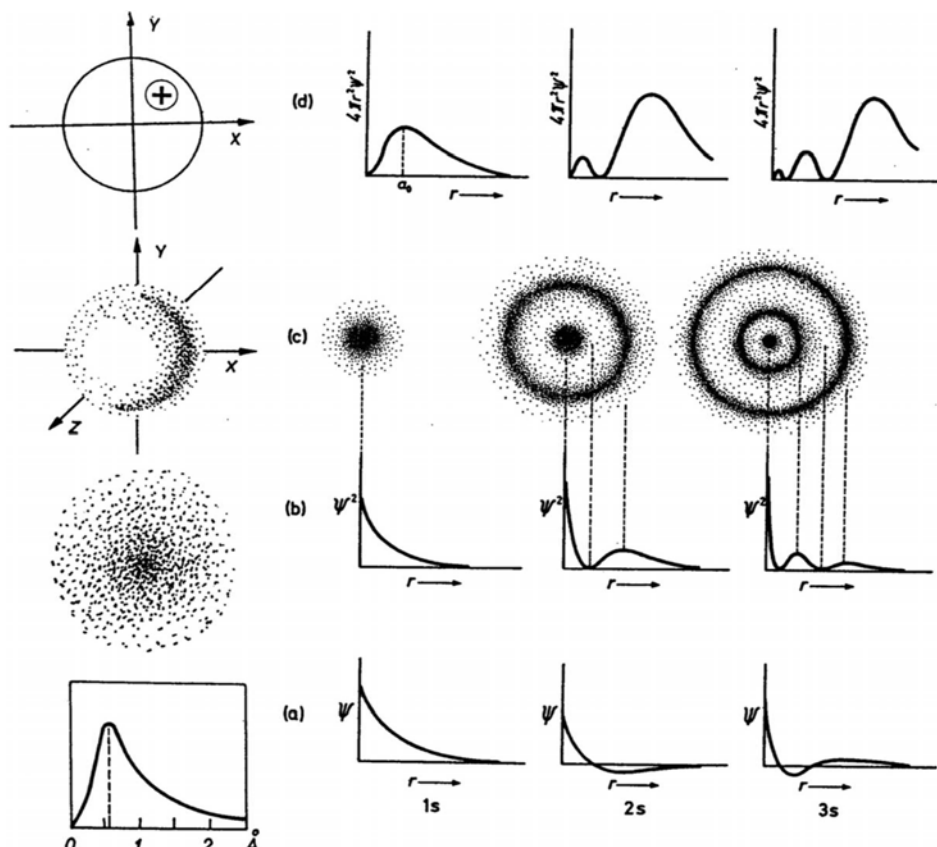
Slika S3.7. je v splošnem katerakoli s orbitala prikazana na dva načina: kot skupek pikic ali kot "(urejeni) čebelji roj" ali (urejeni) roj mušic". Na sliki so predstavljene različne s-orbitale kot grafi že prej predstavljenih funkcij ter v zelo ilustrativni obliki "skupka pikic"; slednje slike so korelirane s kvadratom valovnih funkcij, ki predstavljajo verjetnost nahajanja elektronov. Slednjo predstavo "skupka pikic" bomo največkrat uporabljali pri predstavitvi



Slika S3.4.: Kotna odvisnost s-, p- in d- valovnih funkcij



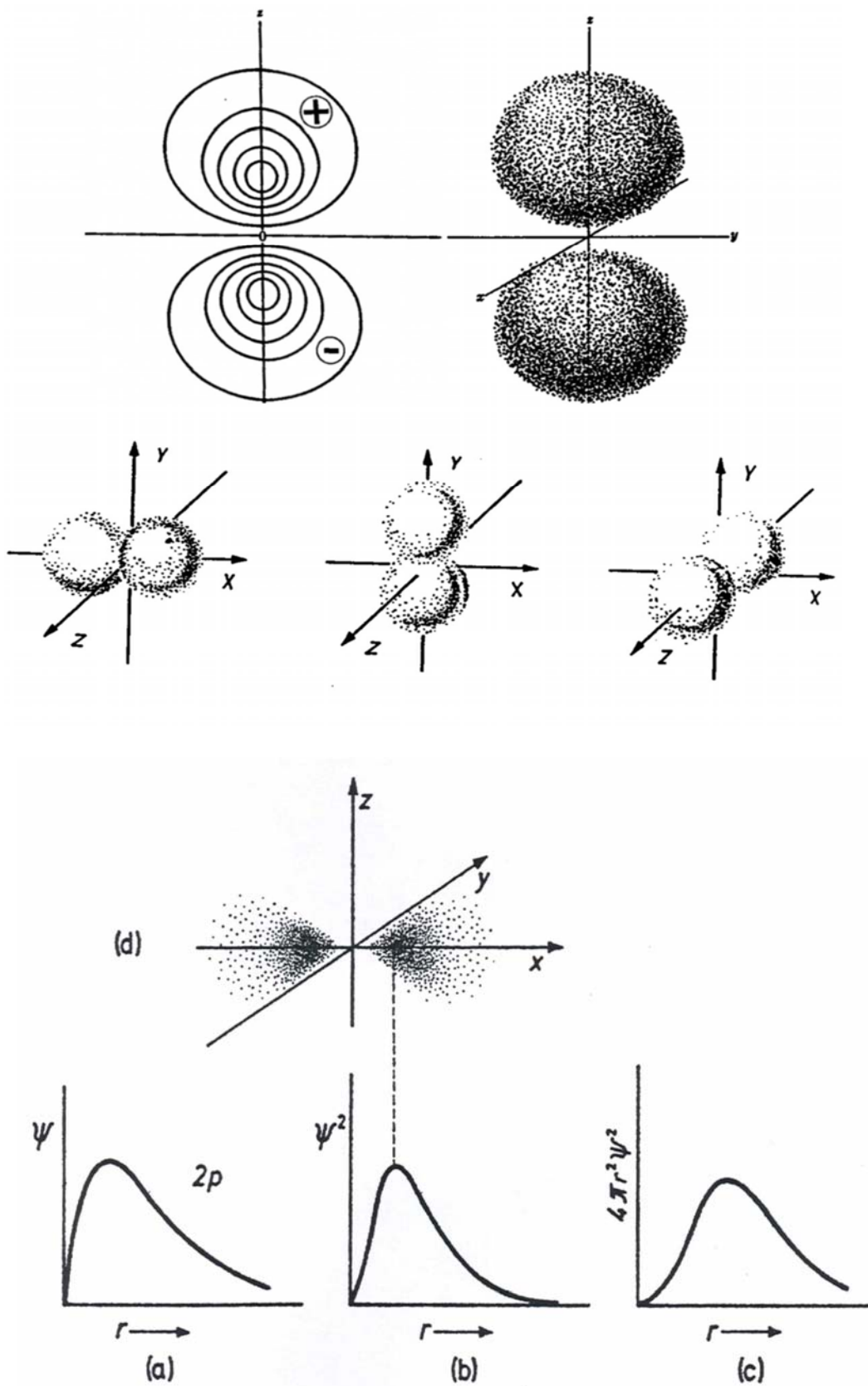
Slika S3.5.: Kotna odvisnost f- valovnih funkcij



Slika S3.6.: Razne predstavitve 1s-, 2s- in 3s- atomskih orbital.

kovalentne vezi. Gostota pikic (čebeljega roja, roja mušic) je sorazmerna z verjetnostjo nahajanja elektrona; slednji se "tako hitro giblje", da ga "vidimo" kot množico pikic, ki pa je tam, kjer je večja verjetnost nahajanja elektrona, bolj gosta; zato tudi termin "urejeni roj". 1s orbitala ima $n = 1$ ter $l = 0$ in je krogla; pikice pa se gostijo proti njenemu središču. Iz katerekoli smeri se približamo tej orbitali, vedno najdemo enako gostoto pikic (krogelna simetrija). 2s orbitala ($n = 2$, $l = 0$) je od zunaj po izgledu enaka kot 1s orbitala, le da je nekoliko večja; vidimo pa, da verjetnost nahajanja elektrona v njeni notranjosti zaniha proti nič, nato pa zopet zraste do neke končne vrednosti. 3s orbitala ($n = 3$, $l = 0$) je še nekoliko bolj "napihnjena", nihanje verjetnosti nahajanja elektrona v njeni notranjosti pa ime še en nihaj več, kot 2s orbitala. Tako za 2s kot za 3s orbitalo velja, da je krogelno simetrična in da je vseeno, od kod se ji približamo, ko želimo, na primer, srečati čim več elektrona; slednje je, kot smo že dejali, pomembno pri tvorbi kovalentne vezi. Faza valovne funkcije, označena s + na sliki S3.6, je pomembna pri tvorbi kovalentne vezi ter pri tvorbi hibridnih molekulskih orbital.

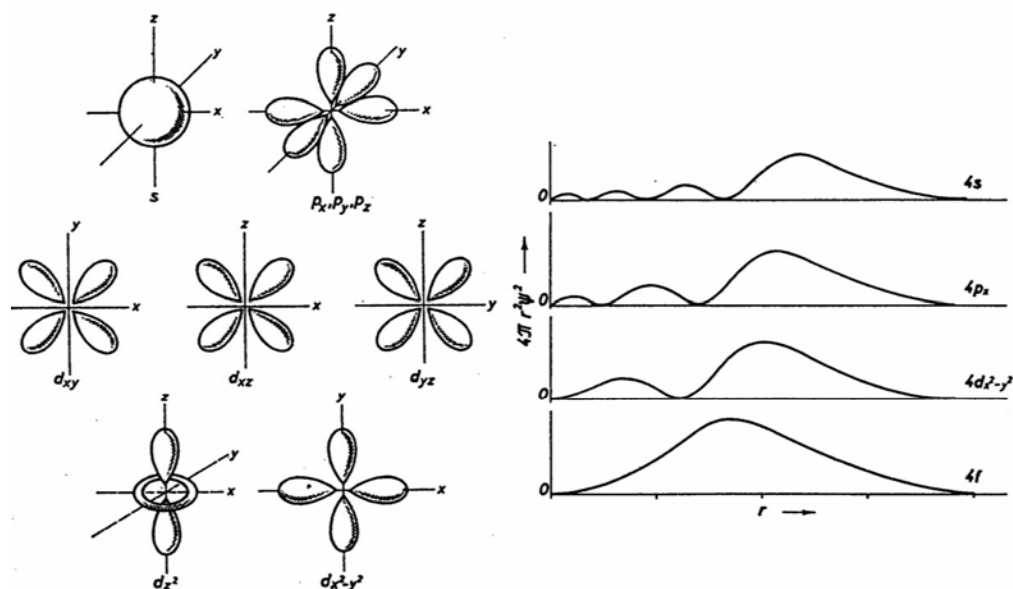
Na sliki S3.7. je na razne načine predstavljena 2p- orbital, ki imajo $n = 2$ in $l = 1$. Črte v konturnem diagramu predstavljajo spreminjanje verjetnosti nahajanja elektrona, slika s "skupkom pikic" pa, tako kot v primeru s- orbital, interpretira hitro gibanje elektrona ter njegovo verjetnost nahajanja. Prikazane so vse tri posamezne p orbitale, ki so nameščena na koordinatnih oseh x, y in z; tako so pravokotne druga na drugo. Na sliki S3.7. je gostota verjetnosti nahajanja elektrona predstavljena z gostoto pikic in korelirana s kvadratom valovne funkcije, ki, kot smo že rekli, predstavlja verjetnost nahajanja elektrona. Žal pa ni nadaljnjih analognih slik 3p in 4p orbital, kjer bi bilo treba narisati, kako v notranjosti



Slika S3.7.: Razne predstavitve p- atomskih orbital.

posamezne "ročke" niha verjetnost nahajanja elektrona. Pač pa je iz slike S3.7. jasno razvidno, da pa v primeru p- orbitale ni vseeno iz katere smeri se ji približujemo, če želimo srečati čimveč elektronov. V primeru p_x orbitale je približevanje v smeri točno po x osi tisto, pri katerem naletimo na največjo verjetnost nahajanja elektrona; ta smer približevanja je torej v tem primeru privilegirana. Analogno velja za p_y in p_z orbitalo s svojima "prednostnima smerema približevanja", ko hitro srečamo veliko gostoto verjetnosti nahajanja elektrona (gosti "čebelji roj"). Obstajajo pa pri p- orbitalah smeri približevanja, ki nas sploh ne pripeljejo do srečanja z elektronom. Ta usmerjenost p- orbital v prostoru (popolnoma nekaj drugega kot s- orbitale) bo zelo pomembna pri kovalentnem povezovanju atomov v molekule. Tudi faza valovnih funkcij p- orbital je drugačna kot pri s- orbitalah: ena ročka ima fazo + (plus) druga ročka pa - (minus); hibridizacija orbital ter kovalentno povezovanje atomov nam bosta pokazala pomen tako predznačenih faz valovne funkcije.

Za konec predstavitev orbital v atomu vodika pa še "skupna slika" ene s- (krogla), skupaj vseh treh p- (ročke) ter posebej vsake od petih d- orbital (štiriperesne deteljce Slika S3.8.); radialne porazdelitvene funkcije z relativno visokim glavnim kvantnim številom ($n =$

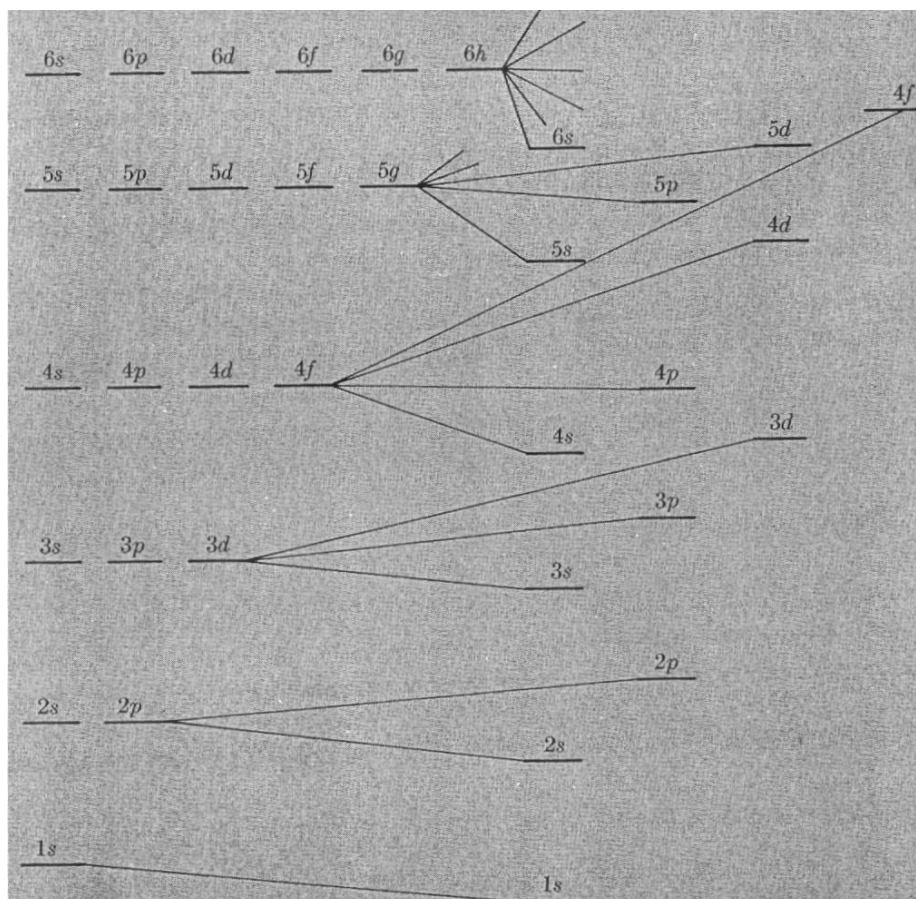


Slika S3.8.: s-, skupek p- ter d- orbitale ter neke njihove radialne porazdelitvene funkcije (tudi 4f- orbitale)

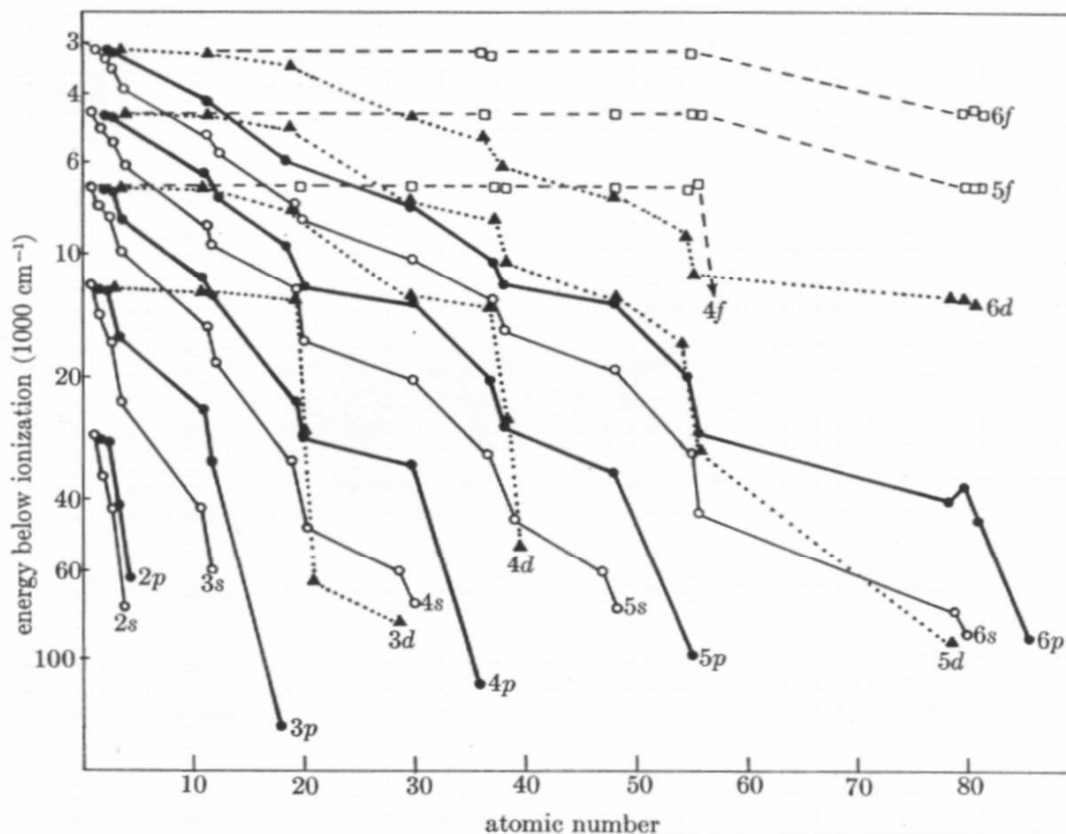
4) lepo kažejo nihanje (valovanja) nahajanja elektrona ter spreminjanje števila nihajev s spreminjanje stranskega kvantnega števila l .

Razlog, zakaj tako podrobno obravnavamo strukturo vodikovega atoma ni samo v tem, da bodo vodikovi atomi prisotni praktično v vsaki molekuli, ki jo bomo obravnavali, temveč tudi v tem, da je predstava o orbitalah in njihovih oblikah v vodikovem atomu osnova za obravnavo orbital elektronov v vseh atomih, ki izpolnjujejo periodni sistem. Analitična rešitev Schroedingerjeve enačbe je mogoča le za sistem jedro - en sam elektron (ob predpostavki, da se elektroni gibljejo bistveno hitreje, kot je gibanje jeder pri njihovem medsebojnem nihanju, je možna analitična rešitev enačbe tudi za sistem dva protona - en sam elektron; to je kation vodikove molekule H_2^+); to pomeni vodikov atom, kation helija, kation berilija z nabojem +2, kation bora z nabojem +3 itd. Za vse ostale elemente, torej tudi za helij, je Shroedingerjeva

enačba analitično nerešljiva; probleme "povzročajo" odbojna interakcija elektronov. Vendar razsoden premislek pokaže, da orbitale za elektrone v ostalih elementih ne moreje biti kaj dosti drugačne, kot so orbitale za elektrone v atomu vodika. To je temeljni razlog, zakaj takšna "podrobna" obravnava orbital v vodikovem atomu. Za vse ostale elemente v periodnem sistemu torej privzamemo, da se njihovi elektroni nahajajo na "vodikovim orbitalam podobnih orbitalah". 1s, 2p, 3p, 3d itd., itd. orbitale so torej prisotne v atomu natrija, ogljika, cesija, niobija itd., itd. Polnjene orbital z elektroni poteka v okviru "aufbau principa", torej principa izgradnje periodnega sistema. Po načelih minimalne energije (elektron gre vedno na tisto razpoložljivo orbitalo, ki ima najnižjo energijo), korelacijskih razmerij med kvantnimi števili (n , glavno kvantno število lahko zavzame vse vrednosti od 1 do ∞ ; l , stransko kvantno število, lahko zavzame vrednosti od 0 do $(n-1)$; magnetno kvantno število lahko zavzame vrednosti od $-l$ preko 0 do $+l$; spinsko kvantno število lahko zavzame samo vrednosti $\pm 1/2$) ter uporabo Hundovega pravila (elektroni se na orbitalah z isto energijo (degeneriranih orbitalah) razporedijo tako, da imajo paralelni spin) ter Paulijevega principa (elektrona v istem atomu se morata razlokovati vsaj v enem kvantnem številu; ali pa; v istem atomu ni dveh elektronov z enakimi vsemi štirimi kvantnimi števili) lahko zlagamo posamezne elektrone v posamezne atome z njihovimi jedri. Pomembna sprememba napolnjenih "vodikovim orbitalam podobnih orbital" je v njihovi (nekoliko) spremenjeni energiji. Razne interakcije med elektroni modificirajo energetske nivoje. Tako iz razporeditve energij v atomu vodika, predstavljenih na sliki S3.1., pridemo do energij, ki jih predstavljata sliki S3.9. in



Slika S3.9.: Energetski nivoji v atomu vodika (skrajno levo) ter njihova shematizirana cepitev v energetske nivoje "vodikovim orbitalam podobnih orbital".



Slika S3.10.: Podrobnejša predstavitev cepljenja energetskih nivojev v odvisnosti od atomskega števila.

ljuska (kvantni nivo)	K		L			M						N											
n (1 do ∞)	1		2			3						4											
l (1 do $n-1$)	0	0	1	0	1	0	1	2	0	1	2	0	1	2	3								
m_l (l do $-l$)	0	0	+1	0	-1	0	-1	0	+1	-2	-1	0	-1	0	+1	-2	-1	+2	+1	0	-1	-2	-3
orientacija spina ($m_s = -1/2, +1/2$)	↑	↓	↑	↓	↑	↑	↓	↑	↓	↑	↓	↑	↓	↑	↓	↑	↓	↑	↓	↑	↓	↑	↓
broj istovrsnih orbitala ($2l+1$)	1	1	3	1	3	5	1	3	5	1	3	5	7										
broj istovrsnih elektronov ($2(2l+1)$)	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	6	10	14										
elektronska konfiguracija	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$3d^{10}$	$4s^2$	$4p^6$	$4d^{10}$	$4f^{14}$													
broj orbitala (n^2)	1		4			9						16											
broj elektronov u ljusci ($2n^2$)	2		8			18						32											

Tabela T3.2.: Preglednica možnih atomskih orbital ter njihovo število in število elektronov.

S3.10; prejšnja, precej jasna slika pri vodik, postane bolj zapletena. Tabela T3.2. vsebuje pregled možnih orbital v več elektronskih atomih, poleg tega pa predstavlja tudi vse "računovodske" podatke o številu posameznih orbital in podorbital (ljusk) ter seveda podatke o številu elektronov v posamezni orbitali, podorbitali (ljuski) in v atomu. Tabela T3.3. pa

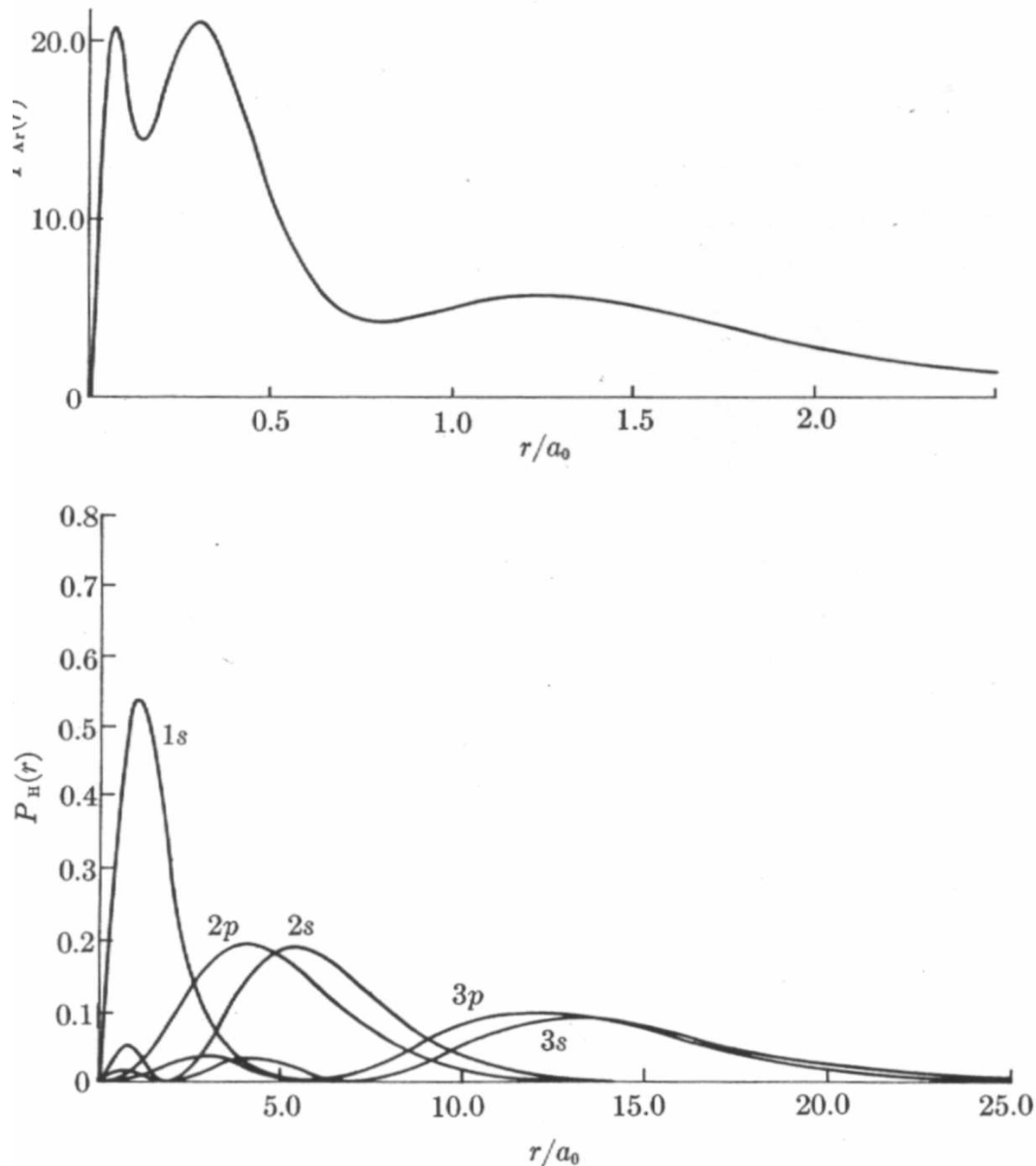
vsebuje elektronske konfiguracije vseh atomov v periodnem sistemu. Podroben pregled pokaže, da v lepo urejenost "izgraditvenega načela" (aufbau principle) poseže kdaj pa kdaj

Elektronske konfiguracije atoma (u plinovitem stanju)

Atomski broj	Element	Elektronska konfiguracija	Atomski broj	Element	Elektronska konfiguracija
1	H	1s ¹	55	Cs	(Xe)6s ¹
2	He	1s ²	56	Ba	-6s ²
3	Li	(He)2s ¹	57	La	-5d ¹ 6s ²
4	Be	-2s ²	58	Ce	-4f ¹ 5d ¹ 6s ²
5	B	-2s ² 2p ¹	59	Pr	-4f ³ 6s ²
6	C	-2s ² 2p ²	60	Nd	-4f ⁴ 6s ²
7	N	-2s ² 2p ³	61	Pm	-4f ⁵ 6s ²
8	O	-2s ² 2p ⁴	62	Sm	-4f ⁶ 6s ²
9	F	-2s ² 2p ⁵	63	Eu	-4f ⁷ 6s ²
10	Ne	-2s ² 2p ⁶	64	Gd	-4f ⁷ 5d ¹ 6s ²
11	Na	(Ne)3s ¹	65	Tb	-4f ⁹ 6s ²
12	Mg	-3s ²	66	Dy	-4f ¹⁰ 6s ²
13	Al	-3s ² 3p ¹	67	Ho	-4f ¹¹ 6s ²
14	Si	-3s ² 3p ²	68	Er	-4f ¹² 6s ²
15	P	-3s ² 3p ³	69	Tm	-4f ¹³ 6s ²
16	S	-3s ² 3p ⁴	70	Yb	-4f ¹⁴ 6s ²
17	Cl	-3s ² 3p ⁵	71	Lu	-4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²
18	Ar	-3s ² 3p ⁶	72	Hf	-4f ¹⁴ 5d ² 6s ²
19	K	(Ar)4s ¹	73	Ta	-4f ¹⁴ 5d ³ 6s ²
20	Ca	-4s ²	74	W	-4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ²
21	Sc	-3d ¹ 4s ²	75	Re	-4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ²
22	Ti	-3d ² 4s ²	76	Os	-4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ²
23	V	-3d ³ 4s ²	77	Ir	-4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ²
24	Cr	-3d ⁵ 4s ¹	78	Pt	-4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ¹
25	Mn	-3d ⁵ 4s ²	79	Au	-4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹
26	Fe	-3d ⁶ 4s ²	80	Hg	-4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ²
27	Co	-3d ⁷ 4s ²	81	Tl	-4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ¹
28	Ni	-3d ⁸ 4s ²	82	Pb	-4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ²
29	Cu	-3d ¹⁰ 4s ¹	83	Bi	-4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³
30	Zn	-3d ¹⁰ 4s ²	84	Po	-4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴
31	Ga	-3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	85	At	-4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵
32	Ge	-3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	86	Rn	-4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶
33	As	-3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	87	Fr	(Rn)7s ¹
34	Se	-3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	88	Ra	-7s ²
35	Br	-3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	89	Ac	-6d ¹ 7s ²
36	Kr	-3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	90	Th	-6d ² 7s ²
37	Rb	(Kr)5s ¹	91	Pa	-5f ² 6d ¹ 7s ²
38	Sr	-5s ²	92	U	-5f ³ 6d ¹ 7s ²
39	Y	-4d ¹ 5s ²	93	Np	-5f ⁴ 6d ¹ 7s ²
40	Zr	-4d ² 5s ²	94	Pu	-5f ⁶ 7s ²
41	Nb	-4d ⁴ 5s ¹	95	Am	-5f ⁷ 7s ²
42	Mo	-4d ⁵ 5s ¹	96	Cm	-5f ⁷ 6d ¹ 7s ²
43	Tc	-4d ⁵ 5s ²	97	Bk	-5f ⁹ 7s ²
44	Ru	-4d ⁷ 5s ¹	98	Cf	-5f ¹⁰ 7s ²
45	Rh	-4d ⁸ 5s ¹	99	Es	-5f ¹¹ 7s ²
46	Pd	-4d ¹⁰	100	Fm	-5f ¹² 7s ²
47	Ag	-4d ¹⁰ 5s ¹	101	Md	-5f ¹³ 7s ²
48	Cd	-4d ¹⁰ 5s ²	102	No	-5f ¹⁴ 7s ²
49	In	-4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹	103	Lr	-5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²
50	Sn	-4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	104	Unq	-5f ¹⁴ 6d ² 7s ²
51	Sb	-4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	105	Unp	-5f ¹⁴ 6d ³ 7s ²
52	Te	-4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴	106	Unh	-5f ¹⁴ 6d ⁴ 7s ²
53	I	-4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵	107	Uns	-5f ¹⁴ 6d ⁵ 7s ²
54	Xe	-4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶	108	Uno	-5f ¹⁴ 6d ⁶ 7s ²
			109	Unc	-5f ¹⁴ 6d ⁷ 7s ²
			110	Uun	-5f ¹⁴ 6d ⁸ 7s ²

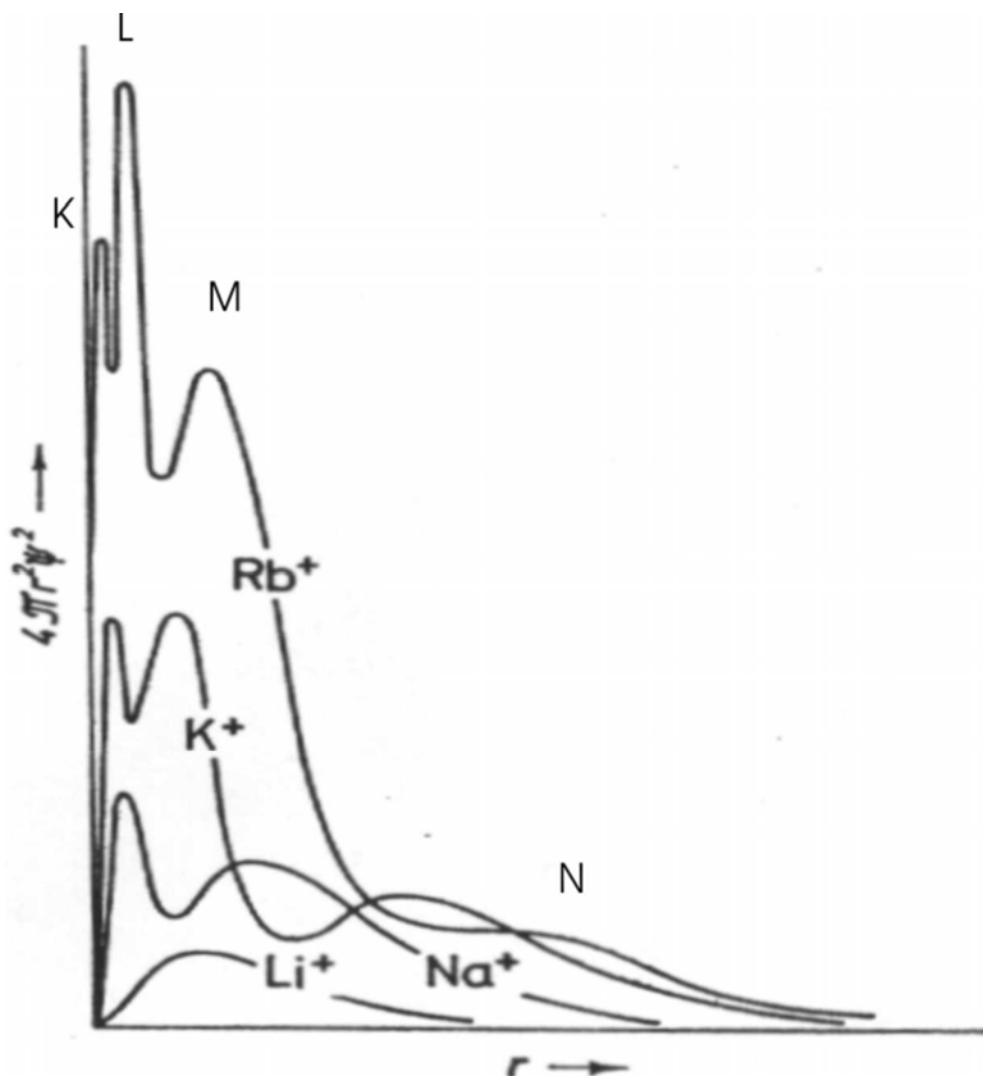
Tabela 3.3.: predstavitev vseh elektronskih konfiguracij atomov periodnega sistema.

delni nered, ki je posledica specifičnega cepljenja energetskih nivojev (atom bakra, kroma, vrsta lantanidov itd.). Glede na izhodne orbitale za vodikov atom se vodikovim orbitalam podobne orbitale najbolj razlikujejo v energiji (podrobnosti so na sliki S3.10). Slika S3.10. kaže, kako se posamezne oble spremenijo v posameznih atomih (K obla ima $n = 1$, L obla $n = 2$, M obla $n = 3$, itd.). Polnjenje orbital z elektroni (izgraditveno načelo - "aufbau principle") sledi seveda tem novim razmeram: 4s orbitala ima nižjo energijo kot 3d orbitale (to seveda ni primer pri atomu vodika) in se seveda zato polni prva (4s) pred drugo (3d). Takih odstopanj oziroma še bolj "nesistematičnih" odstopanj (recimo baker, krom in še drugi elementi) je v celotnem periodnem sistemu kar nekaj; seveda pa to ne "ogroža" kemijske periodičnosti do take mere, da bi periodni sistem postal odvečen. Nadaljnja razlika med orbitalami v atomu



Slika S3.11.: Radialna porazdelitvena funkcija za atom argona (Ar, zgoraj) ter nekaterih orbital v atomu vodika.

vodika in orbitalami v ostalih atomih je v tem, kako daleč se razprostirajo v prostor. V nekem večjem atomu na elektrona na 1s orbitali učinkuje precej večji pozitivni naboj jedra, kot je to primer pri atomu vodika, kjer je v jedru en sam proton; posledica je seveda zmanjšanje "volumna" verjetnosti nahajanja elektrona. Na sliki S3.11. je predstavljena elektronska gostota (verjetnost nahajanja elektrona/ov) v atomu argona ter v atomu vodika. Primerjava vrednosti na abscisi (razdalja kot mnogokratnik Borovega radija) ter na ordinati (vrednost radialne porazdelitvene funkcije) pokaže, da je 1s- orbitala ($n = 1$) v vodiku na razdalji, ko se v argonu nekako konča L-oblata ($n = 2$) in začne M-oblata ($n = 3$). Seveda pa je zato, ker so elektroni "zbiti" na manjši razdalji, vrednost radialne porazdelitvene funkcije pri Ar mnogo večja (okoli 20) kot v primeru H (dobrih 0,5). Na sliki S3.12. so prikazane radialne porazdelitvene funkcije še za razne katione alkalijskih kovin.



Slika S1.12.: Radialne porazdelitvene funkcije za katione alkalijskih kovin.

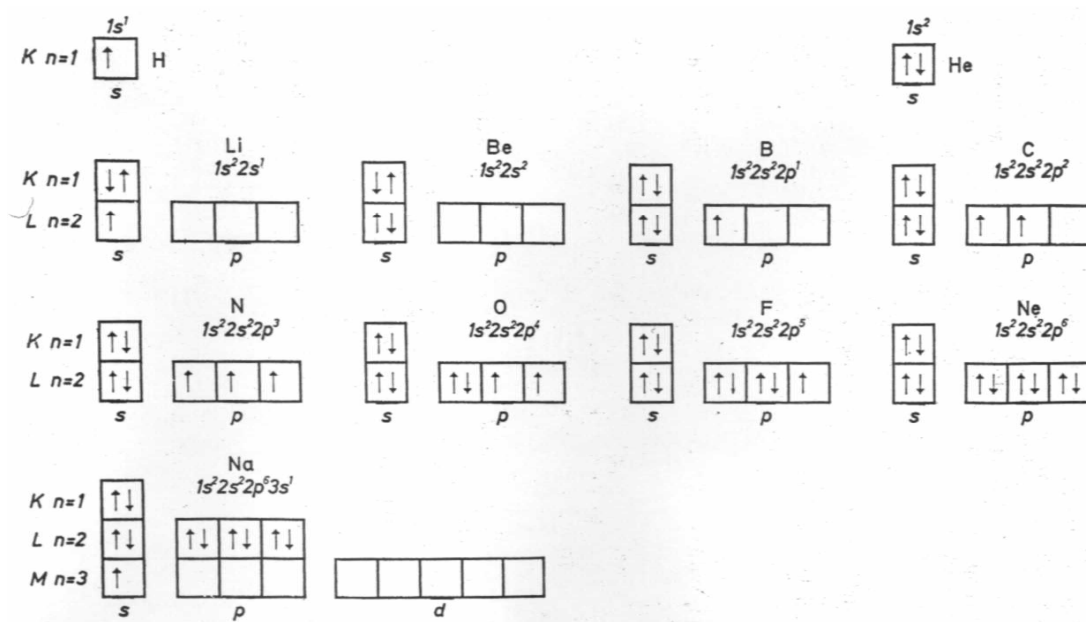
V okviru našega učenja bomo daleč v največji meri srečevali "organogene elemente", ki so v prvi in drugi periodi periodnega sistema. Njihova osnovna elektronska struktura je poleg ostalih atomov predstavljena v tabeli T3.3. Naslednja tabela T3.4. je sestavljena tako da

je vsak naslednji element iz nične ter prve in druge periode predstavljen s svojim "zadnjim elektronom", torej s tistim, ki ga je treba dodati k predhodnjemu elementu, da dobimo "naš

H							He
1s							1s ²
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
2s	2s ²	2s ² 2p	2p ²	2p ³	2p ⁴	2p ⁵	2p ⁶
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
3s	3s ²	3s ² 3p	3p ²	3p ³	3p ⁴	3p ⁵	3p ⁶

Tabela T3.4.: Elektronska struktura elementov nične ter prve in druge periode ("organogeni elementi").

element". Vodik je najenostavneje zgrajeni atom, najdemo pa ga praktično "kjerkoli": na soncu, v vodi, v vseh živih bitjih itd. Naslednji organogeni element je ogljik. To je osnovni element življenja. Organska kemija lahko imenujemo tudi kemija ogljika (brez soli ogljikove kisline); z ogljikom oziroma z njegovimi variacijami se bomo neprestano srečevali. Dušik in



Slika S3.13.: Podrobna razporeditev elektronov v atomih iz začetka periodnega sistema.

kisik sta naslednja organogena elementa; brez njiju seveda ni molekul, ki predstavljajo življeneje. Na sliki S3.13. so podrobno predstavljene elektronske strukture elementov iz nične ter prve periode (tudi začetek druge periode) periodnega sistema. Fosfor, žveplo ter klor in brom so še nadaljnji organogeni elementi; Njihovo podrobno elektronsko strukturo ni težko sestaviti na osnovi njihove predstavitve v tabeli T3.3. Tudi ostalim elementom kot so natrij, kalij, klor, železo, magnezij, kobalt, selen ipd. lahko njihovo podrobno elektronsko sliko izpeljemo iz tabele T3.3. V živih organizmih se pojavljajo v zelo malih ali celo v "mikro" količinah (mikroelementi), pa zaradi tega seveda niso nič manj pomembni za obstoj in "delovanje življenja".