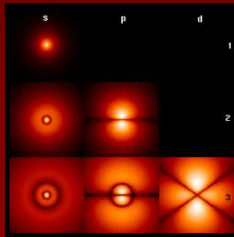


Elektronový obal atomu



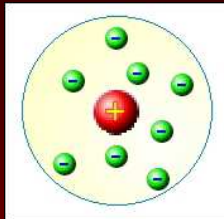
Vlnění o frekvenci ν se může chovat jako proud částic (kvant - fotonů) o energii

$$E = h \cdot \nu$$

Částice pohybující se s hybností p se může chovat jako vlna o vlnové délce

$$\lambda = h/p$$

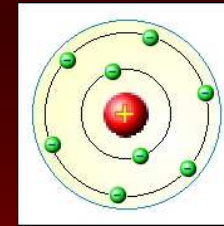
Kde h – Planckova konstanta ($6,63 \times 10^{-34}$ J.s)



Rutherford

Dráha elektronu kruhová – poloměr r , rychlost v

Problém – ztráta energie (vyzáření) při pohybu nabitých částic (klasická fyzika) – kolaps elektronu do jádra – v praxi k tomu nedochází.

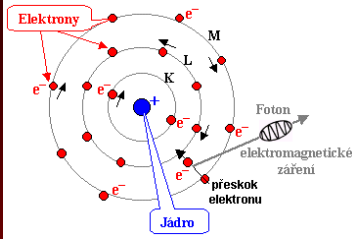


Bohr

Dráha elektronu – zcela určitá, konkrétní (kruhová)

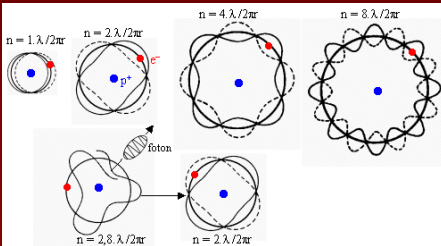
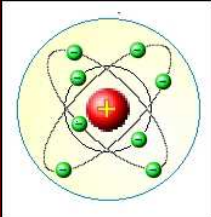
Elektron na této dráze – pouze určitá (kvantovaná) energie a žádné vyzařování

Problém u větších atomů - více elektronů, energetické spektrum neodpovídá



Elektron - pouze určitá (kvantovaná) energie – při získání nebo ztrátě energie (foton) – přestup na jinou dráhu – energetickou HLADINU

Elektron - pouze určitá (kvantovaná) energie, neboli vlnová délka a frekvence →

$$2\pi r_n = n \cdot \lambda$$



Schrödingerovy rovnice

Energie elektronu – součet kinetické a potenciální energie – řešení této rovnice

$$\sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2mr^2 \sin^2 \theta}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) \psi = 0$$

$\Psi_{n,m,l}$ – vlnová funkce – udává pravděpodobnost výskytu elektronu v daném místě (trojrozměrném prostoru)



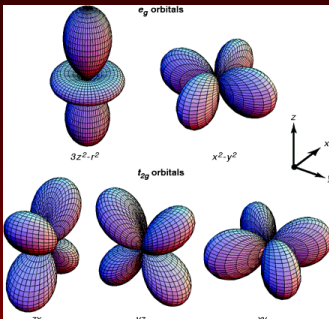
$\Psi_{n,m,l}$ – vlnová funkce

Vhodným zobrazením této funkce vychází prostor, kde se elektron může s největší pravděpodobností vyskytovat kolem atomu

ORBITAL

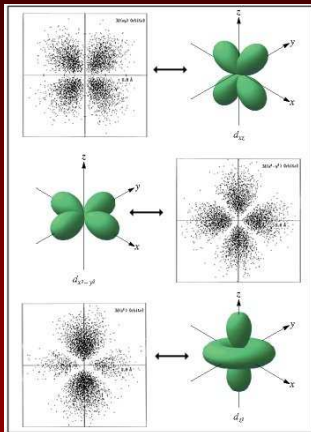
Orbital vodíku

Řešení rovnice je možné pouze tehdy, když sada kvantových čísel - n,m,l – nabývá pouze určitých hodnot



Kvantová čísla

Adresa elektronu, vč. patra, čísla bytu a spolubydlících



n - hlavní kvantové číslo

$n = 1, 2, 3, \dots$;

n : 1=K, 2=L, 3=M atd.

Popisuje na jaké hladině se elektron nachází, tedy energii elektronu a jeho vzdálenost od jádra.

V tabulce určuje periodu!

l – vedlejší kvantové číslo

$l = 0$ až $n-1$ (př. $n=2 \rightarrow l=0$ a 1)

**$l=0$ orbital s; $l=1$ orbital p; $l=2$ orbital d;
 $l=3$ orbital f**

Popisuje energii elektronu a tvar orbitalu

V tabulce určuje oblast!

m – magnetické kvantové číslo

m : $-l$ do $+l$ (př. $l=2 \rightarrow m=-2, -1, 0, 1, 2$)

Popisuje orientaci jednotlivých orbitalů.

Udává, kolik orbitalů existuje od daného typu (s, p, d, f) a jak jsou orientované.

m_s – spinové kvantové číslo

m_s : $1/2$ a $-1/2$

Popisuje vnitřní moment hybnosti. Lze si představit jako směr rotace částice (s výhradou).

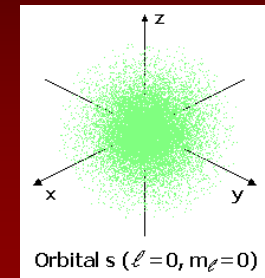
SOUBOREM ČTYŘ KVANTOVÝCH ČÍSEL JE JEDNOZNAČNĚ URČEN KAŽDÝ ELEKTRON V ATOMU.

PAULIHO PRINCIP VÝLUČNOSTI – ŽÁDNÉ DVA ELEKTRONY V ATOMU NEMOHOU MÍT VŠECHNA KVANTOVÁ ČÍSLA STEJNÁ.

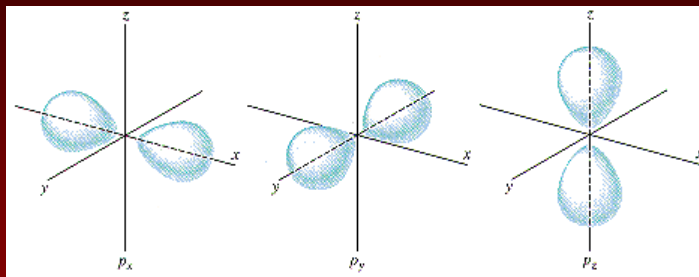
Co vyplývá z PAULIHO PRINCIPU PRO POČET ELEKTRONŮ V JEDNOM ORBITALU??

V JAKÉMKOLIV LIBOVOLNÉM ORBITALU MOHOU BÝT NANEJVÝŠ DVA ELEKTRONY, TY ALE MUSÍ MÍT OPAČNÝ SPIN!

$l=0$ tento orbital je v každé vrstvě (periodě) pouze jeden (protože m je pouze 0) a má tvar koule. Může být obsazen dvěma elektrony, jako každý orbital. To v jaké vrstvě (periodě) se orbital nachází označíme číslem před, to kolik je v něm elektronů číselným indexem.

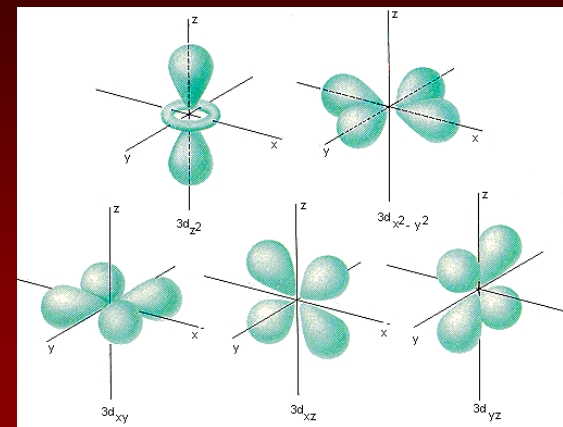


$l=1$ tento orbital je v každé vrstvě (kromě první) ...x (protože m je ..., ..., ...) a má tvar dvojité kuželky.



Všechny tři orbitaly mají stejnou energii ale různou orientaci – jsou degenerované. V jakém kv. čísle se liší?

$l=2$ tento orbital je v každé vrstvě (kromě ?. a ?.) ...x (protože m je) a má tvar složitější:



Všechny orbitály se stejným hlavním kvantovým číslem n – jedna elektronová vrstva – slupka, v tabulce je to perioda

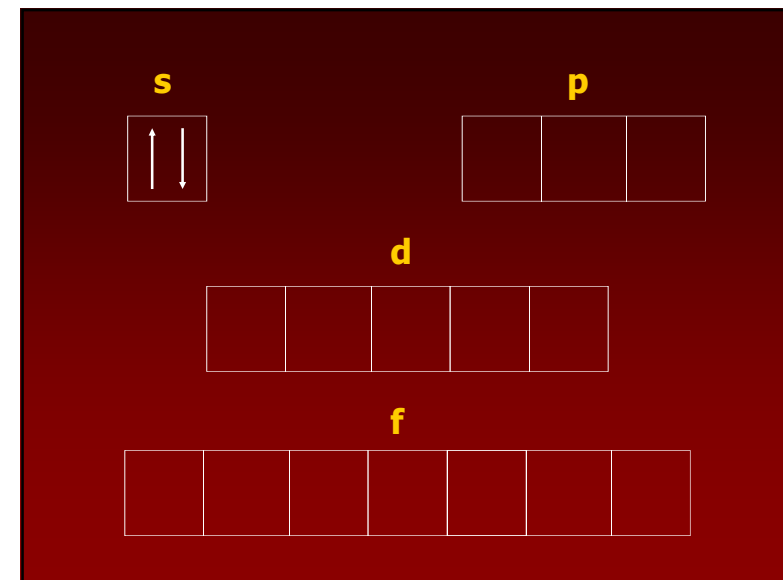
Všechny orbitály se stejnou dvojicí čísel n a l - degenerované orbitály –

- Stejný tvar
- Stejná energie
- Různá orientace


Označení orbitalů podle kvantového čísla l →

Vedlejší kvantové číslo l	0	1	2	3
Typ orbitalu	s	p	d	f

Označení orbitalů podle obsazení elektrony →



1s² 2s² 2p³




Takto je pomocí orbitalů zapsán dusík N

Proč zrovna takto? → Pravidla zaplňování orbitalů

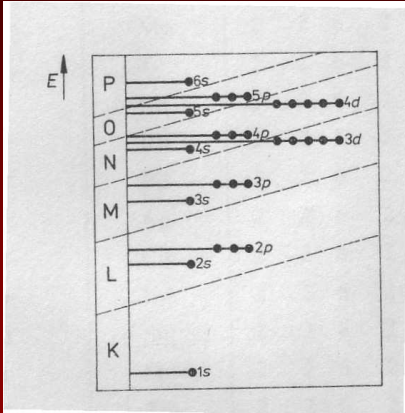
Pravidla zaplňování orbitalů

I. – Pauliho princip výlučnosti – v jednom orbitalu dva elektrony s různým spinem

S



II. – Výstavbový princip – snaha dosáhnout co nejnižší energie – první se obsazují energeticky nižší orbitály – tabulka energií orbitalů!!!




Pořadí zaplňování dle stoupající energie:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p

Pravidlo n+l

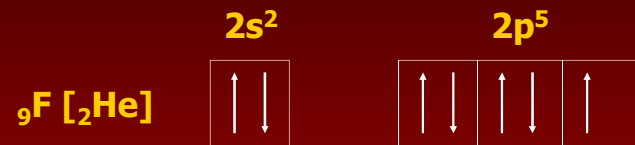
III. – Hundovo pravidlo – nejdříve se zaplňuje co nejvíce degenerovaných orbitalů jedním nepárovým elektronem. Pak teprve vznikají elektronové páry.

1s² 2s² 2p⁵



O jaký prvek se jedná?

Při zápisu je zbytečné vypisovat všechny vnitřní vrstvy elektronového obalu – *pomáháme si konfigurací nejbližšího vzácného plynu*



Do diagramu pak píšeme pouze *valenční vrstvu prvku*

