

STRUKTURA ATOMŮ

Thomson (1897) objevení elektronu (hmotností $w(e) = 9.109\ 382\ 91(40) \times 10^{-31}$ kg a záporným nábojem $Q(e) = -1,602176565(35) \cdot 10^{-19} \text{C}$)

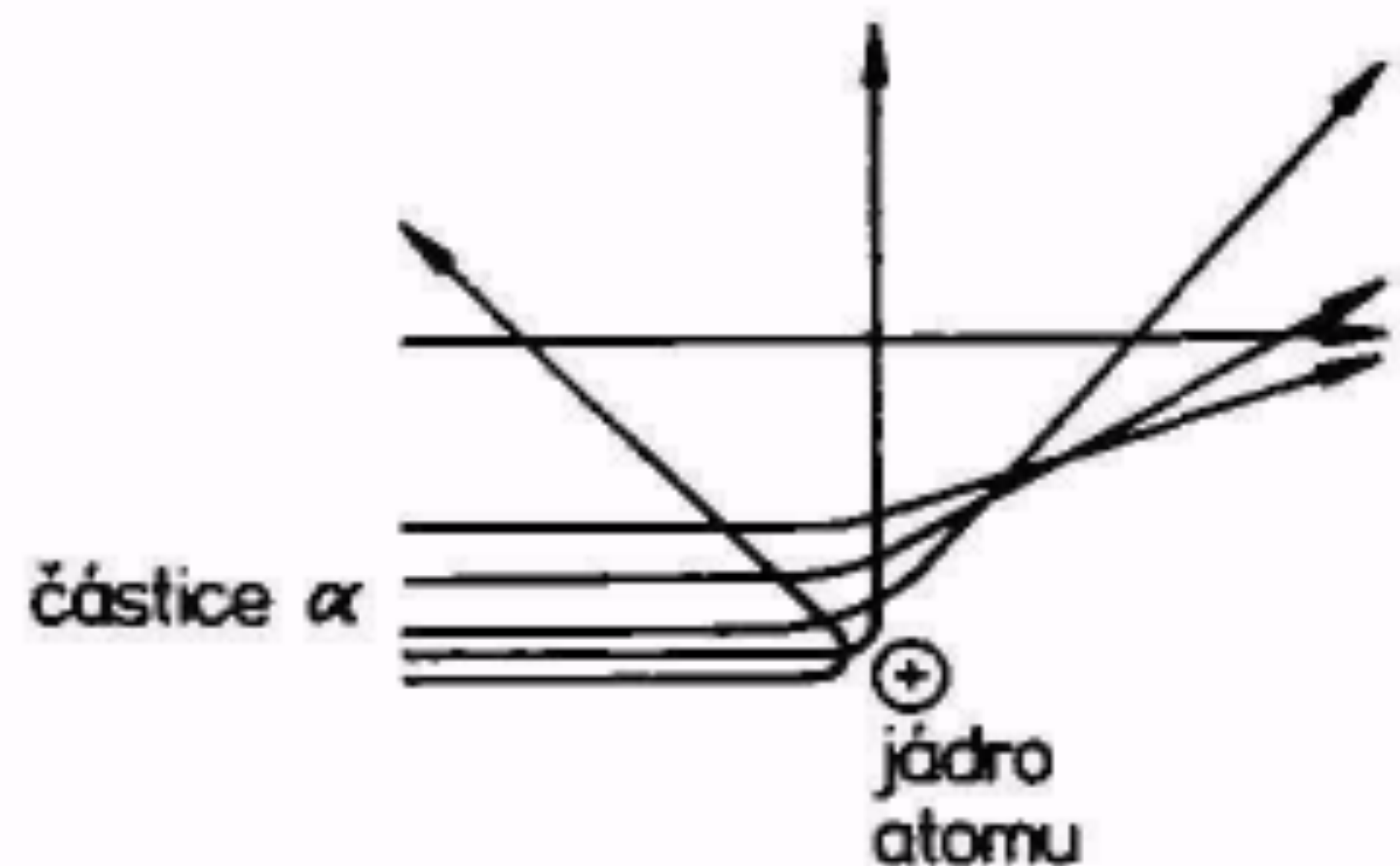
První model atomu - Thomson (1898)

atom je homogenní koule kladně nabitě hmoty, v níž jsou ponořeny elektrony

Objev radioaktivity a pokusy s rozptylem záření při průchodu tenkými kovovými fóliemi (velmi malý počet částic se odchyloval).

Rutherford (1911) **nový model atomu** - kolem kladně nabitého jádra, které je 10 – 100 tis. krát menší než celý atom (ten má velikost řádově 10^{-10}m), obíhají elektrony. Prakticky veškerá hmotnost atomu je soustředěna v jádře;

záporný náboj elektronů kompenzuje kladný náboj jádra. Uspořádání elektronů v elektronovém obalu je rozhodující pro chemické chování atomů při chemických dějích. Odebráním či dodáním elektronu vzniká z atomu elektricky nabitá částice — ion.



JÁDRO ATOMU

Jádro se skládá z **nukleonů**, což je společný název pro **protony a neutrony**.

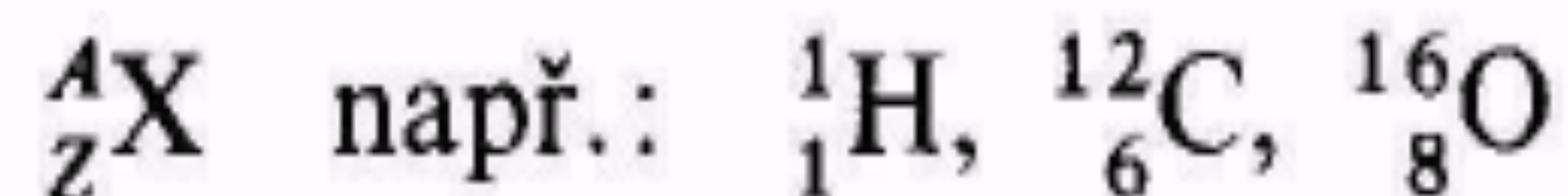
Proton (p) - hmotnost $w(p) = (1,672\ 648\ 5 \pm 0,000\ 008\ 6) \cdot 10^{-27}$ kg, jeden kladný elementární náboj $g(p) = (1,602\ 189\ 2 \pm 0,000\ 004\ 6) \cdot 10^{-19}$ C.

Relativní atomová hmotnost $A_r(p) = 1,00727$. Počet protonů v jádře udává **protonové (atomové) číslo Z**.

Neutron (n) - $m(n) = (1,6749543 \pm 0,0000086) \cdot 10^{-27}$ kg, elektricky neutrální **Relativní atomovou hmotností $A_r(n) = 1,00866$** . Počet neutronů v jádře atomu udává **neutronové číslo N**.

Počet všech nukleonů v jádře udává **nukleonové (hmotnostní) číslo A, platí $A = N + Z$** .

Protonové číslo se uvádí jako index vlevo dole a nukleonové číslo jako index vlevo nahoře u symbolu prvku X:



Nuklid je látka složená z atomů se stejným protonovým a stejným nukleonovým číslem.

Izotopy jsou atomy se stejným protonovým, ale různým nukleonovým číslem.

Z existujících modelů jádra atomu jsou nejznámější dva — **kapkový a slupkový**.

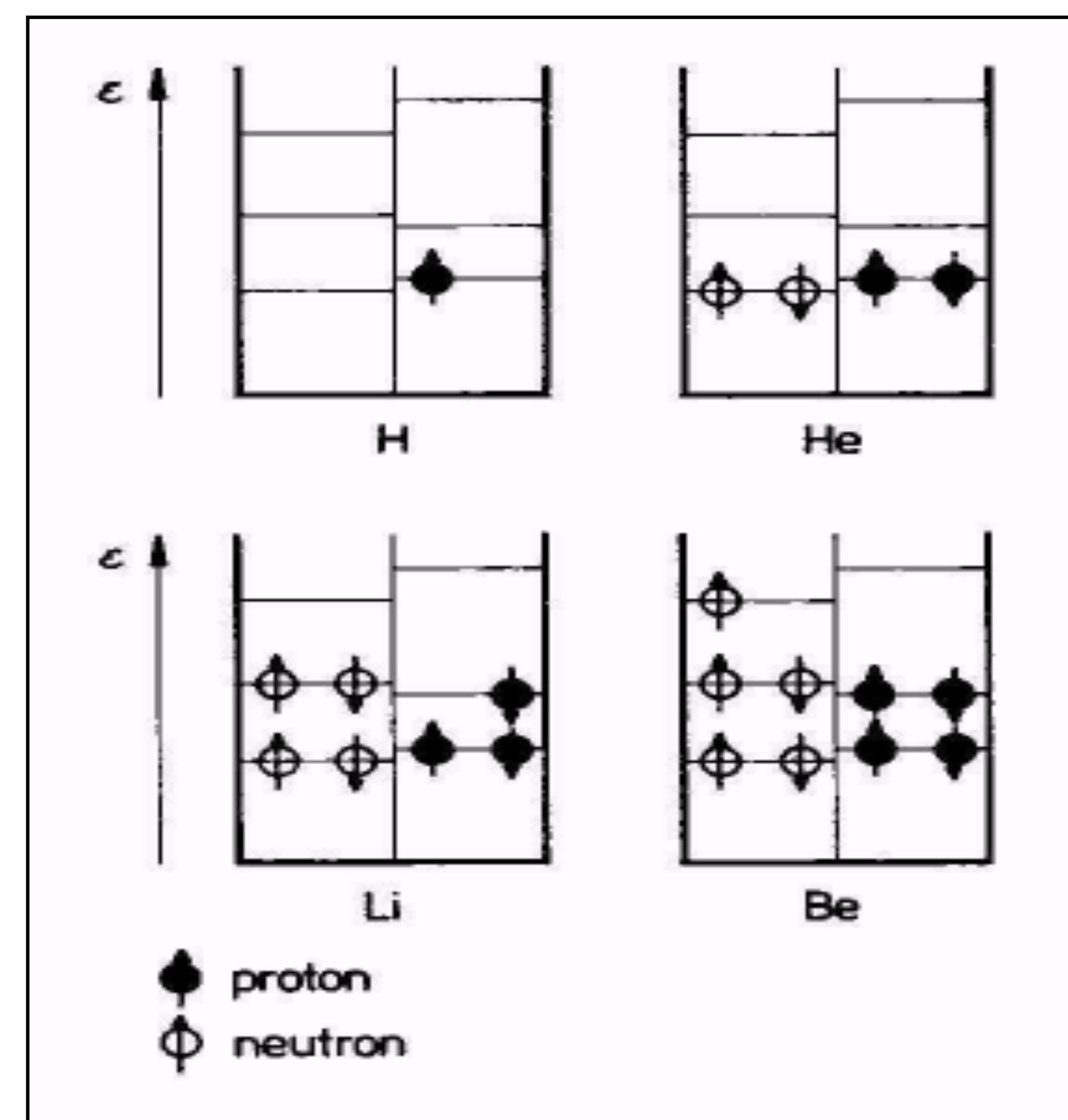
Kapkový model předpokládá, že silné (jaderné) síly působí na nukleony na velmi krátkou vzdálenost, takže na každý nukleon působí silnou silou jen jeho bezprostřední sousedé. Na nukleony v povrchu jádra působí silné síly jen směrem do jádra (analogie povrchového napětí). Kapkový model se používá k vysvětlení štěpení jader.

Slupkový model vychází z předpokladu, že nukleony jsou v jádře uspořádány v určitých energetických hladinách (obdobně jako elektrony v elektronovém obalu), a to tak, že jednotlivé energetické hladiny se postupně zaplňují dvěma protony a dvěma neutrony.

Diagram energetických hladin prvních čtyř prvků.

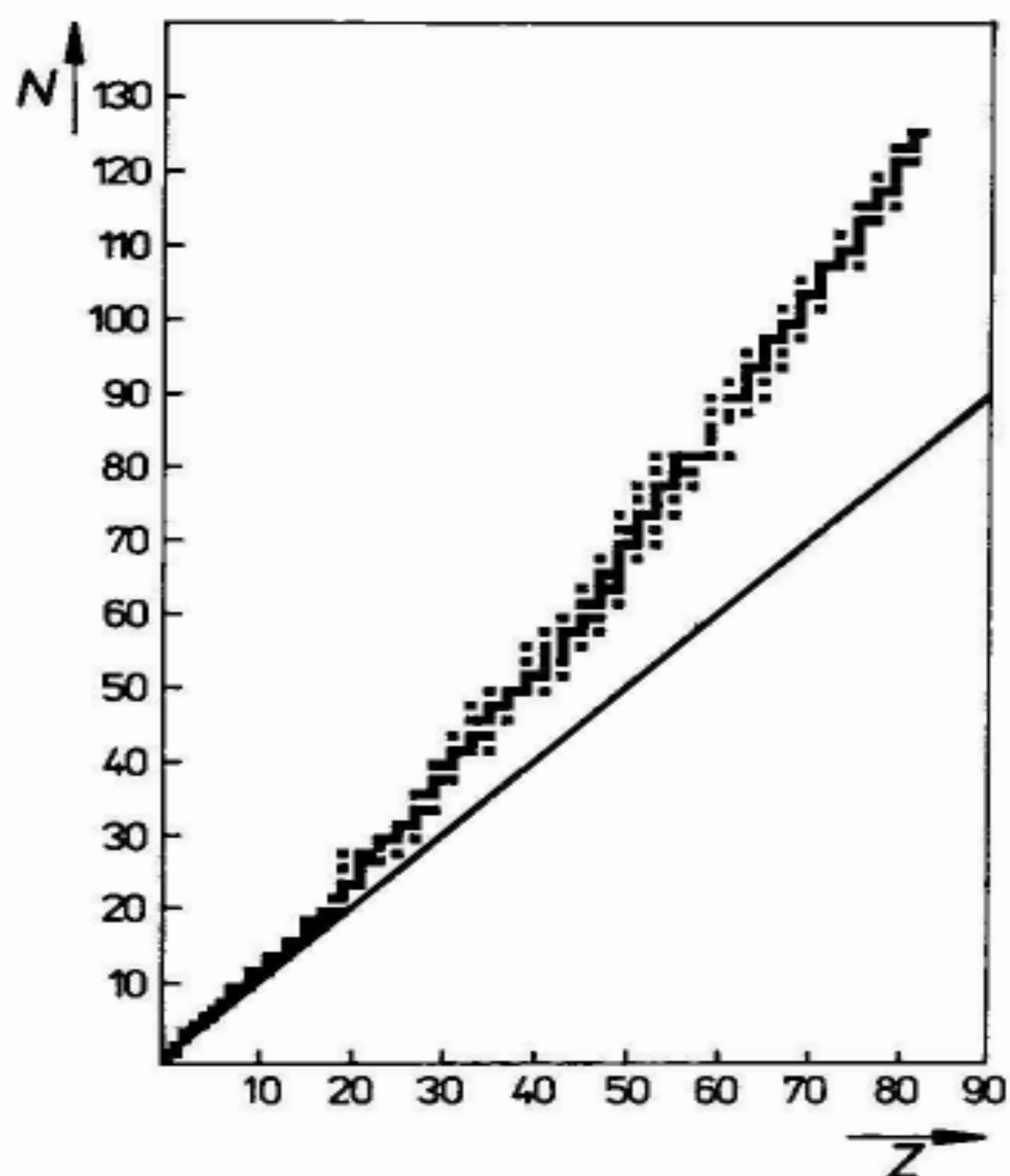
Relativně stálé jsou útvary se slupkami obsazenými dvěma protony a dvěma neutrony. Proto jádro helia a také jádra, která lze formálně odvodit jako násobek jader helia, se vyznačují velkou stabilitou.

Pro $Z < 20$ se jádra skládají přibližně ze stejného počtu protonů i neutronů. U těžších jader se již velmi silně uplatní elektrostatické odpuzování protonů, takže k udržení stability jader v nich musí být určitý přebytek neutronů (působí na ostatní nukleony jen silnými jadernými silami).



Hmotnost jádra je menší než součet hmotností nukleonů - **hmotnostním defektem**

$$\Delta m = \sum m(p) + \sum m(n) - m(j)$$



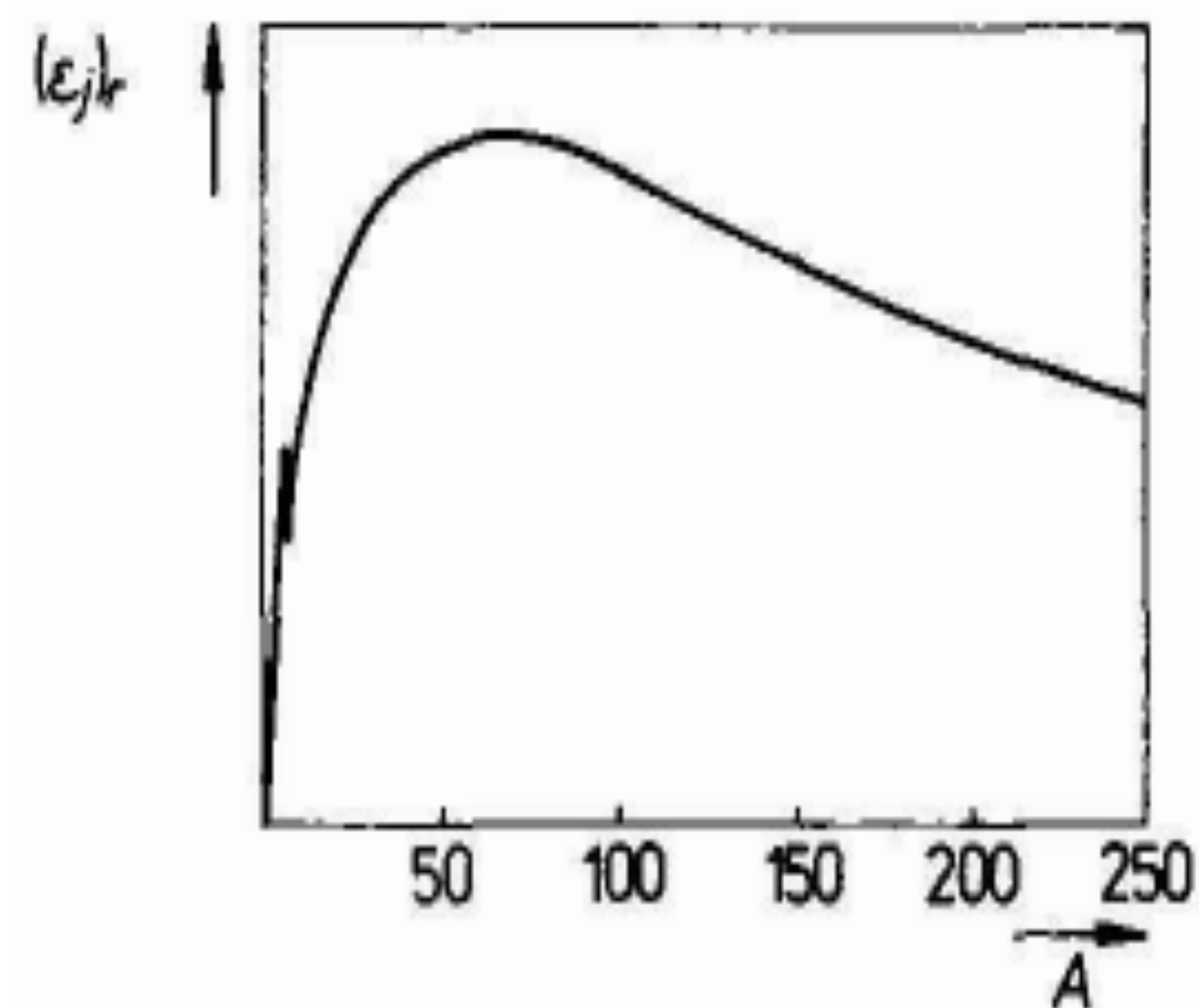
Neutron – protonový diagram stabilních nukleonů (přímka odpovídá jadrům s $N = Z$).

Energetický ekvivalent hmotnostního úbytku představuje **celkovou vazebnou energii jádra ϵ_j** .

Vztažením vazebné energie ϵ_j na jeden nukleon :

$$(\epsilon_j)_r = \frac{\epsilon_j}{A}$$

Závislost vazebné energie $(\epsilon_j)_r$ na A :



Maximum - nejstálější nuklidy (chróm, železo, nikl)

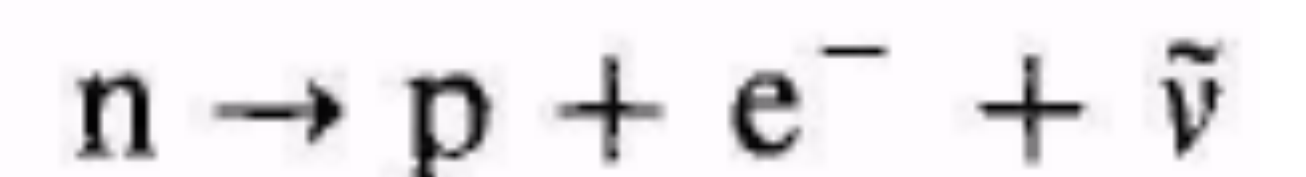
RADIOAKTIVITA

Becquerel (1896)

Radioaktivita je schopnost atomu přeměnit se dříve či později samovolně v jiný atom (za současného vyslání radioaktivního záření).

Záření α jsou rychle letící jádra atomů helia. Vzhledem ke své poměrně velké hmotnosti není příliš pronikavé a lze je úplně zabrzdit již vrstvou vzduchu o tloušťce několika centimetrů.

Záření β jsou rychle letící volné elektrony, které mají mnohem menší hmotnost než záření α , a proto je záření β daleko pronikavější než záření α . Elektrony vyzařované při přeměně β vznikají teprve v okamžiku této přeměny, a to z neutronu, který se tím změní v proton. Při tomto rozpadu se emituje ještě antineutrino.



Záření γ má elektromagnetický charakter. Podobá se rentgenovým paprskům, má však ještě kratší vlnovou délku (10^{-10} až 10^{-13} m). Je proto neobyčejně pronikavé. Provází nejčastěji záření (β , výjimečně též záření α). Záření γ vzniká při přechodu nukleonů v jádře nově vzniklého prvku z energeticky vyšších hladin (ze stavu vzbuzeného) do stavu základního.

Posuvové zákony Soddyho, Fajanse a Russela

Je-li z jádra atomu radioaktivního prvku vyzářena **částice α** , zmenší se počet kladných nábojů v tomto jádře o dva a vznikne nový atom, stojící v periodické soustavě o dvě místa vlevo od atomu původního. Spolu se **zmenšením protonového čísla o dvě jednotky zmenší se i nukleonové číslo, a to o čtyři jednotky**. Relativní atomová hmotnost nového atomu je tedy o čtyři jednotky menší.

Vyzáření částice β z jádra je podmíněno přeměnou jednoho neutronu na proton.

Protonové číslo proto vzroste o jednotku, a vznikne tedy atom nového prvku, stojícího v periodické soustavě o jedno místo vpravo od prvku původního. Počet nukleonů v jádře však zůstane zachován, takže nový prvek má stejnou relativní atomovou hmotnost jako prvek původní.

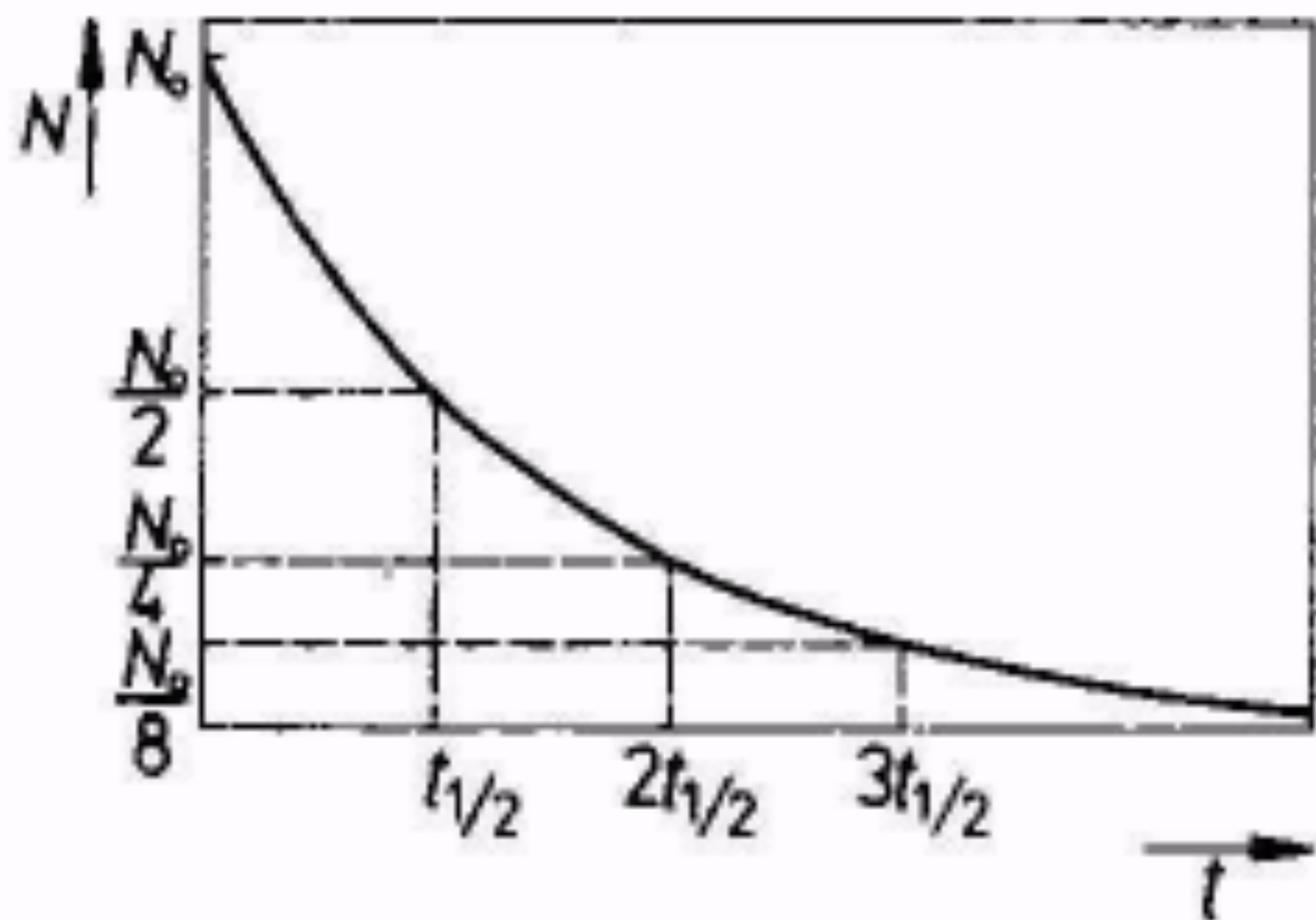
Záření γ nemění složení jádra, a **nezpůsobí** tedy jeho přeměnu v jádro jiné.

Rychlost

$$\frac{-dN}{dt} = kN$$

$$N = N_0 e^{-kt}$$

k je rozpadová konstanta



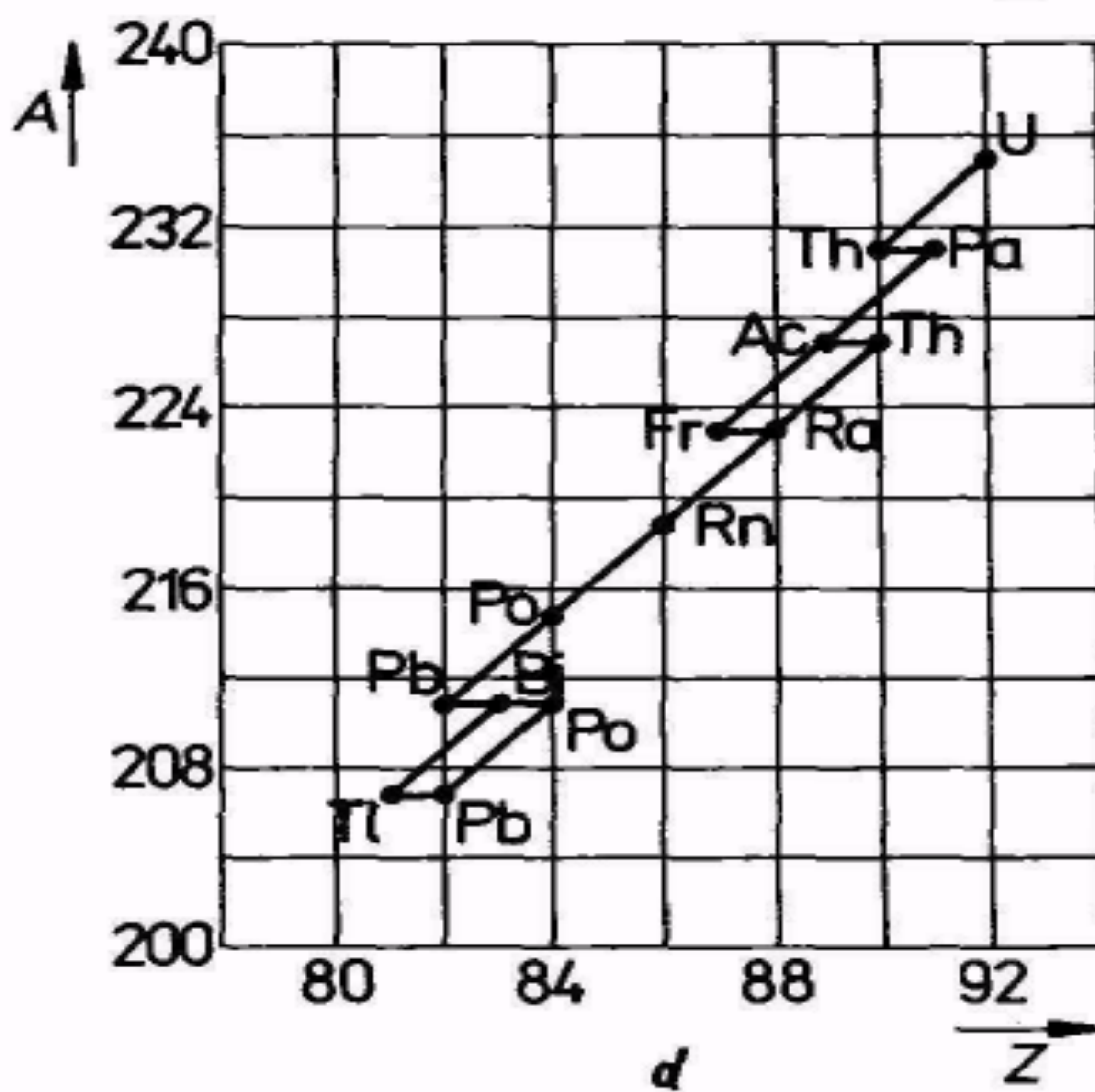
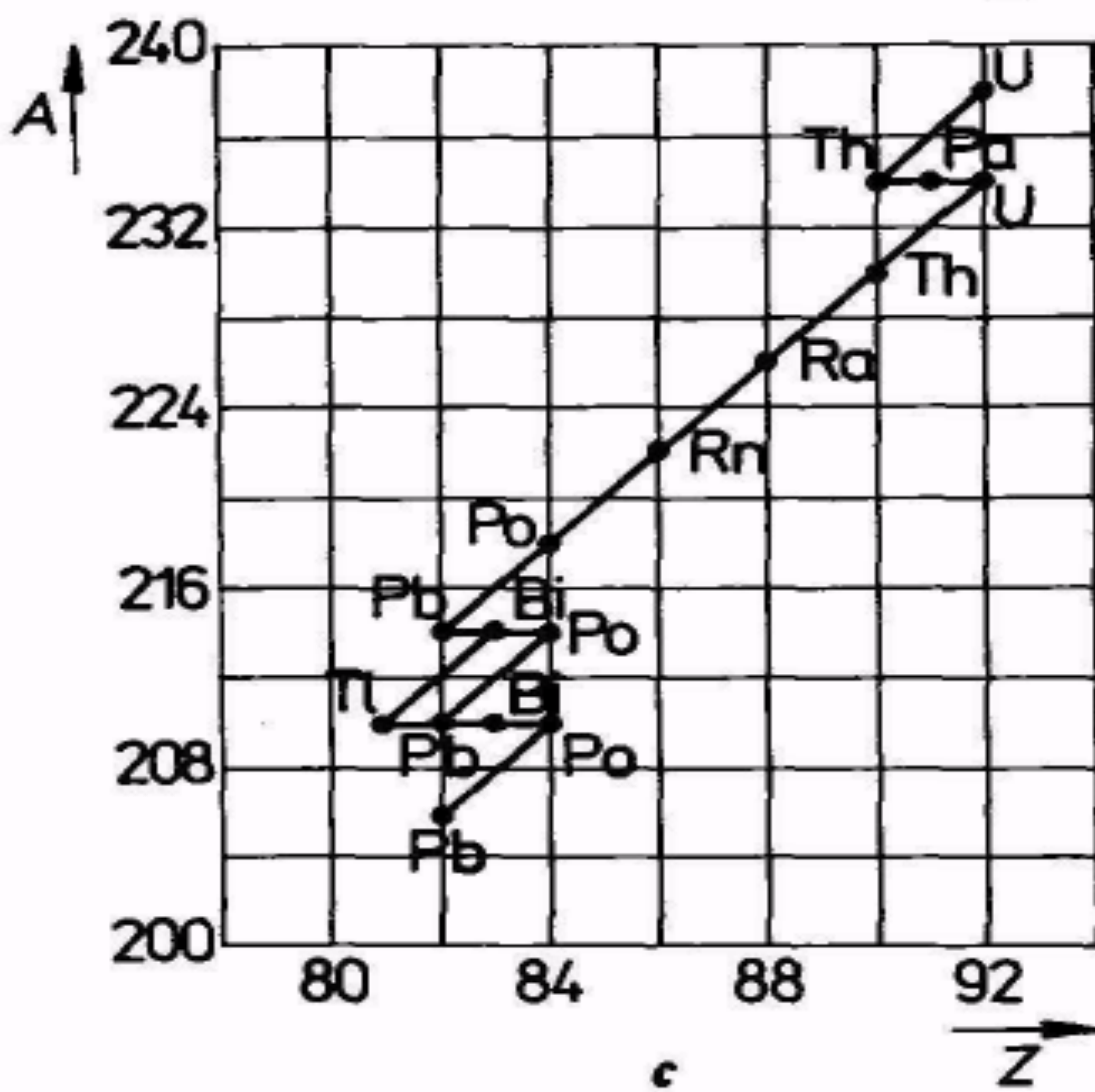
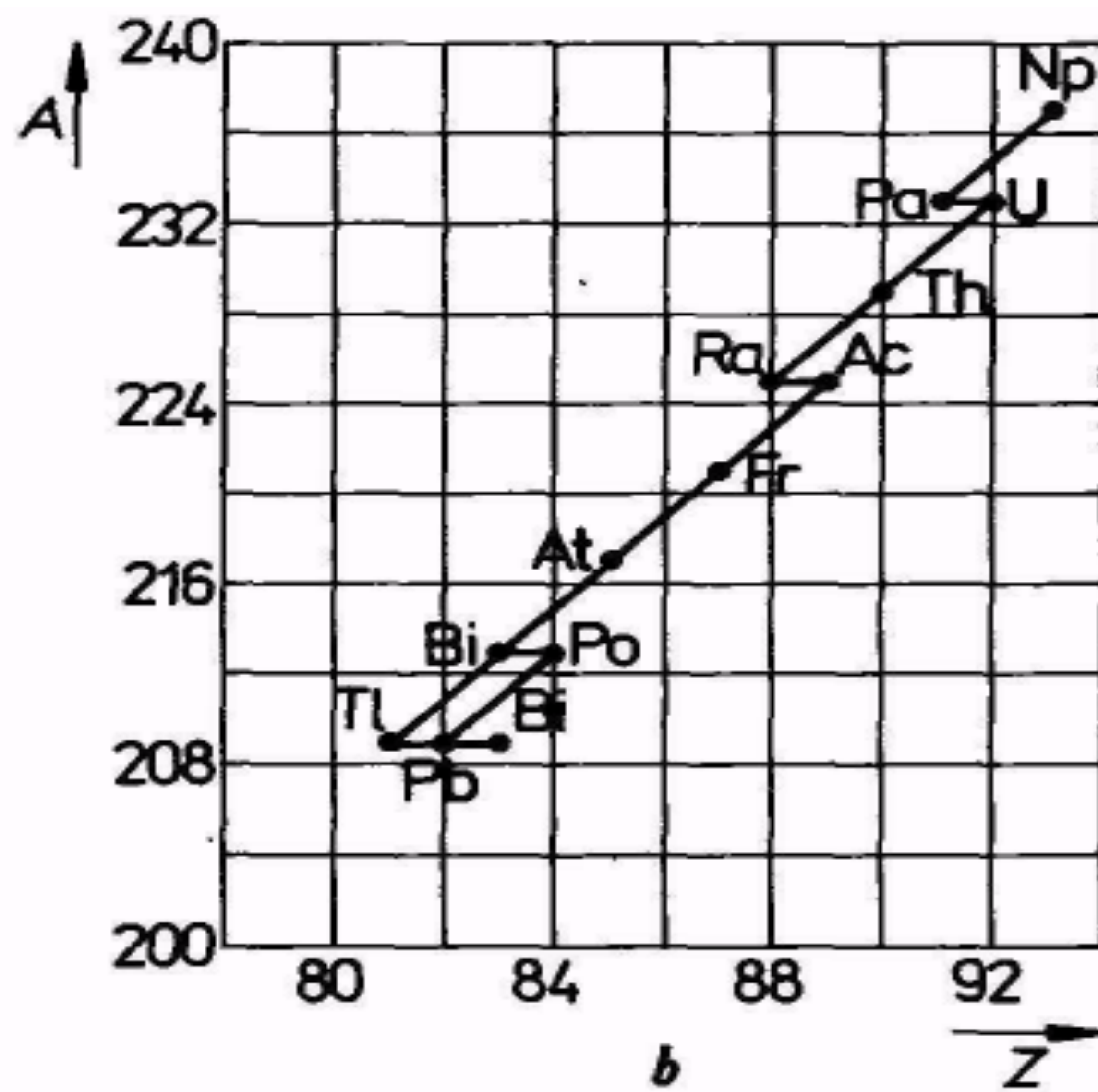
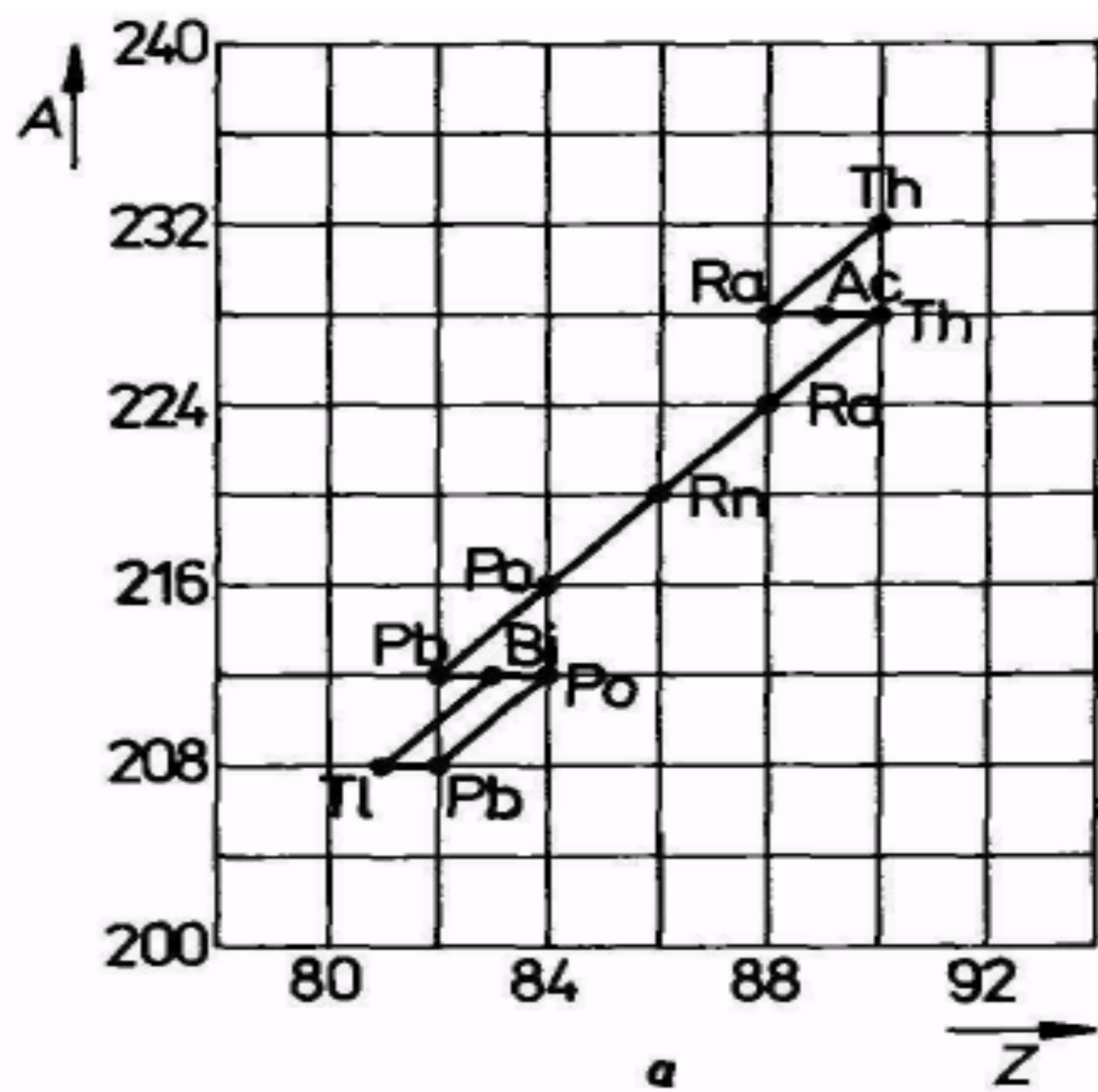
Časová závislost počtu nerozpadlých jader

Místo rozpadové konstanty se používá poločas rozpadu $t_{1/2}$:

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

Radioaktivní rozpadové řady

| Nukleonové číslo | Řada | Mateřský prvek | Poločas (roky) | Konečný prvek |
|------------------|------------|--------------------------|----------------------|--------------------------|
| $A = 4n$ | thoriová | ${}_{90}^{232}\text{Th}$ | $1,39 \cdot 10^{10}$ | ${}_{82}^{208}\text{Pb}$ |
| $A = 4n + 1$ | neptuniová | ${}_{93}^{237}\text{Np}$ | $2,55 \cdot 10^6$ | ${}_{83}^{209}\text{Bi}$ |
| $A = 4n + 2$ | uranová | ${}_{92}^{238}\text{U}$ | $4,51 \cdot 10^9$ | ${}_{82}^{206}\text{Pb}$ |
| $A = 4n + 3$ | aktiniová | ${}_{92}^{235}\text{U}$ | $7,07 \cdot 10^8$ | ${}_{82}^{207}\text{Pb}$ |



2.7 Radioaktivní rozpadové řady. *a* —thoriová; *b* — neptuniová; *c* — uranová; *d* — aktiniová

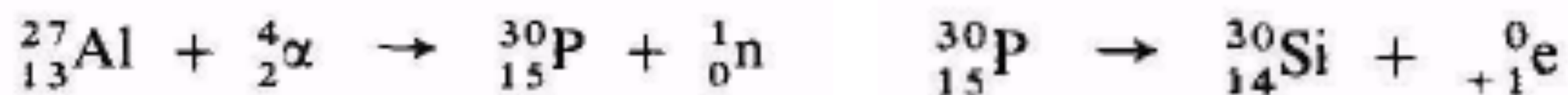
JADERNÉ REAKCE

Přeměna atomového jádra vyvolaná zasažením jádra částicí buď z přirozeného zdroje, nebo ze zdroje umělého. Jaderné přeměny můžeme rozdělit na **přeměny prosté a na štěpné reakce.**

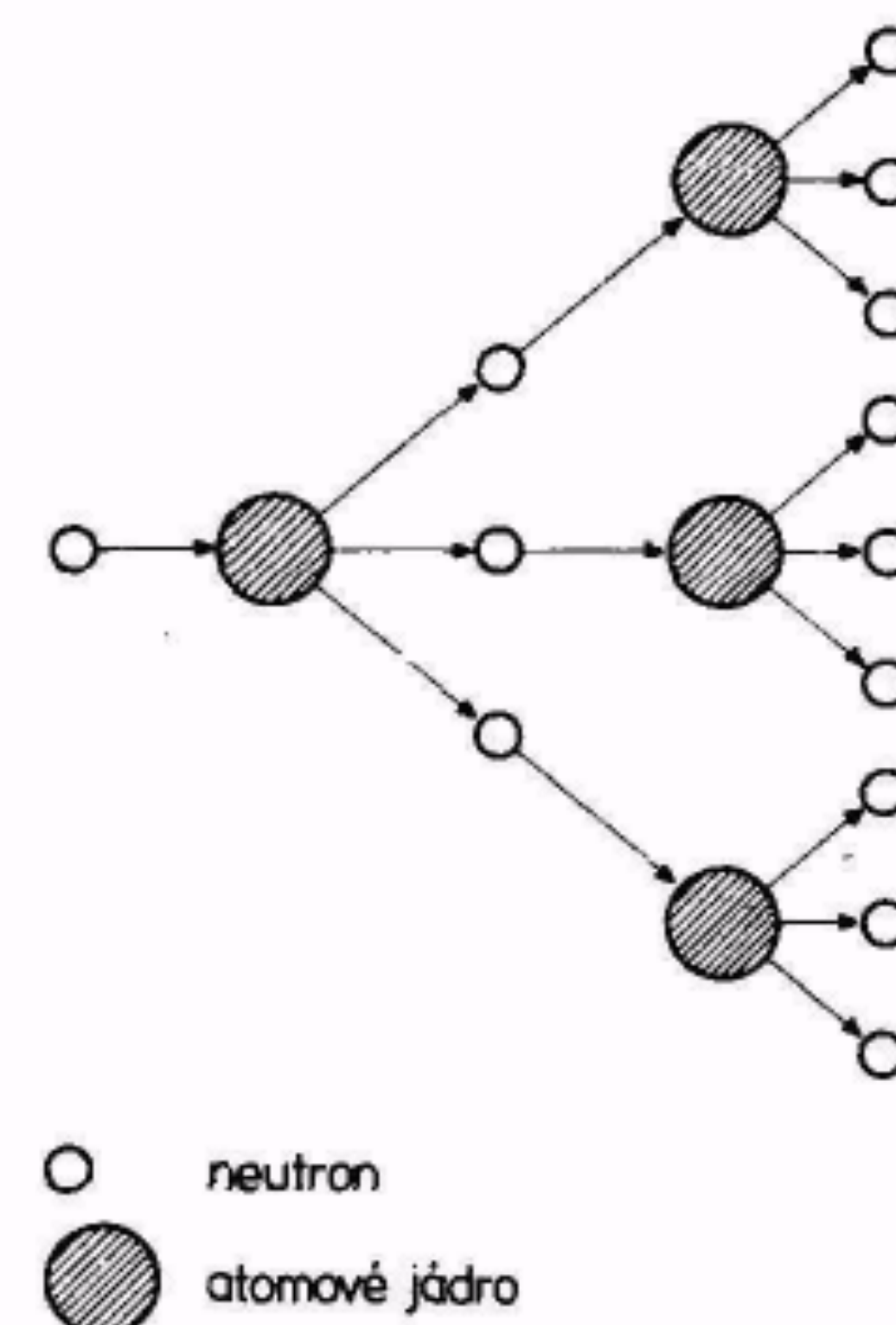
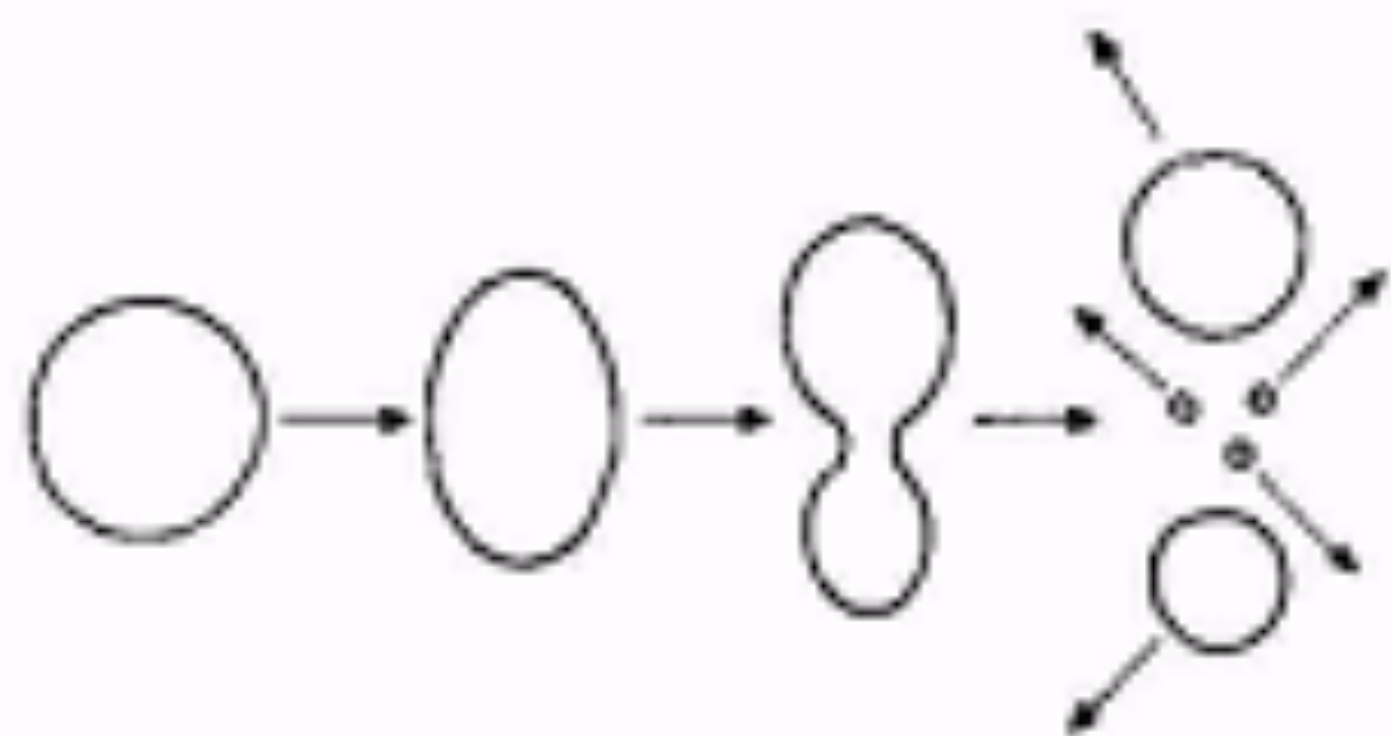
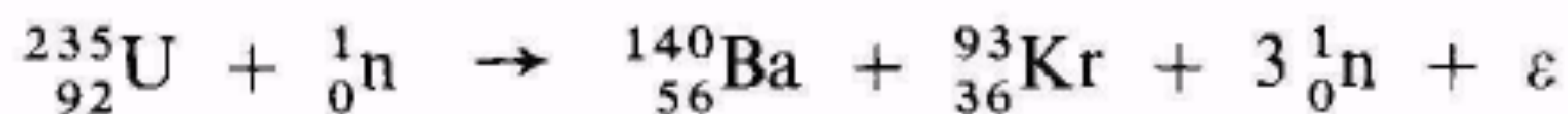
Prostá přeměna (transmutace) - *Rutherford* 1919 ${}^{14}_7\text{N} + {}^4_2\alpha \rightarrow {}^{17}_8\text{O} + {}^1_1\text{p}$

Ve zkrácené formě můžeme tuto reakci zapsat také formou ${}^{14}_7\text{N}({}^4_2\text{a}, {}^1_1\text{p}){}^{17}_8\text{O}$.

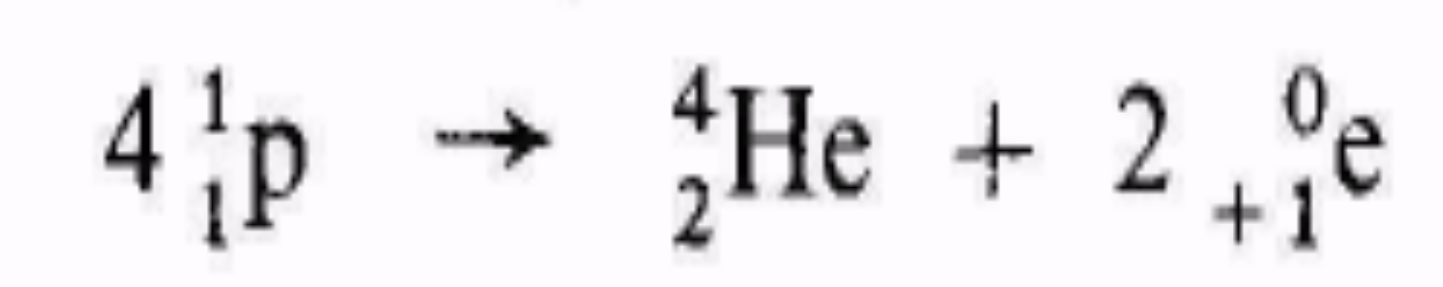
V mnohých případech je vzniklý nuklid nestálý, v přírodních prvcích se nevyskytuje a samovolně se rozpadá. Tento jev se nazývá **umělá radioaktivita. Joliot-Curie.**



Štěpné reakce - Hahn a Strassmann (1939)



Termonukleární reakce



ELEKTRONOVÝ OBAL ATOMU

Problémy Rutherfordova modelu – pohyb elektronu okolo jádra způsobuje vyzařování energie a tedy pokles rychlosti a poloměru dráhy. Nevysvětlení čárových spekter.

Odstranění problémů - Bohr (1915) - Pohyb elektronů po určitých drahách – energetické hladiny, a při pohybu na nich nevyzařuje žádnou energii. Při přechodech platí:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{h}{m(e)v} = \frac{h}{\sqrt{2m(e)(E - E_p)}}$$

Rychlost je získána z kinetické energie

$$E_k = \frac{1}{2}m(e)v^2$$

Časově nezávislá Schrödingerova rovnice

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Atom vodíku

Atom je složen z 1 protonu a 1 elektronu;
elektron se pohybuje v Coulombickém poli jádra – potenciální energii lze vyjádřit:

$$V = \frac{-e^2}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}}$$

a celkový Hamiltonián:
$$H = \frac{M}{2} \left[\left(\frac{dx_1}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dy_1}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dz_1}{dt} \right)^2 \right] + \frac{m}{2} \left[\left(\frac{dx_2}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dy_2}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dz_2}{dt} \right)^2 \right] + V$$

Zavedeme-li těžišťový systém souřadnic, platí pro vzdálenost jádra a elektronu od počátku:
$$\mathbf{a} = \frac{M}{M+m} \mathbf{r}, \mathbf{b} = -\frac{m}{M+m} \mathbf{r}$$
 kde \mathbf{r} je vzdálenost elektronu od jádra.

Po přechodu k sférickým souřadnicím:

$$\begin{aligned} x_1 &= x - \frac{\mu}{M} r \sin \theta \cos \varphi & x_2 &= x + \frac{\mu}{m} r \sin \theta \cos \varphi \\ y_1 &= y - \frac{\mu}{M} r \sin \theta \sin \varphi & y_2 &= y + \frac{\mu}{m} r \sin \theta \sin \varphi \\ z_1 &= z - \frac{\mu}{M} r \cos \theta & z_2 &= z + \frac{\mu}{m} r \cos \theta \end{aligned}$$

Lze Hamiltonovu funkci zapsat:

$$H = \frac{M + m}{2} \left[\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 \right] + \frac{\mu}{2} \left[\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + r^2 \sin^2 \theta \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right] - \frac{e^2}{r}$$

Kde 1. část reprezentuje translační stupně volnosti.

Přechod ke kvantovému popisu provedeme zavedením Hamiltonova operátoru:

$$\mathbf{H} = \frac{-\hbar^2}{8\pi^2(M + m)} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} - \frac{\hbar^2}{8\pi^2\mu} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} - \frac{e^2}{r}$$

Pak lze řešit Schrödingerovu rovnici:

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2(M + m)} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} \psi' + \frac{\hbar^2}{8\pi^2\mu} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \psi' + \left(E' + \frac{e^2}{r} \right) \psi' = 0$$

Rozepsáním vlnové funkce: $\psi' = \chi(x, y, z)\psi(r, \theta, \varphi)$

Můžeme z rovnice odseparovat pohyb těžiště:

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2(M+m)}{h^2} (E' - E)\chi = 0$$

A řešíme H atom v relativních koordinátách:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0$$

Provedeme-li další rozdělení pohybů: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$

a získáme vztah: $\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) r^2$

$$= - \frac{1}{Y \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{Y \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2}$$

který řešíme separací radiální a úhlových proměnných:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \lambda Y = 0$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) - \frac{\lambda}{r^2} \right\} R = 0$$

První rovnice je relativně jednoduchá (známá též z řešení tuhého rotátoru) a vede ke sférickým funkcím (asociované Legerendovy polynomy) $Y = Y_{l,\pm m}(\theta, \varphi)$, kde $\lambda = l(l+1)$, s celočíselnými konstantami l a m za současného splnění podmínky: $l \geq |m|$.

Dosazením za $\lambda = l(l+1)$:
$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{8\pi^2 \mu}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0$$

Pro záporné hodnoty E lze po zavedení nového parametru n rovnici zjednodušit na:

$$E = -\frac{2\pi^2 \mu e^4}{n^2 h^2} \quad \frac{d^2 R}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dR}{dx} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{n}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) R = 0 \quad \text{kde}$$

platí:
$$r = \frac{n h^2}{8\pi^2 \mu e^2} x$$

Tato diferenciální rovnice má řešení ve tvaru asociovaných Laguerových polynomů:

$$R(r) = c x^l e^{-\frac{x}{2}} L_{n+l}^{2l+1}(x); \quad c \text{ se určí z normalizační podmínky:}$$

a platí $n > l$

$$\int_0^{\infty} [R(r)]^2 r^2 dr = 1$$

konstanty v definici x lze označit jako a_0 , kde:
$$a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 \mu e^2}$$

a pak:
$$r = \frac{n a_0}{2} x,$$

Radiální funkci pak můžeme psát ve tvaru:

$$R(r) = - \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

A výsledné řešení atomu vodíku:

$$\psi = R_{n,l}(r) Y_{l,\pm m}(\theta, \varphi)$$

$$Y_{l,\pm m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P^{|m|}(\cos \theta) e^{\pm im\varphi}$$

$$\begin{aligned} R_{n,l}(r) &= - \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) \\ &= - \sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{n^4[(n+l)!]^3}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{2\rho}{n}\right)^l e^{-\frac{\rho}{n}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2\rho}{n}\right) \end{aligned}$$

Indexy n , l a m jsou **hlavní, vedlejší a magnetické kvantová čísla** asociačními podmínkami:

$$n > l \geq |m|,$$

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots; \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1; \quad m = -l, \dots, 0, \dots, +l.$$

Vlnovou funkci $\Psi_{n,l,m}$ popisující pohyb elektronu nazýváme **atomový orbital (AO)**.
Nejnižší orbitaly mají následující tvary:

$$\rho = \frac{Z}{a_0} r$$

$$n = 1, \quad l = 0, \quad m = 0 \quad \psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\rho}$$

$$n = 2, \quad l = 0, \quad m = 0 \quad \psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (2 - \rho) e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$n = 2, \quad l = 1, \quad m = 0 \quad \psi_{2p_z} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\frac{\rho}{2}} \cos \theta$$

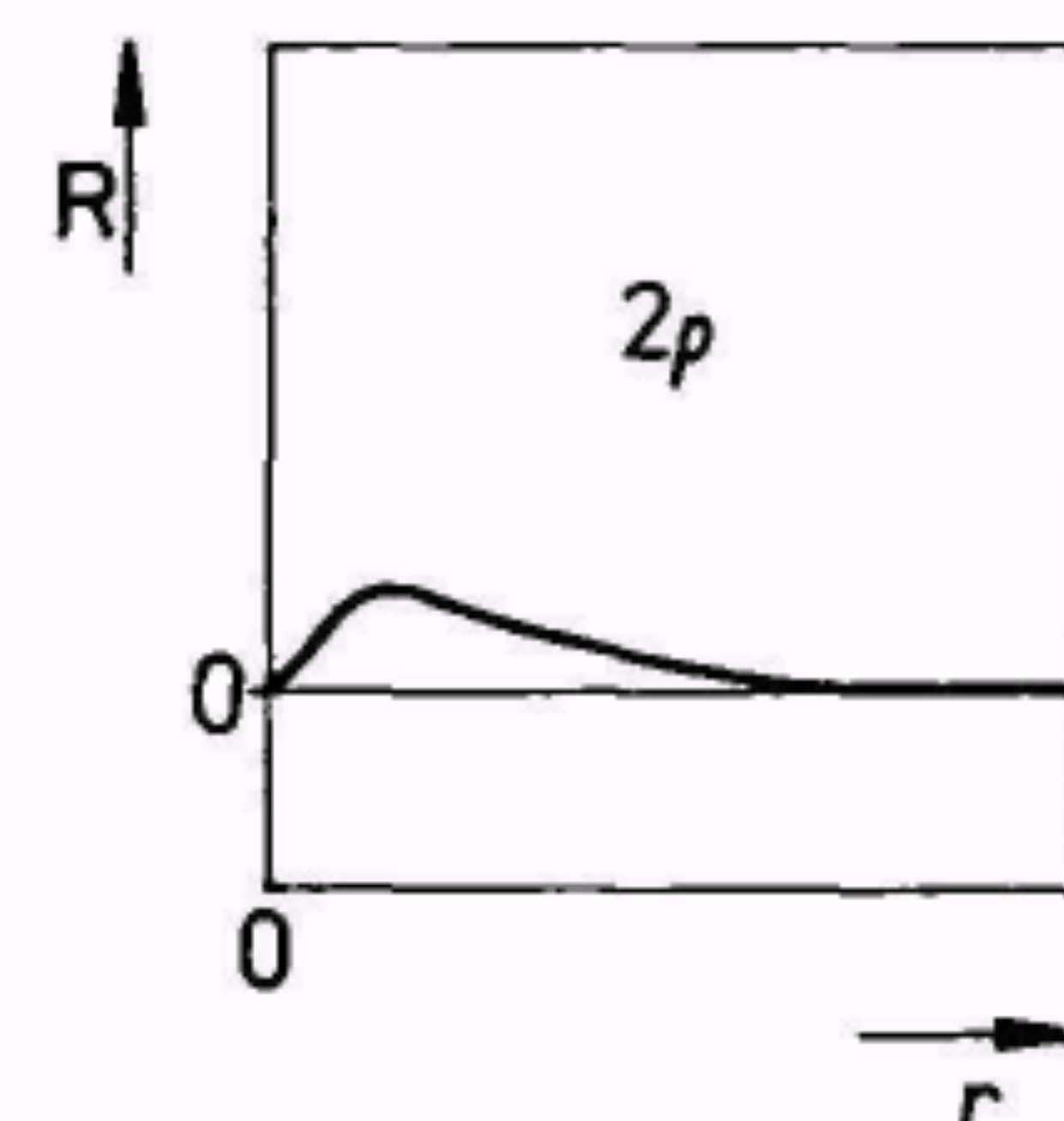
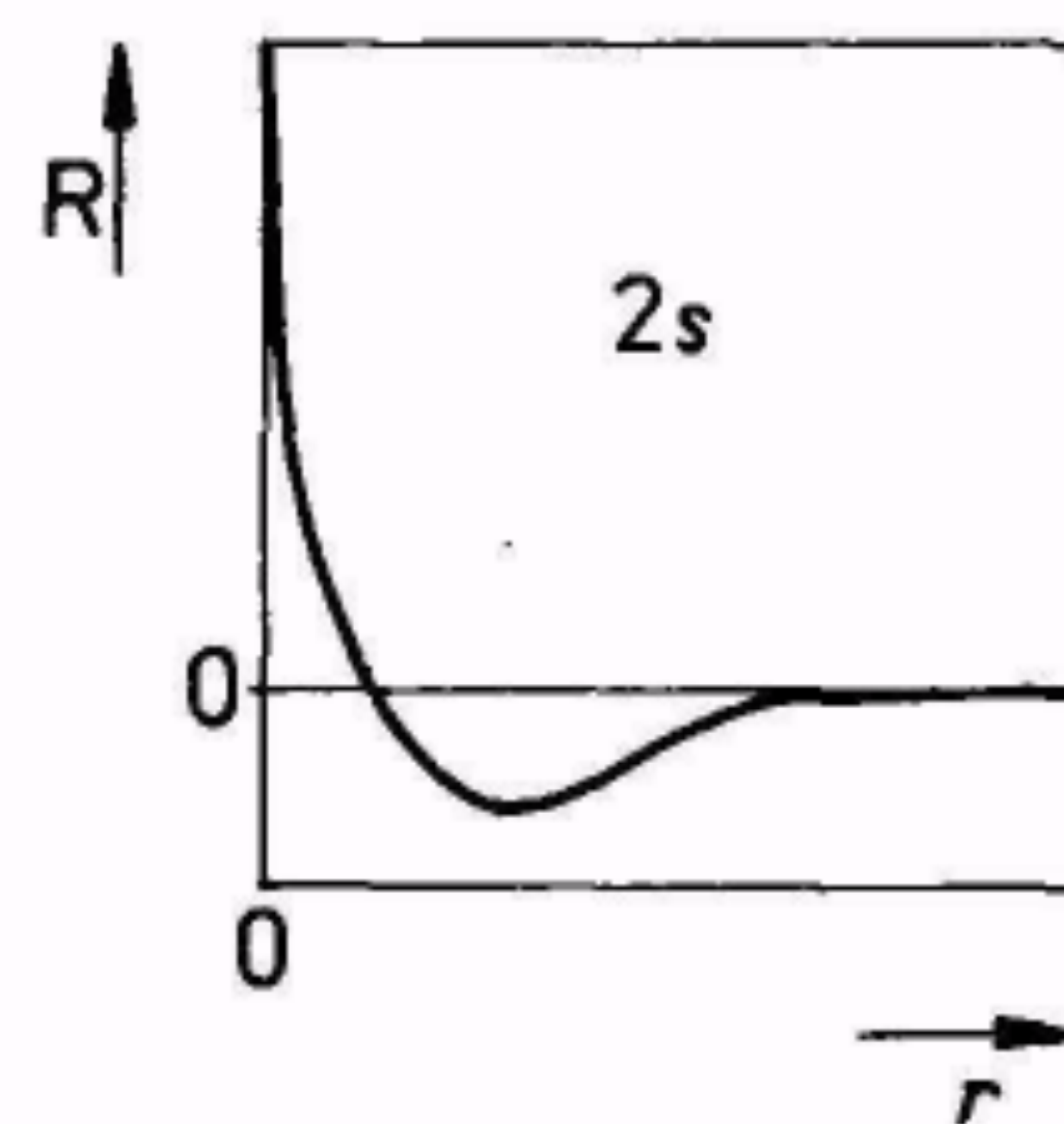
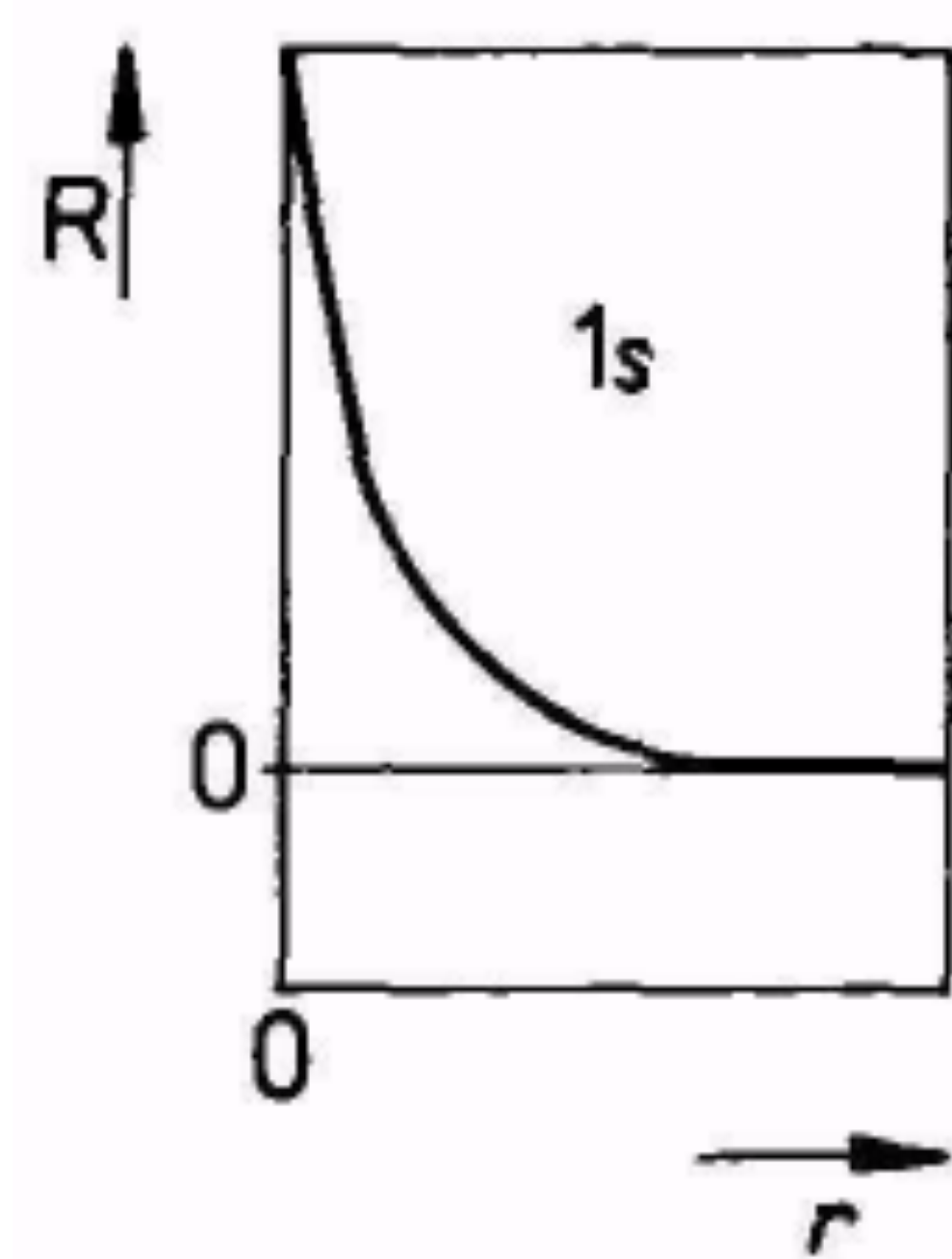
$$n = 2, \quad l = 1, \quad m = \pm 1 \quad \psi_{2p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\frac{\rho}{2}} \sin \theta \cos \varphi$$

$$\psi_{2p_y} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\frac{\rho}{2}} \sin \theta \sin \varphi$$

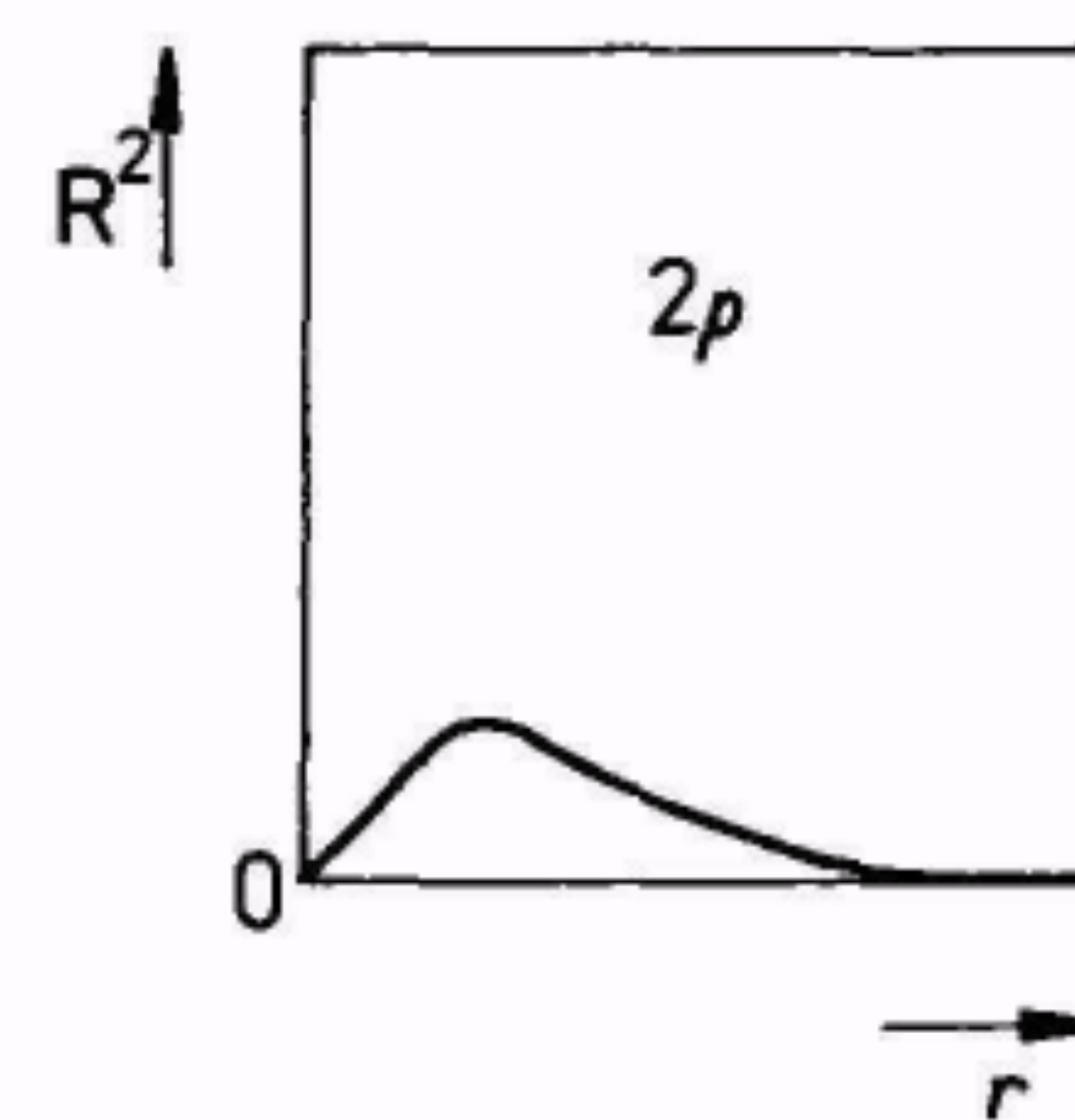
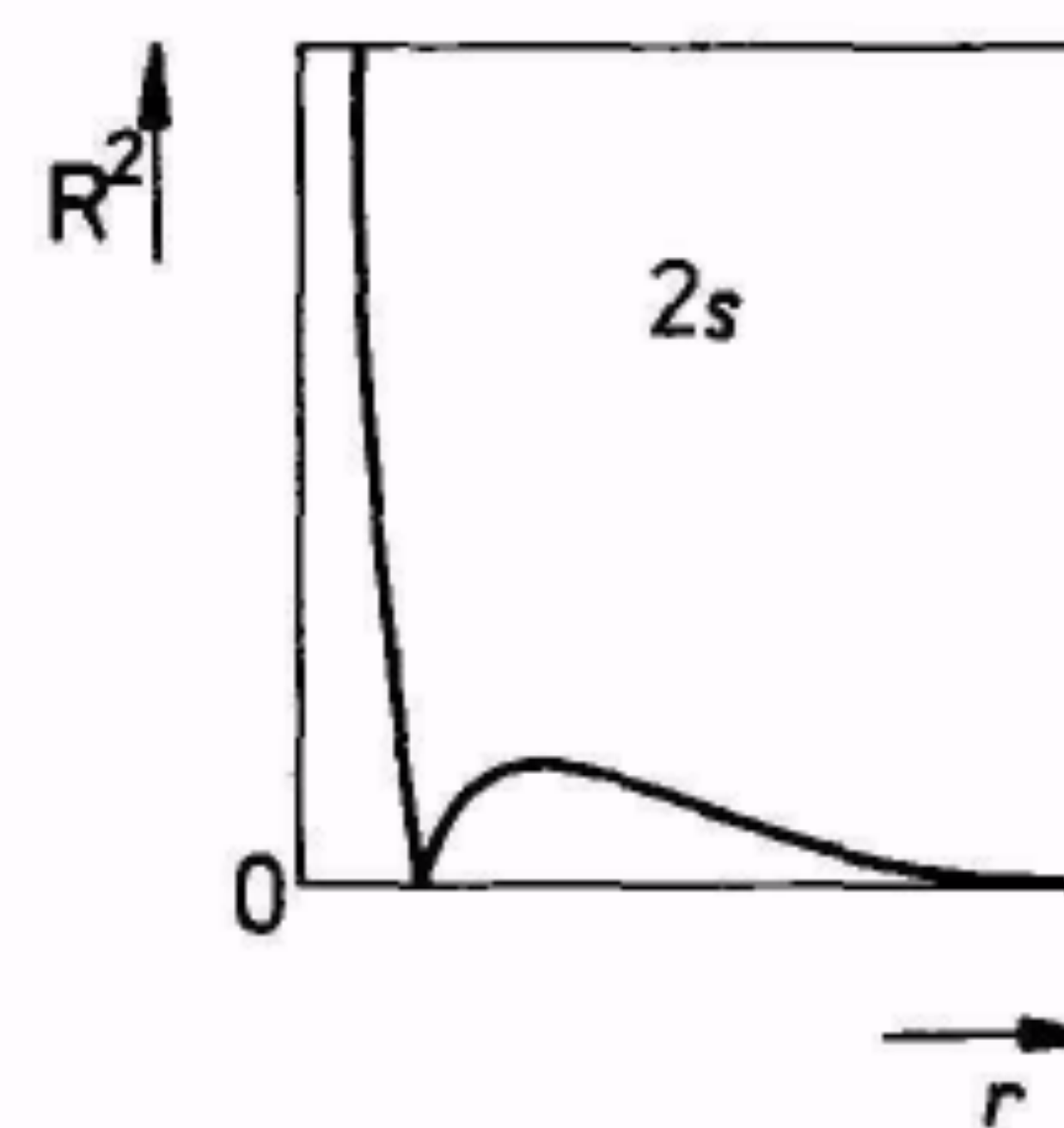
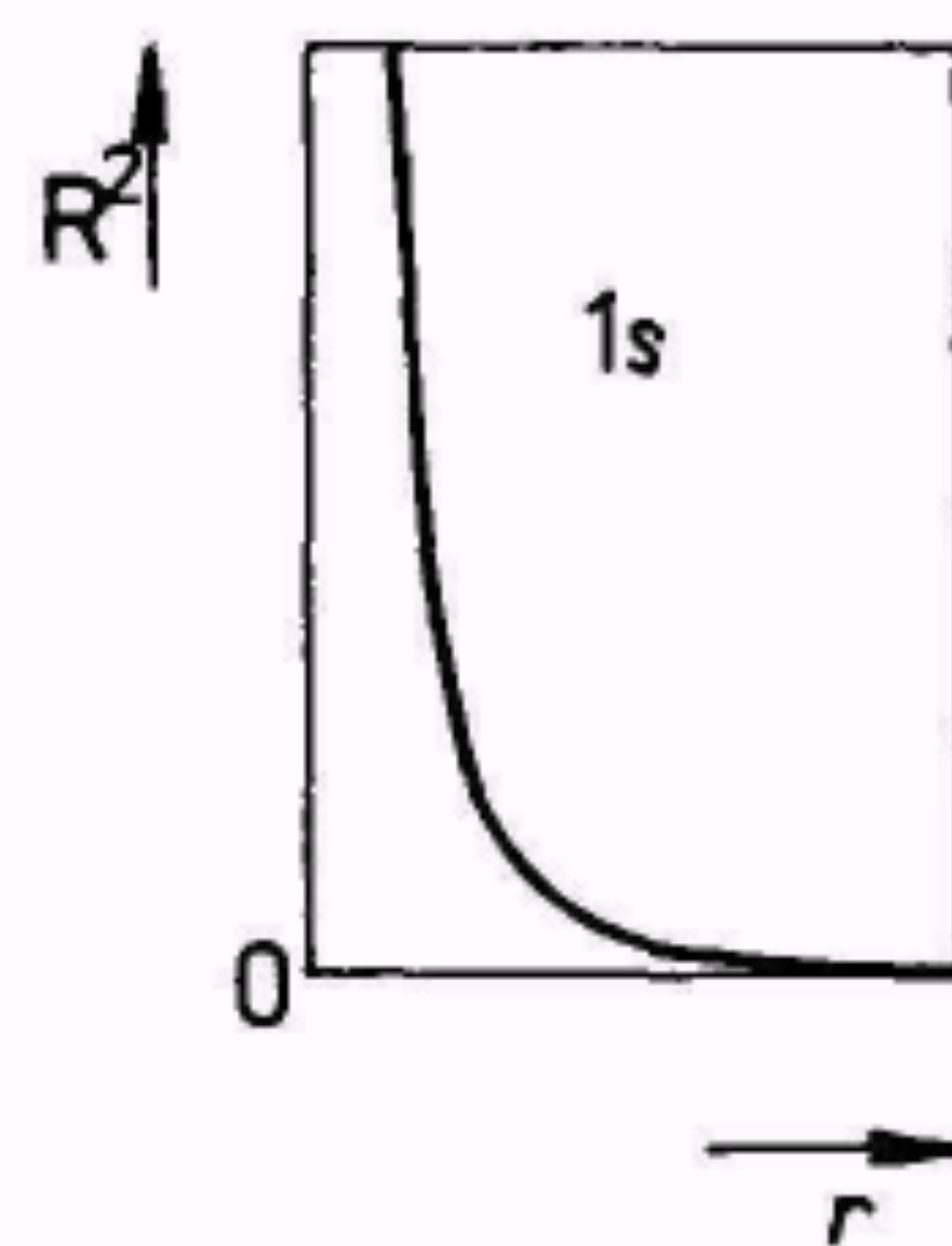
$$n = 3, \quad l = 0, \quad m = 0 \quad \psi_{3s} = \frac{2}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (27 - 18\rho + 2\rho^2) e^{-\frac{\rho}{3}}$$

$$\begin{aligned}
n = 3, \quad l = 1, \quad m = 0 \quad \psi_{3p_z} &= \frac{2}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6\rho - \rho^2)e^{-\frac{\rho}{3}} \cos \theta \\
n = 3, \quad l = 1, \quad m = \pm 1 \quad \psi_{3p_x} &= \frac{2}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6\rho - \rho^2)e^{-\frac{\rho}{3}} \sin \theta \cos \varphi \\
\psi_{3p_y} &= \frac{2}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6\rho - \rho^2)e^{-\frac{\rho}{3}} \sin \theta \sin \varphi \\
n = 3, \quad l = 2, \quad m = 0 \quad \psi_{3d_{z^2}} &= \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\frac{\rho}{3}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\
n = 3, \quad l = 2, \quad m = \pm 1 \quad \psi_{3d_{xz}} &= \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\frac{\rho}{3}} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \\
\psi_{3d_{yz}} &= \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\frac{\rho}{3}} \sin \theta \cos \theta \sin \varphi \\
n = 3, \quad l = 2, \quad m = \pm 2 \quad \psi_{3d_{x^2-y^2}} &= \frac{1}{81\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\frac{\rho}{3}} \sin^2 \theta \cos 2\varphi \\
\psi_{3d_{xy}} &= \frac{1}{81\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\frac{\rho}{3}} \sin^2 \theta \sin 2\varphi
\end{aligned}$$

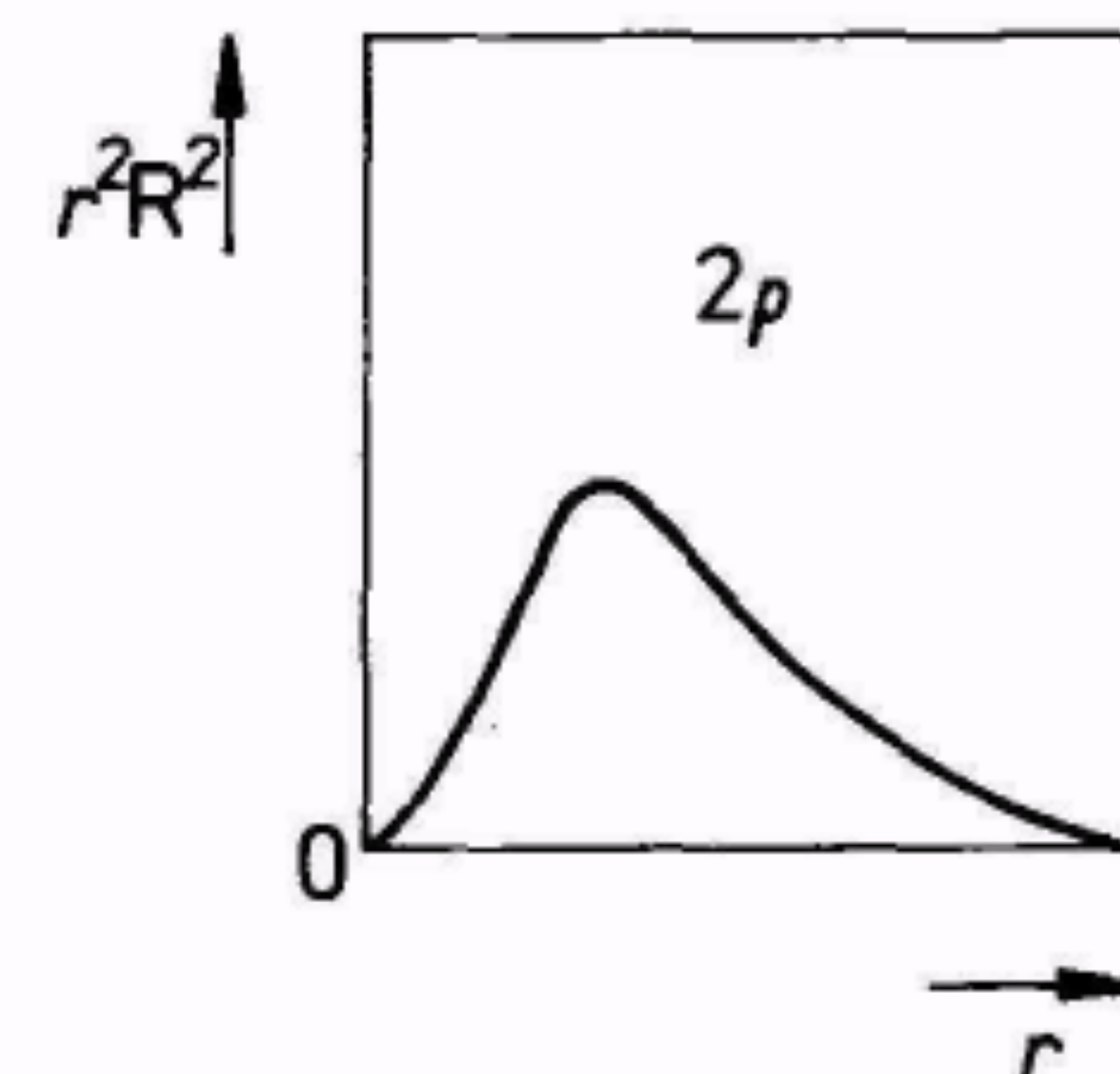
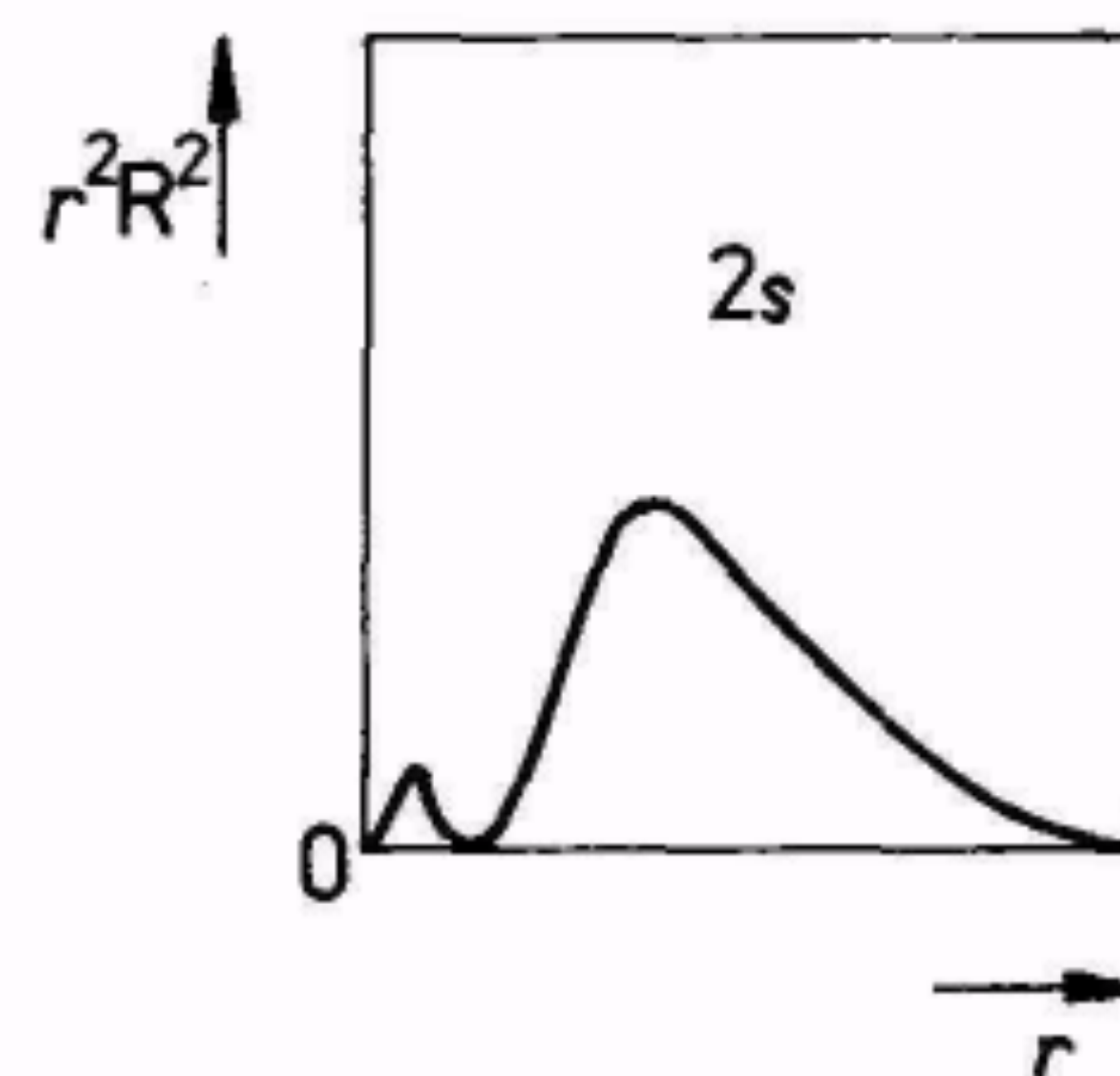
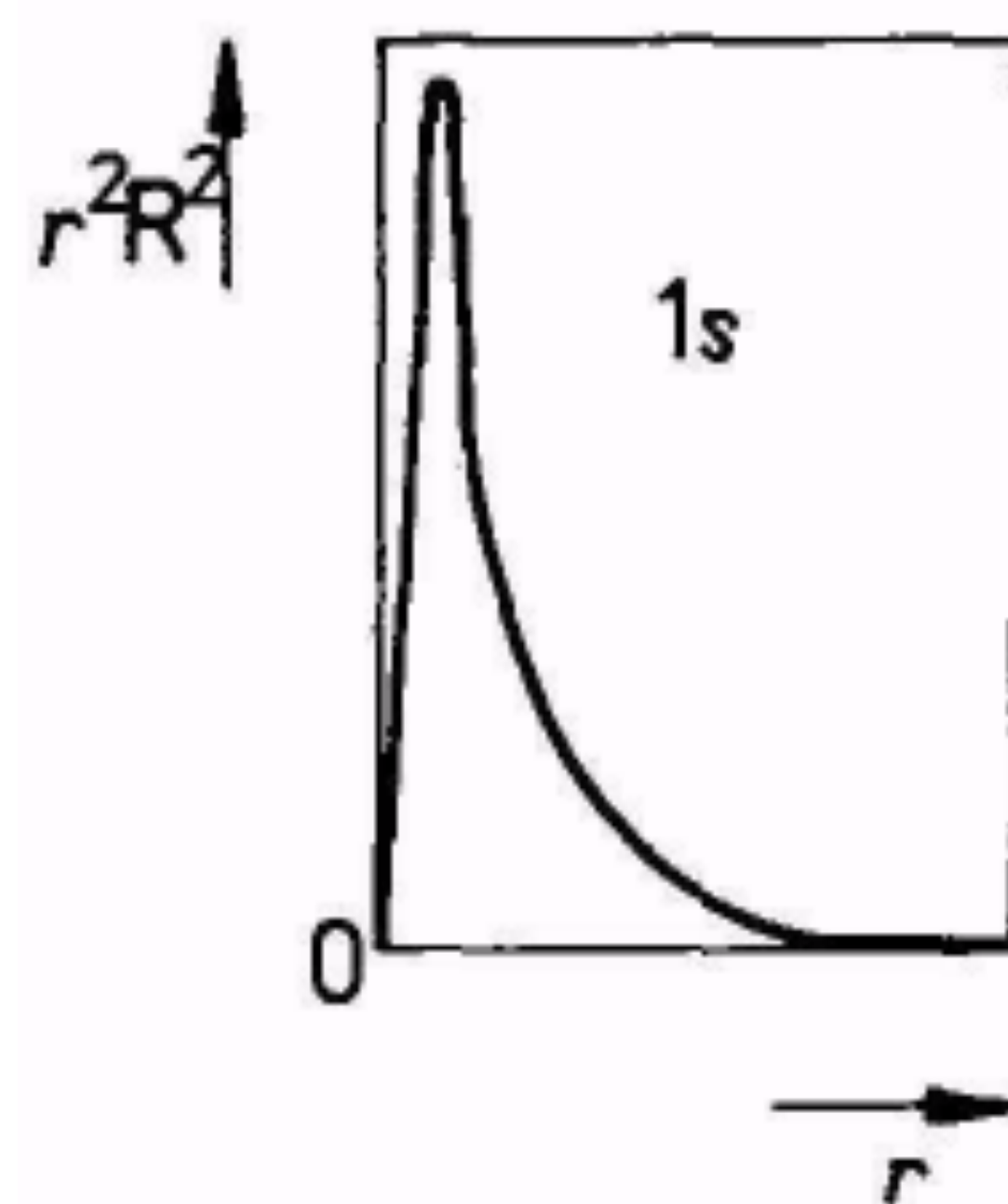
$R(r)$ pro 1s, 2s, 2p



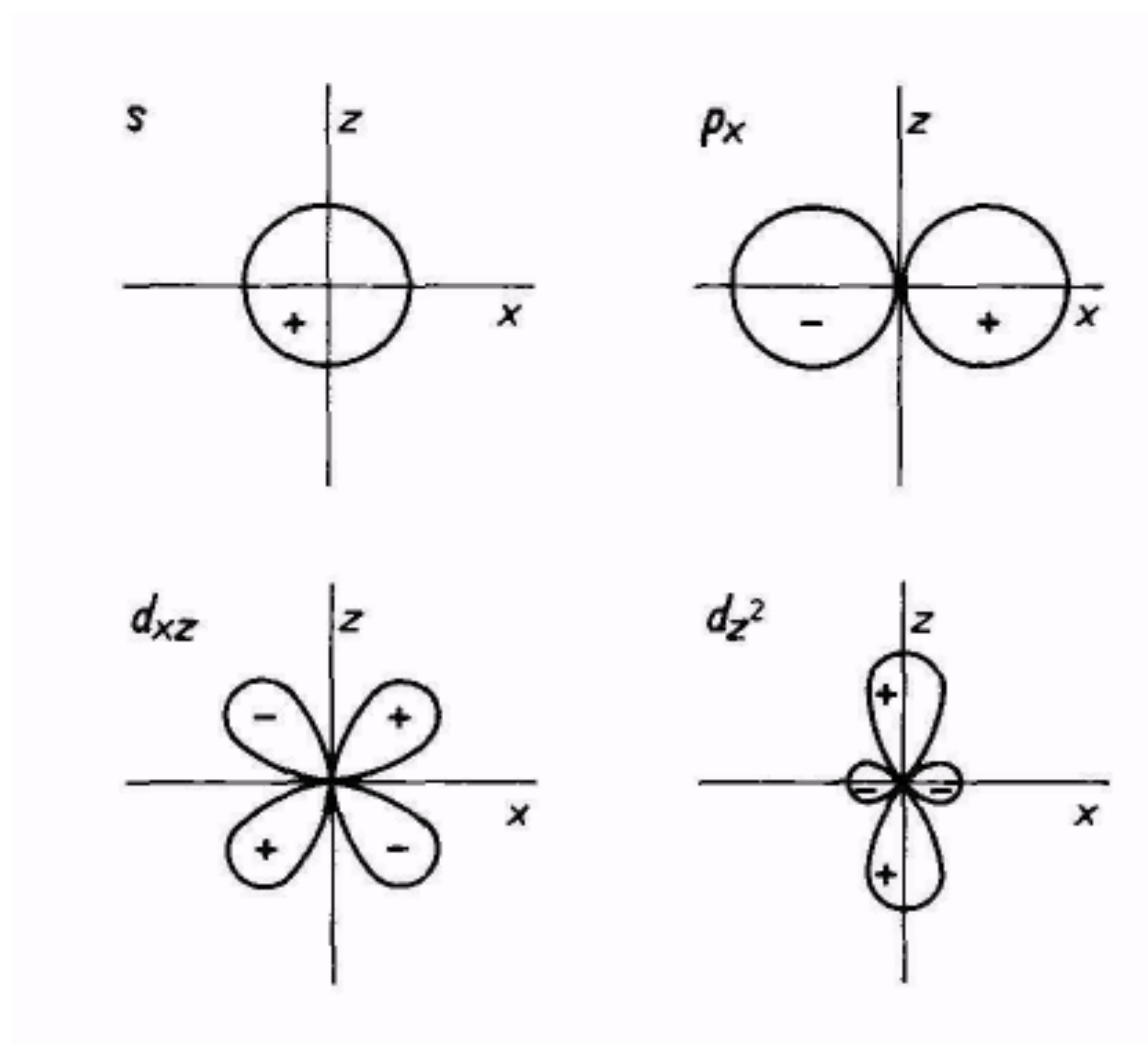
$R^2(r)$ pro 1s, 2s, 2p



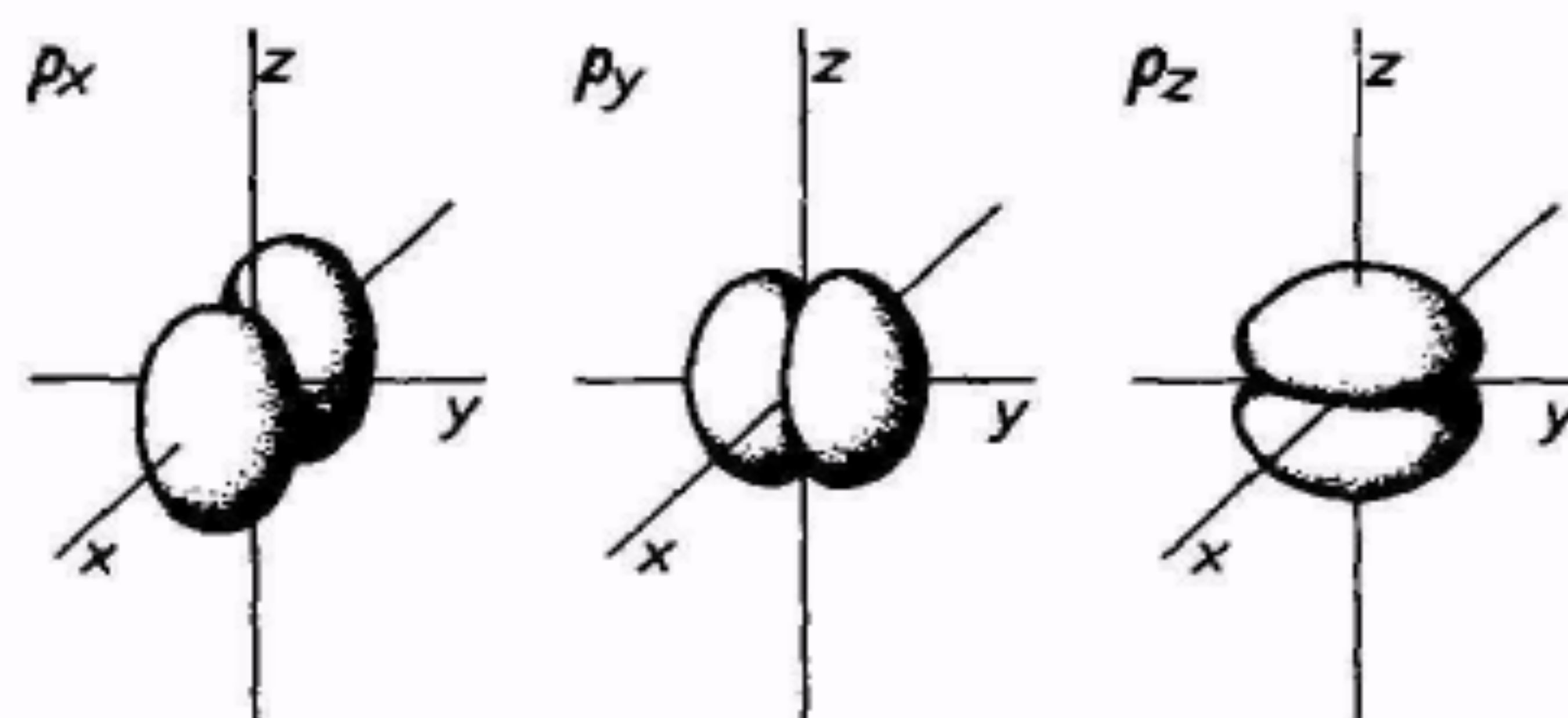
$r^2R^2(r)$ pro 1s, 2s, 2p



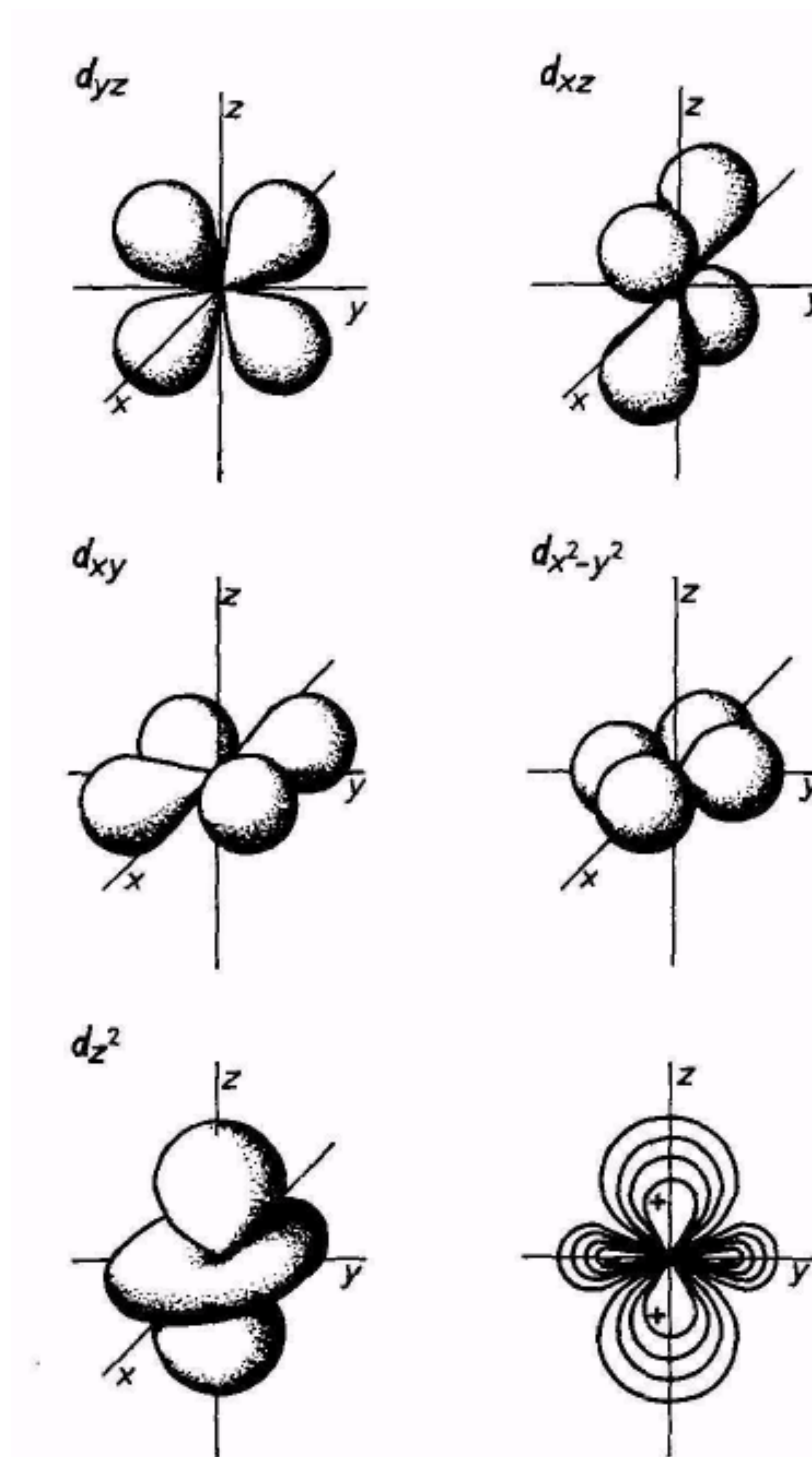
Polární diagramy úhlových funkcí
pro s , p_x a d_{xz} a d_z^2



p-orbitals



d-orbitals



Hlavní kvantové číslo n souvisí s velikostí a tvarem orbitalů. Vedlejší kvantové číslo l souvisí s tvarem orbitalů a magnetické kvantové číslo m s prostorovou orientací orbitalů.

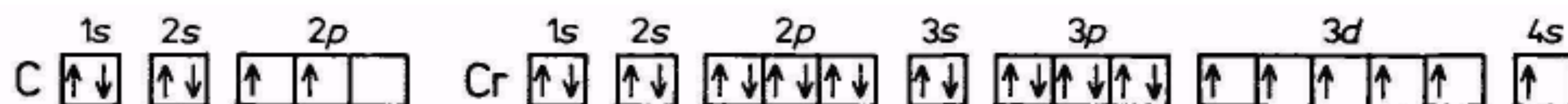
Všechny orbitaly o stejné hodnotě hlavního kvantového čísla n řadíme do jedné **elektronové vrstvy** neboli **slupky**. Vrstvy označujeme buď čísly 1,2,3,... nebo písmeny K, L, M,...

Orbitaly, které mají stejné dvojice kvantových čísel n a l , tvoří **podslupky** či **energetické hladiny** (elektrony v nich mají stejnou energii) a nazýváme je **orbitaly degenerované** (např. třikrát, pětkrát a sedmkrát degenerované orbitaly). Vlivem magnetického pole se mohou degenerované slupky rozštěpit – Zeemanův jev.

Energetické hladiny značíme číslem udávajícím hodnotu hlavního kvantového čísla a písmenem **s**, **p**, **d** nebo **f**, zastupujícím příslušnou hodnotu l (s je pro $l = 0$, p pro $l = 1$, d pro $l = 2$, f pro $l = 3$). Např. $4d$ - hladina s $n = 4$ a $l = 2$. Počet elektronů v dané hladině se vyznačuje jako index vpravo nahoře. Např. uhlík má $1s^2 2s^2 2p^2$, pro chróm $1s^2 2s^2 2p^2 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$ se vyjadřuje $\text{Cr} = [\text{Ar}] 3d^5 4s^1$

Kvantová čísla n , l a m plně charakterizují každý orbital. Pro charakterizaci elektronu v orbitalu se zavádí **magnetické spinové kvantové číslo** s , které může nabývat hodnot $s = \pm 1/2$. Protože v každém orbitalu mohou být jen dva elektrony, lišící se od sebe svým spinem, je celkový počet elektronů v elektronové vrstvě, charakterizované hlavním kvantovým číslem n , dán počtem $2n^2$.

Grafické znázornění **elektronové konfigurace atomu**



Znázorňování atomových orbitalů

Místa, v nichž má AO (ev. elektronová hustota) určitou konstantní hodnotu proložíme, jednou plochou. Tato hraniční plocha pak představuje **prostorový model AO**, resp. **(AO)²**, tj. **model rozložení elektronové hustoty**. Obvykle se volí 95%. Prořízneme-li hraniční plochu vhodně zvolenou rovinou, procházející atomovým jádrem, dostaneme **konturovou křivku**, kterou lze již graficky zaznamenat. Dokonalejší představu si učiníme, jestliže v dané rovině zaznameneáme **konturový diagram**, což je soubor konturových křivek pro různé, předem stanovené hodnoty buď samotné vlnové funkce, nebo čtverce této funkce.

VÝSTAVBA ELEKTRONOVÉHO OBALU

1. **Pauliho vylučovací princip:** *V každém orbital mohou být nanejvýše dva elektrony, lišící se svým spinovým kvantovým číslem s*
2. Snahou každého atomu je nabýt elektronové konfigurace s co nejnižší energií. První se okupují orbitály s nejnižší energií. Energie orbitalu závisí na protonovém čísle

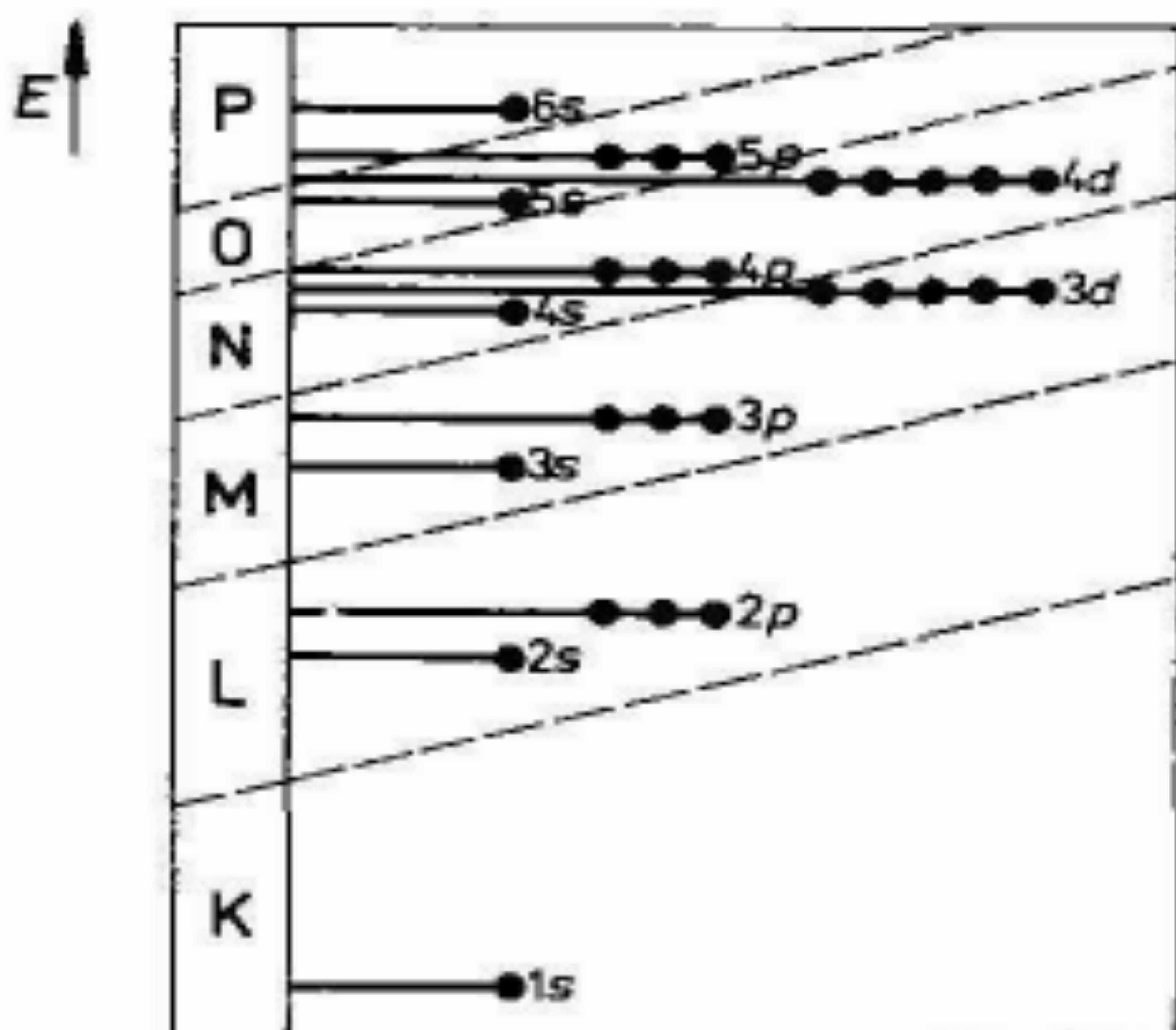


Diagram energií jednotlivých AO pro K,L, M,N,O,P elektronové slupky

3. Hundovo pravidlo: *Elektrony ve volném atomu jsou rozděleny mezi degenerované orbitály tak, aby dříve, než dojde ke sdružování elektronů do páru s opačným (antiparalelním) spinem, bylo co nejvíce možných orbitalů obsazeno jedním (nepárovým) elektronem se stejným spinem (pravidlo maximální multiplicity).*

Rozložení elektronů v atomech přirozené řady prvků

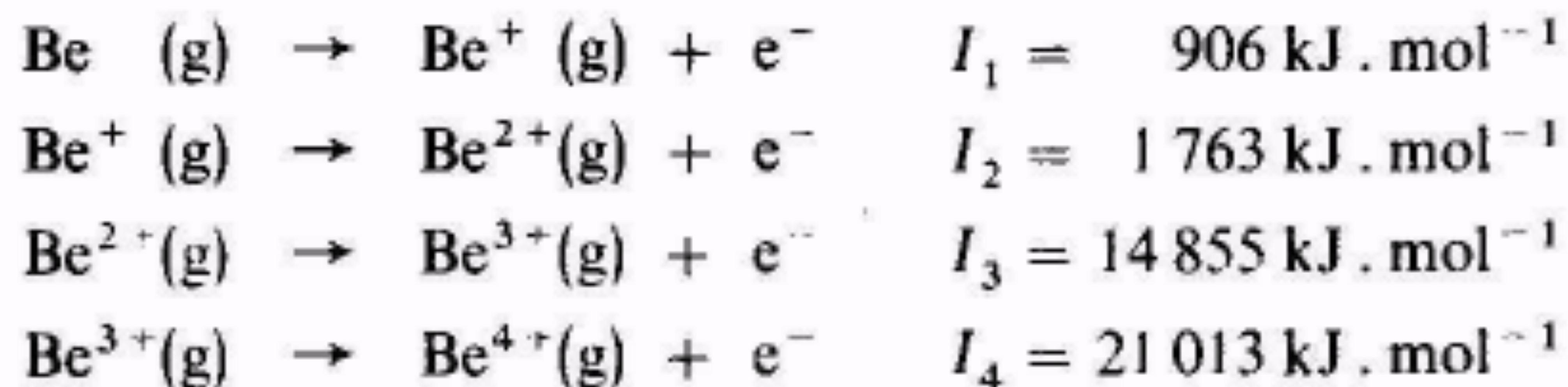
| Pořadové číslo prvku | Symbol prvku | K | | | | L | | | M | | | N | | | |
|----------------------|--------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|---|--|--|--|
| | | 1s | 2s | 2p | 3s | 3p | 3d | 4s | 4p | 4d | 4f | | | | |
| 1 | H | 1 | | | | | | | | | | | | | |
| 2 | He | 2 | | | | | | | | | | | | | |
| 3 | Li | 2 | 1 | | | | | | | | | | | | |
| 4 | Be | 2 | 2 | | | | | | | | | | | | |
| 5 | B | 2 | 2 | 1 | | | | | | | | | | | |
| 6 | C | 2 | 2 | 2 | | | | | | | | | | | |
| 7 | N | 2 | 2 | 3 | | | | | | | | | | | |
| 8 | O | 2 | 2 | 4 | | | | | | | | | | | |
| 9 | F | 2 | 2 | 5 | | | | | | | | | | | |
| 10 | Ne | 2 | 2 | 6 | | | | | | | | | | | |
| 11 | Na | 2 | 2 | 6 | 1 | | | | | | | | | | |
| 12 | Mg | 2 | 2 | 6 | 2 | | | | | | | | | | |
| 13 | Al | 2 | 2 | 6 | 2 | 1 | | | | | | | | | |
| 14 | Si | 2 | 2 | 6 | 2 | 2 | | | | | | | | | |
| 15 | P | 2 | 2 | 6 | 2 | 3 | | | | | | | | | |
| 16 | S | 2 | 2 | 6 | 2 | 4 | | | | | | | | | |
| 17 | Cl | 2 | 2 | 6 | 2 | 5 | | | | | | | | | |
| 18 | Ar | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | | | | | | | | | |
| 19 | K | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 1 | | | | | | | | |
| 20 | Ca | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 2 | | | | | | | | |
| 21 | Sc | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 1 | 2 | | | | | | | |
| 22 | Ti | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 2 | 2 | | | | | | | |
| 23 | V | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 3 | 2 | | | | | | | |
| 24 | Cr | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 5 | 1 | | | | | | | |
| 25 | Mn | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 5 | 2 | | | | | | | |
| 26 | Fe | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 6 | 2 | | | | | | | |
| 27 | Co | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 7 | 2 | | | | | | | |
| 28 | Ni | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 8 | 2 | | | | | | | |
| 29 | Cu | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 10 | 1 | | | | | | | |
| 30 | Zn | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 10 | 2 | | | | | | | |
| 31 | Ga | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 10 | 2 | 1 | | | | | | |
| 32 | Ge | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 10 | 2 | 2 | | | | | | |
| 33 | As | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 10 | 2 | 3 | | | | | | |
| 34 | Se | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 10 | 2 | 4 | | | | | | |

Základní stav atomu je stav s nejnižší energií.

Dodáním energie může jeden či více elektronů přejít do energeticky vyšších orbitalů
-excitovaný stav atomu

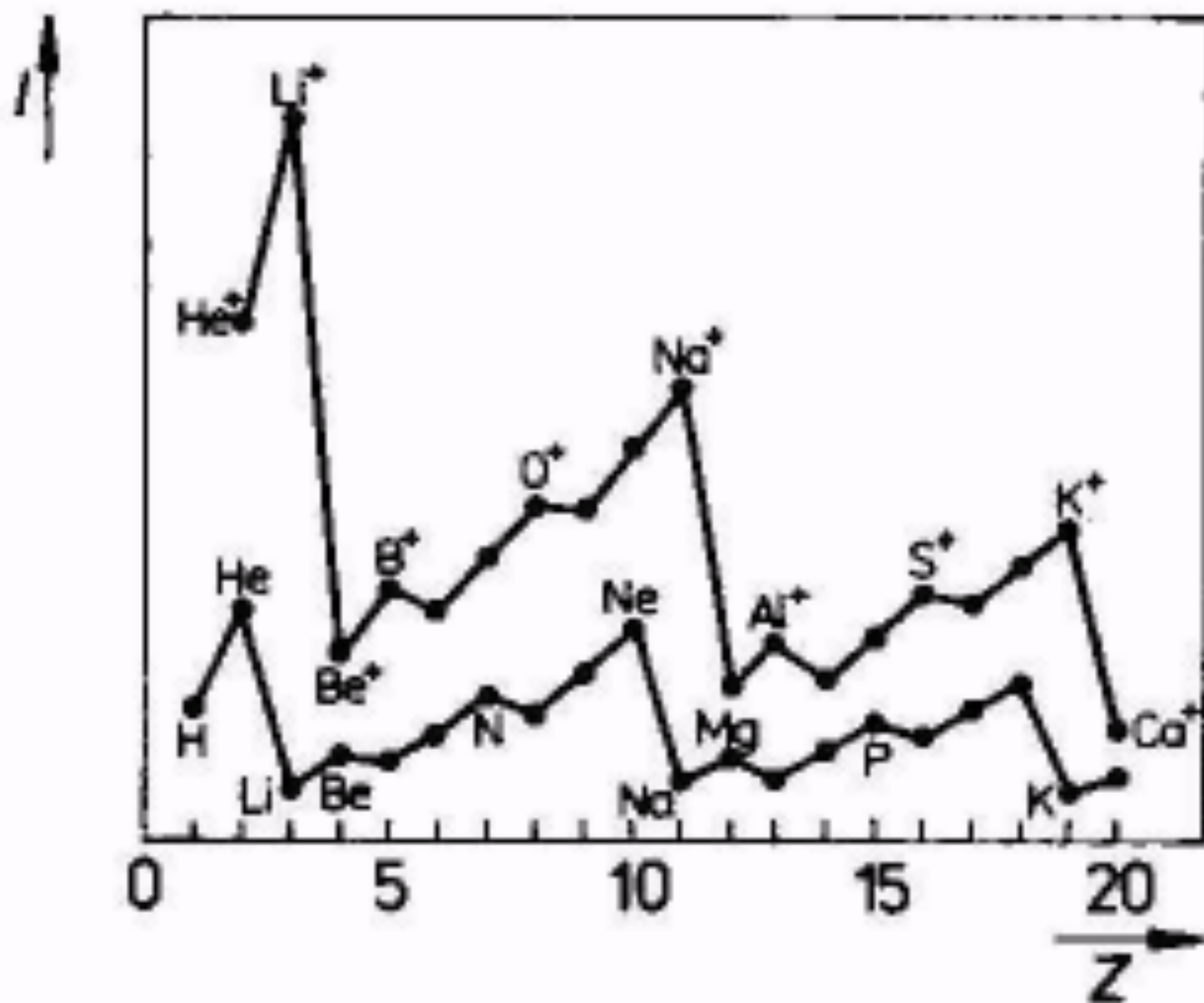
Přijme-li atom tolik energie, že dojde až k odtržení elektronu, vznikne z elektro-neutrálního atomu kladně nabitá částice — **kation**. Tato energie (vztažená na jeden mol odtržených elektronů) se nazývá **ionizační energie I**.

Např. pro Be (postupné odtrhávání 4 elektronů)



Minimální je první energie, druhý se trhá již z kationu, třetí pochází z hladiny 1s

Závislost první a druhé ionizační energie na protonovém čísle



Nejstabilnější jsou atomy či ionty s elektronovou konfigurací vzácných plynů — He, Ne, Li⁺, Na⁺

Nejmenší ionizační energii mají atomy či ionty s jedním elektronem navíc proti elektronové konfiguraci vzácných plynů (Li, Na, Be⁺, Ca⁺).

Elektricky nabitá částice z elektroneutrálního atomu může vzniknout i opačným způsobem — přijetím elektronu vznikne záporně nabitá částice — **anion**. Při zachycení elektronu se energie zpravidla uvolní. Této energii (opět vztažené na jeden mol zachycených elektronů) říkáme **elektronová afinita *A***.

Souvislosti mezi strukturou elektronových obalů a fyzikálně-chemickými vlastnostmi

1. Podobné chemické chování je dáno podobným uspořádáním vnějších (valenčních) elektronových vrstev atomů (alkalické kovy, kovy alkalických zemin, halogeny, vzácné plyny aj.).
2. Nejstálejší jsou atomy s plně obsazenými elektronovými vrstvami.
3. Nejreaktivnější jsou prvky, které se svou strukturou nejvíce blíží vzácným plynům.
4. Řada vlastností je těsně spjata s valenčními elektrony.

Valenční elektrony jsou ty, které má atom prvku navíc vzhledem k elektronové konfiguraci předcházejícího vzácného plynu.

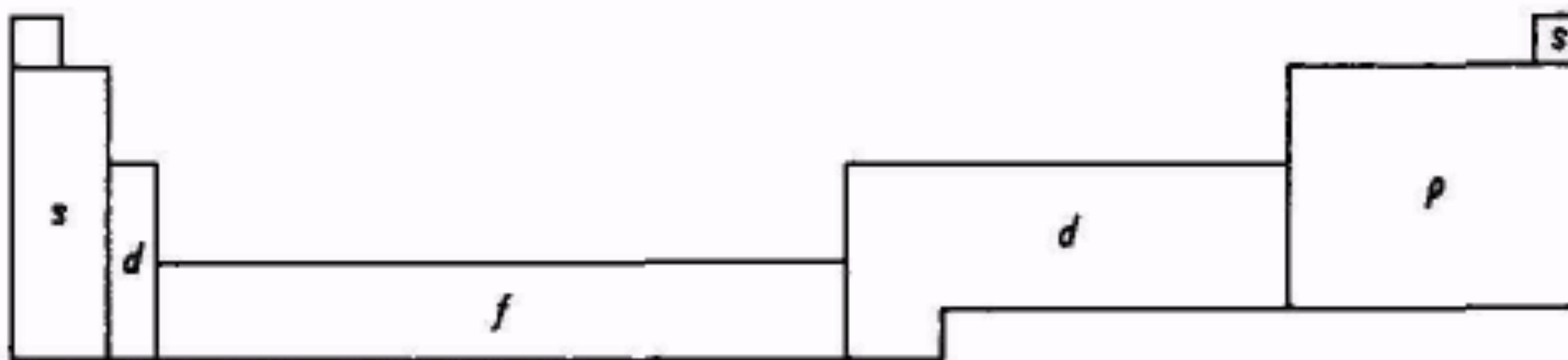
Periodicita vlastností vedla k vytvoření periodické tabulky. Prvky jsou v tabulce uspořádány podle stoupajícího protonového čísla do sedmi **vodorovných řad** — **period**. Délka period a tvar tabulky se volí tak, aby prvky podobných chemických vlastností (jsou dány podobnou elektronovou konfigurací vnější valenční vrstvy) byly umístěny pod sebou.

Tím vytvářejí **skupiny (grupy)**. Některé skupiny mají společné označení jako alkalické kovy (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr), kovy alkalických zemin (Ca, Sr, Ba, Ra), chalkogeny (S, Se, Te, Po), halogeny (F, Cl, Br, I, At), vzácné plyny (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn).

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

Číslo periody je shodné s hodnotou hlavního kvantového čísla n orbitalu s a p , které se obsazují valenčními elektrony. Počínaje čtvrtou periodou se obsazují i orbitaly d o hlavním kvantovém čísle o jednotku menším, než je číslo periody; počínaje šestou periodou se obsazují i orbitaly f o hlavním kvantovém čísle o dvě menším, než je číslo periody. Tyto prvky se v šesté periodě nazývají lanthanoidy ($_{58}\text{Ce}$ — $_{71}\text{Ln}$), v sedmé periodě se nazývají aktinoidy ($_{90}\text{Th}$ — $_{103}\text{Lr}$) a vyčleňují se (tabulka by byla příliš dlouhá) pod tabulku.

Prvky, kde elektrony zaplňují orbitaly d označujeme jako **prvky přechodné**.



Rozdělení periodické tabulky podle typu zaplňovaných orbitalů