

Kvantově mechanický model atomu:

Chování mikročástic (např. elektronů) nelze vystihnout klasickou mechanikou. Pro popis těchto jevů byla vypracována obecnější teorie – kvantová mechanika:

$$p = m \cdot v = \frac{h}{\lambda} \quad p \dots \text{hybnost částice; } m \dots \text{pohybová hmotnost částice; } \lambda \dots \text{vlnová délka de Broglieho vln}$$

Myšlenky de Broglieho dále rozvedl a matematicky dokázal:

- ① **E. Schrödinger:** – pohyb elektronu v kvantové mechanice popsal pomocí tzv. vlnové funkce ψ , kterou získal řešením Schrödingerovy vlnové rovnice: Fyzikální smysl má ψ^2 , která charakterizuje pravděpodobnost výskytu elektronu (popř. hustota pravděpodobnosti výskytu elektronu)
- ② **W. Heisenberg:** – ve světě mikročástic je omezená přesnost současného určení polohy a rychlosti pohybující se částice; popř. energie a času pohybujícího se elektronu:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h \quad \Delta E \cdot \Delta t \geq h$$

Tzn., že polohu elektronu můžeme popsat pomocí vlnové funkce jen s určitou pravděpodobností.

STAVBA ELEKTRONOVÉHO OBALU

ATOM VODÍKU – jednoduchý systém, pro který je Schrödingerova rovnice přesně řešitelná. Výsledkem řešení je soubor vlnových funkcí, tzv. orbitalů a energií odpovídajících jednotlivým stacionárním stavům. Tyto stavy, funkce i energie se charakterizují pomocí trojice kvantových čísel, jejichž hodnoty vyplývají z řešení Schrödingerovy rovnice.

- **hlavní kvantové číslo n :** – udává energii elektronu

$$E_n = -\frac{B}{n^2} \quad E_n \dots \text{molární energie elektronu ve stavu s kvant. č. } n; \quad B \dots \text{konstanta, jejíž hodnota je } 13,6 \text{ eV}$$

n – nabývá hodnot od 1, 2, 3, ..., ∞ (popř. $K=1, L=2, M=3, \dots$)

Energie elektronu roste s rostoucím n .

Za běžných podmínek má elektron v atomu vodíku nejmenší možnou energii ($n=1$) – atom je v základním stavu. Dodáváním příslušného kvanta energie lze atom převést do vybuzeného (excitovaného) stavu – stav s vyšší energií, stav s vyšším n .

- **vedlejší kvantové číslo l :** – společně s n určuje energii elektronu a rozhoduje o tvaru orbitalu. Nabývá hodnot od 0 až po $n-1$.

Např. $n=4$ $l=$

0	1	2	3
s	p	d	f

hlavní kv. č. $3d^4$ – počet elektronů
typ orbitalu

- **magnetické kvant. číslo m :** – určuje orientaci orbitalů v prostoru; nabývá hodnot od - l přes 0 až + l

Např. orbital $p: l=1$ $m=-1, 0, 1$

- Pro popis zvláštní vlastnosti částice (tzv. vnitřního momentu hybnosti) se zavádí poslední, tzv. **spinové kvantové číslo s** ; charakterizující rotaci elektronu; nabývá hodnot $+\frac{1}{2}$ a $-\frac{1}{2}$.

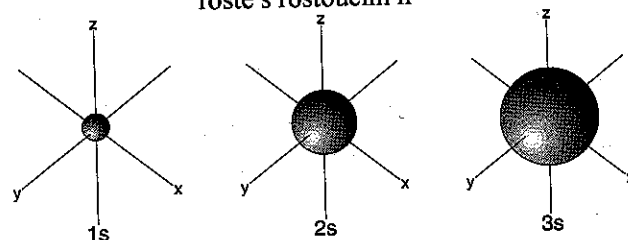
Kombinací všech čtyř kvantových čísel je možno jednoznačně charakterizovat kterýkoliv elektron v obalu atomu.

- **degenerované orbitály** – (mají stejnou energii) mají stejnou hodnotu hlavního a vedlejšího kvant. čísla, liší se v čísle magnetickém.
- **Pauliho princip vylučnosti** – v atomu nemohou existovat dva elektrony, které by měly všechna čtyři kvantová čísla stejná.

Tvary a prostorová orientace orbitalů

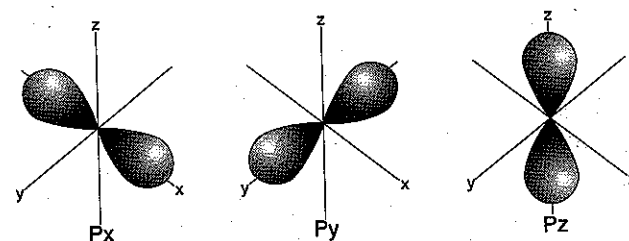
Vedlejší kvantové číslo l určuje kromě energie elektronu též tvar orbitalu.

$l=0$ orbital s ; kulově symetrický; velikost orbitalu s roste s rostoucím n



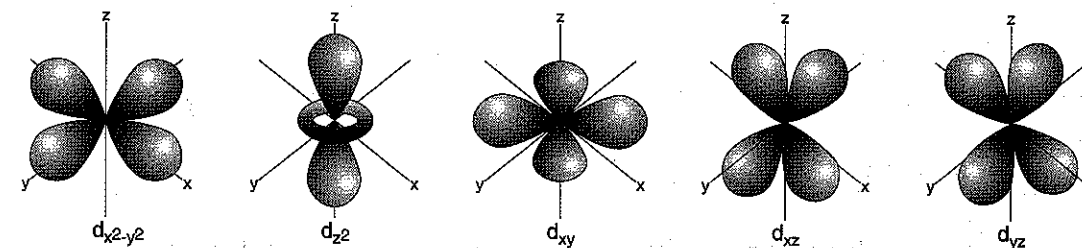
grafické znázornění orbitalů s

$l=1$ orbital p ; třikrát degenerovaný ($m=-1, 0, 1$)



grafické znázornění orbitalů p

$l=2$ orbital d ; pětkrát degenerovaný ($m=-2, -1, 0, 1, 2$)



grafické znázornění orbitalů d

$l=3$ orbital f ; sedmkrát degenerovaný ($m=-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$)

Znázorňování a zápis orbitalů

- všechny orbitály se znázorňují stejně velikými rámečky

s

p

d

- degenerované orbitály; odpovídající počet rámečků se spojí v jeden celek př.

--	--	--
- počet degenerovaných orbitalů je dán $2l+1$
- elektrony se znázorňují šipkami

↑↓

↑

↓

 chybně
- pomocí hlavního a vedlejšího kvantového čísla

Elektronová konfigurace atomu

Obsazení jednotlivých stavů (orbitalů – tzv. elektronové konfigurace) atomu v základním stavu se řídí třemi pravidly:

a) **Výstavbový princip (princip minimální energie)**

Orbitály s energií nižší se zaplňují elektrony dříve než orbitály s vyšší energií

s	p	d	f
8	7	6	5
7	6	5	4
6	5	4	3
5	4	3	2
4	3	2	1
3	2	1	
2	1		
1			

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p

pravidlo $n+1$ – Nejdříve se zaplňují orbitály, jejichž součet hlavního a vedlejšího kvantového čísla ($n+l$) je nižší. Jestliže mají orbitály stejnou hodnotu $n+l$, zaplňuje se nejdříve orbital, jehož hodnota n je nižší.

Př. orbital $2p$ se zaplňuje dříve než $3s$.

Vysvětlení: pro orbital $2p$ je součet $n+l$ roven $2+1=3$
pro orbital $3s$ je součet $n+l$ roven $3+0=3$

b) **Hundovo pravidlo**

- ① V degenerovaných orbitalech vznikají elektronové páry teprve po obsazení každého orbitalu jedním elektronem.
- ② Nespárované elektrony v degenerovaných orbitalech mají stejný spin.

<table><tr><td>↑</td><td>↓</td><td>↑</td></tr></table>	↑	↓	↑	<table><tr><td>↑</td><td>↓</td><td>↑</td></tr></table>	↑	↓	↑	<table><tr><td>↑</td><td>↑</td><td>↑</td></tr></table>	↑	↑	↑	<table><tr><td>↑</td><td>↓</td><td>↓</td></tr></table>	↑	↓	↓
↑	↓	↑													
↑	↓	↑													
↑	↑	↑													
↑	↓	↓													
správně	chybně	chybně	chybně												

c) **Pauliho princip vylučnosti**

V jednom atomu nemohou být dva elektrony, které by měly stejnou kombinaci všech čtyř kvantových čísel; tzn. v jednom orbitalu mohou být maximálně dva elektrony lišící se hodnotou spinového kvantového čísla.