# Atomové orbitaly

Vztahy: ; ; ; , 1 eV = 1,602 · 10-19 J

Slaterovy skupiny: (1s)(2s,2p)(3s,3p)(3d)(4s,4p)(4d)(4f)(5s,5p)(5d)(5f)...

Slaterova pravidla pro výpočet stínících konstant

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  |  |  |  |
| 1s | – | – | 0,30 | 0 |
| s, p | 1 | 0,85 | 0,35 | 0 |

Stínící konstanta se počítá jako součet těchto příspěvků od všech ostatních elektronů.

Konstanty:

2,18 · 10-18 J = 13,6 eV

Avogadrova konstanta 6,022 · 1023 mol-1

Planckova konstanta 6,626 · 10-34 Js

rychlost světla ve vakuu 3 · 108 ms-1

Bohrův poloměr 0,529 · 10-10 m = 0,529 Å

*Atomy s jedním elektronem (= atomy vodíkového typu)*

1. Uvažujte atom vodíku ve stavu 3p.
   1. Vypočtěte energie orbitalů 1s, 2s, 2p a 3s a 3p.

Řešení:

-13,6 eV

-3,4 eV

-1,51 eV

* 1. Určete ionizační potenciál pro vodík v tomto excitovaném stavu v eV a v kJ mol-1.

Řešení:

elektron ve stavu 3p: , volný elektron: ;

1,51 eV

1 eV = 1,602 · 10-19 J, , 1

1,51 · 6,022 · 1023· 1,602 · 10-19 J mol-1  145,7 kJ mol-1

* 1. **\*** Do kterých atomových orbitalů může elektron spontánně přecházet (za současné emise energie)? Vypočtěte vlnové délky záření spojeného s těmito přechody.

Řešení:

S emisí energie jsou spojeny přechody ze stavů s vyšším hlavním kvantovým číslem do stavů s nižším hlavním kvantovým číslem, tj. přechody 3p → 2s, 3p → 2s a 3p → 1s.

, ,

s-1 = 4,569540866 · 1014 s-1

656,5 nm

s-1 = 2,924506154 · 1015 s-1

102,6 nm

* 1. Spočítejte ionizační potenciály (v eV) iontů He+ a C5+ v jejich základních elektronových stavech.

Řešení:

He+: 54,4 eV

C5+: 489,6 eV

* 1. Uvažujte kation Li2+ ve druhém excitovaném stavu. Jaká je degenerace vlnových funkcí pro odpovídající hladiny energie? Jaký je ionizační potenciál iontu v tomto stavu? Jak se tento ionizační potenciál liší od ionizačního potenciálu pro vodík v základním stavu? Je to náhoda?

Řešení:

Kation se nachází ve stavu s . Této hodnotě hlavního kvantového čísla odpovídá 9 vlnových funkcí (orbitalů): 3s, 3px, 3py, 3pz, 3dxy, 3dxy, 3dxy, 3, 3. Degenerace je tedy 9.

13,6 eV

Oba ionizační potenciály jsou stejné. Nejedná se o náhodu – kation Li2+ ve druhém excitovaném stavu byl schválně zvolen tak, aby byly oba ionizační potenciály stejné.

*Atomy s mnoha elektrony*

1. Pro atom síry ()
   1. napište elektronovou konfiguraci nejnižšího energetického stavu.

Řešení: 1s2 2s2 2p6 3s2 3p4

* 1. vypočtěte poloměry obsazených atomových orbitalů pro tento atom.

Řešení:

1s:

1 · 0,30 = 0,30

16 – 0,30 = 15,70

3 pm

2s, 2p:

2· 0,85 + 7 · 0,35 = 4,15

16 – 4,15 = 11,85

18 pm

3s, 3p:

2· 1 + 8 · 0,85 + 5· 0,35 = 10,55

16 – 10,55 = 5,45

87 pm

1. Pro valenční elektrony fluoru (), chloru () a bromu () vypočtěte:
   1. stínící konstanty

Řešení:

F: 2 · 0,85 + 6 · 0,35 = 3,8

Cl: 2 · 1 + 8 · 0,85 + 6 · 0,35 = 10,9

Br: 10 · 1 + 18 · 0,85 + 6 · 0,35 = 27,4

* 1. efektivní náboje

Řešení:

F: 9 – 3,8 = 5,2

Cl: 17 – 10,9 = 6,1

Br: 35 – 27,4 = 7,6

* 1. Slaterovy orbitální poloměry

Řešení:

F: 41 pm

Cl: 78 pm

Br: 111 pm

*Příklady pro procvičování elektronové konfigurace*

1. Napište elektronovou konfiguraci pro platinu, která splňuje pravidlo o součtu a další dvě elektronové konfigurace, které jsou možné díky tomu, že hladiny 6s a 5d jsou velmi blízko v energii.

Řešení:

1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d104p6 5s2 4d105p6 6s2 4f14 5d8, zkráceně: [Xe] 6s2 4f14 5d8

1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d104p6 5s2 4d105p6 6s14f14 5d9, zkráceně: [Xe] 6s14f14 5d9

1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d104p6 5s2 4d105p6 6s04f14 5d10, zkráceně: [Xe] 6s04f14 5d10

1. Které z atomů se 20 v základním elektronovém stavu
   1. jsou diamagnetické, tj. nemají žádný nepárový elektron?

Řešení: He, Be, Ne, Mg, Ar a Ca (viz jejich elektronová konfigurace).

* 1. mají právě jeden nepárový elektron?

Řešení: H, Li, B, F, Na, Al, Cl a K (viz jejich elektronová konfigurace)

* 1. mají právě dva nepárové elektrony?

Řešení: C, O, Si, S (viz jejich elektronová konfigurace)

**\*** složitější příklad pro zájemce