

1. Atomové orbitály

$$\text{Vztahy: } E_n = \frac{-RyZ^2}{n^2}; E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}; Z^* = Z - \sigma; \rho = \frac{n^2 a_0}{Z^*}$$

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

Slaterova pravidla pro výpočet stínících konstant

	$n' < n - 1$	$n' = n - 1$	$n' = n$	$n' > n$
1s	–	–	0,30	0
ns, np	1	0,85	0,35	0

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

Konstanty:

$$Ry = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13,6 \text{ eV}$$

$$\text{Avogadrova konstanta } N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{Planckova konstanta } h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$\text{rychlost světla ve vakuu } c = 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

$$\text{Bohrův poloměr } a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0,529 \text{ \AA}$$

Atomy s jedním elektronem (= atomy vodíkového typu)

1. Uvažujte atom vodíku ve stavu 3p.

- Vypočtěte energie orbitalů 1s, 2s, 2p a 3s a 3p. [1s: -13,6 eV; 2s, 2p: -3,4 eV; 3s, 3p: -1,51 eV]
- Určete ionizační potenciál pro vodík v tomto excitovaném stavu v eV a v kJ mol⁻¹.
[1,51 eV; 145,7 kJ mol⁻¹]
- * Do kterých atomových orbitalů může elektron spontánně přecházet (za současné emise energie)? Vypočtěte vlnové délky záření spojeného s těmito přechody. [656,5 nm; 102,6 nm]

2.

- Vypočtěte ionizační potenciály (v eV) iontů He⁺ a C⁵⁺ v jejich základních elektronových stavech.
[He⁺: 54,4 eV; C⁵⁺: 489,6 eV]
- 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?
[13,6 eV]

Atomy s mnoha elektrony

3. Pro atom síry (Z = 16)

- napište elektronovou konfiguraci nejnižšího energetického stavu.
- spočítejte poloměry obsazených atomových orbitalů pro tento atom.
[1s: 3 pm; 2s, 2p: 18 pm; 3s, 3p: 87 pm]

4. Pro valenční elektrony fluoru (Z = 9), chloru (Z = 17) a bromu (Z = 35) vypočtěte:

- stínící konstanty [F: 3,8; Cl: 10,9; Br: 27,4]
- efektivní náboje [F: 5,2; Cl: 6,1; Br: 7,6]
- Slaterovy orbitální poloměry [F: 41 pm; Cl: 78 pm; Br: 111 pm]

Příklady pro procvičování elektronové konfigurace

5. Napište elektronovou konfiguraci pro platinu, která splňuje pravidlo o součtu $n + l$ a další dvě elektronové konfigurace, které jsou možné díky tomu, že hladiny 6s a 5d jsou velmi blízko v energii.
6. Které z atomů se $Z \leq 20$ v základním elektronovém stavu
 - a. jsou diamagnetické, tj. nemají žádný nepárový elektron?
 - b. mají právě jeden nepárový elektron?
 - c. mají právě dva nepárové elektrony?

* složitější příklad pro zájemce