# Atomové orbitaly

Vztahy: ; ; ;

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. [1s: -13,6 eV; 2s, 2p: -3,4 eV; 3s, 3p: -1,51 eV]
   2. Určete ionizační potenciál pro vodík v tomto excitovaném stavu v eV a v kJ mol-1.

[1,51 eV; 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. [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]
  3. 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*

1. Pro atom síry (Z = 16)
   1. napište elektronovou konfiguraci nejnižšího energetického stavu.
   2. spočítejte poloměry obsazených atomových orbitalů pro tento atom.

[1s: 3 pm; 2s, 2p: 18 pm; 3s, 3p: 87 pm]

1. Pro valenční elektrony fluoru (), chloru () a bromu () vypočtěte:
   1. stínící konstanty [F: 3,8; Cl: 10,9; Br: 27,4]
   2. efektivní náboje [F: 5,2; Cl: 6,1; Br: 7,6]
   3. Slaterovy orbitální poloměry [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.
2. Které z atomů se 20 v základním elektronovém stavu
   1. jsou diamagnetické, tj. nemají žádný nepárový elektron?
   2. mají právě jeden nepárový elektron?
   3. mají právě dva nepárové elektrony?

**\*** složitější příklad pro zájemce