# Atomové orbitaly

Vztahy: $E\_{n}=\frac{-RyZ^{2}}{n^{2}}$; $E=hν=h\frac{c}{λ}$; $Z^{\*}=Z-σ$; $ρ=\frac{n^{2}a\_{0}}{Z^{\*}}$

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 |
| $n$s, $n$p | 1 | 0,85 | 0,35 | 0 |

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

Konstanty:

$Ry=$ 2,18 · 10-18 J = 13,6 eV

Avogadrova konstanta $N\_{A}=$ 6,022 · 1023 mol-1

Planckova konstanta $h=$ 6,626 · 10-34 Js

rychlost světla ve vakuu $c=$ 3 · 108 ms-1

Bohrův poloměr $a\_{0}=$ 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 ($Z=9$), chloru ($Z=17$) a bromu ($Z=35$) 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 $n+l$ 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 $Z\leq $ 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