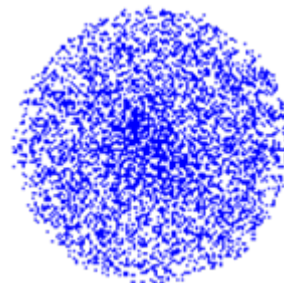


# Elektronový obal atomu

**Chemické vlastnosti** atomů (a molekul) jsou určeny vlastnostmi elektronového obalu.

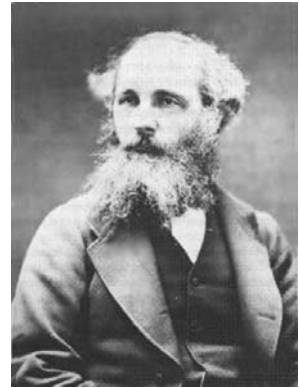
Chceme znát **energii** a prostorové **rozložení** elektronů

Znalosti o elektronovém obalu byly získány studiem **záření** emitovaného excitovanými atomy (vybuzení ze základního stavu do stavu excitovaného dodáním energie – tepelné, elektrické - jiskra, oblouk)



# Elektromagnetické záření

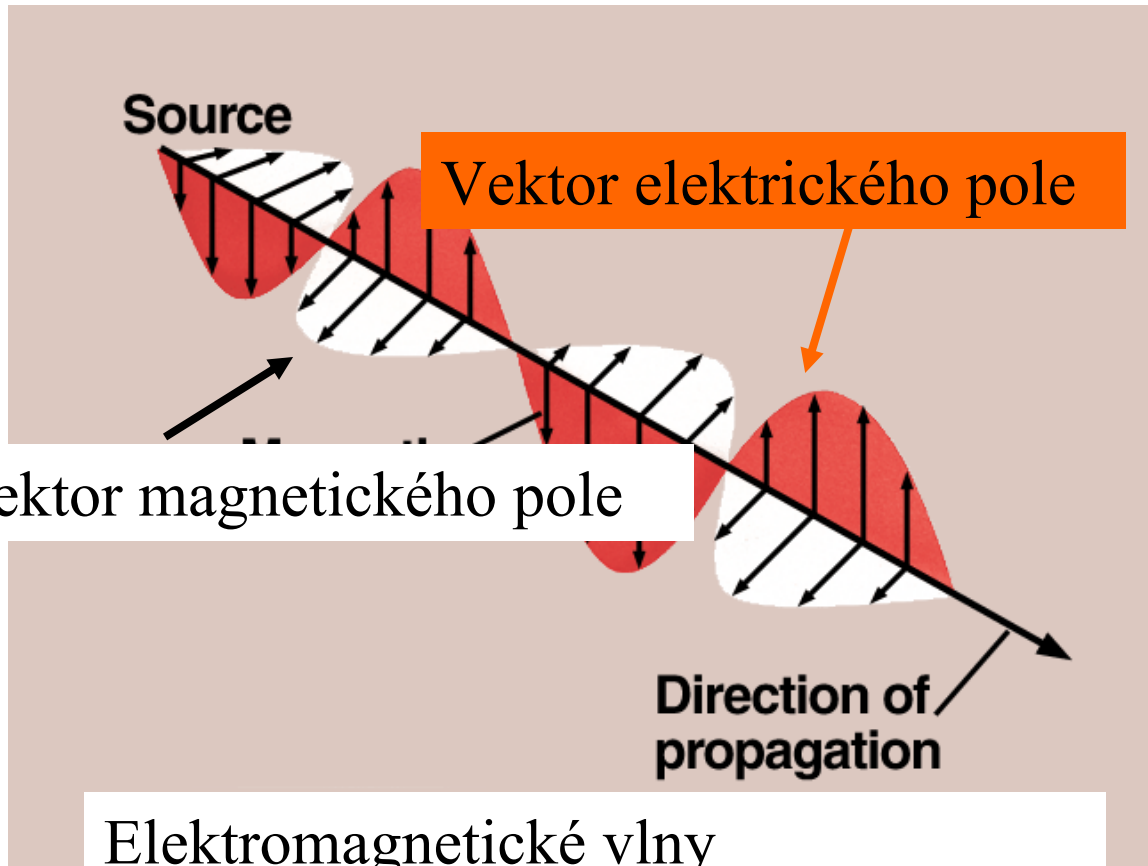
$c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$  rychlost šíření světla ve vakuu



James C. Maxwell  
(1831-1879)



Heinrich Hertz  
(1857 - 1894)

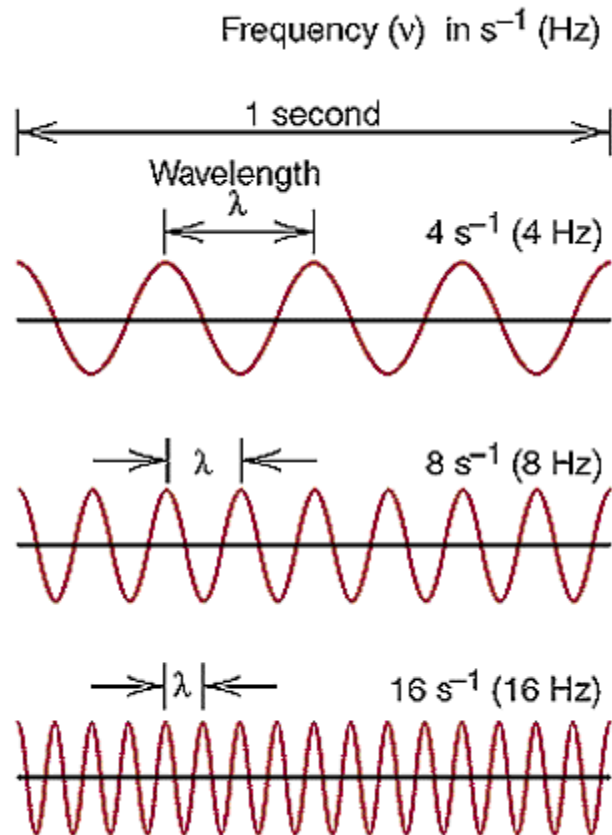


Vektor magnetického pole

Vektor elektrického pole

Elektromagnetické vlny  
oscilující elektrické a magnetické pole

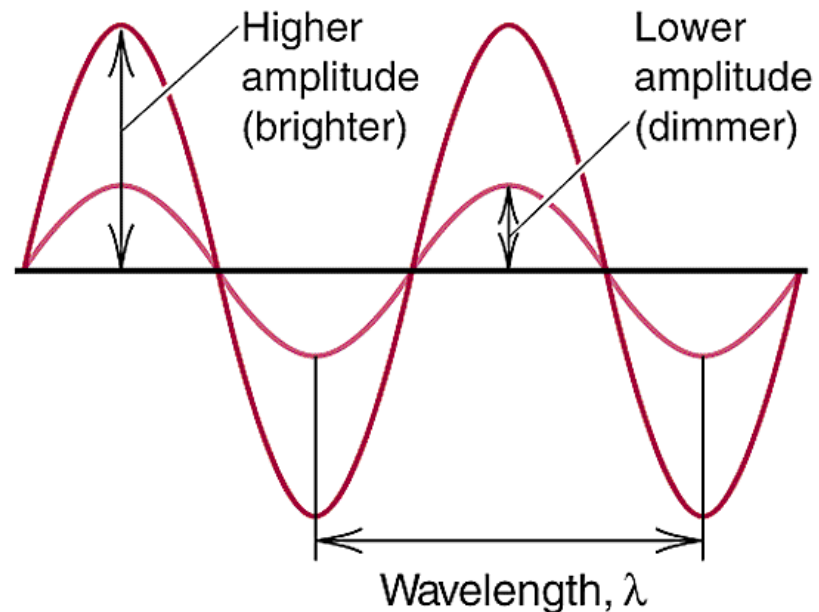
# Vlnová délka $\lambda$ , frekvence $\nu$ , vlnočet $\tilde{\nu}$ amplituda



$$\nu \lambda = c$$

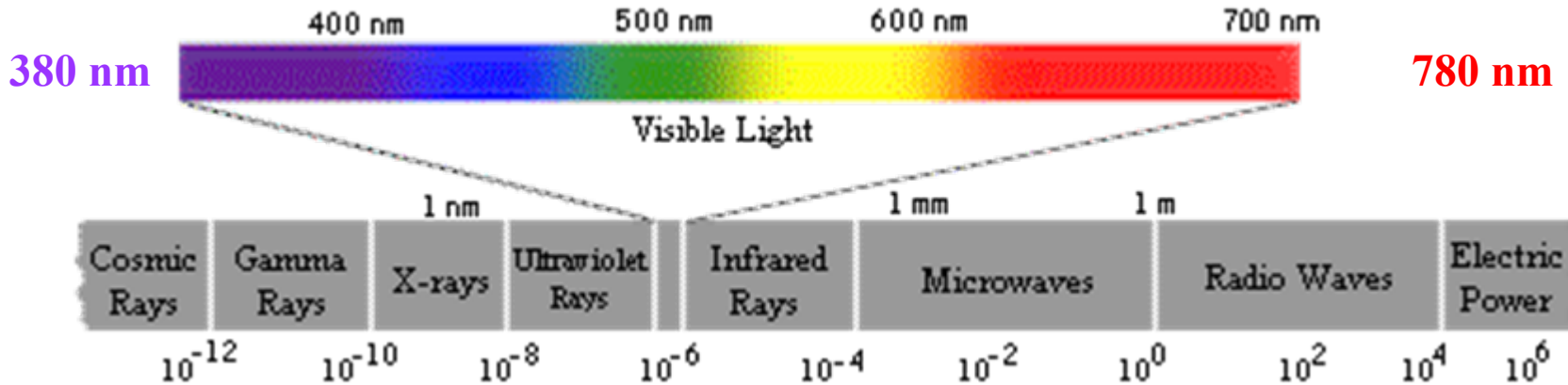
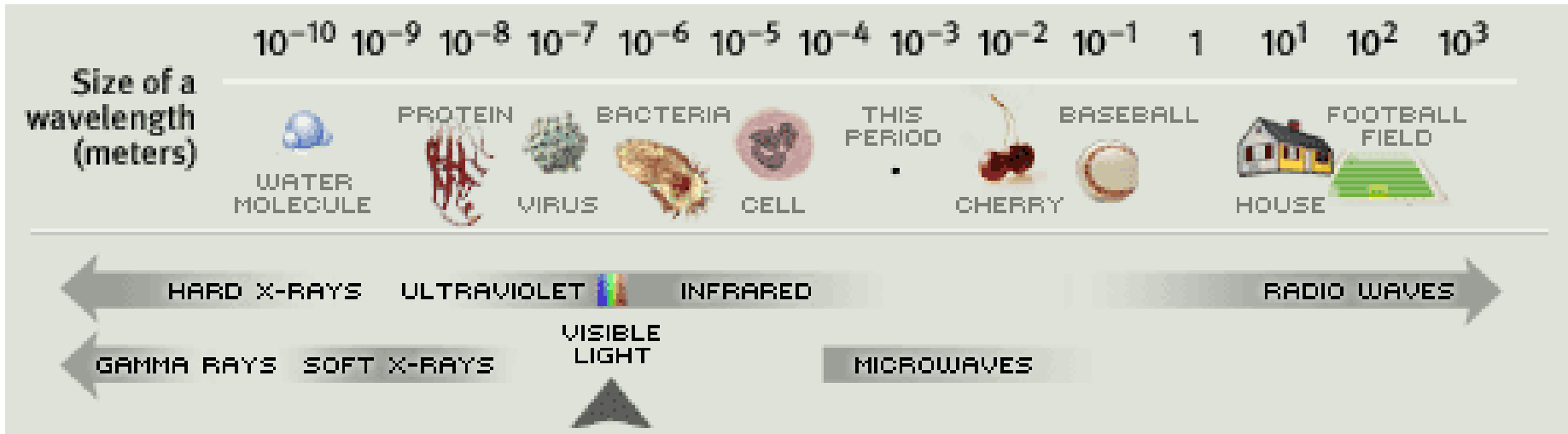
$$c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

$$\tilde{\nu} = 1/\lambda \text{ [cm}^{-1}\text{]}$$

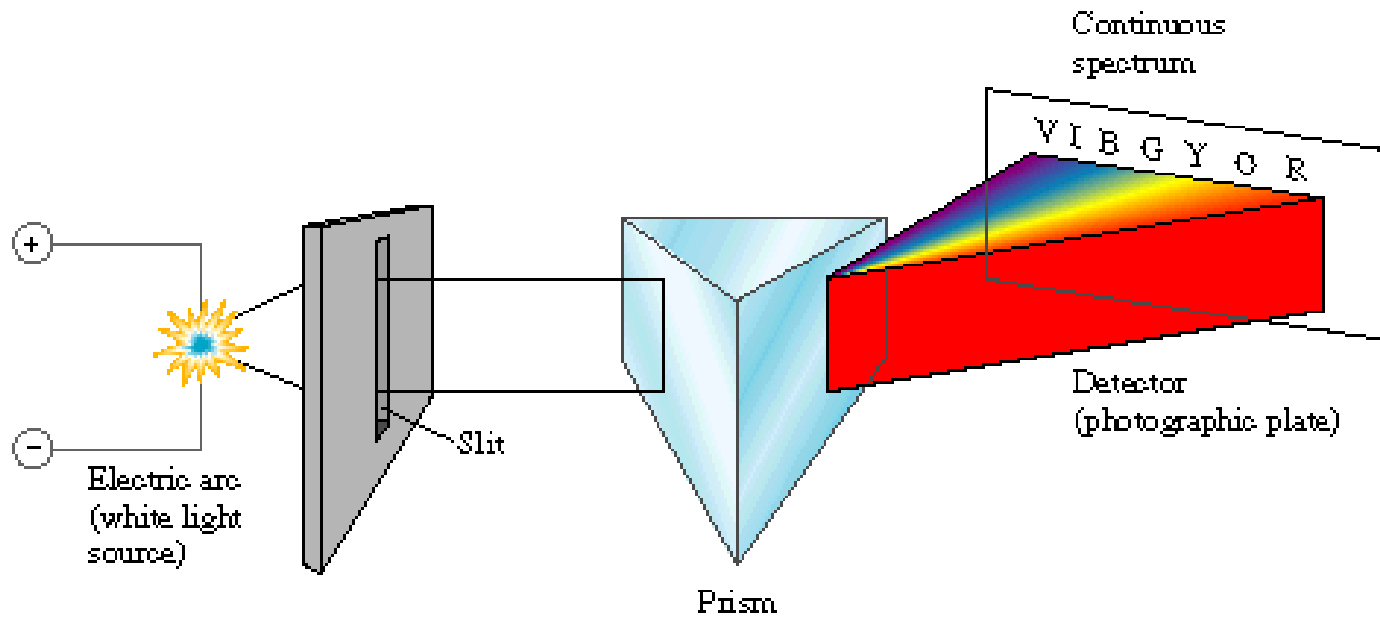


# Elektromagnetické záření

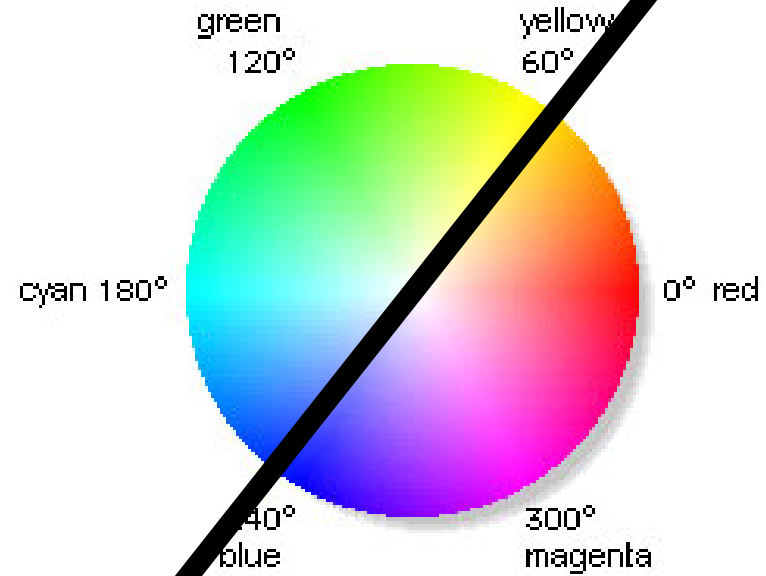
Vlnová délka,  $\lambda$  [m]



# Spektrum záření



# Newtonovo kolo



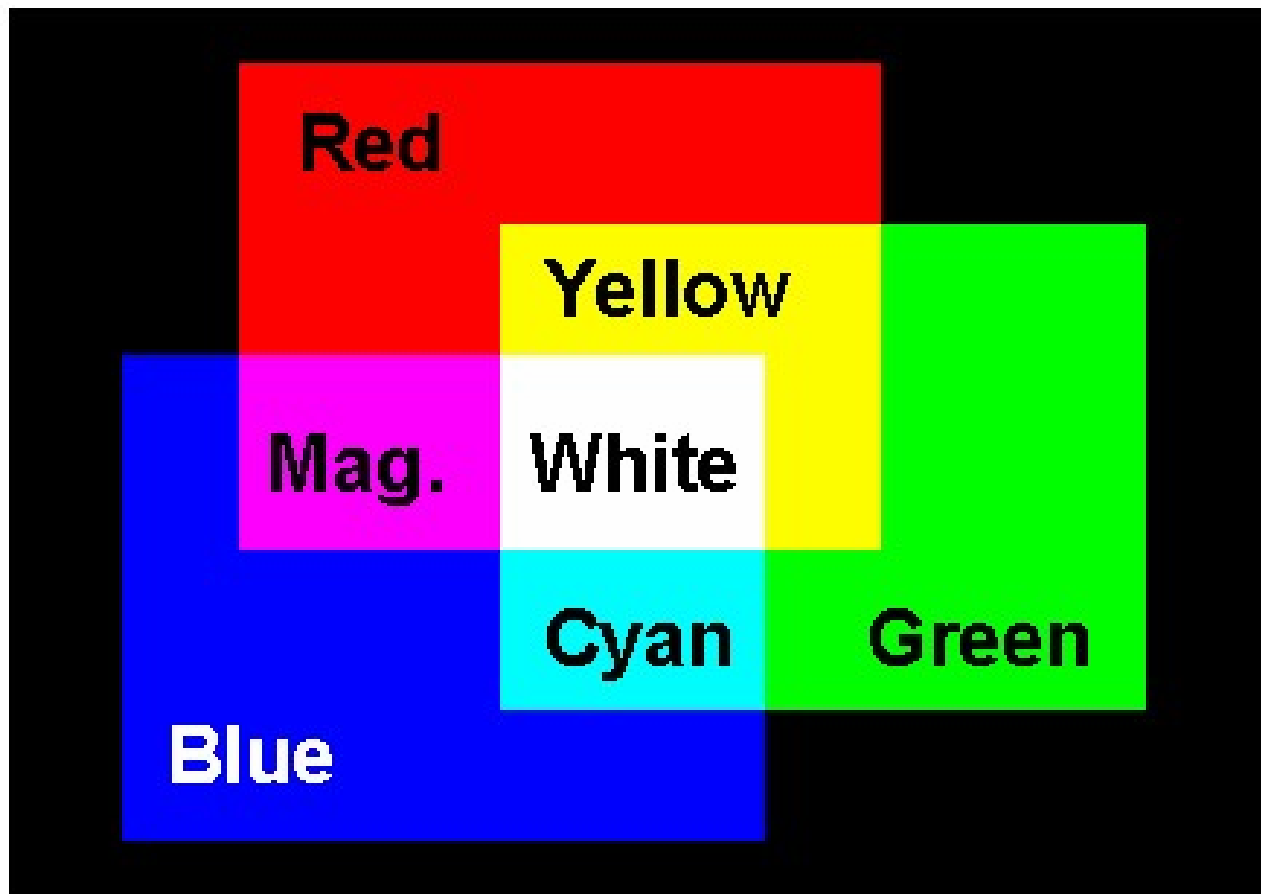
Světlo má charakter:

- vlnový (interference)
- částicový (pohyb po přímce)

Předmět absorbuje žlutou barvu z bílého světla a jeví se jako modrý

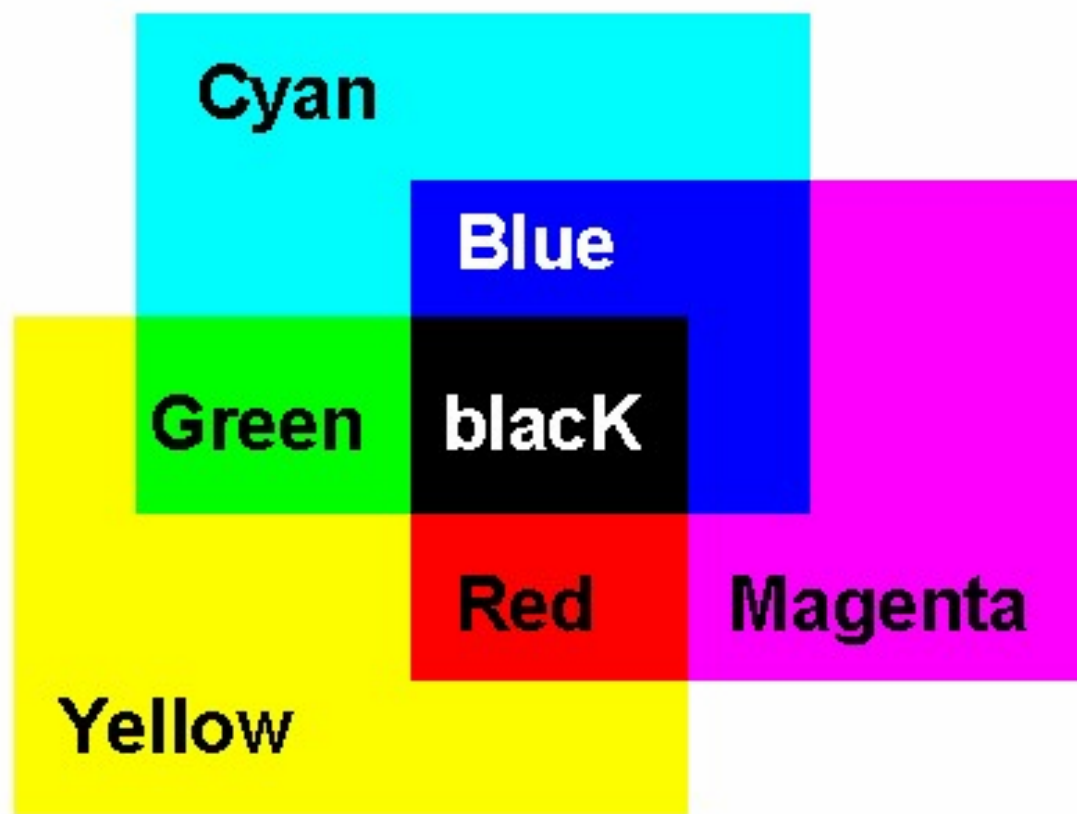
# Aditivní skládání barev (RGB)

---



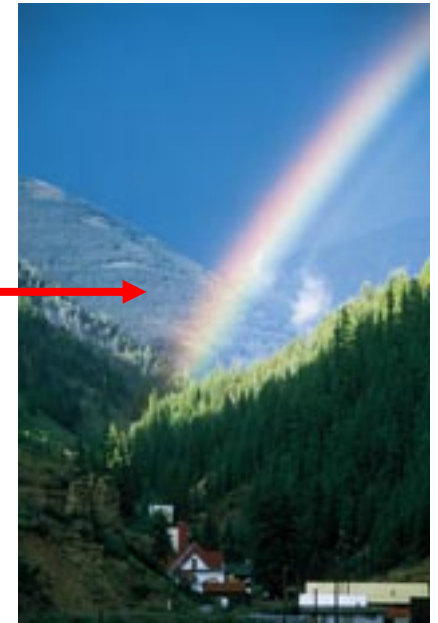
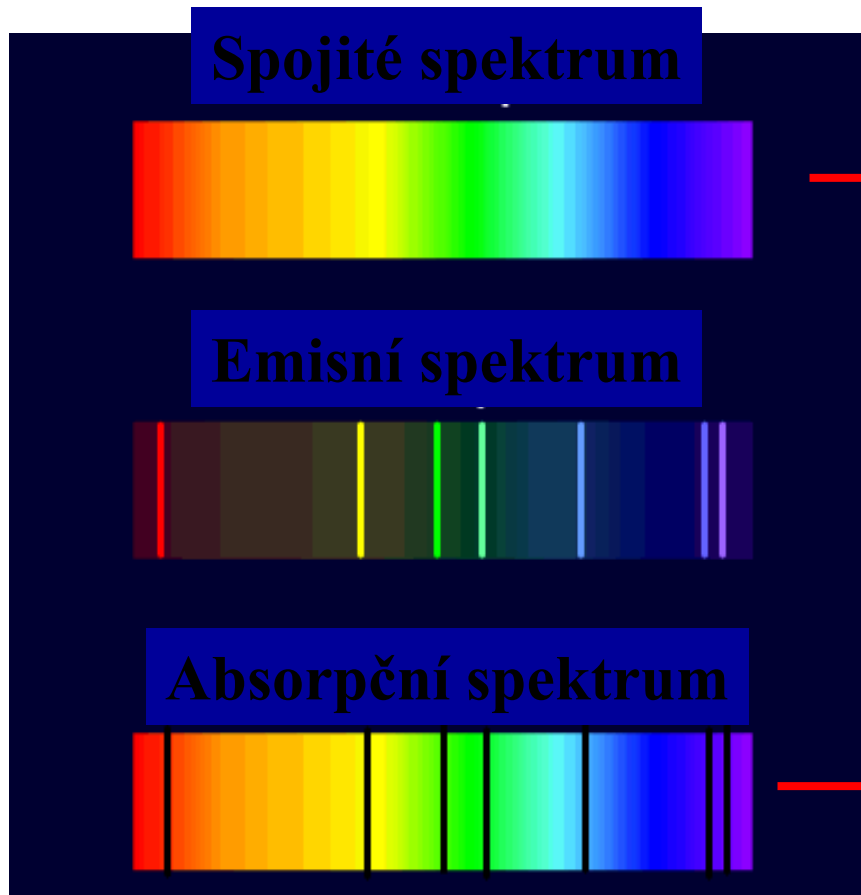
## Subtraktivní skládání barev (CMY)

---

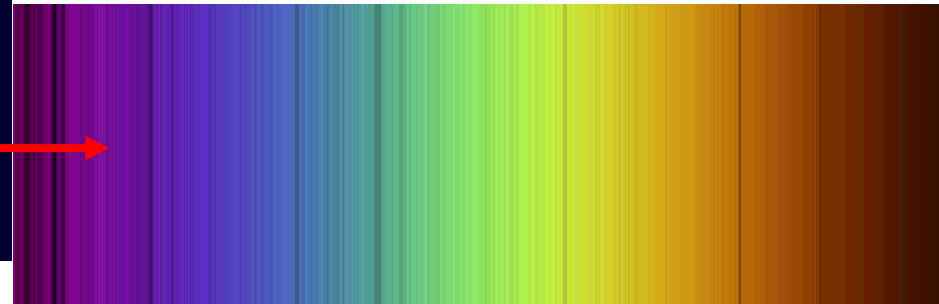




# Spektrum záření

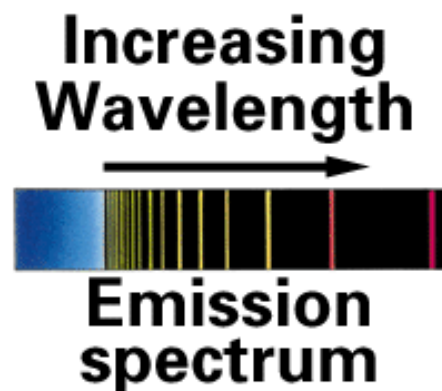
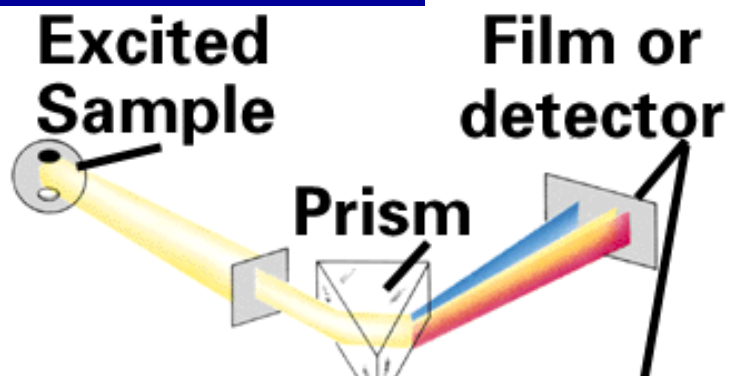


Sluneční spektrum: He, Fe, Mg,...

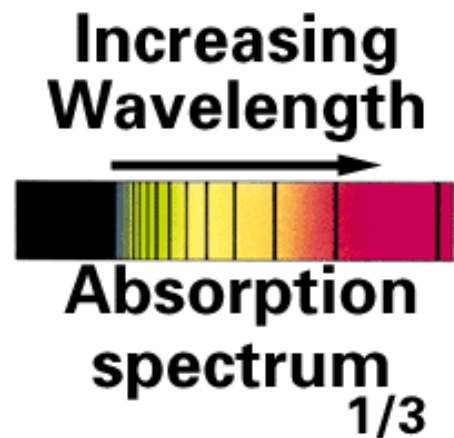
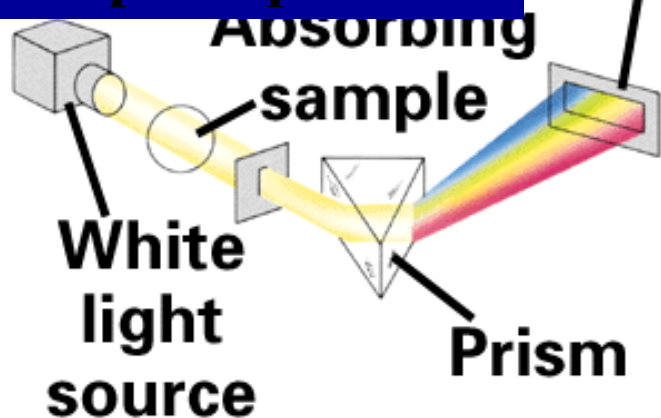


# Čárová spektra prvků

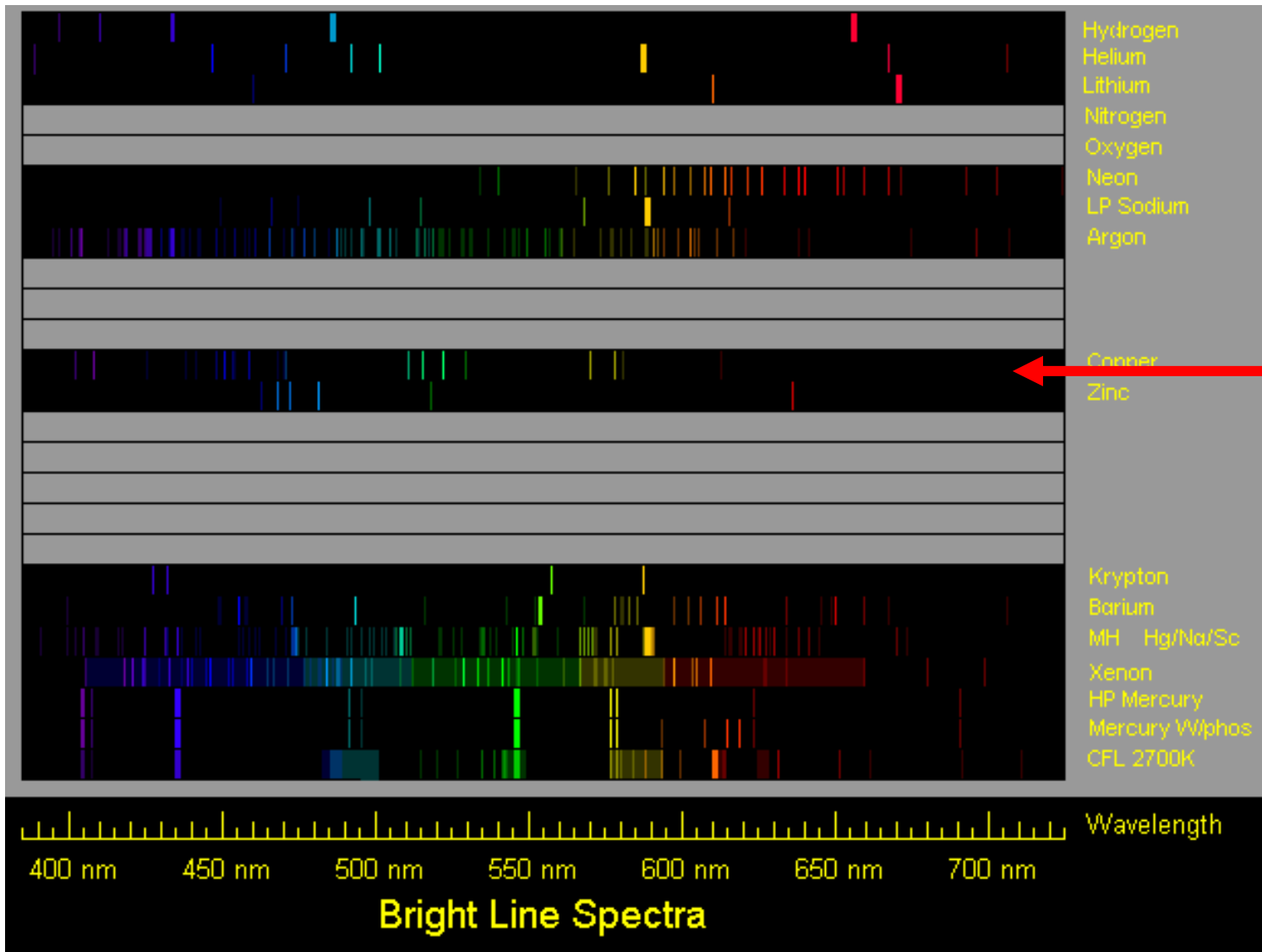
## Emisní spektrum



## Absorpční spektrum



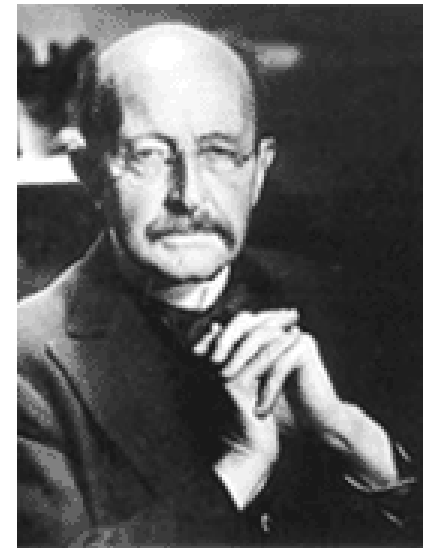
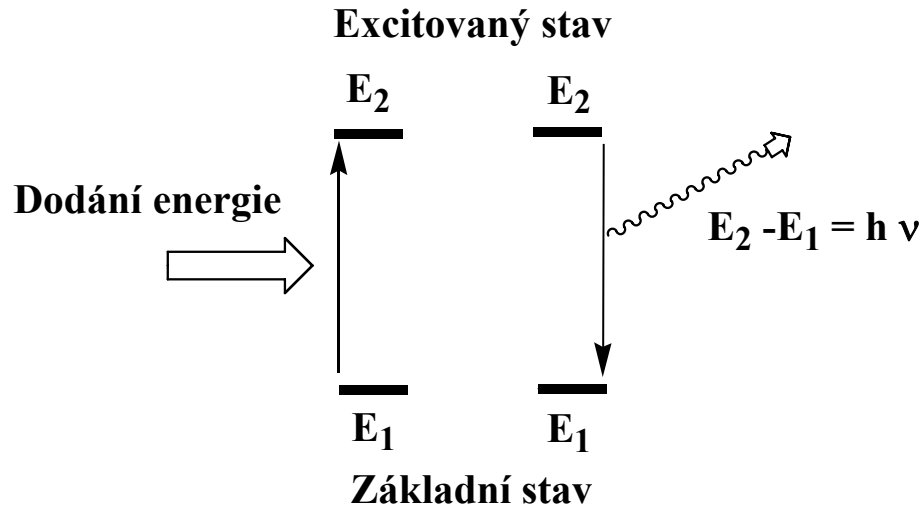
# Emisní čárová spektra prvků



H  
He  
Li  
  
Cu  
Zn

# Kvantování energie

1900 Energie záření o vlnové délce  $\lambda$  se může absorbovat nebo emitovat po diskretních množstvích = **kvantech**



Světelná kvanta = **fotony**

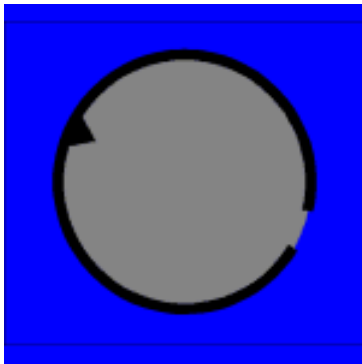
$$\Delta E = n h \nu = n h c / \lambda$$

Planckova konstanta  $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$

Max Planck  
(1858 - 1947)  
NP za fyziku 1918

# Záření černého tělesa

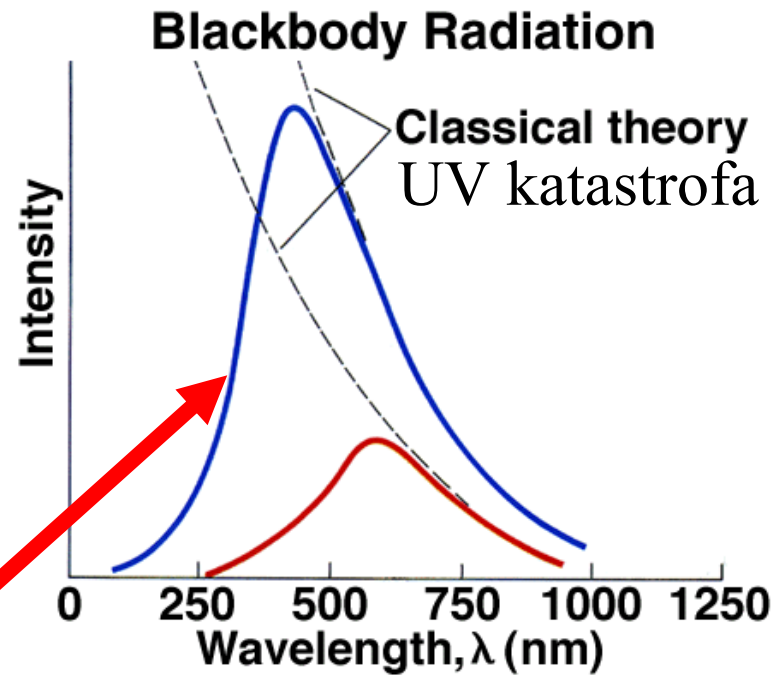
černé těleso = záření pouze dovnitř, nic ven



Atomy = oscilátory  
Kvantování energie  
 $E = h \nu$

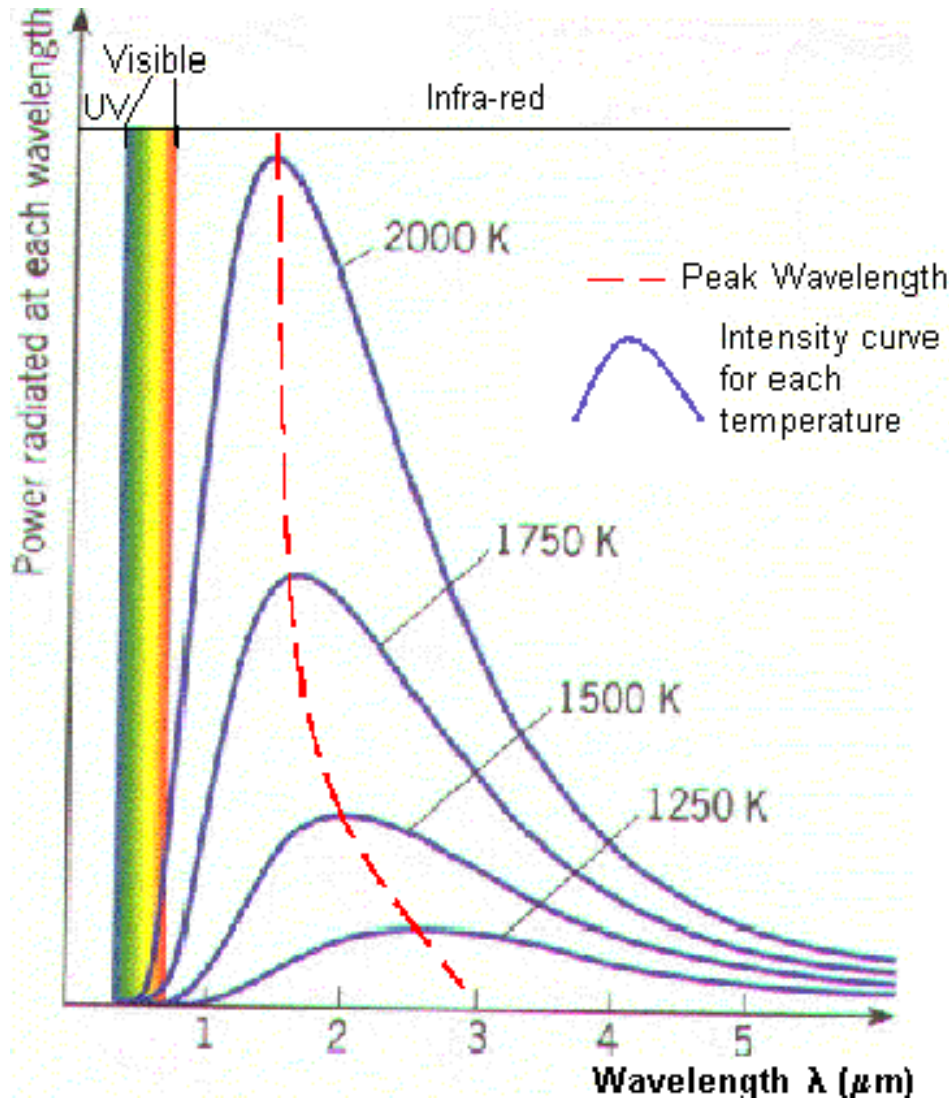
Max Planck odvodil

$$P_{\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{(hc/\lambda kt)} - 1)}$$



Vyzářená energie při vlnové délce  $\lambda$   
je funkcí pouze teploty

# Záření černého tělesa



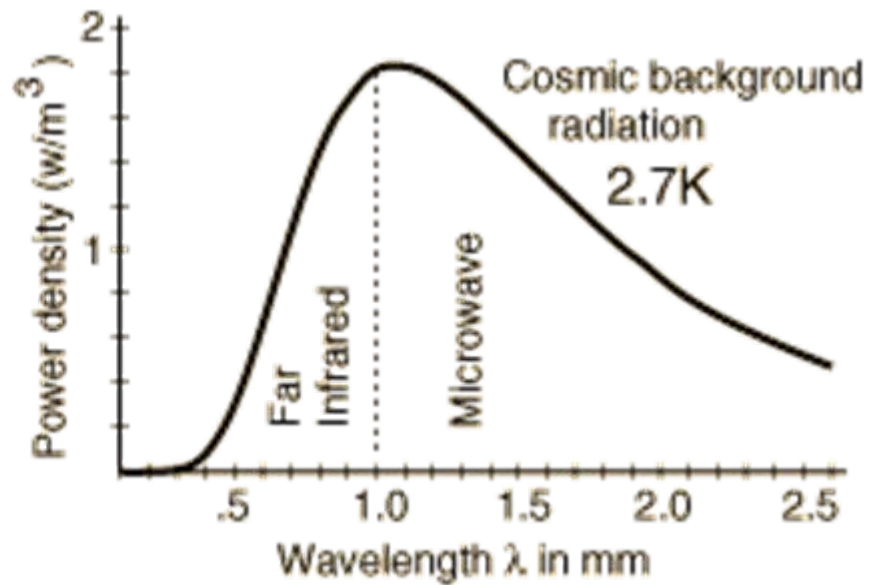
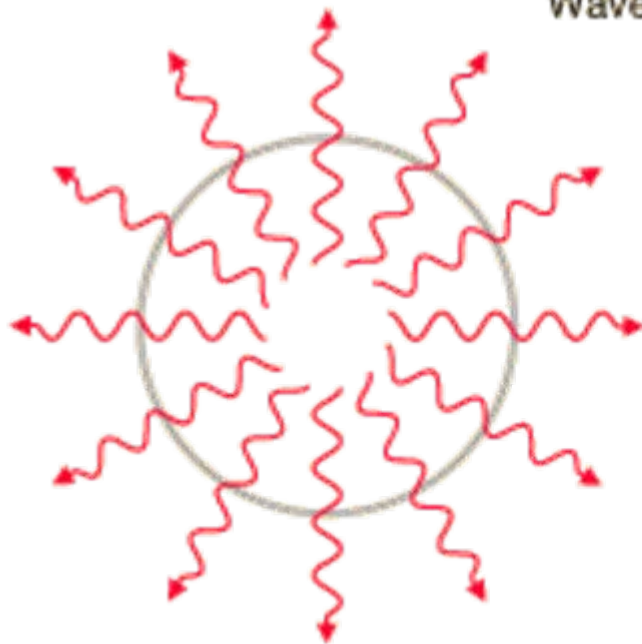
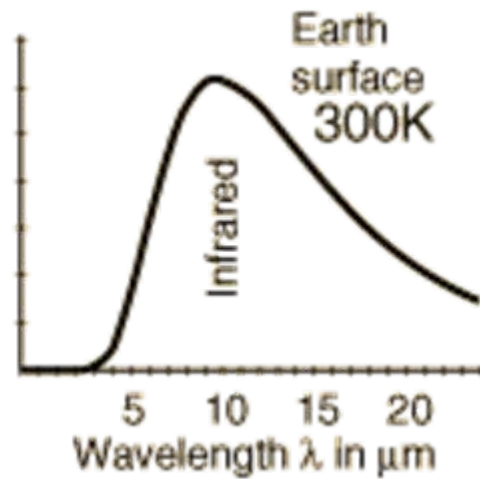
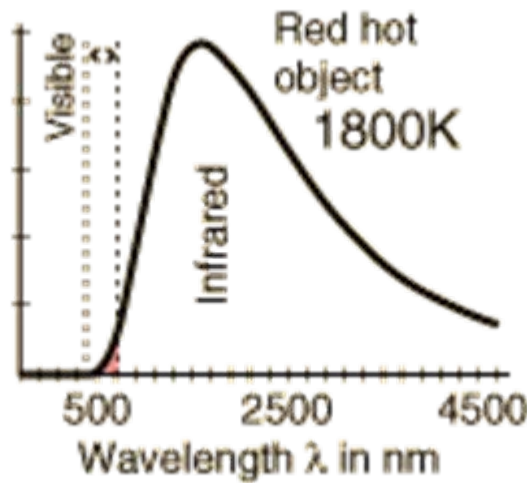
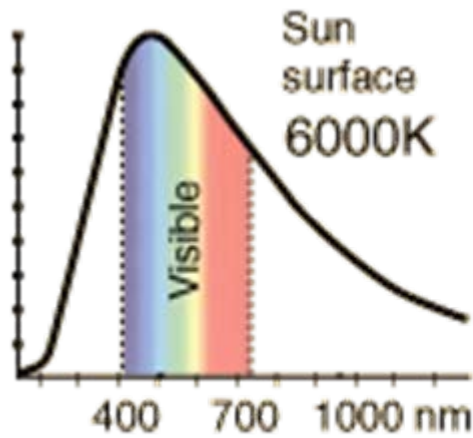
Wienův zákon

$$\lambda_{\text{max}} T = \text{konst}$$

Stefan-Boltzmannův zákon

$$P = \sigma T^4$$

Teplota záření vesmíru  
2.73 K

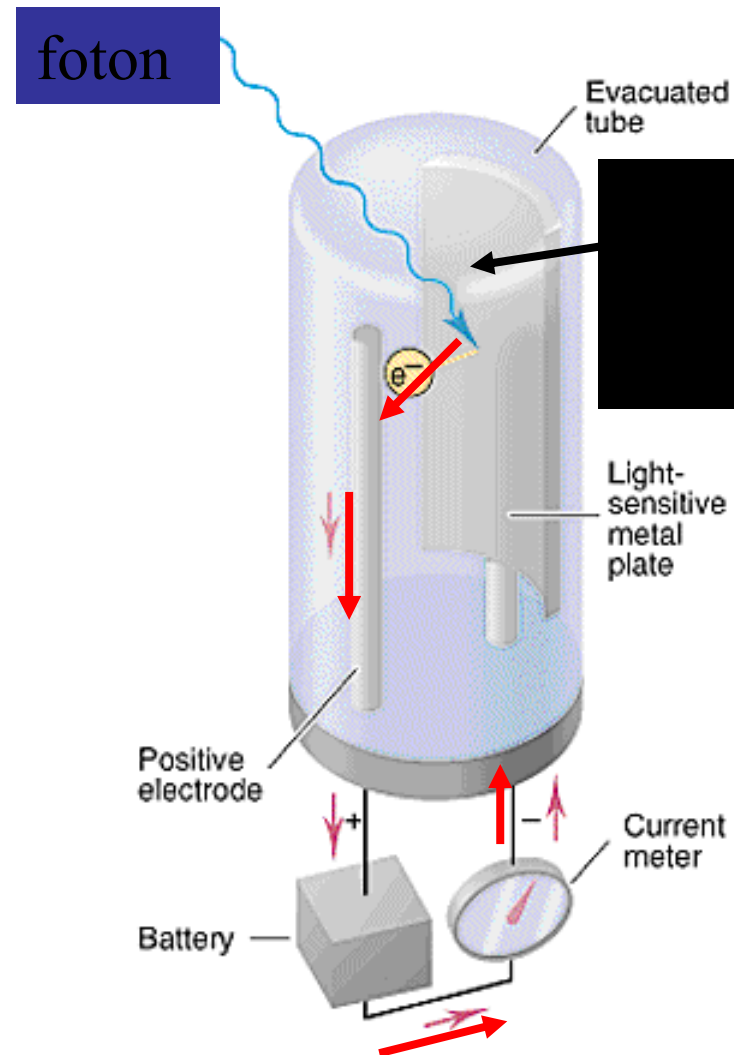


# Fotoelektrický jev

1887 Heinrich Hertz

1898 J. J. Thomson

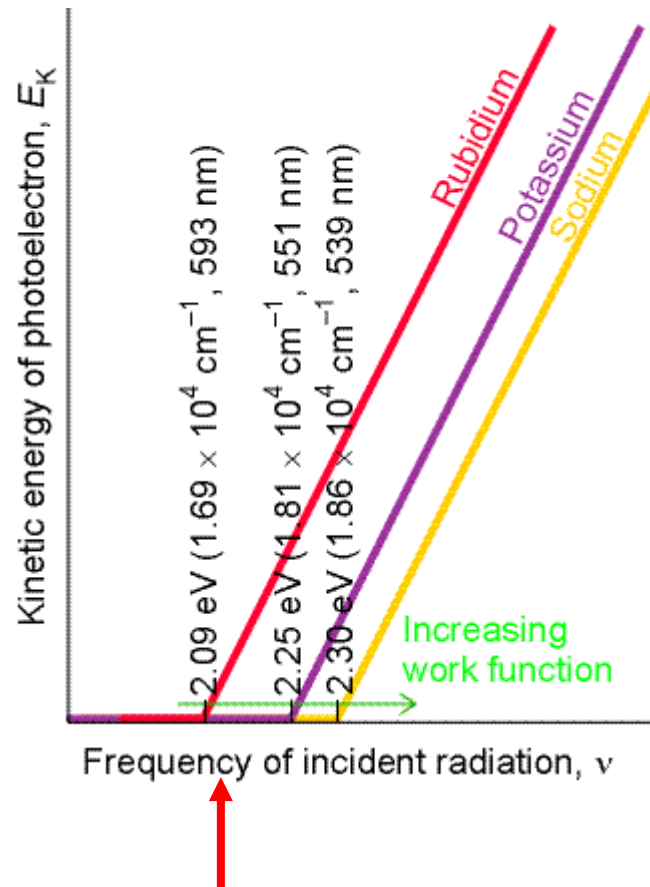
- elektrony jsou emitovány z povrchu kovu při ozařování UV zářením
- existuje minimální  $\nu$ , fotony s nižší energií už nevyrazí elektrony
- kinetická energie fotoelektronů závisí na  $\nu$ , roste s vyšší energií UV. Nezávisí na intenzitě UV.





# Fotoelektrický jev

Kinetická energie fotoelektronů

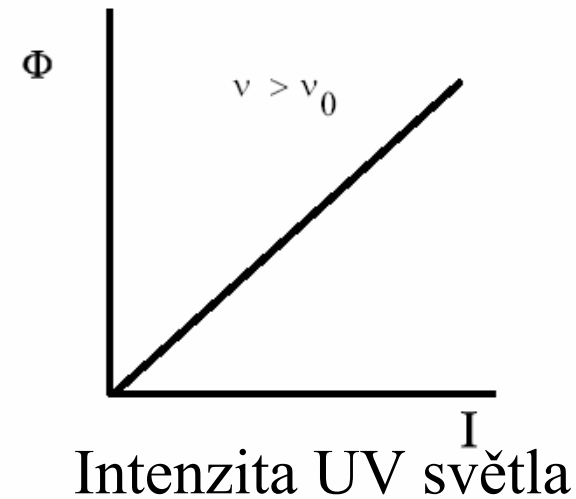
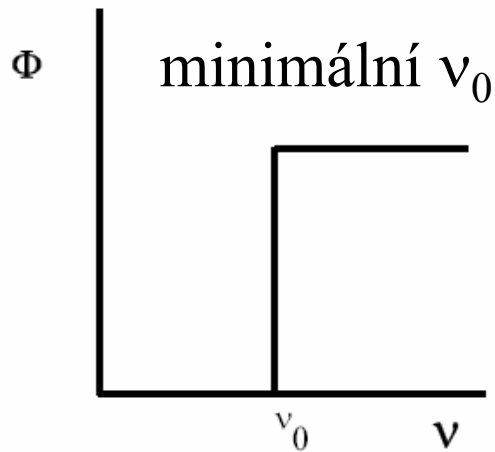


Pod  $\nu_0$  žádná emise  
bez ohledu na intenzitu světla!

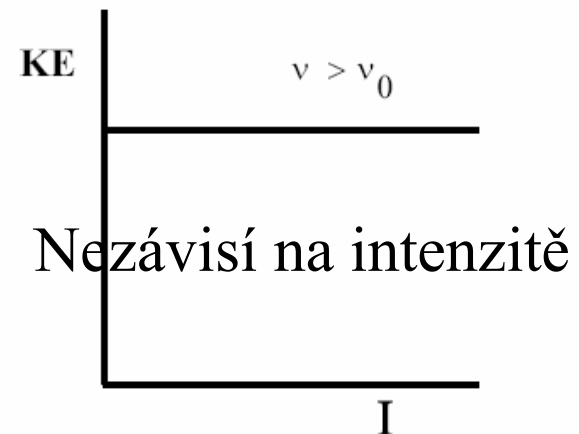
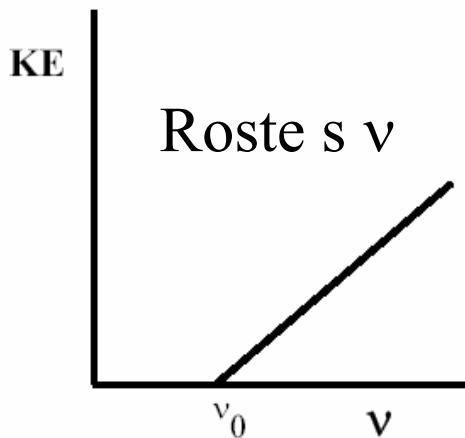
# Fotoelektrický jev

$\Phi$  = Tok fotoelektronů

$h\nu_0$  = výstupní práce



$I$  =  
Intenzita  
UV světla



$KE$  =  
Kinetická  
energie

1905

# Fotoelektrický jev

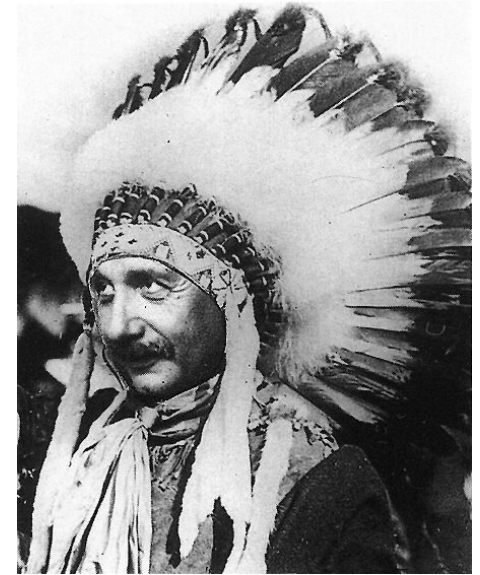
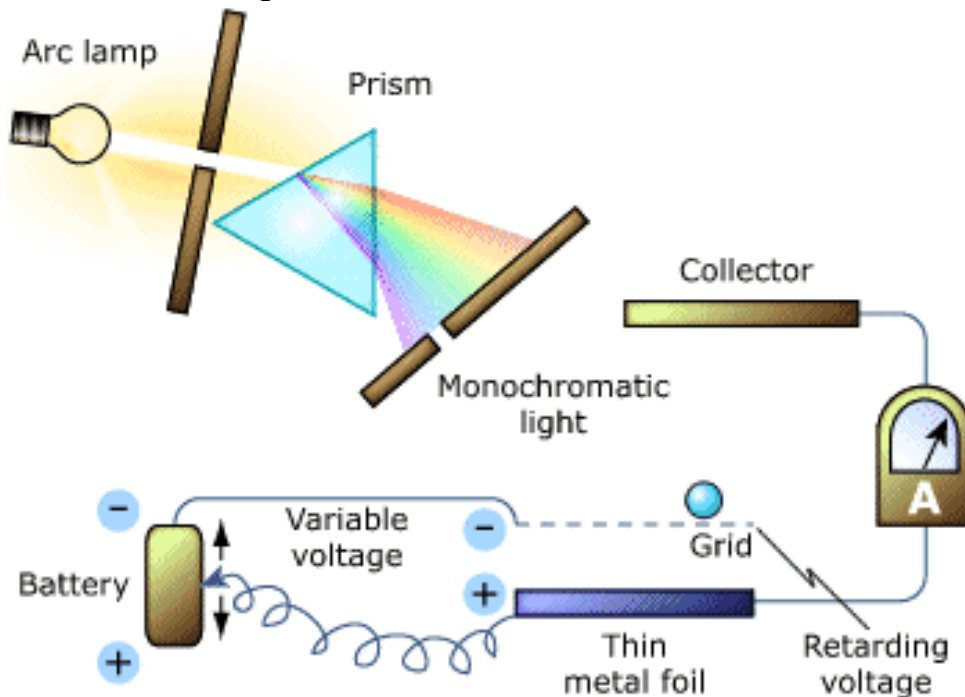
Částicový charakter elektromagnetického záření

Světlo = fotony

energie fotonu  $E = h \nu$

energie vyletujícího elektronu  $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m v^2$

$$h \nu = E_i + \frac{1}{2} m v^2$$



Albert Einstein  
(1879-1955)

NP za fyziku 1921

$$E_{\text{kin}} = h (\nu - \nu_0)$$

$\nu_0$  = konstanta kovu

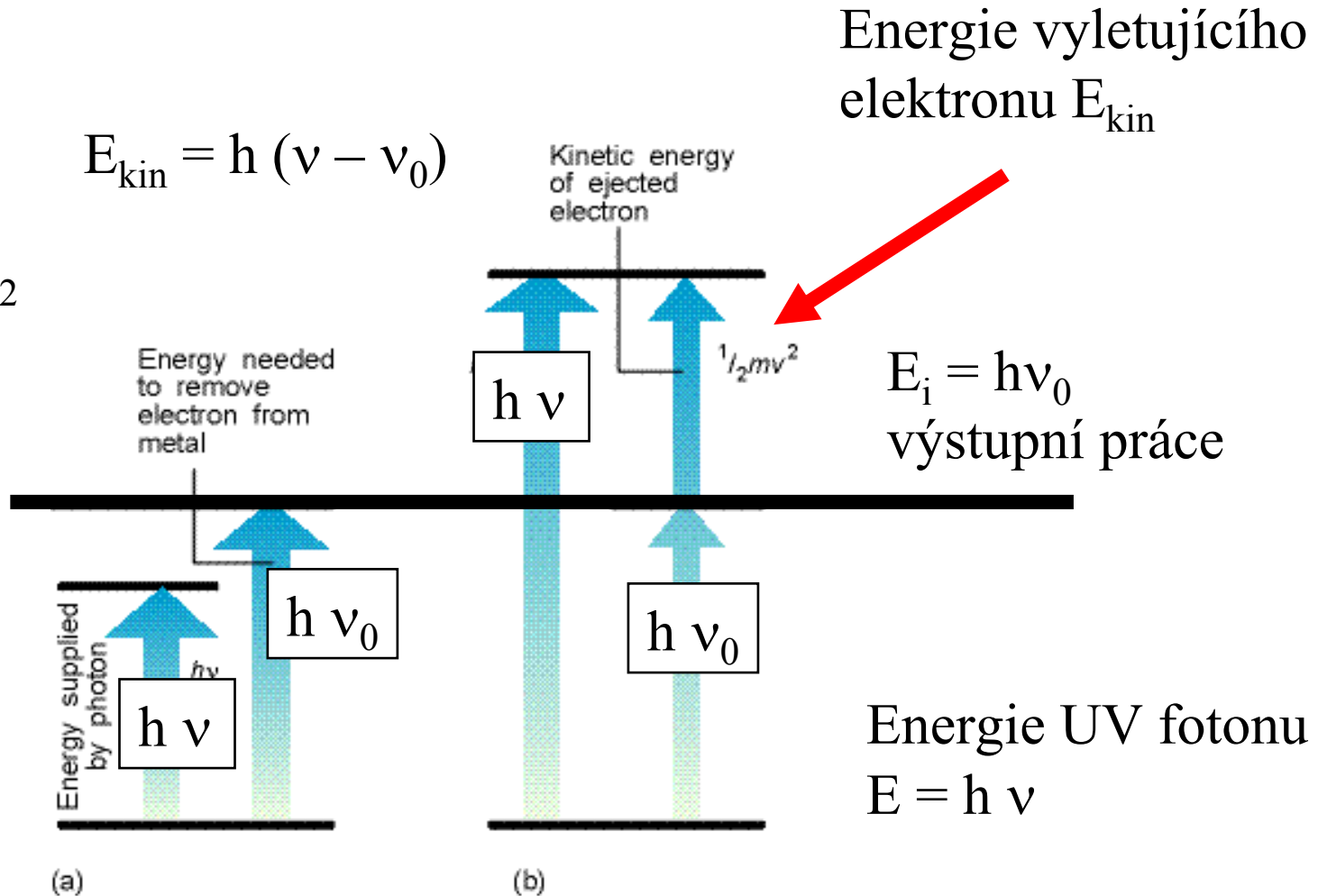
$h$  = Planckova konstanta

$E_i = h \nu_0 =$  výstupní práce

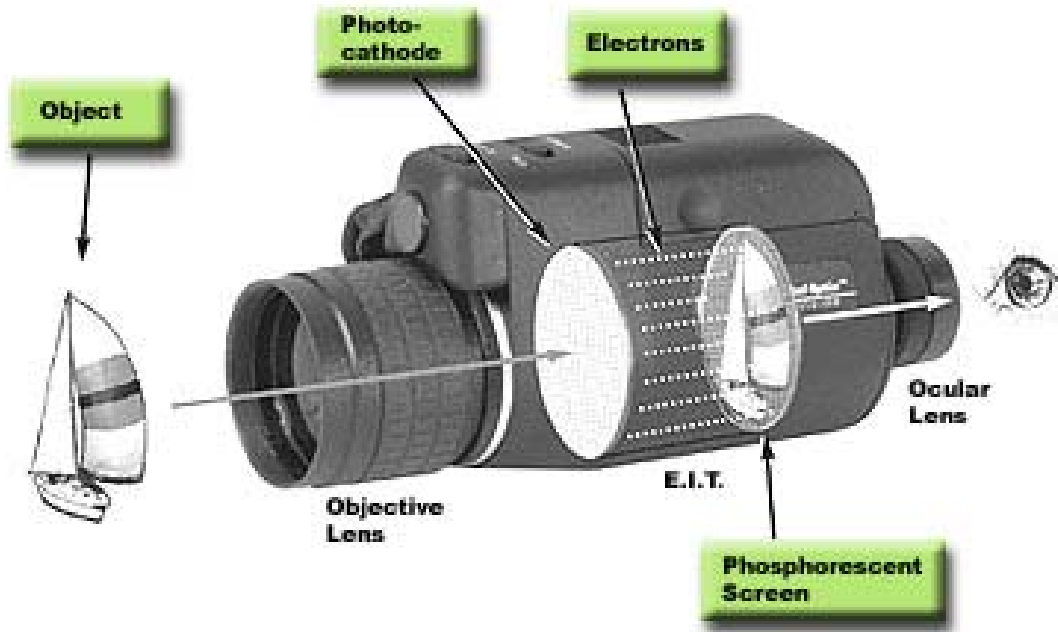
# Fotoelektrický jev

$$E_{\text{kin}} = h (\nu - \nu_0)$$

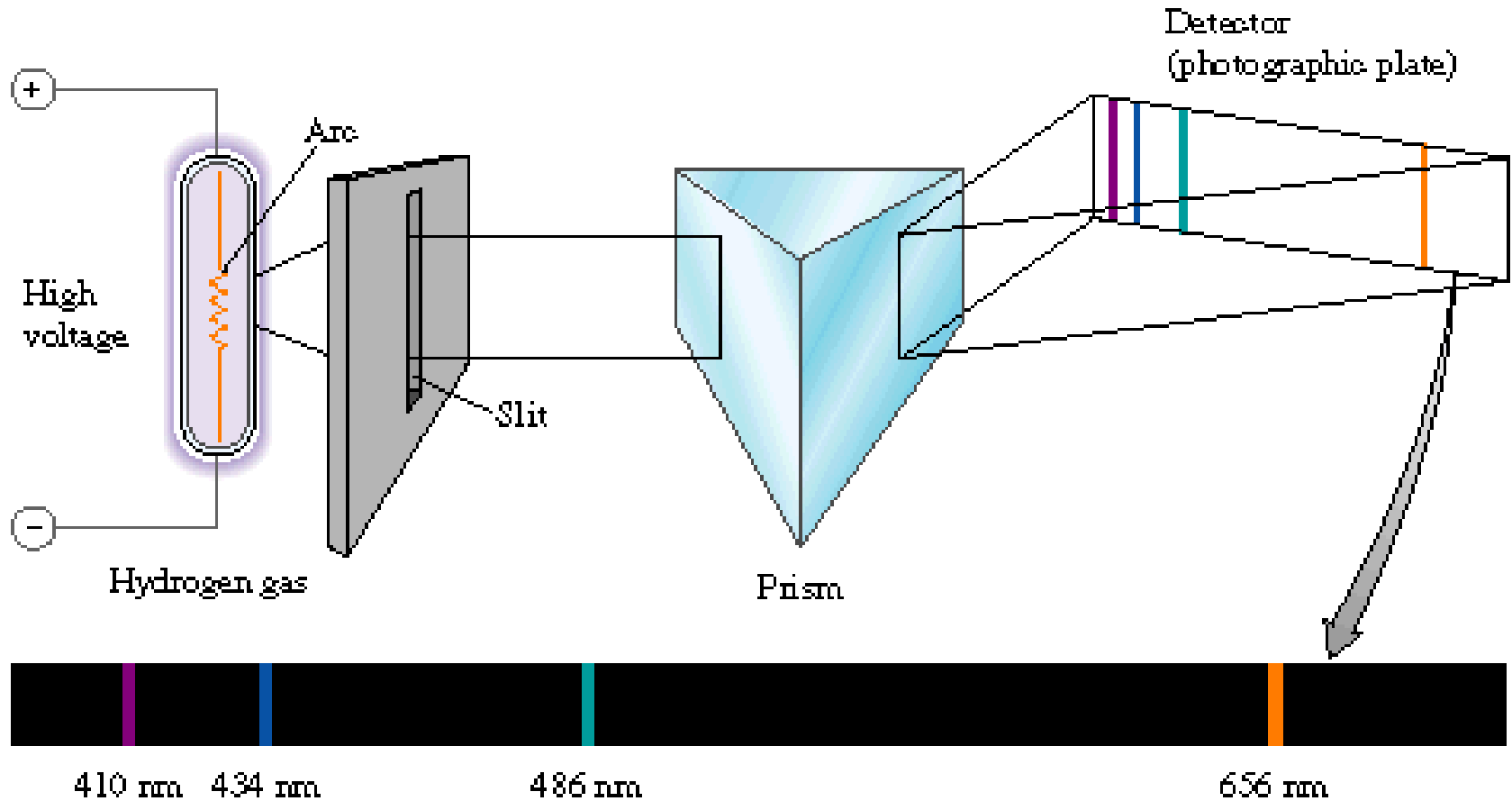
$$h \nu = E_i + \frac{1}{2} m v^2$$



# Aplikace fotoelektrického jevu - Night Vision



# Emisní spektrum vodíku



Spektrum světla emitovaného H atomy

# Rydbergova rovnice

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Experimentálně získaná rovnice z výsledků spektrálních měření

Rydbergova konstanta,  $R_{\infty} = 109678 \text{ cm}^{-1}$

$n, m$  celá čísla,

$n = 2, m = 3, 4, 5, 6, \dots$  Balmerova série, vis

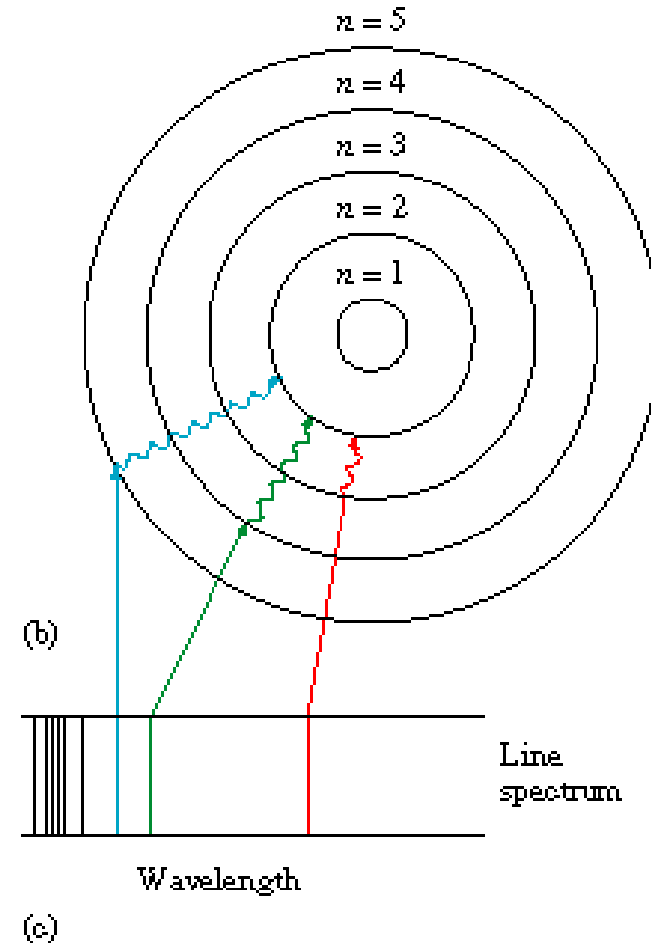
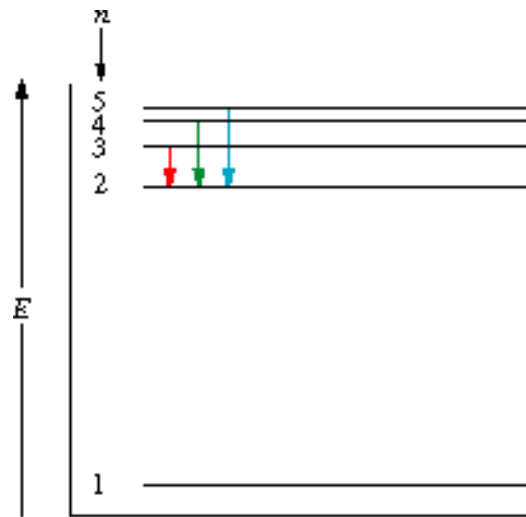
A horizontal bar showing the visible emission spectrum of hydrogen. It features several vertical lines of different colors: a blue-violet line on the left, a blue-green line, a bright green line, a yellow-green line, a red line, and a dark red line on the right. The background is black.

**Rydbergova rovnice platí pouze pro spektrum H**

# Spektrum atomu vodíku

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

$m \rightarrow n$

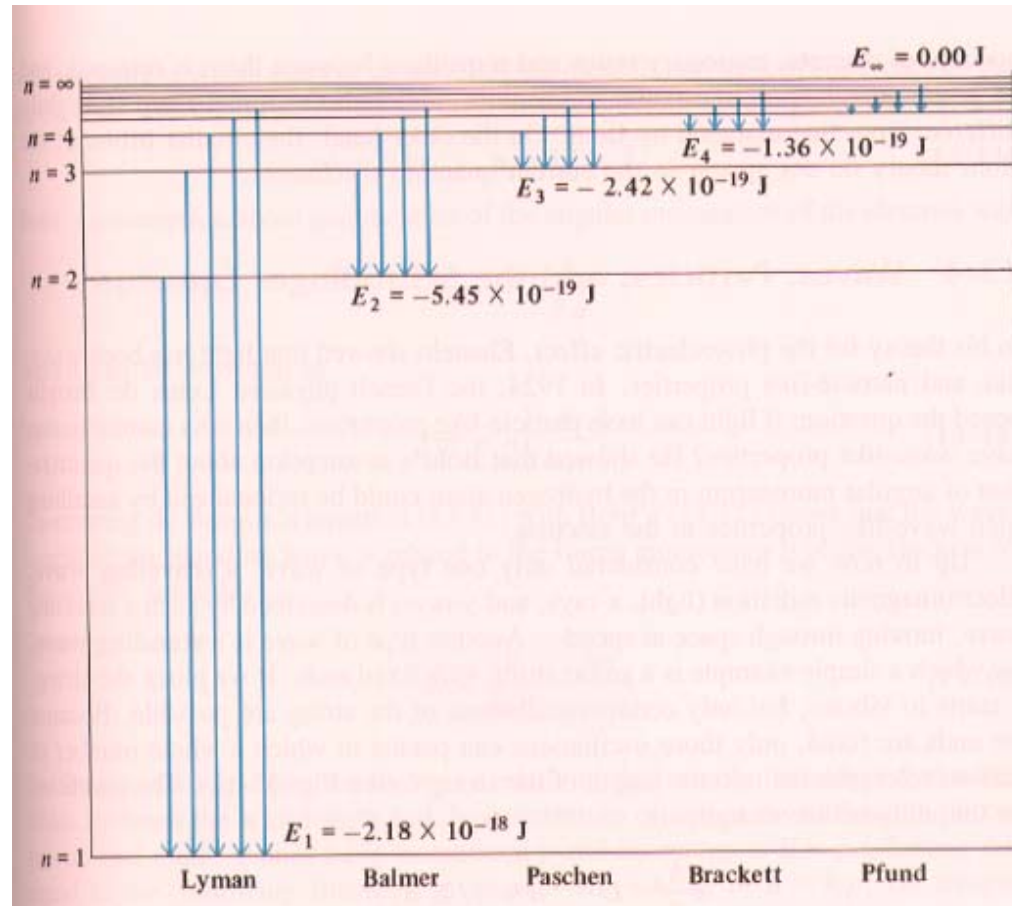




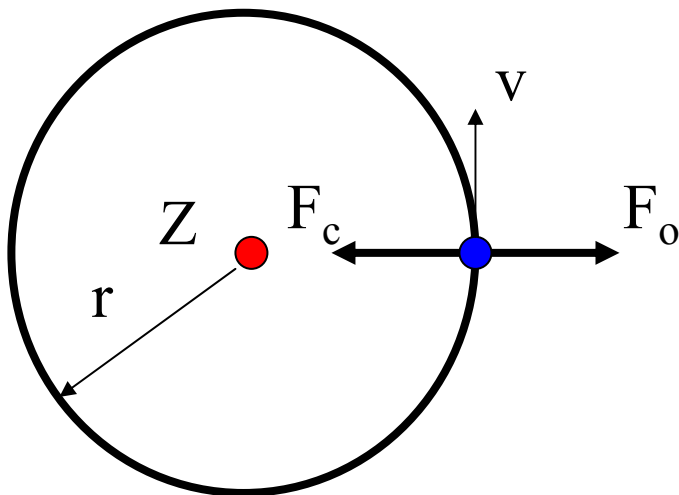
# Spektrální série

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

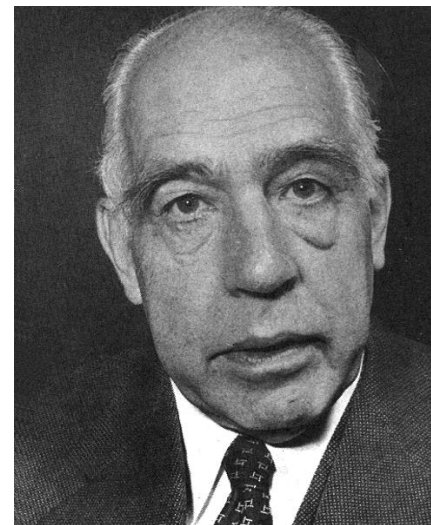
- $n = 1, m = 2, 3, \dots$  Lymanova
- $n = 2, m = 3, 4, \dots$  Balmerova
- $n = 3, m = 4, 5, \dots$  Paschenova
- $n = 4, m = 5, 6, \dots$  Brackettova
- $n = 5, m = 6, 7, \dots$  Pfundova



# Bohrův model atomu



1913



Elektrony obíhají kolem jádra po kruhových drahách, rovnováha odstředivé a Coulombovské přitažlivé síly

$$F_o = F_c$$

Niels Bohr  
(1885 - 1962)  
NP za fyziku 1922

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

# Bohrův model atomu

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad \longrightarrow \quad r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 mv^2}$$

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} m v^2 - Z e^2 / 4 \pi \epsilon_0 r = - Z e^2 / 8 \pi \epsilon_0 r$$

Pokud je  $r$  libovolné, obíhající  $e$  ztrácí (vyzařuje) energii,  $r$  se snižuje,  $e$  se srazí s jádrem. Není to ve skutečnosti pravda.

Elektron tedy musí obíhat jen po určitých drahách s danou  $E$  a  $r$ , na kterých nevyzařuje energii = stacionární stavy.

Nejnižší energetický stav = nejstabilnější = základní stav  
vyšší = excitované stavy

Změna energetického stavu kvantována  $E_2 - E_1 = h\nu$

# Bohrův model atomu

Bohrův postulát: moment hybnosti elektronu je celočíselným násobkem Planckova kvanta  $h/2\pi$

$n$  = kvantové číslo

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

dosadíme z  $m v^2 = Z e^2 / 4 \pi \epsilon_0 r$

$$r_n = n^2 (a_0 / Z)$$

pro  $n = 1$  a  $Z = 1$

$$a_0 = \epsilon_0 h^2 / \pi m e^2$$

$a_0 = 0.529 \text{ \AA}$  Bohrův poloměr atomu H

$$v_n = Z e^2 / 2 \epsilon_0 n h$$

# Bohrův model atomu

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} m v^2 - Z e^2 / 4 \pi \epsilon_0 r$$

$$E_n = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$$

zavedením kvantování

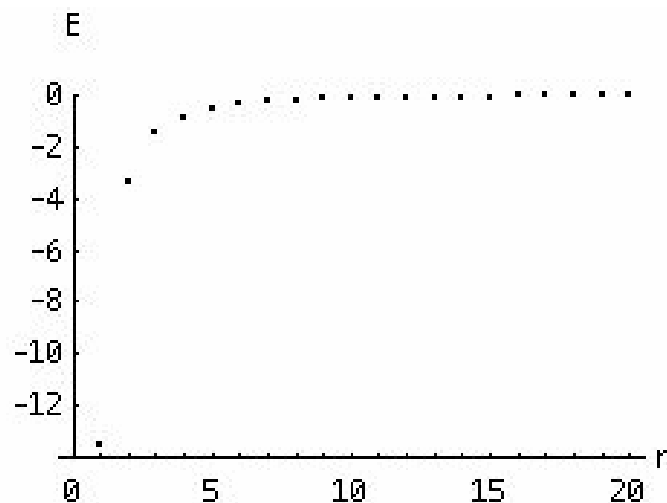
$$E_0 (= m e^4 / 8 \epsilon_0^2 h^2) = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$(1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J})$$

$$E_0 = 13.6 \text{ eV}$$

Ionizační potenciál

H atomu

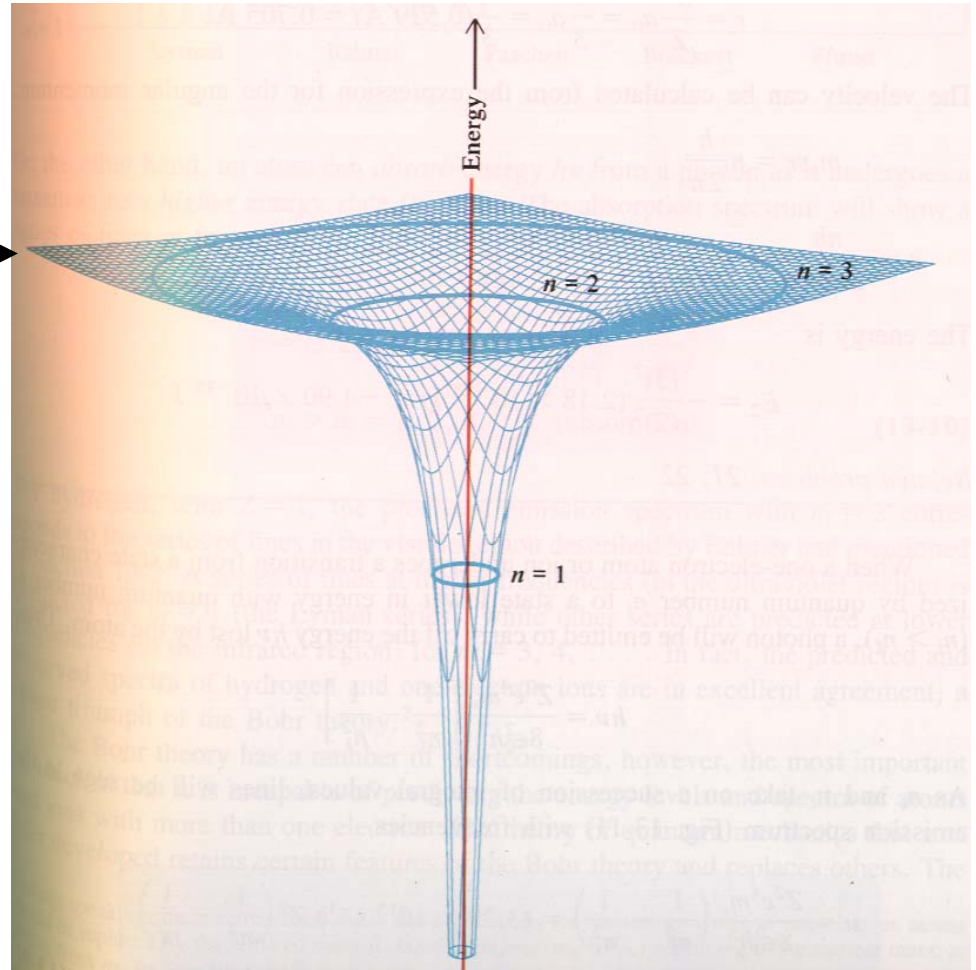


# Bohrův model atomu

$$E = 0$$

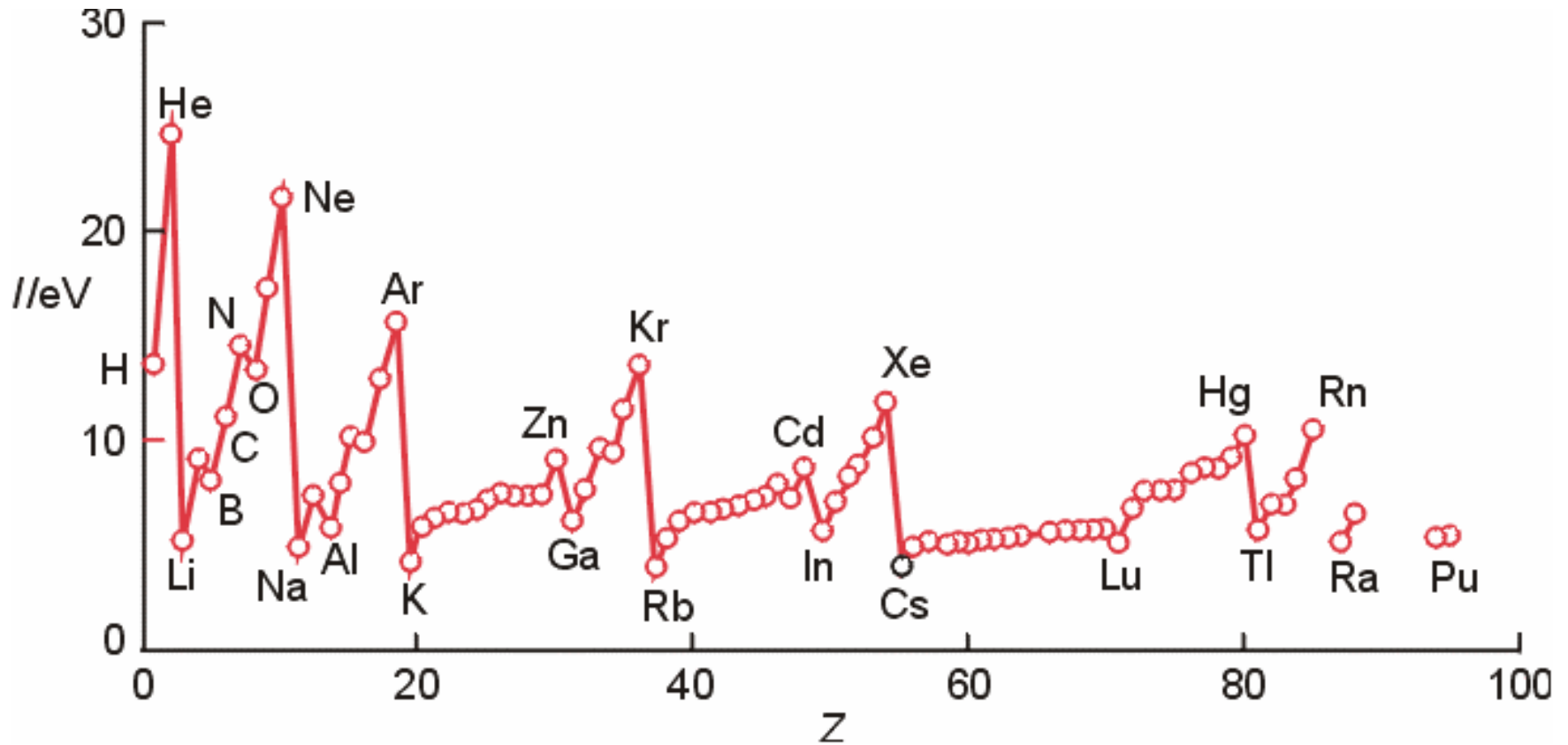


Čím je elektron pevněji  
vázán k jádru, tím je jeho  
energie negativnější, více  
energie se uvolní.



# Ionizační energie

Energie potřebná na odtržení vázaného elektronu



Atomové číslo,  $Z$

# Bohrův model atomu

$$E_n = -E_0 \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{Z^2}{n^2}$$

Rozdíl energií mezi dvěma hladinami

$$E_2 - E_1 = (-E_0 Z^2 / n_2^2) - (-E_0 Z^2 / n_1^2)$$

$$\Delta E = h \nu = h c / \lambda$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

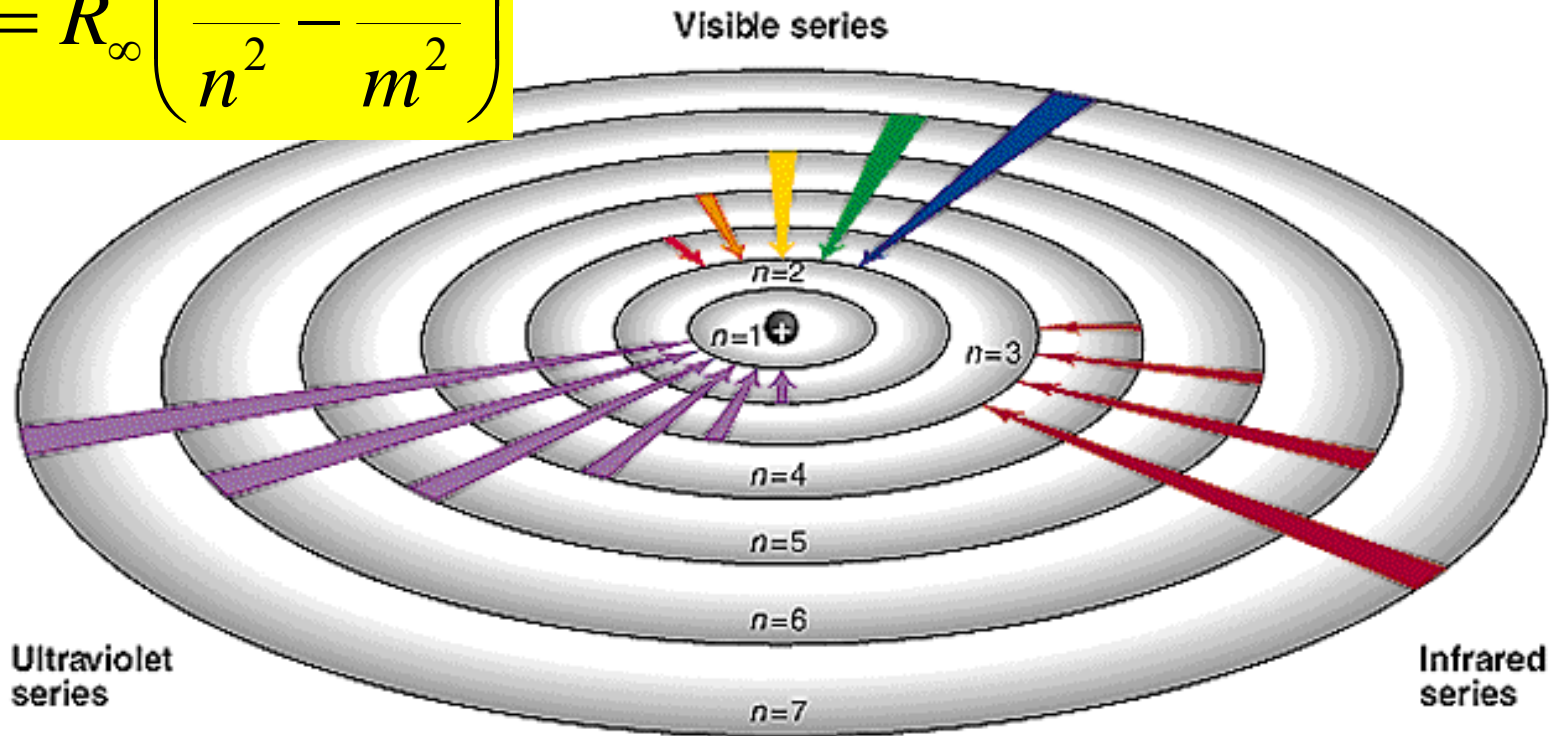
Identická rovnice s Rydbergovou !!!



# Spektrum atomu vodíku

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

$n = 2, m = 3, 4, \dots$  Balmerova



$n = 1, m = 2, 3, \dots$  Lymanova

$n = 3, m = 4, 5, \dots$  Paschenova

# Vzestup a pád Bohrova modelu atomu

Bohrův (planetární) model atomu:

- jednoduchý a snadno srozumitelný
- vysvětlil dokonale linie ve vodíkovém spektru
- vysvětlil kvantování energie v atomu
- nevysvětloval spektra víceelektronových atomů
- použitelný pro atomy “vodíkového typu”  
(jádro =  $Z^+$ , jediný elektron)

fundamentálně nesprávný model

byl překonán kvantově-mechanickým modelem

# Vlnový charakter světla

Rozptyl na mřížce, interference, difrakce

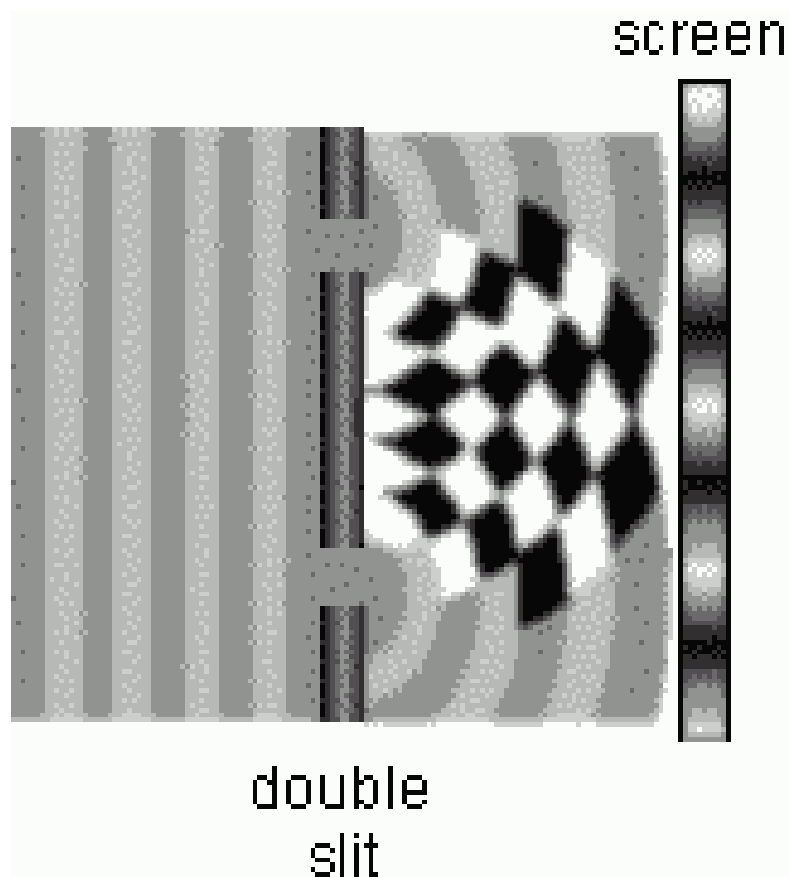
Christian Huygens

Augustin J. Fresnel

Thomas Young

James C. Maxwell

Heinrich Hertz



# Duální charakter světla

Elektromagnetické záření = **vlnění**

$$E = h \nu$$

Elektromagnetické záření = **částice** – fotony

Compton 1922

Foton má hmotnost  $m_f$

$$E = h \nu = h c / \lambda$$

$$E = m_f c^2$$

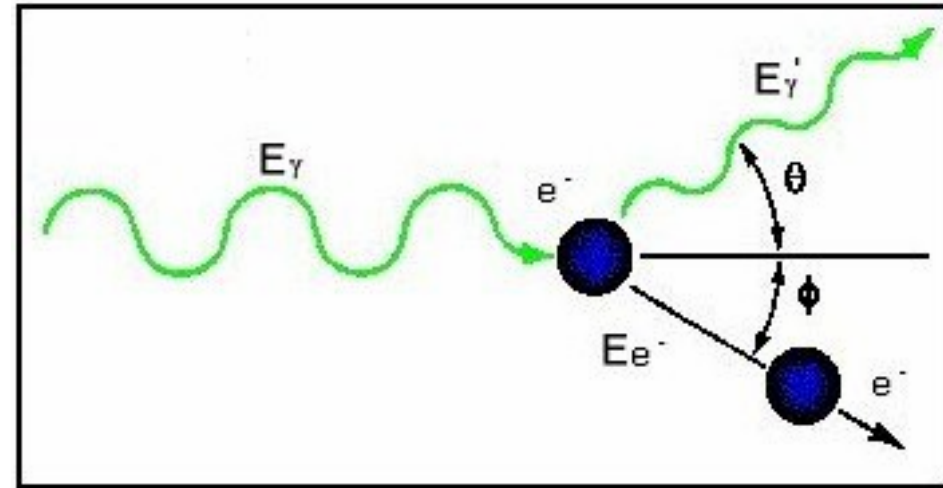
$$m_f = h / \lambda c$$



Arthur H. Compton  
(1892 - 1962)

# Duální charakter světla

Vlnová délka fotonu se prodlužuje po kolizi s elektronem = předání energie



$$E'_\gamma = \frac{E_\gamma}{1 + (1 - \cos\theta) \frac{E_\gamma}{m_0 c^2}}$$

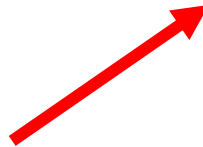
# Vlnový charakter elektronu

1923 de Broglieho rovnice

Elektronu přísluší vlnová délka

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Planck + Einstein  
 $E = h \nu = h \frac{v}{\lambda}$      $E = m v^2$



Louis de Broglie  
(1892 - 1987)  
NP za fyziku 1929

částice



$mv = \text{hybnost}$

vlna

vlnová délka  $\lambda$

# Rozptyl elektronů na krystalu Ni

1927



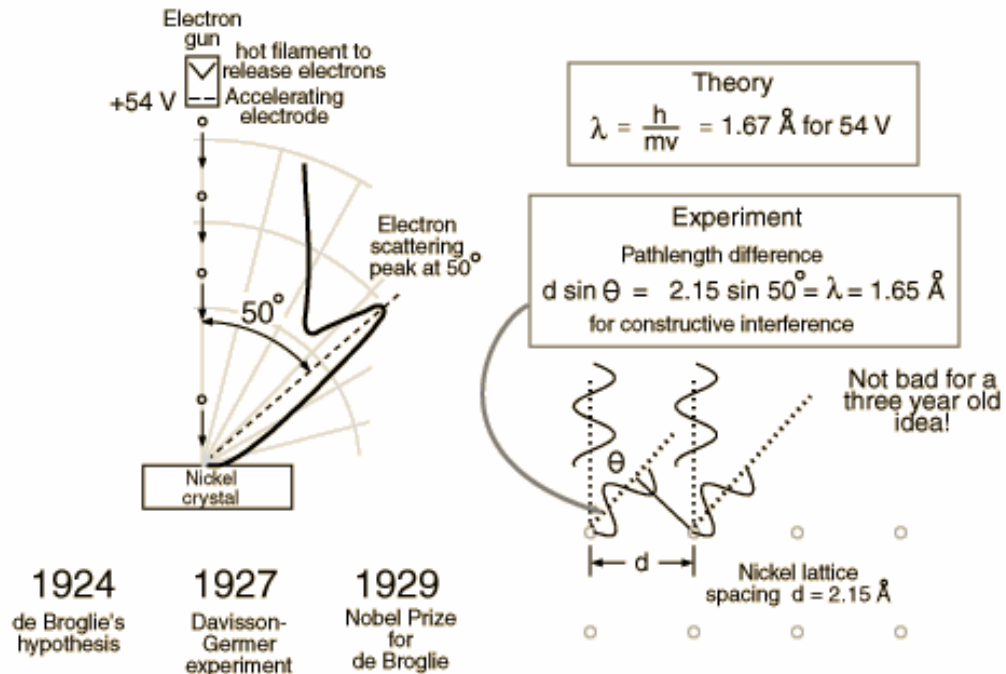
C. J. Davisson  
(1881-1958)

L. Germer



G. P. Thomson  
(1892-1975)

NP za fyziku 1937

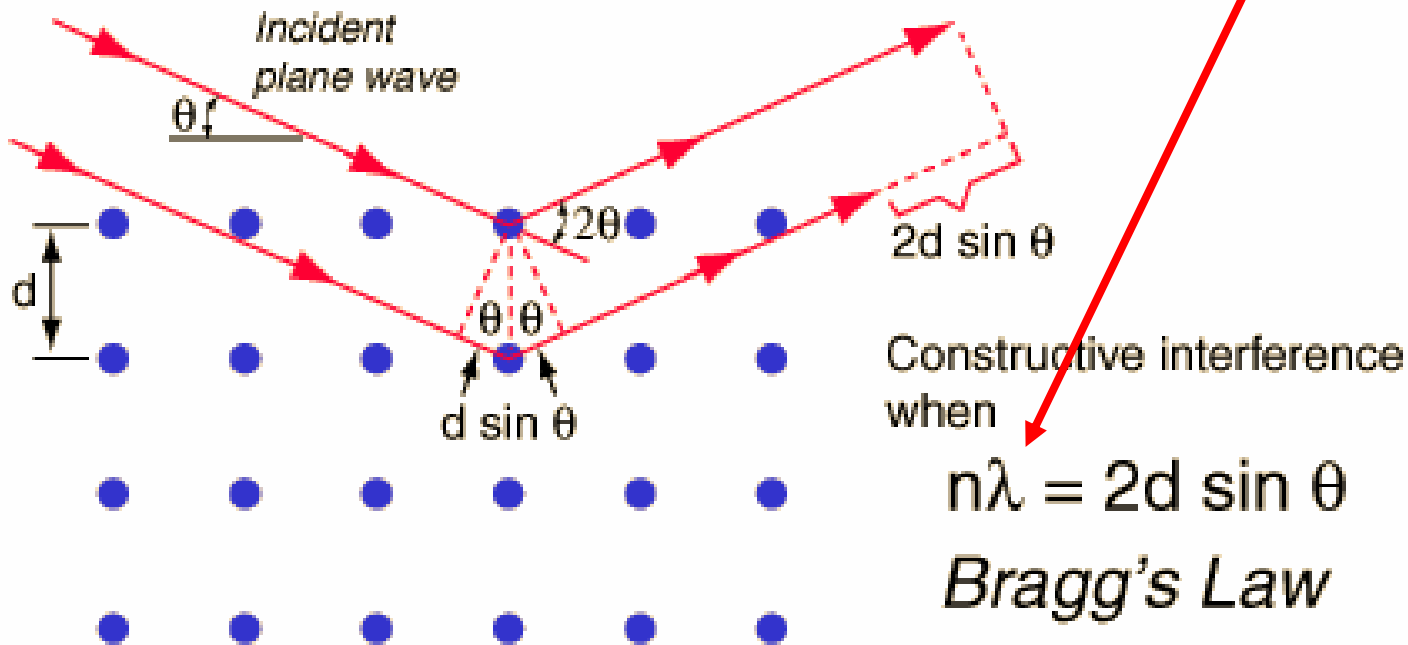


$$E = e V = \frac{1}{2} m v^2$$

Experimentální důkaz vlnového charakteru elektronu. Částice by se rozptylovaly do všech směrů stejně.

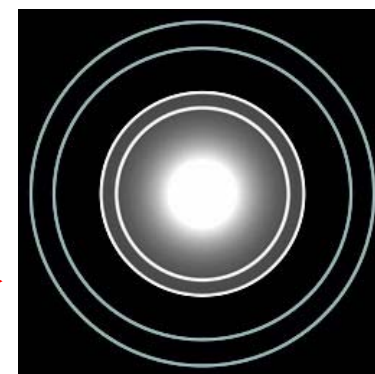
# Braggova rovnice

de Broglieho  
vlnová délka  
elektronu  $\lambda$



← Rentgenovo záření

Elektrony →





# Elektron jako stojaté vlnění

Elektron = vlna

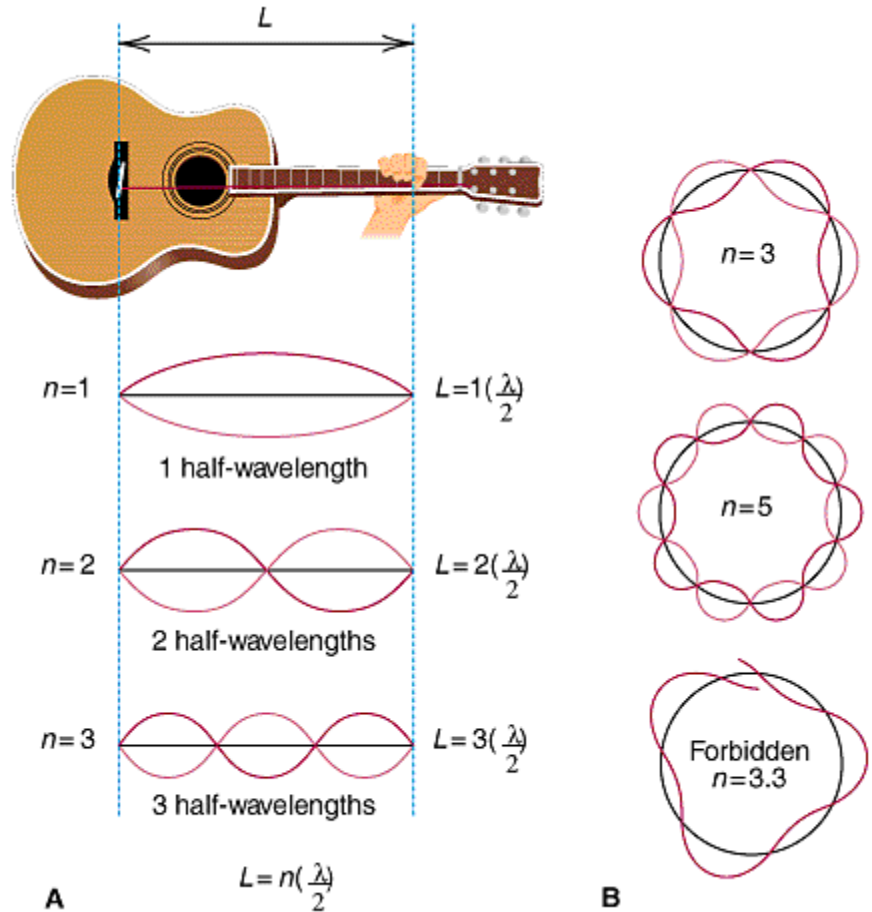
$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Stojaté vlnění na kružnici  
o poloměru  $r$

$$n \lambda = 2 \pi r$$

spojením rovnic dostaneme  
 $n \frac{h}{2 \pi} = m v r$

Toto je ale Bohrův postulát !



## **Klasická teorie:**

Hmota je částicová, má hmotnost

Energie je kontinuální, vlnový charakter

Černé těleso, Planck, energie záření kvantována

Fotoelektrický jev, Einstein, světlo je částicové, fotony

Atomová spektra, Bohr, energie atomů kvantována

Difrakce elektronů na krystalu Ni, Davisson

de Broglie, hmota má vlnový charakter, energie atomů je kvantována, protože elektrony se chovají jako vlny

Vlnová délka fotonu se prodlužuje po kolizi s elektronem, Compton

## **Kvantová teorie:**

Hmota a energie jsou ekvivalentní, mají hmotnost, jsou částicové, mají vlnový charakter

# Heisenbergův princip neurčitosti

1927

Není možné určit zároveň přesně polohu ( $x$ ) a hybnost ( $p = m v$ ) elektronu

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

elektron v atomu H v základním stavu

$$v = 2.18 \cdot 10^6 \text{ m s}^{-1}$$

přesnost 1%,  $\Delta v = 10^4 \text{ m s}^{-1}$

$$\Delta x = 0.7 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 70 \text{ nm}$$

$$a_0 = 0.053 \text{ nm}$$

Nelze určit přesnou polohu elektronu v atomu



Werner Heisenberg  
(1901 - 1976)  
NP za fyziku 1932

# Heisenbergův princip neurčitosti

Není možné určit zároveň přesně energii elektronu v daném časovém intervalu ( $\Delta t$  doba měření)

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

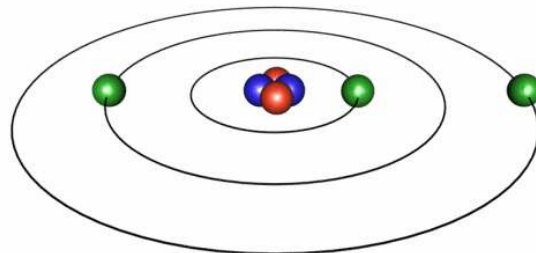
$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

# Důsledek Heisenbergova principu neurčitosti

Energie elektronu je známa velmi přesně (emisní spektra)

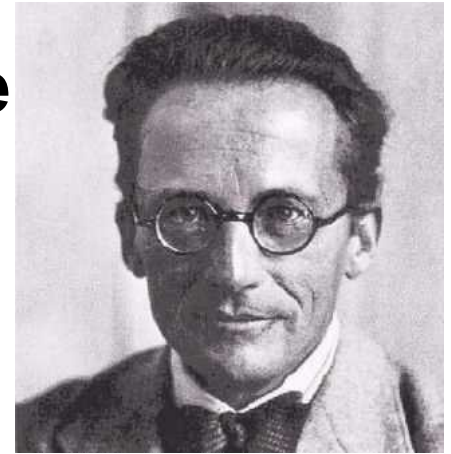
Poloha elektronu tedy nemůže být určena přesně ( $a_0 = 0.053 \text{ nm}$ )

Kruhové dráhy elektronů kolem jádra s určitým poloměrem jsou nesmysl



Stav elektronu je nutno popsat pomocí kvantové mechaniky  
 $a_0 = 0.053 \text{ nm}$  je nejpravděpodobnější poloměr dráhy elektronu

# Schrödingerova rovnice



1926 Schrödingerova rovnice = postulát

$$\hat{H} \Psi = E \Psi$$

Erwin Schrödinger  
(1887 - 1961)

NP za fyziku 1933

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

$\hat{H}$  = Hamiltonův operátor celkové energie (E),  
kinetická a potenciální (V) energie

# Schrödingerova rovnice

Parciální diferenciální rovnice druhého řádu

exaktní řešení jen pro H a jednoelektronové systémy ( $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ ,....)

přibližná řešení pro víceelektronové atomy ( $\text{He}$ ,...)

řešením diferenciální rovnice jsou:

- Vlastní vlnové funkce,  $\Psi$  - orbitaly - prostorové rozložení e
- Vlastní hodnoty energie elektronu v orbitalech,  $E$ , jedné vlastní hodnotě  $E$  může příslušet více vlnových funkcí (degenerované)

# Vlastní vlnové funkce

$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$  je řešením stacionární Schrödingerovy rovnice

Jen některé stavy  $e$  jsou povoleny

$\Psi$  je komplexní funkce souřadnic  $x, y, z$ , nemá fyzikální význam, může nabývat kladných i záporných hodnot

$|\Psi|^2$  má význam **hustoty pravděpodobnosti** výskytu  $e$

$\Psi$  závisí na kvantových číslech (celá čísla)

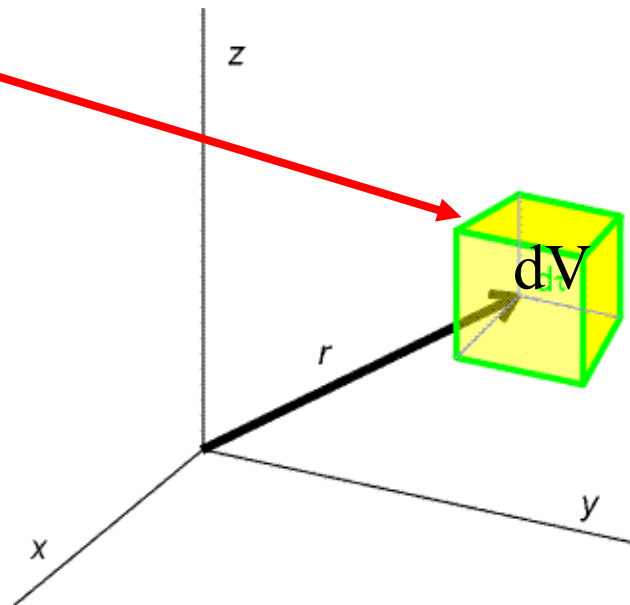


# Bornova interpretace vlnové funkce

$\Psi(x,y,z)$  je řešením stacionární Schrödingerovy rovnice,  
( $\Psi$  nemá fyzikální význam)

$|\Psi|^2 dV$  pravděpodobnost výskytu elektronu v objemu  $dV$   
v místě  $\mathbf{r}$

( $dV = dx dy dz$ )



Max Born  
(1882 - 1970)  
NP za fyziku 1954

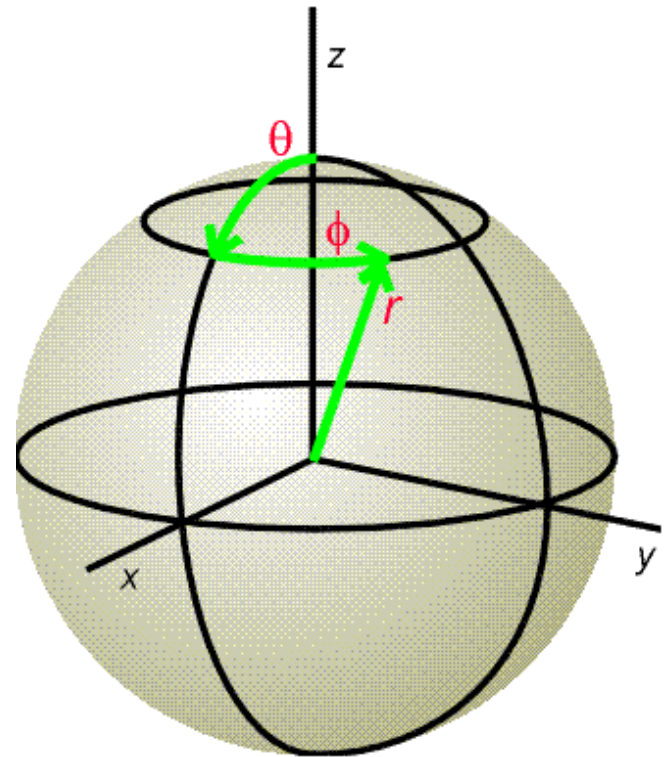
# Atom vodíku

Nejjednodušší soustava: p + e  
Řešitelná exaktně

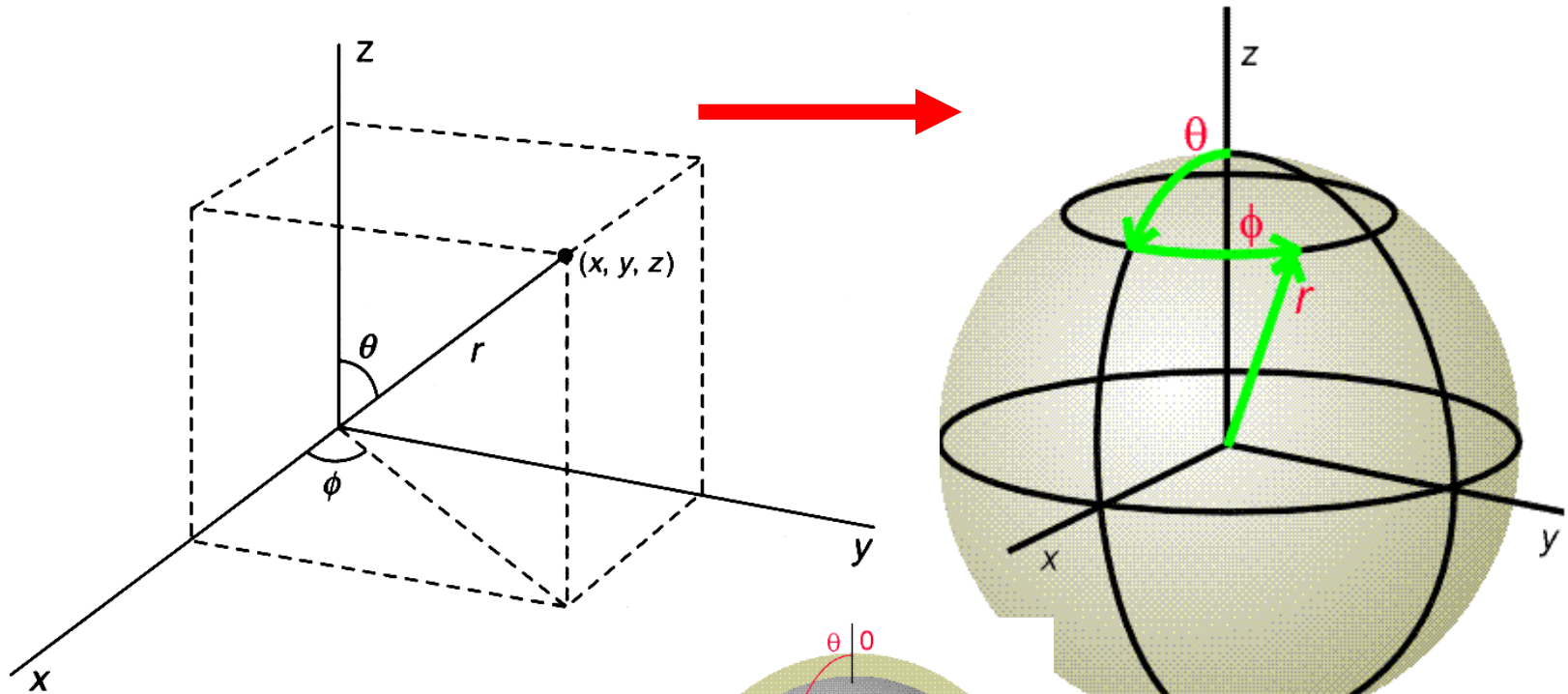
Kulová symetrie

Potenciální energie mezi p + e

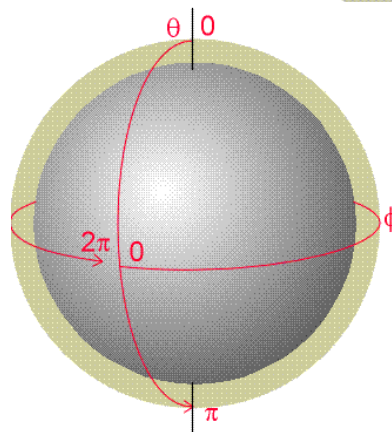
$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$



# Polární souřadnice – využití kulové symetrie atomu



$$\Psi(x,y,z) \rightarrow \Psi(r,\theta, \phi)$$



$$x = ?$$

$$y = ?$$

$$z = r \cos \theta$$

# Rozklad vlnové funkce na radiální a angulární část

$$\Psi_{n, l, m}(\mathbf{r}, \theta, \phi) = N \times R_{n, l}(\mathbf{r}) \times \chi_{l, m}(\theta, \phi)$$

## Separace proměnných

$R_{n, l}(\mathbf{r})$  = radiální část vlnové funkce, závisí jen na vzdálenosti  $r$  od jádra

$\chi_{l, m}(\theta, \phi)$  = angulární (úhlová) část vlnové funkce závisí na směru  $\theta, \phi$

$N$  = normalizační konstanta

aby platilo  $\int |\Psi|^2 dV = +1$

normalizační podmínka, elektron určitě někde je,  
pravděpodobnost = 1

# Kvantová čísla

$R_{n, l}(\mathbf{r})$  závisí na kvantových číslech  $n$  a  $l$

$\chi_{l, m}(\theta, \phi)$  závisí na kvantových číslech  $l$  a  $m_l$

Hlavní kvantové číslo  $n$ , (nabývá hodnot 1 až  $\infty$ )

Vedlejší kvantové číslo  $l$ , (nabývá hodnot 0 až  $n - 1$ )

$l =$  4 (g), 5 (h), .....

Magnetické kvantové číslo  $m_l$ , (nabývá hodnot  $+l, \dots, 0, \dots, -l$ )

Pro každé  $l$  je  $(2l + 1)$  hodnot  $m_l$

Spinové kvantové číslo  $m_s$  (nabývá hodnot  $\pm 1/2$ )

# Vlnové funkce atomu H

$$\varphi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

$$\varphi_{2,0,0} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$\varphi_{2,1,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta$$

$$\varphi_{2,1,1} = -\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{i\phi}$$

$$\varphi_{3,0,0} = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{1}{3\pi a_0^3}} \left[1 - \frac{2}{3} \frac{r}{a_0} + \frac{2}{27} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right] e^{-r/3a_0}$$

$$\varphi_{3,1,m} = \frac{4}{27} \sqrt{\frac{2}{3a_0^3}} \frac{r}{a_0} \left(1 - \frac{1}{6} \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/3a_0} Y_{1,m}(\theta, \phi)$$

$$\varphi_{3,2,m} = \frac{2}{81} \sqrt{\frac{2}{15a_0^3}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0} Y_{2,m}(\theta, \phi)$$

## Radiální část vlnové funkce atomu H

$n$	$l$	$m_l$	$R_{n,l}(r)$
1 (K)	0 (s)	0	$2 (Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$
2 (L)	1 (p)	0	$2 (Z/2a_0)^{3/2} (1 - Zr/2a_0) \exp(-Zr/2a_0)$
2 (L)	1 (p)	$\pm 1$	$2/\sqrt{3} (Z/2a_0)^{3/2} (Zr/2a_0) \exp(-Zr/2a_0)$

# Vlastní hodnoty E elektronu v atomu H typu

$$E_n = - \frac{N_A \mu e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^2} \frac{Z^2}{n^2}$$

$\mu$  = redukovaná hmotnost systému jádro-elektron  
 $e$  = elementární náboj,  $\varepsilon_0$  = permitivita vakua

$Z$  – čím vyšší náboj jádra tím silněji je elektron vázán, nižší energie, jednoelektronové ionty ( $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ ,.....)

$n$  – s rostoucím hlavním kvantovým číslem se  $e$  stává méně stabilní

Odpovídá Bohrově rovnici!!

$$E_n = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$$



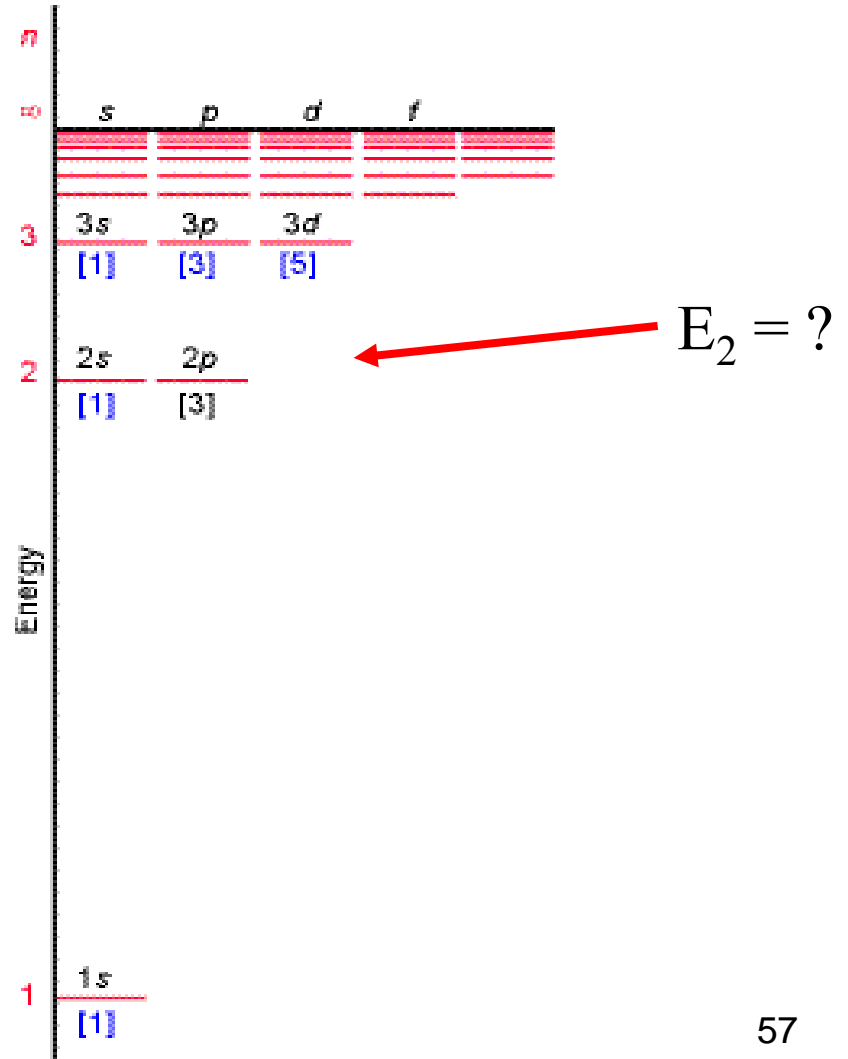
# Vlastní hodnoty E elektronu v atomu H typu

$$E_n = -\frac{N_A \mu e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 h^2 n^2}$$

Energie závisí jen na  $n$

$$E_1 = -13.6 \text{ eV}$$

$$(13.6 \text{ eV} = 1 \text{ Ry})$$



# Hlavní kvantové číslo $n$

Určuje energii hladiny  
vyšší  $n$  má vyšší energii - méně stabilní

$n$  stejné jako v Bohrově modelu

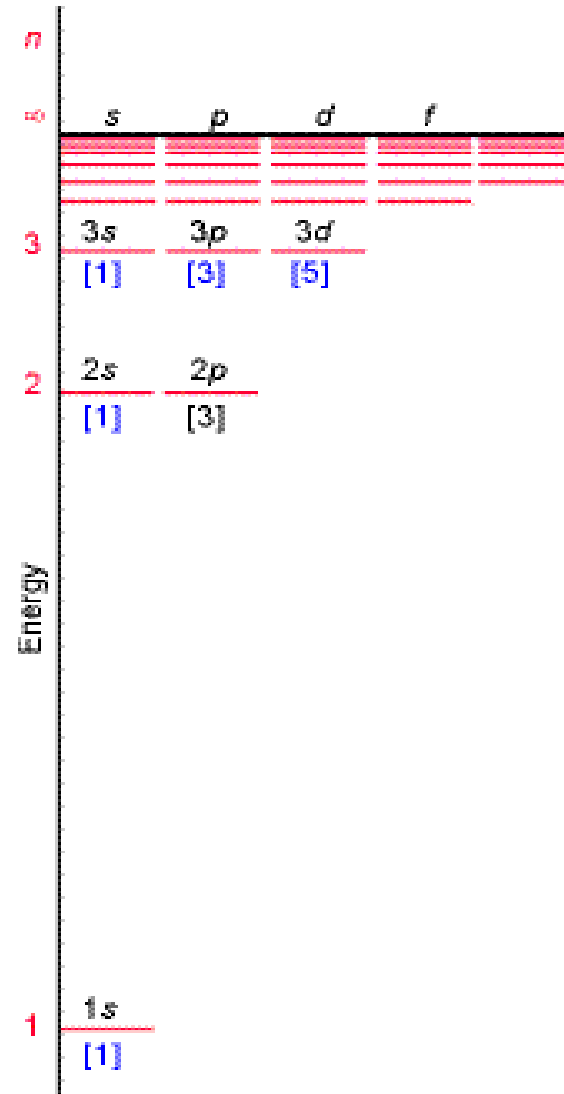
přípustné hodnoty 1 až  $\infty$

Pro každé  $n$  existuje  $n^2$   
degenerovaných hladin

$$l = n - 1$$

$$\sum (2l + 1) = n^2$$

$$l = 0$$

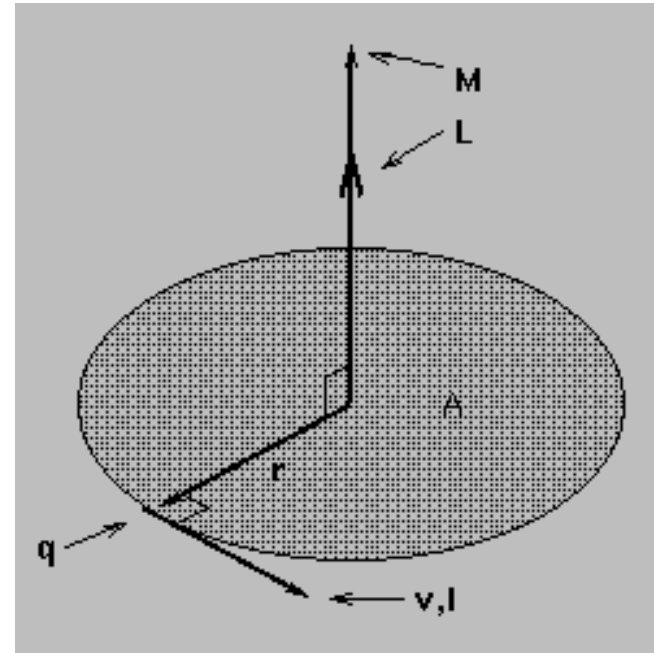


# Orbitální moment hybnosti

$L$  = orbitální moment hybnosti

$L = m v r$

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$



# Vedlejší kvantové číslo $l$

Určuje typ orbitalu, (0 až  $n - 1$ )

$l$	orbital
0	s
1	p
2	d
3	f
4	g
5	h
6	i
7	j
8	k

$L$  = orbitální moment hybnosti

$L = m v r$

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

tyto orbitaly nejsou zaplněny  
elektrony u atomů v  
základním stavu

# Magnetické kvantové číslo $m_l$

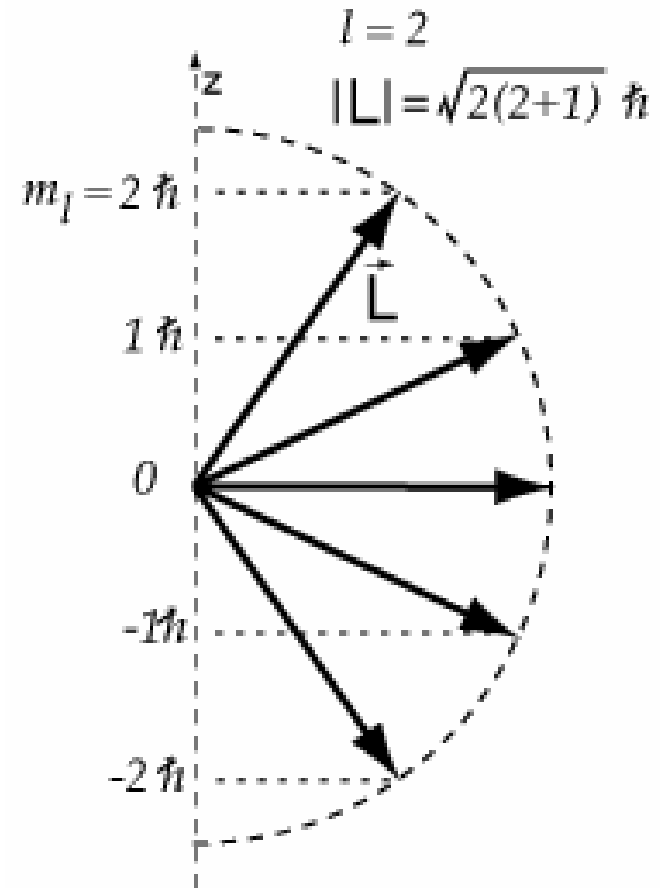
$l$	orbital	$m_l$
0	s	0
1	p	1, 0, -1
2	d	2, 1, 0, -1, -2
3	f	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3
4	g	nejsou zaplněny
5	h	elektrony u atomů v
6	i	základním stavu

$$L_z = m_l \hbar = m_l \frac{h}{2\pi}$$

# Kvantování orbitálního momentu hybnosti

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

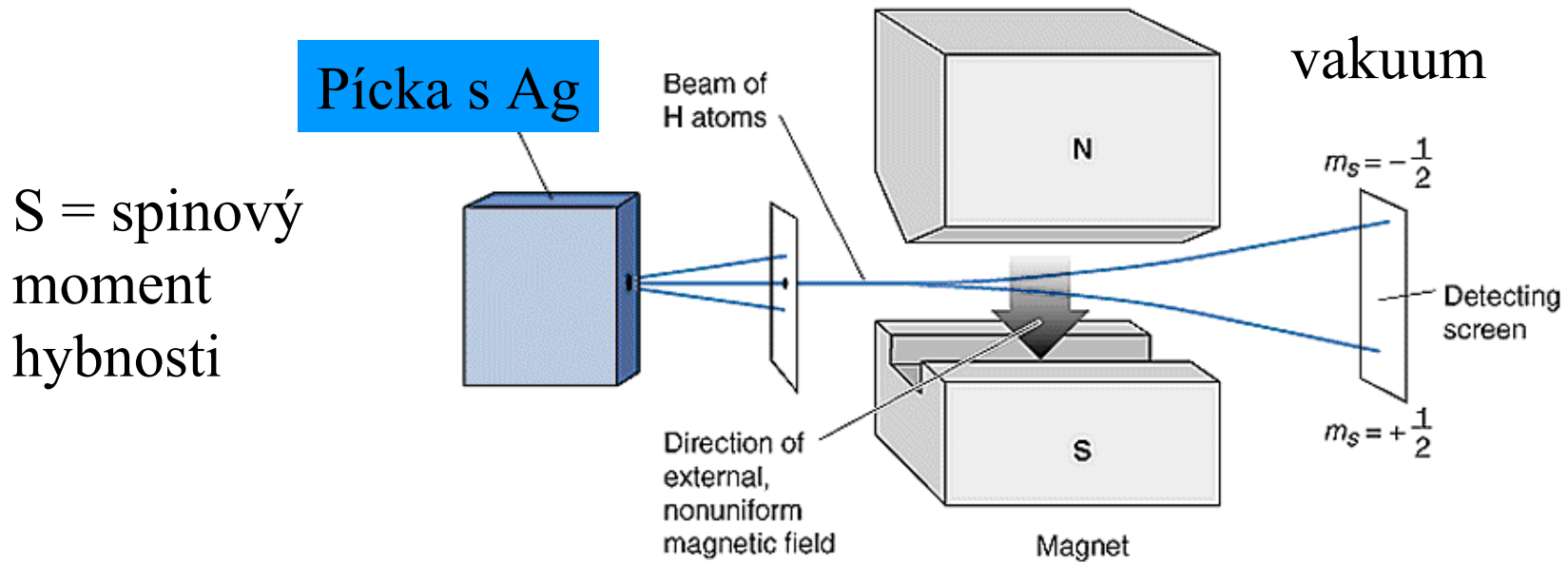
$$L_z = m_l \hbar = m_l \frac{h}{2\pi}$$



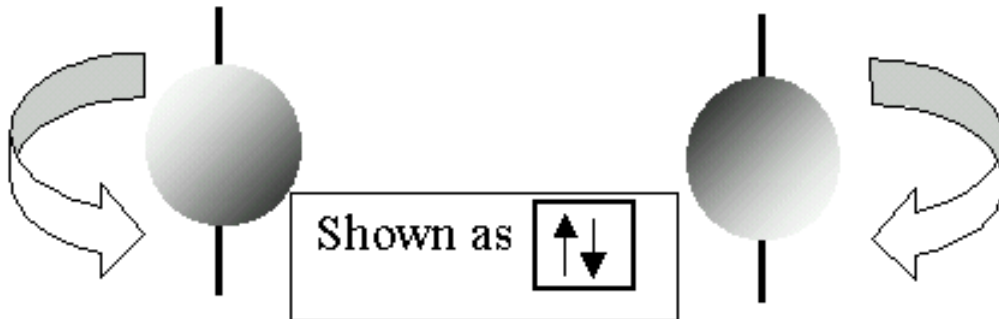
	s	p	d	f	g	h
$l =$	0	1	2	3	4	5
$n = 1$	1s					
$n = 2$	2s	2p				
$n = 3$	3s	3p	3d			
$n = 4$	4s	4p	4d	4f		
$n = 5$	5s	5p	5d	5f	5g	
$n = 6$	6s	6p	6d	6f	6g	6h

# Magnetické spinové kvantové číslo $m_s$

Stern-Gerlachův experiment    Nehomogenní magnetické pole



$S$  = spinový moment hybnosti



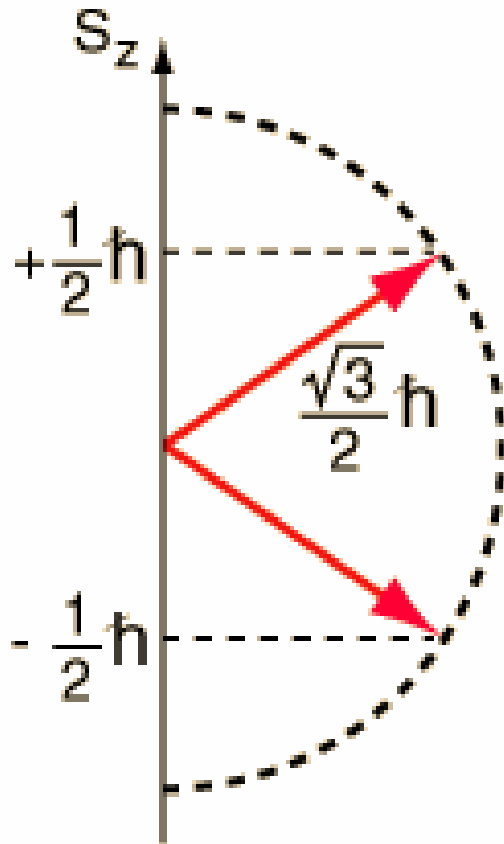
$$S = \frac{h}{2\pi} [s(s+1)]^{1/2}$$

$$s = \frac{1}{2}$$

$$S_Z = m_s \frac{h}{2\pi}$$



# Magnetické spinové kvantové číslo $m_s$

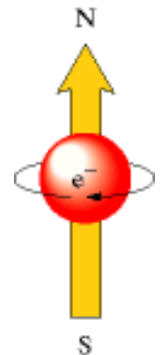


$$S = \hbar/2\pi [s(s+1)]^{1/2}$$

$$s = 1/2$$

$$S_z = m_s \hbar/2\pi$$

$$m_s = \pm 1/2$$

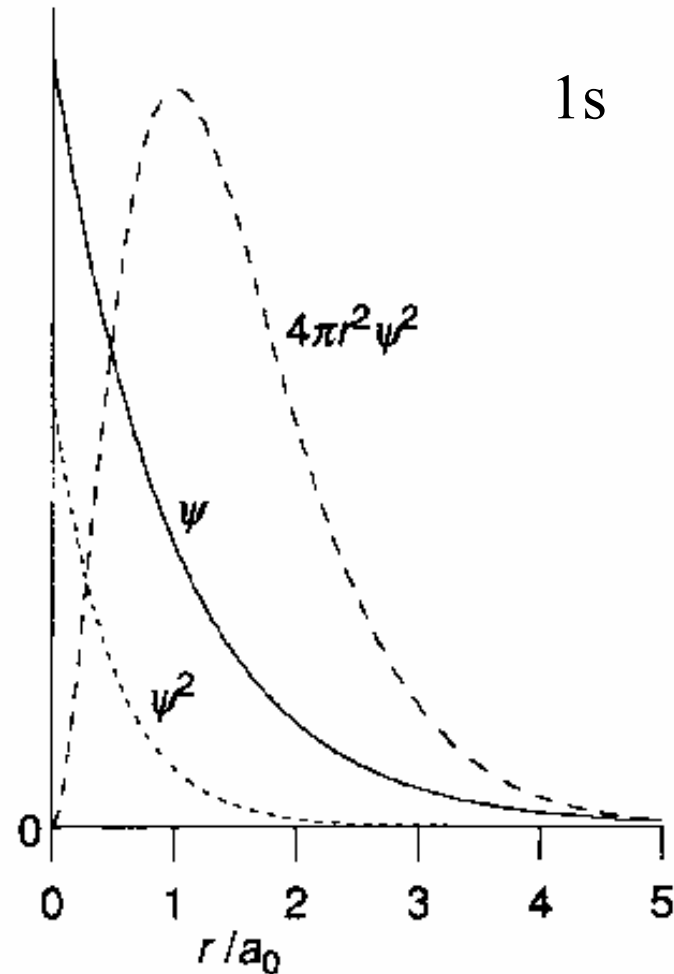


# $\Psi$ = vlnová funkce

Vlnové funkce  $\Psi$  jsou řešením Schrödingerovy rovnice

$|\Psi|^2 =$  hustota  
pravděpodobnosti výskytu  $e$

$|\Psi|^2 dV =$  pravděpodobnost  
výskytu  $e$  v objemu  $dV$ ,  
rozložení elektronové hustoty



# Pravděpodobnost výskytu elektronu

Polární souřadnice

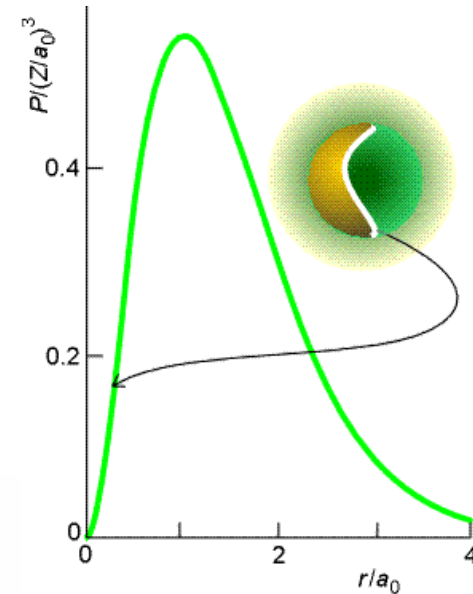
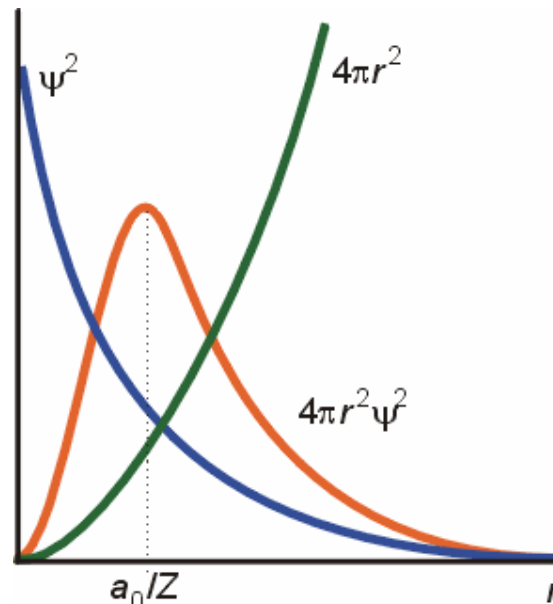
$R_{n,1}(r)$  radiální část vlnové funkce

$dV = 4\pi r^2 dr$  (kulová slupka tloušťky  $dr$ )

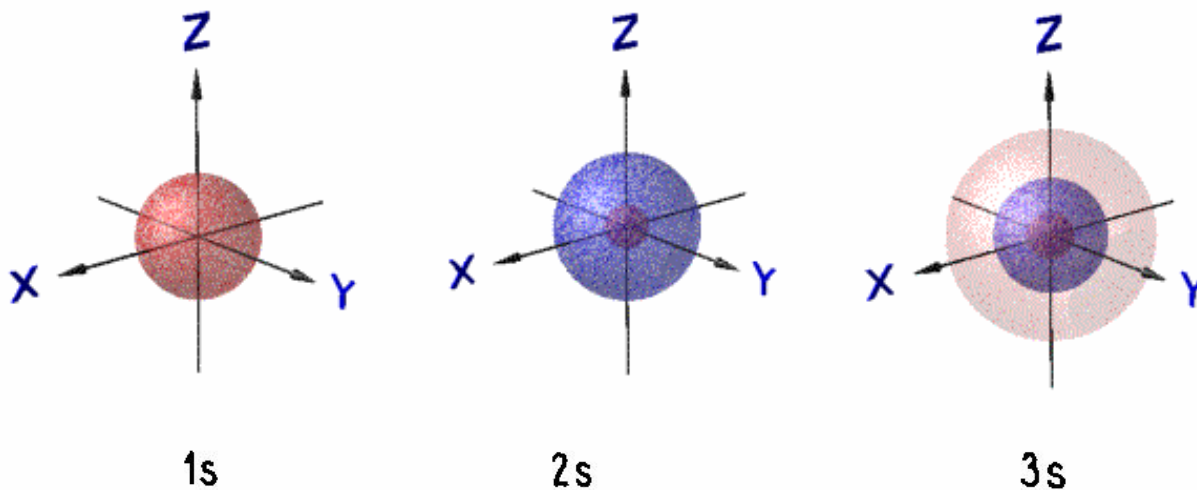
Radiální distribuční funkce

$P = 4\pi r^2 |\Psi|^2 dr = 4\pi r^2 R_{n,1}^2(r) dr$

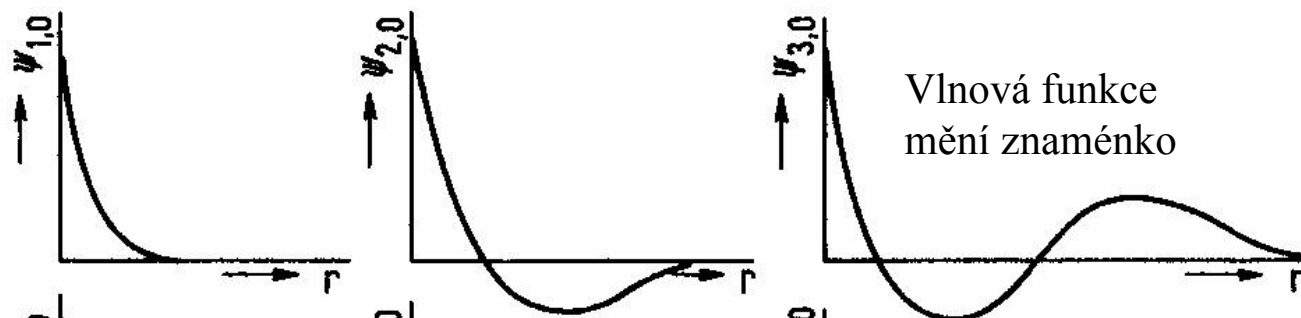
$P$  = Pravděpodobnost výskytu  $e$  v objemu tvaru kulové slupky tloušťky  $dr$  ve vzdálenosti  $r$



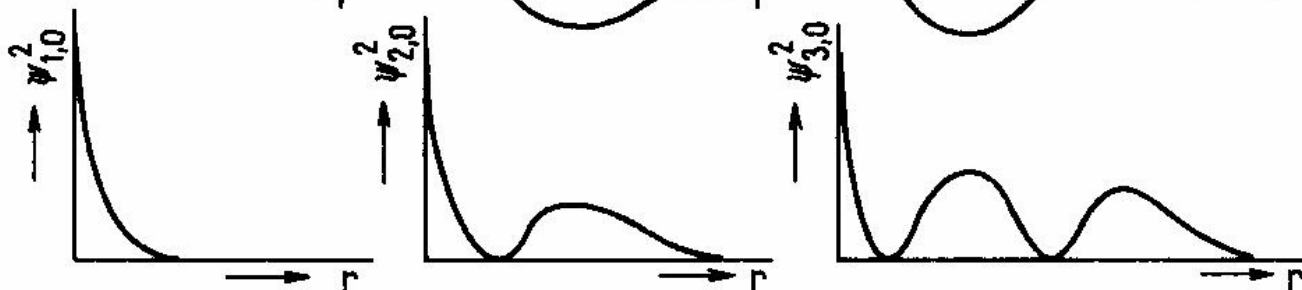
# Orbital



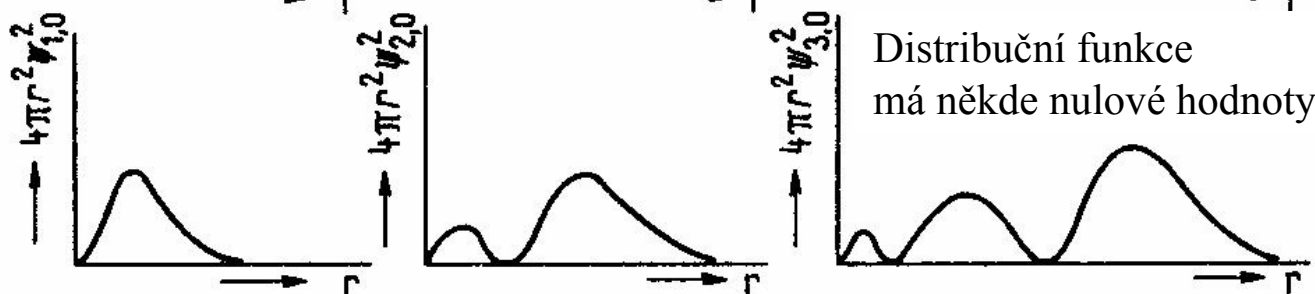
## Vlnová funkce



## Hustota pravděpodobnosti



## Radiální rozložení (distribuční fce)

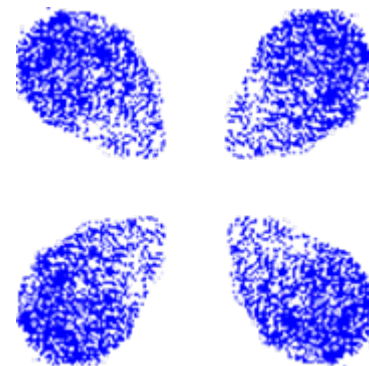
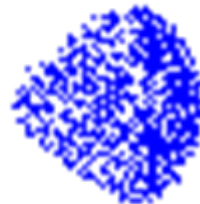
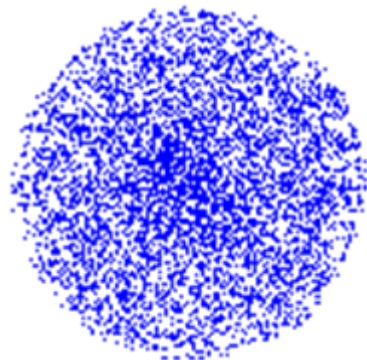


# Orbital

Polohu elektronu nelze určit přesně – Heisenbergův princip lze ale stanovit pravděpodobnost výskytu elektronu

Radiální část vlnové funkce určuje pravděpodobnost výskytu e směrem od jádra (do  $r = \infty$ ) a počet nodálních ploch

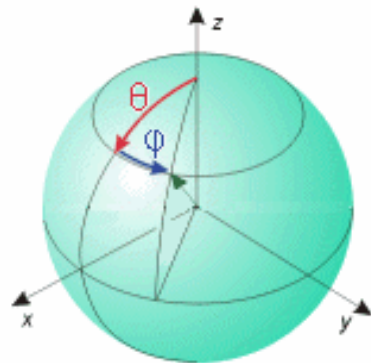
Angulární část vlnové funkce určuje tvar orbitalu (počet nodálních rovin)



# s - orbitaly

$R_{n,l}(r)$  = radiální část vlnové funkce, závisí jen na vzdálenosti od jádra  $r$

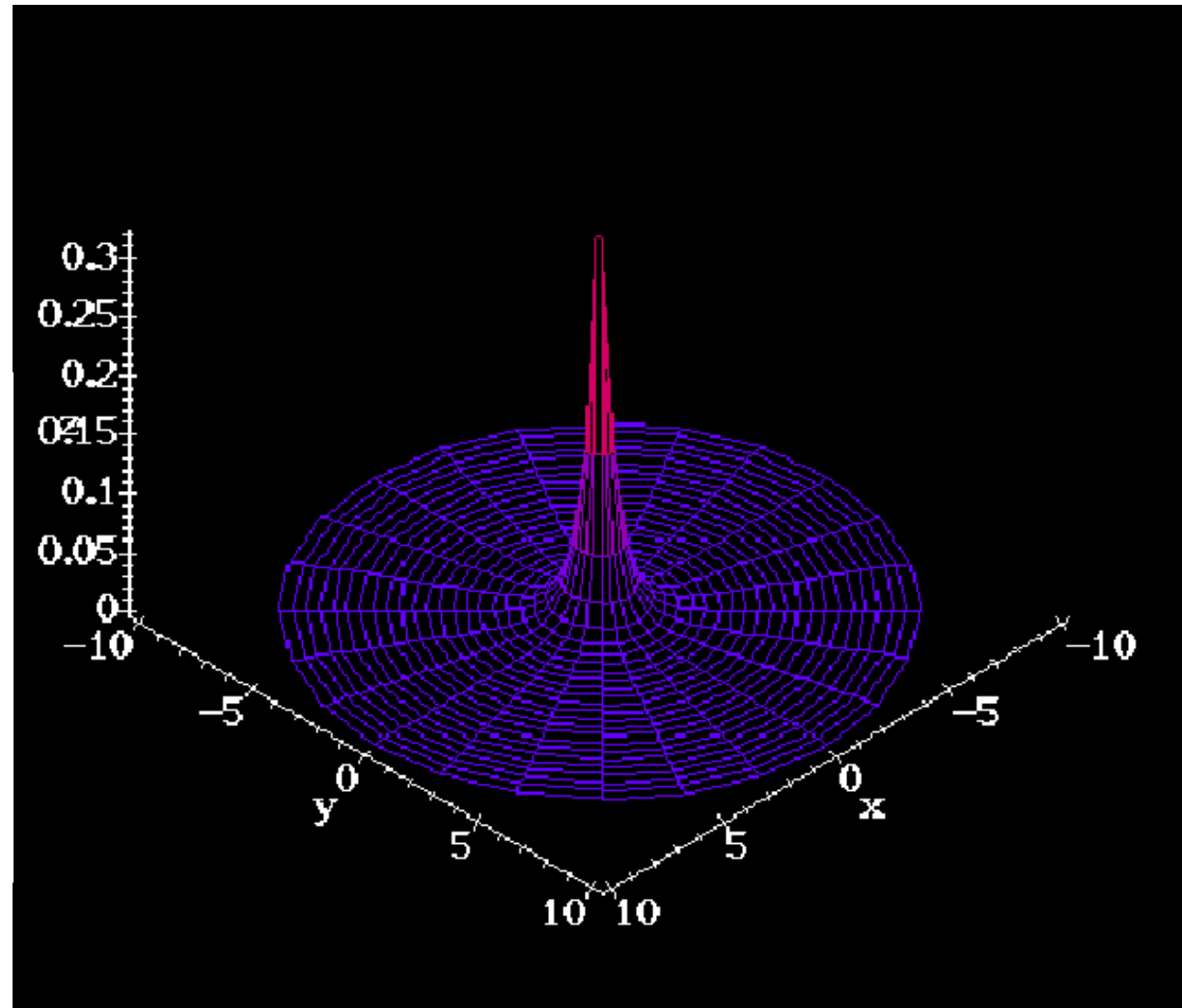
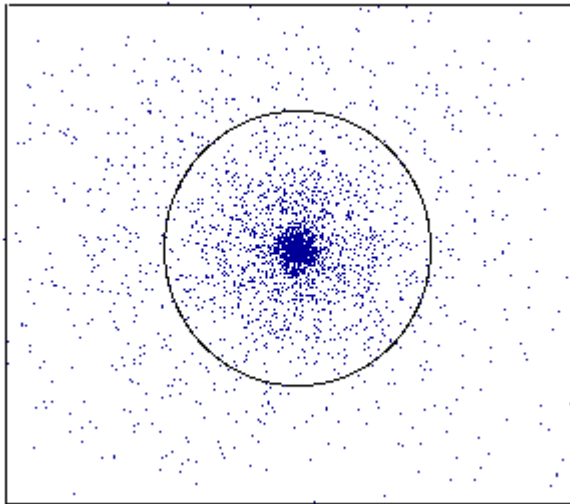
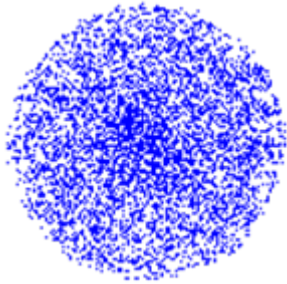
$\chi_{l,m}(\theta, \phi)$  = angulární (úhlová) část vlnové funkce, je **konstanta** pro s-orbitaly ( $l = 0$ ) = KULOVÝ TVAR



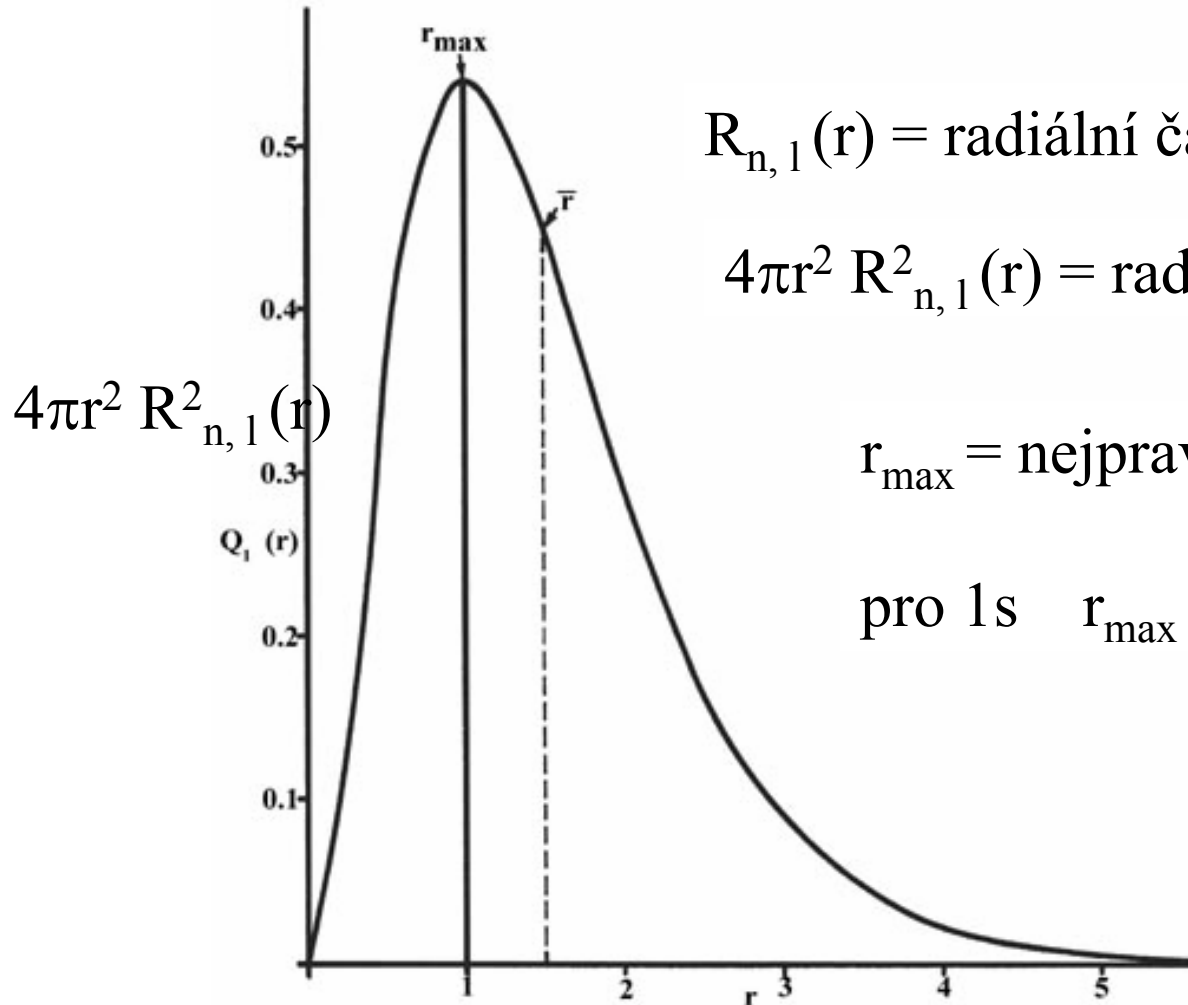
$$\psi_{0,0}^2$$

$$Y_{0,0} = (1/4\pi)^{1/2}$$

# Atomový orbital 1s



# Radiální distribuční funkce



$R_{n,1}(r)$  = radiální část vlnové funkce atomu H

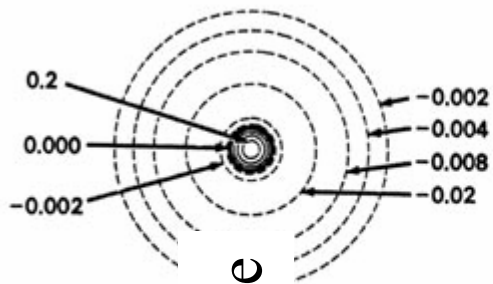
$4\pi r^2 R_{n,1}^2(r)$  = radiální distribuční funkce

$r_{\max}$  = nejpravděpodobnější poloměr

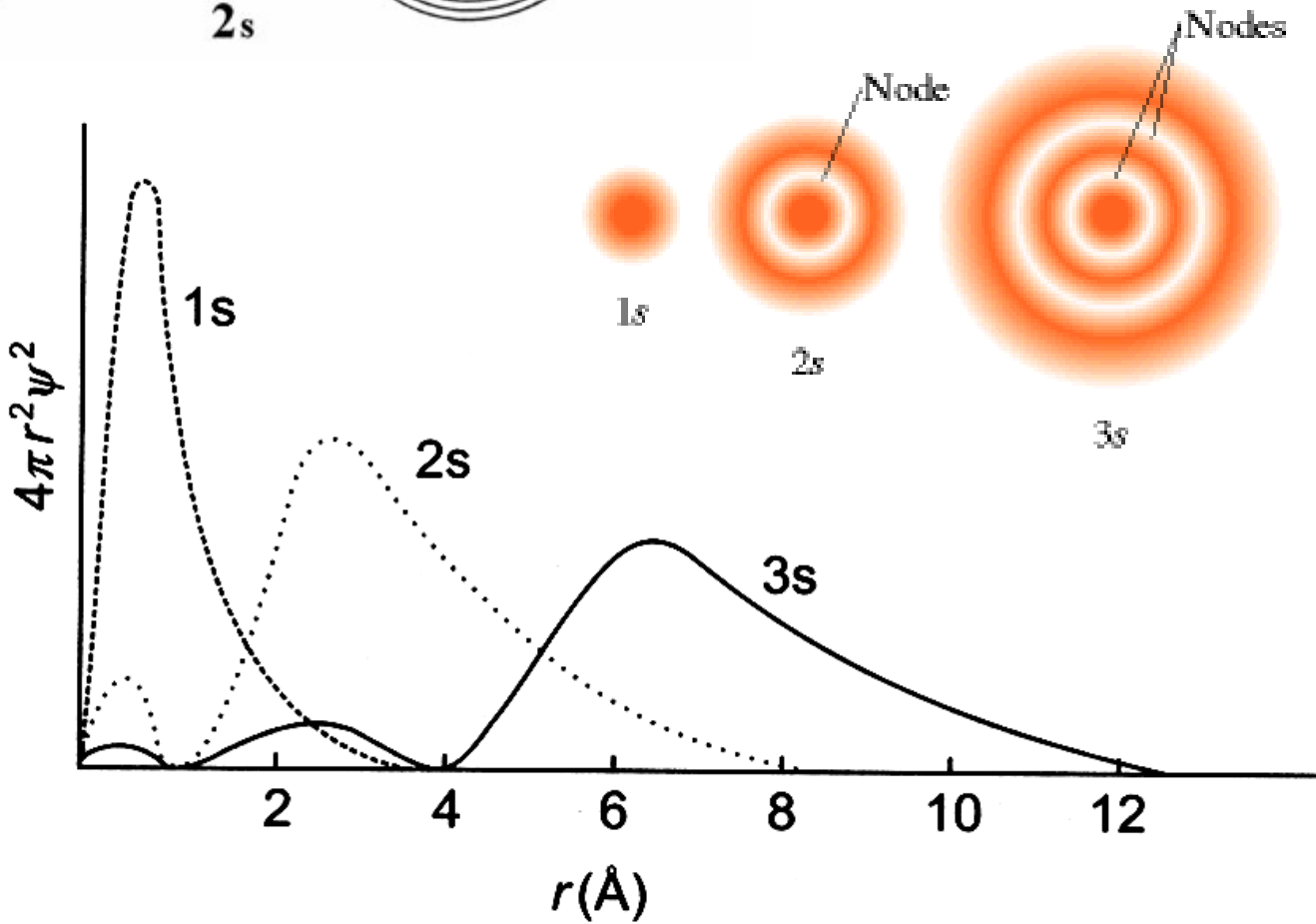
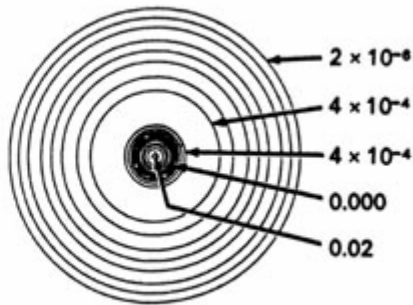
pro 1s  $r_{\max} = a_0$  Bohrův poloměr

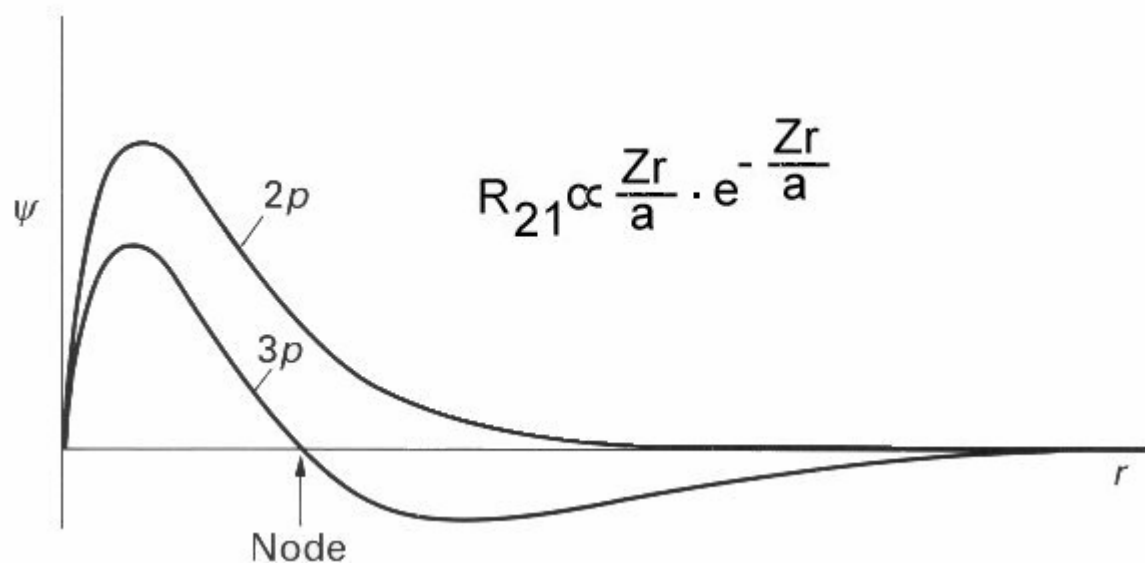
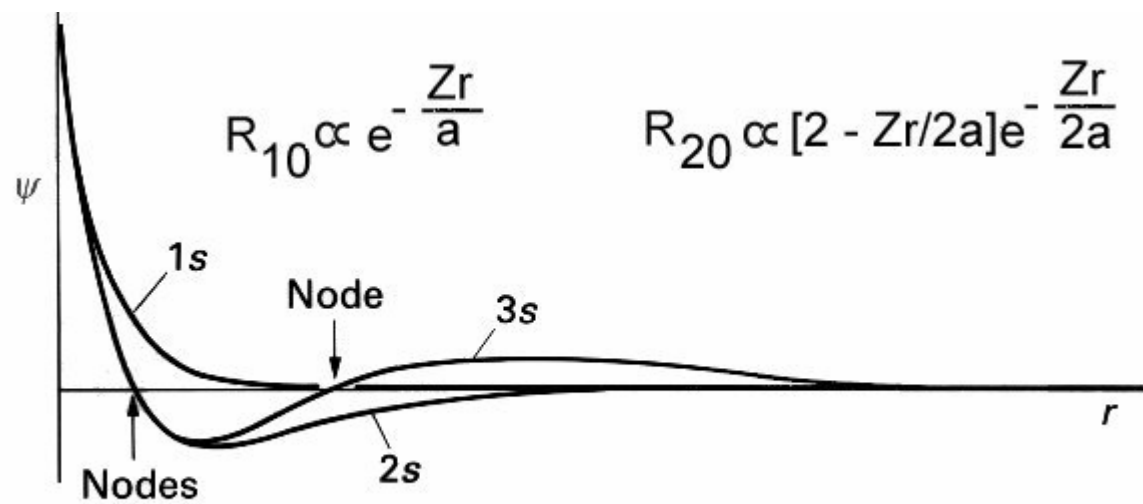
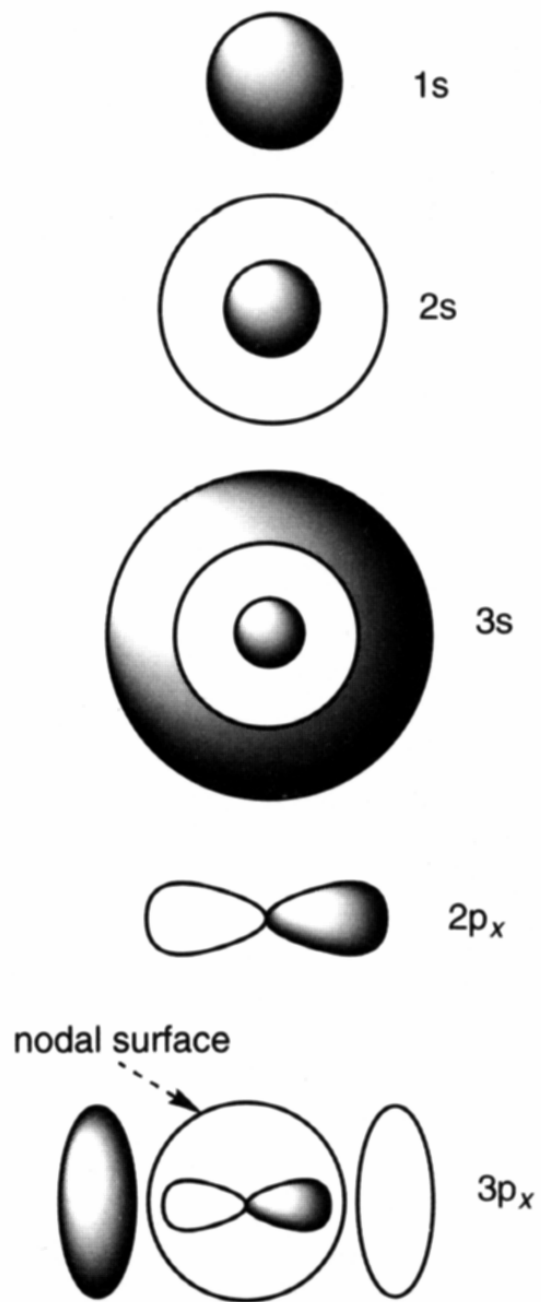


$4\pi r^2 R_{n,1}^2(r)$  = radiální distribuční funkce



2s

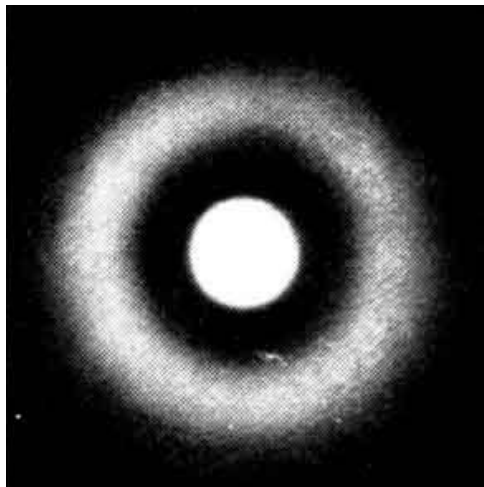




# Uzlové (nodální) plochy v radiální distribuční funkci

## Uzlová (nodální) plocha

- Vlnová funkce mění znaménko
- Radiální distribuční funkce nabývá nulové hodnoty

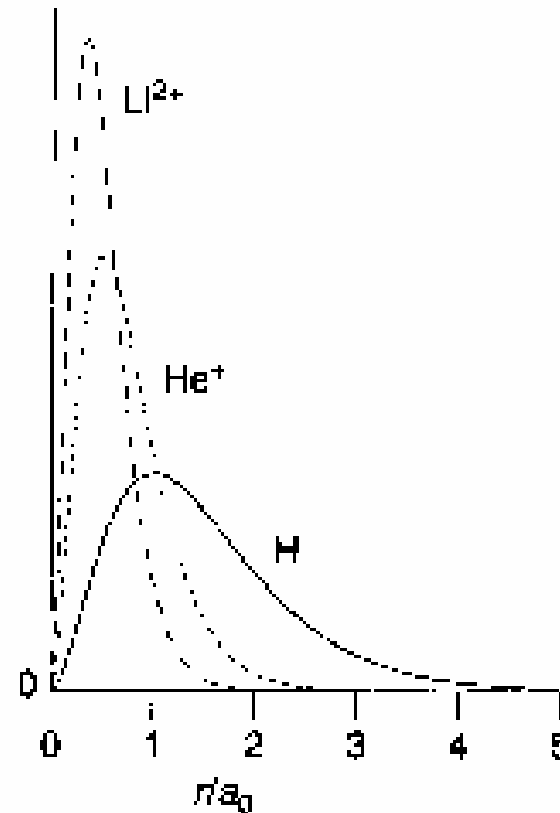


Počet kulových uzlových (nodálních) ploch =  $n - l - 1$

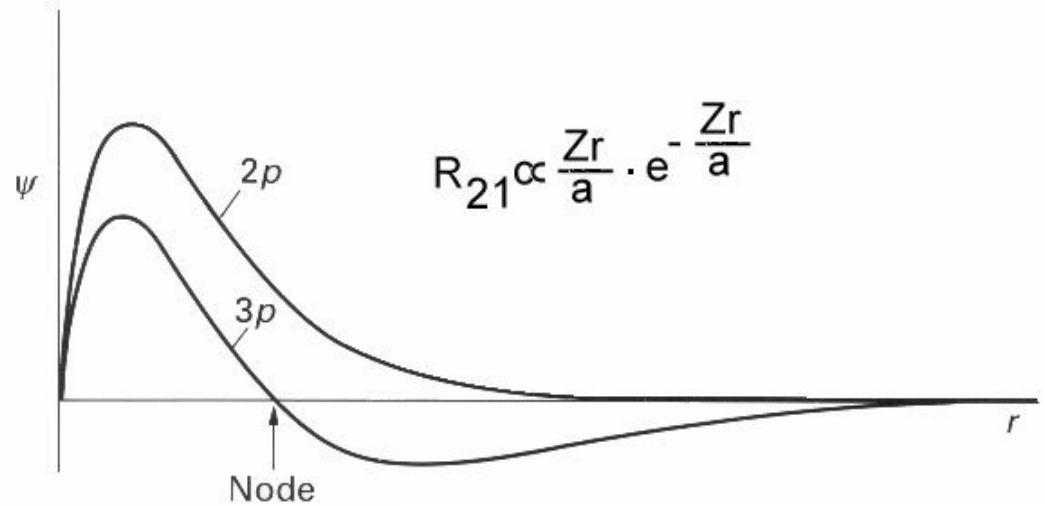
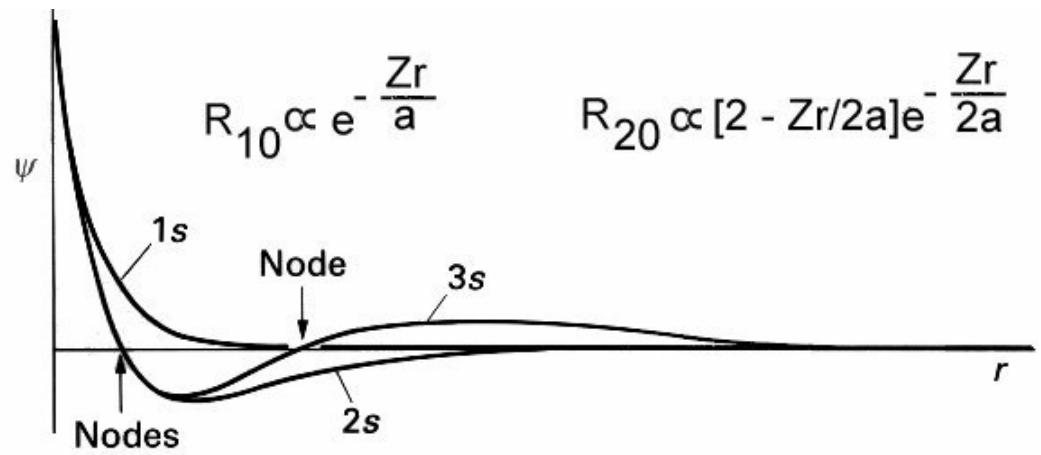
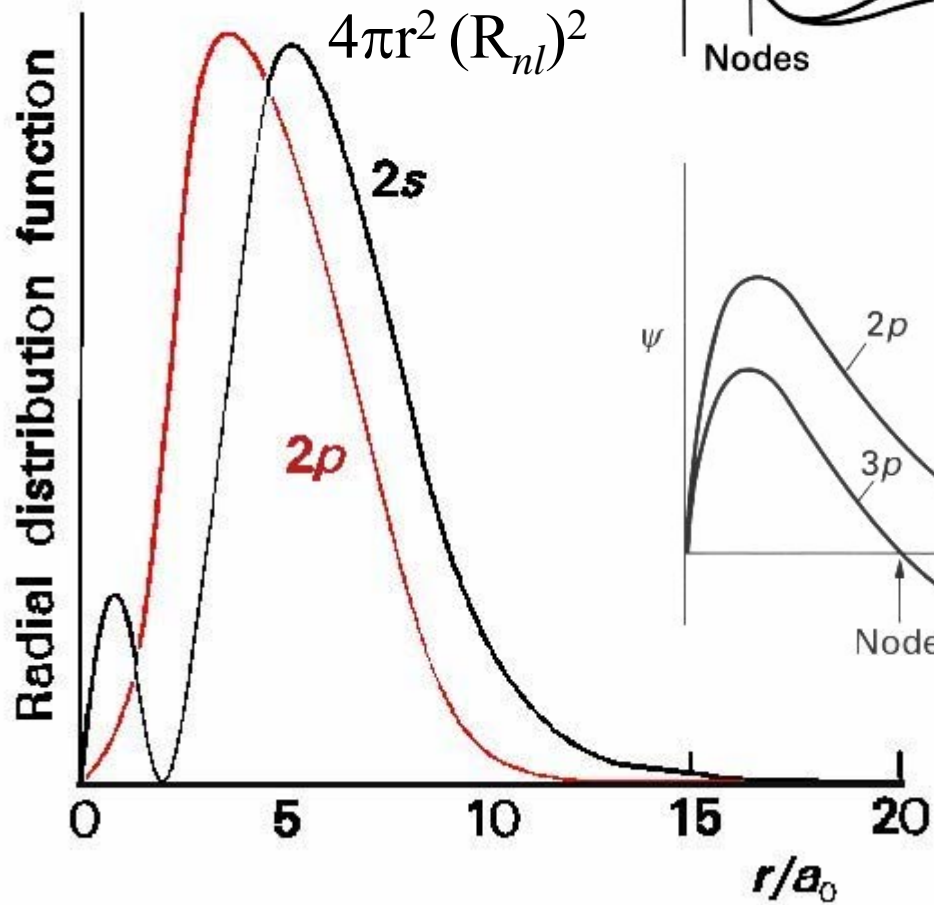
# Účinek Z na radiální část vlnové funkce s

$$R_{n,1}(r) = 2\sqrt{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right)$$

## Radiální distribuční funkce 1s

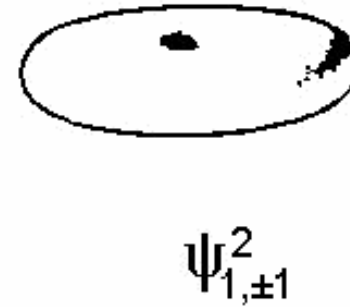
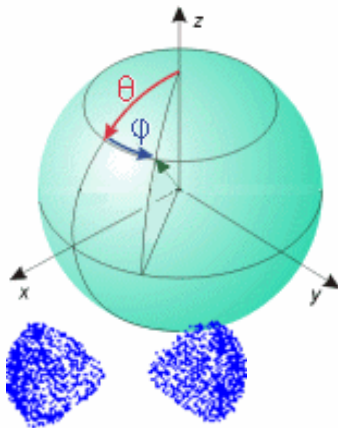


S rostoucím nábojem jádra se poloha maxima pravděpodobnosti výskytu e přibližuje k jádru



# Angulární část vlnové funkce p orbitalů

Angulární část vlnové funkce určuje tvar orbitalu  
Stejná pro všechny hodnoty n



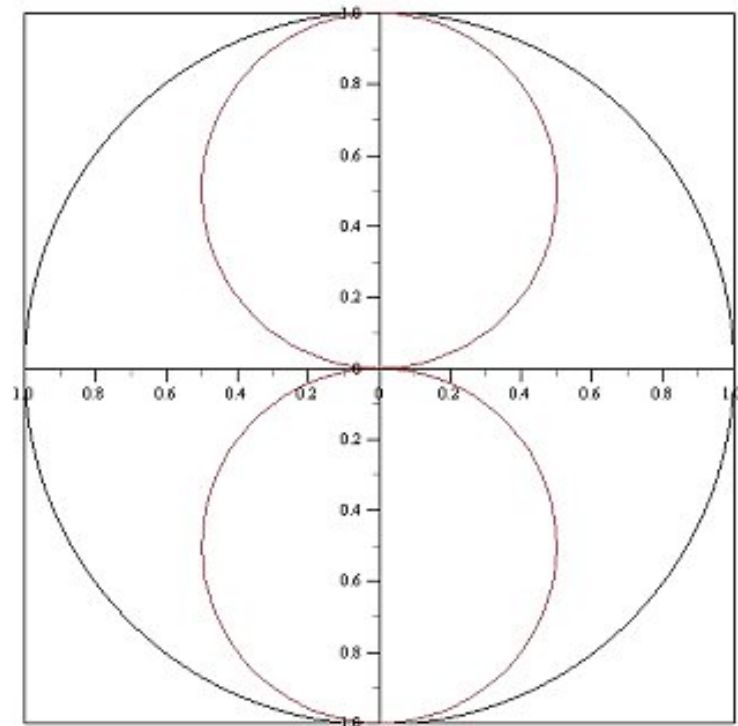
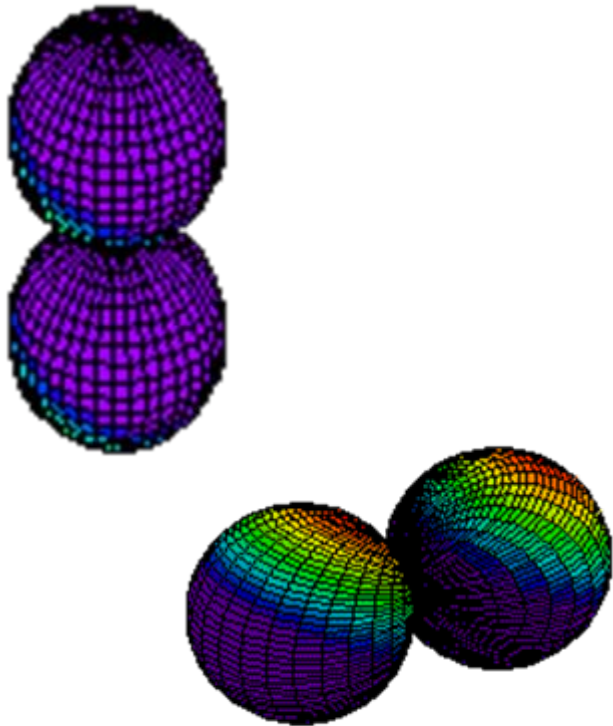
$$Y_{1,0} = (1/4\pi)^{1/2} 3^{1/2} \cos\theta$$

$$Y_{1,\pm 1} = (1/4\pi)^{1/2} (\mp 3/2)^{1/2} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

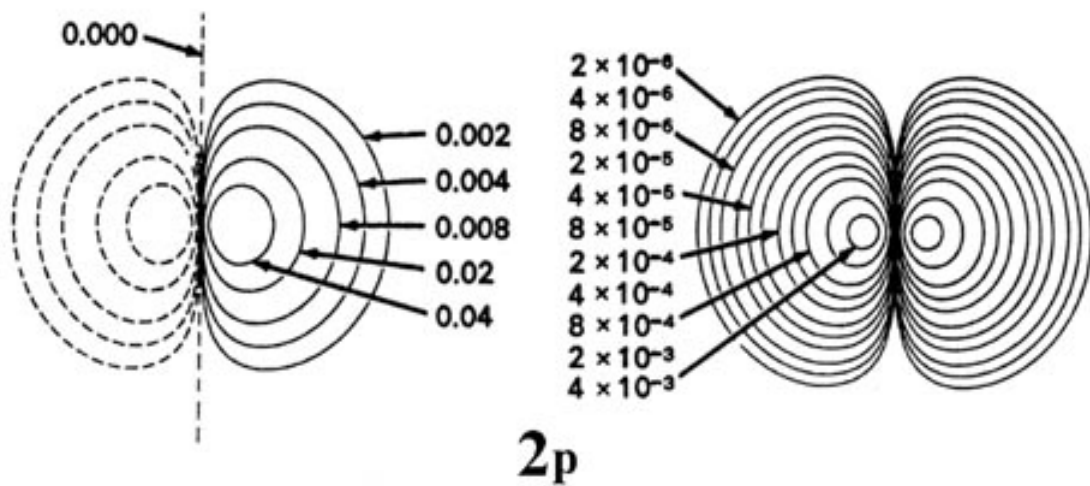
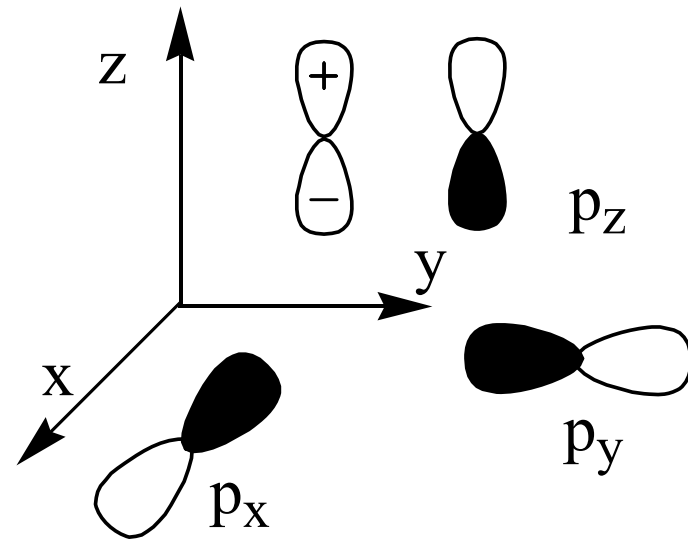
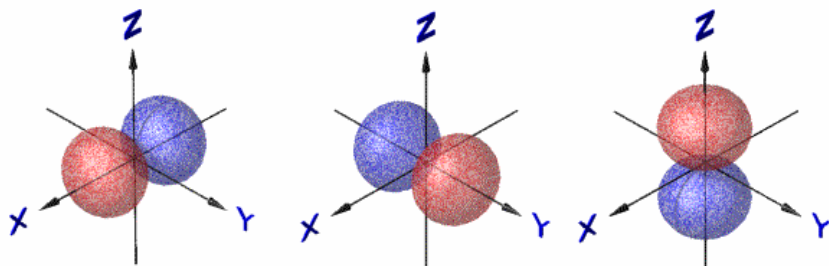
# p - orbitaly

$$n = 2, l = 1, m = 1, 0, -1$$

**Angulární část vlnové funkce určuje tvar**  
**Stejná pro všechny hodnoty n**



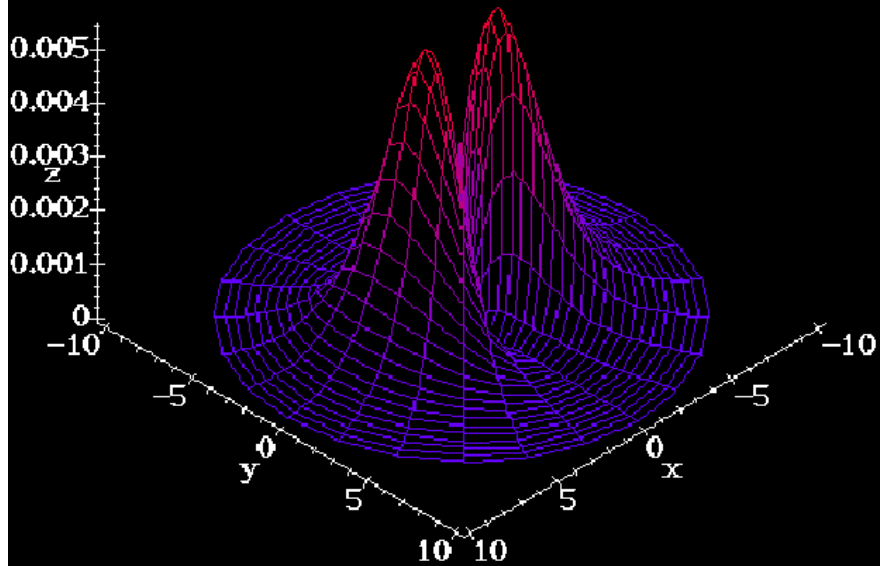
# p - orbitaly





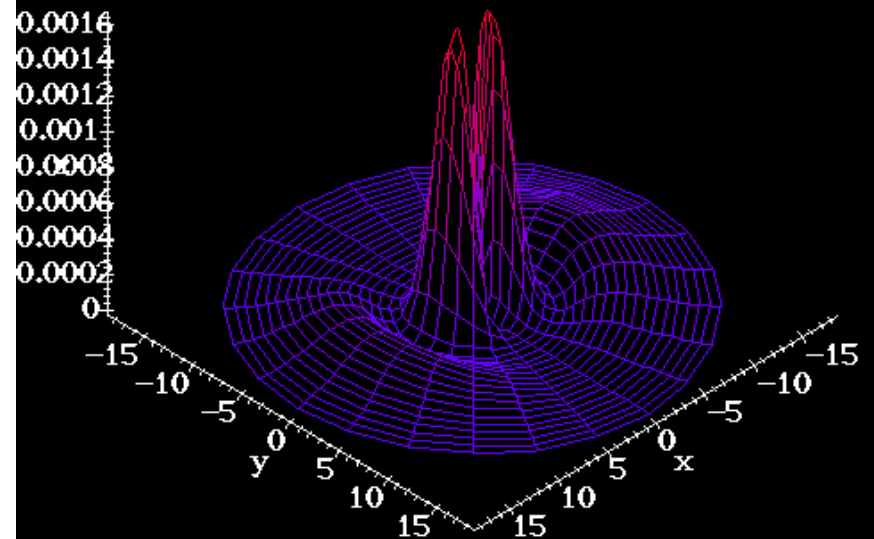
## 2p - orbitaly

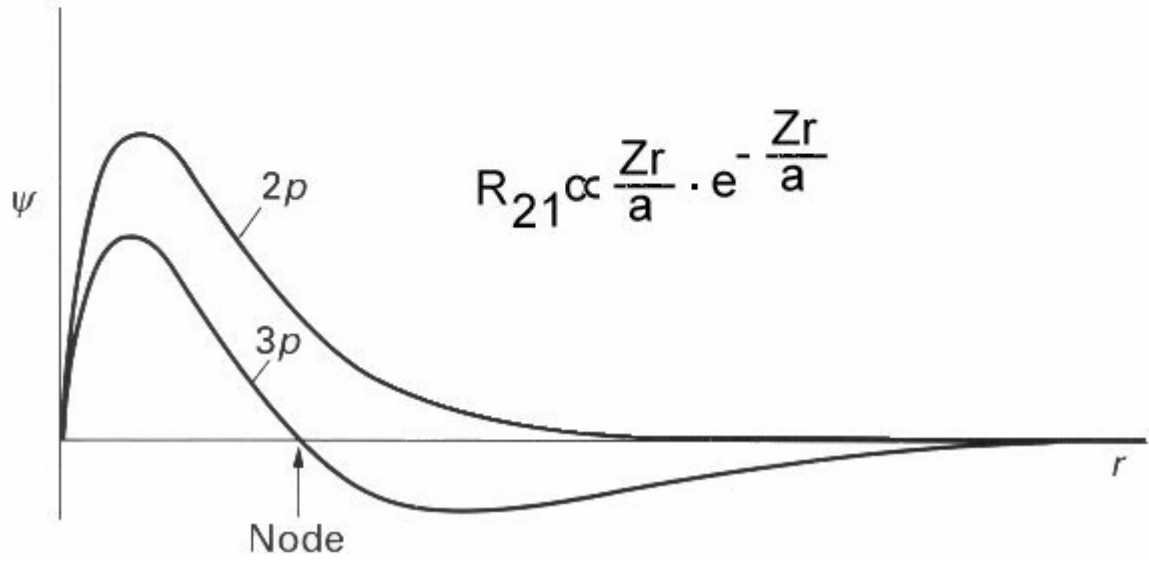
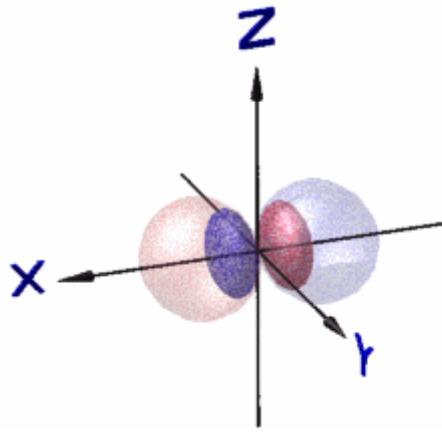
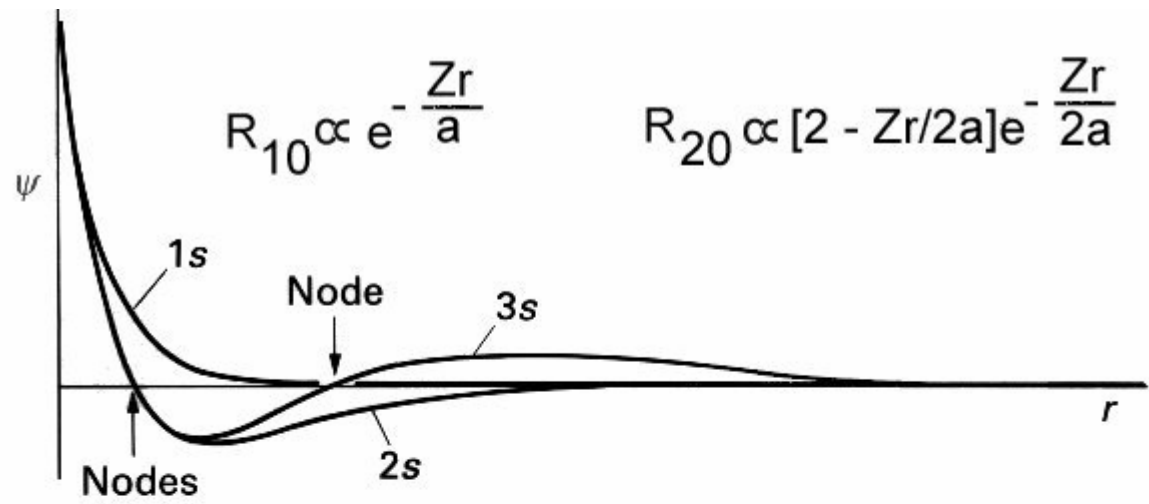
2p orbital:  $n=2, l=1, m=0$



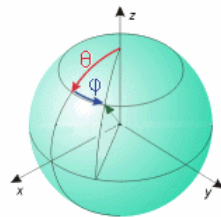
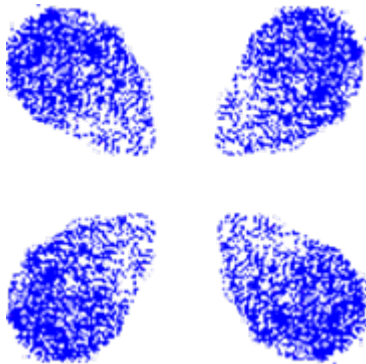
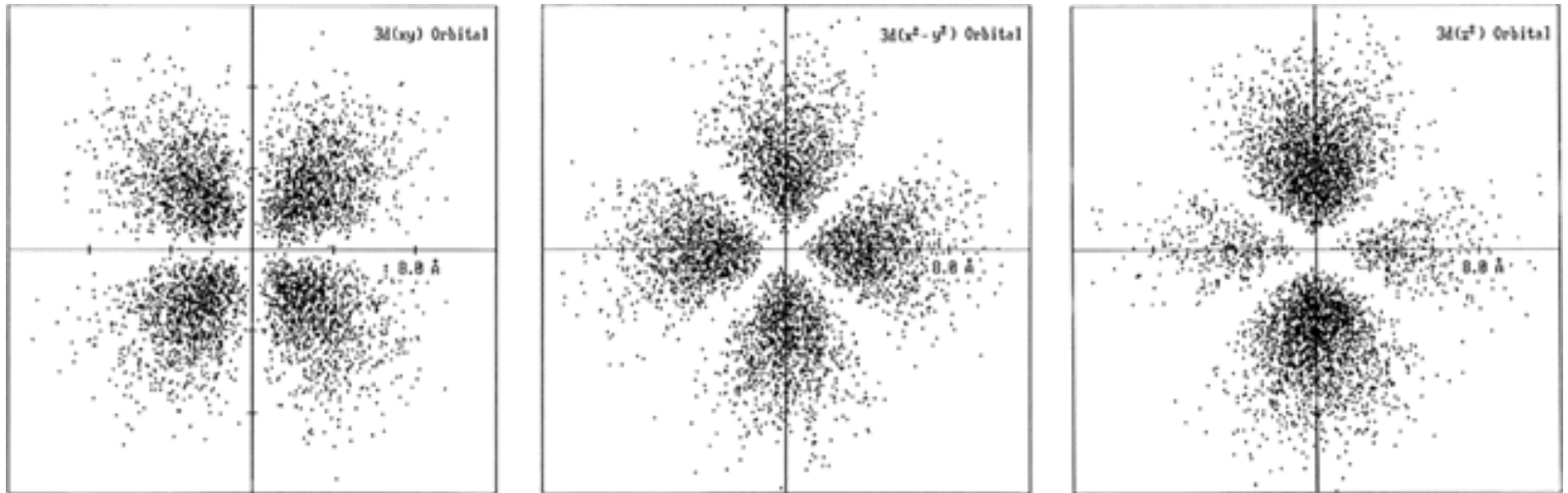
## 3p - orbitaly

3p orbital:  $n=3, l=1, m=0$





# Angulární část vlnové funkce d orbitalů



$$\Psi_{2,0}^2$$



$$\Psi_{2,\pm 1}^2$$



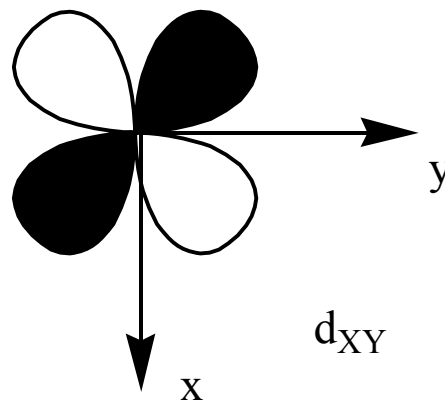
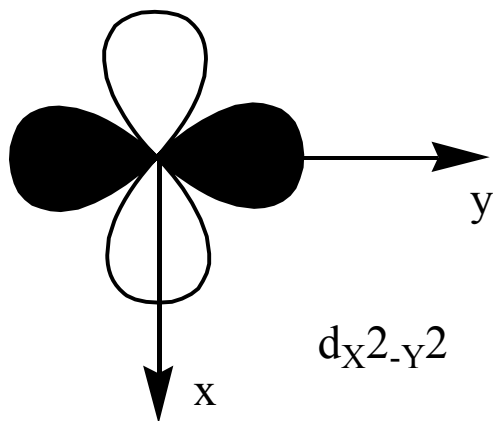
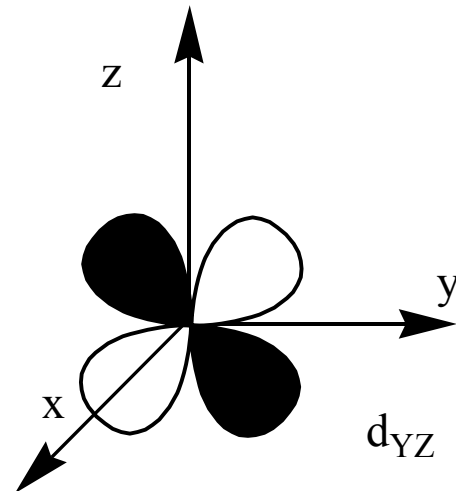
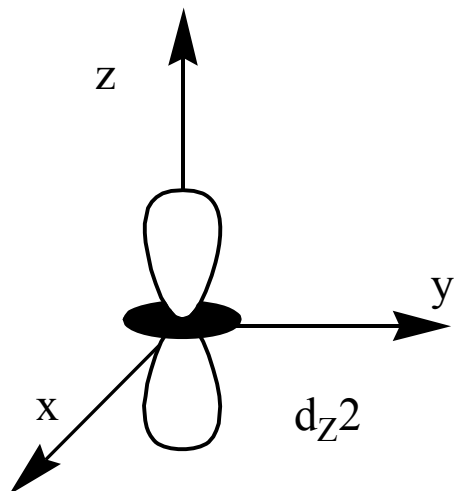
$$\Psi_{2,\pm 2}^2$$

$$Y_{2,0} = (1/4\pi)^{1/2} (5/4)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$$

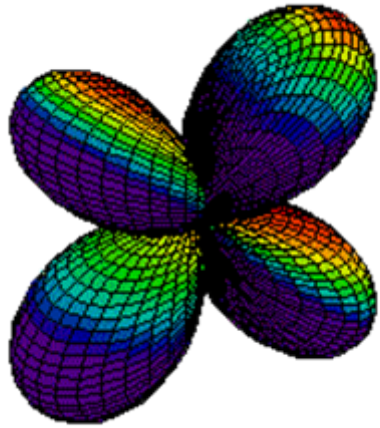
$$Y_{2,\pm 1} = (1/4\pi)^{1/2} (\mp 15/4)^{1/2} \cos\theta \sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{2,\pm 2} = (1/4\pi)^{1/2} (15/8)^{1/2} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$$

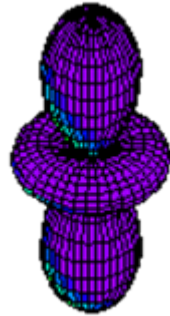
# d - orbitaly



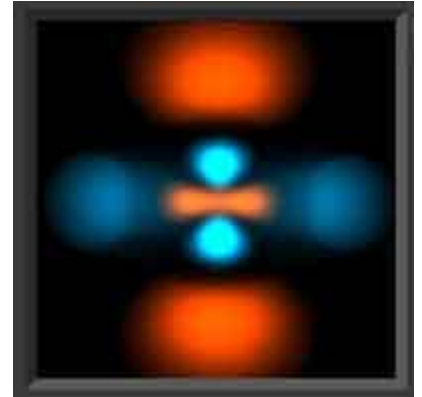
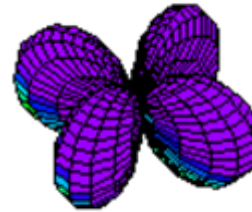
# d - orbitaly



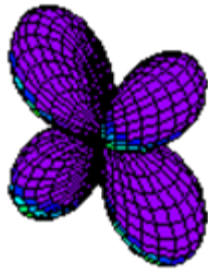
$d_{z^2}$



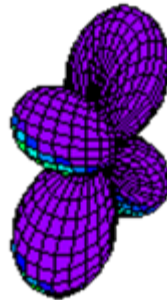
$d_{x^2-y^2}$



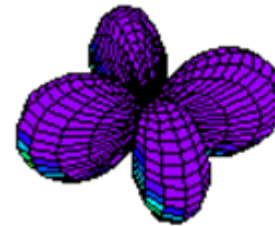
$d_{yz}$



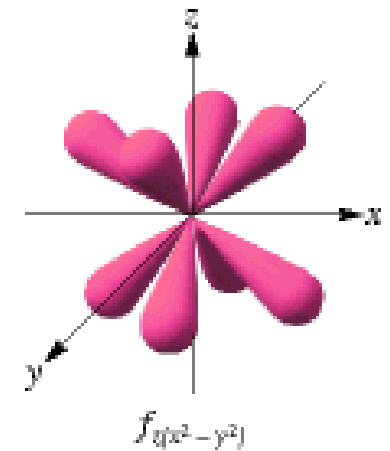
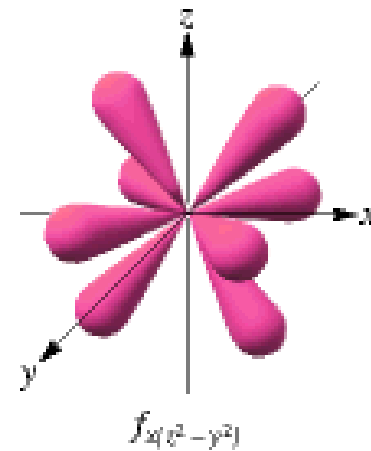
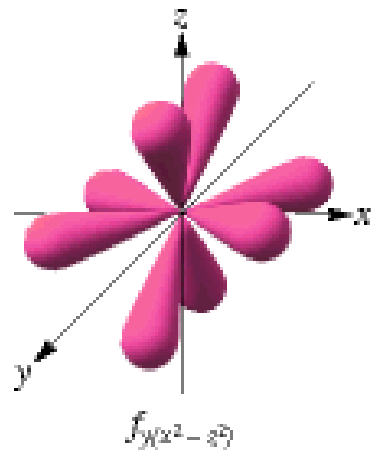
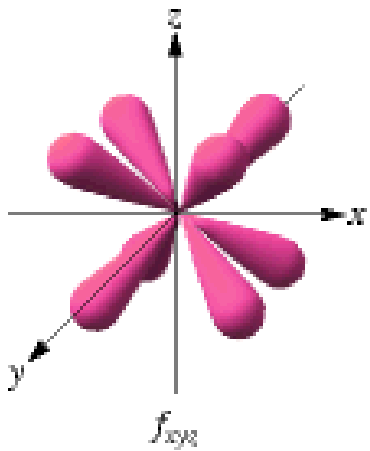
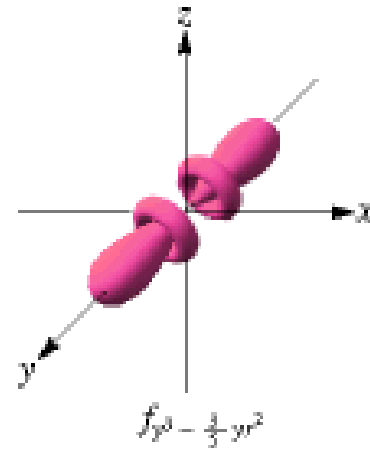
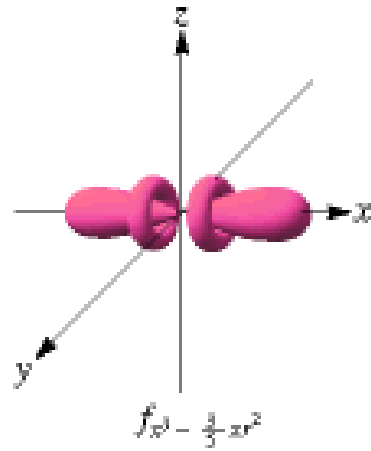
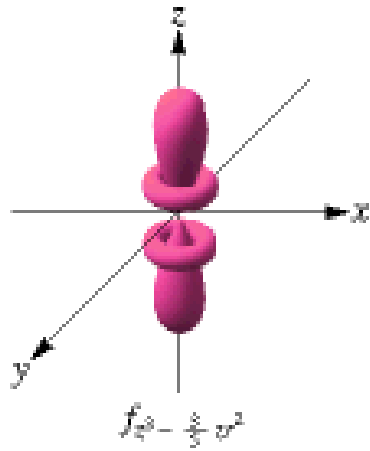
$d_{xz}$



$d_{xy}$



# f - orbitaly

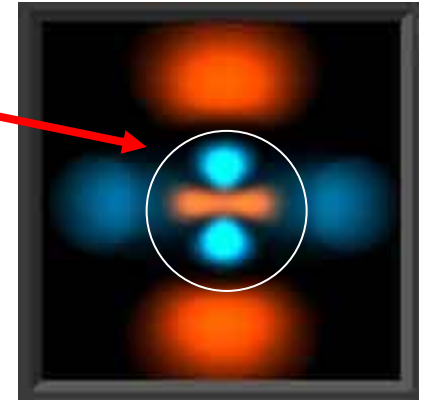


# Uzlové (nodální) plochy a roviny

Kulové uzlové (nodálních) plochy =  $n - l - 1$

Platí pro s, p, d, f,....

*radiální* část vlnové funkce



Uzlové (nodálních) roviny

*angulární* části vlnové funkce :

**Orbital**                      **Počet**

s

0

p

1

d

2

f

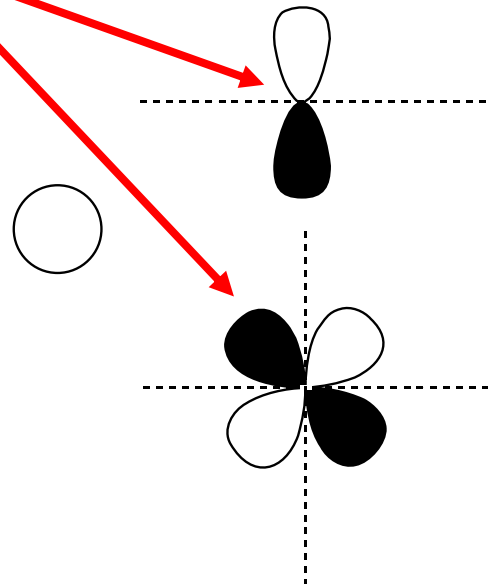
3

.

.

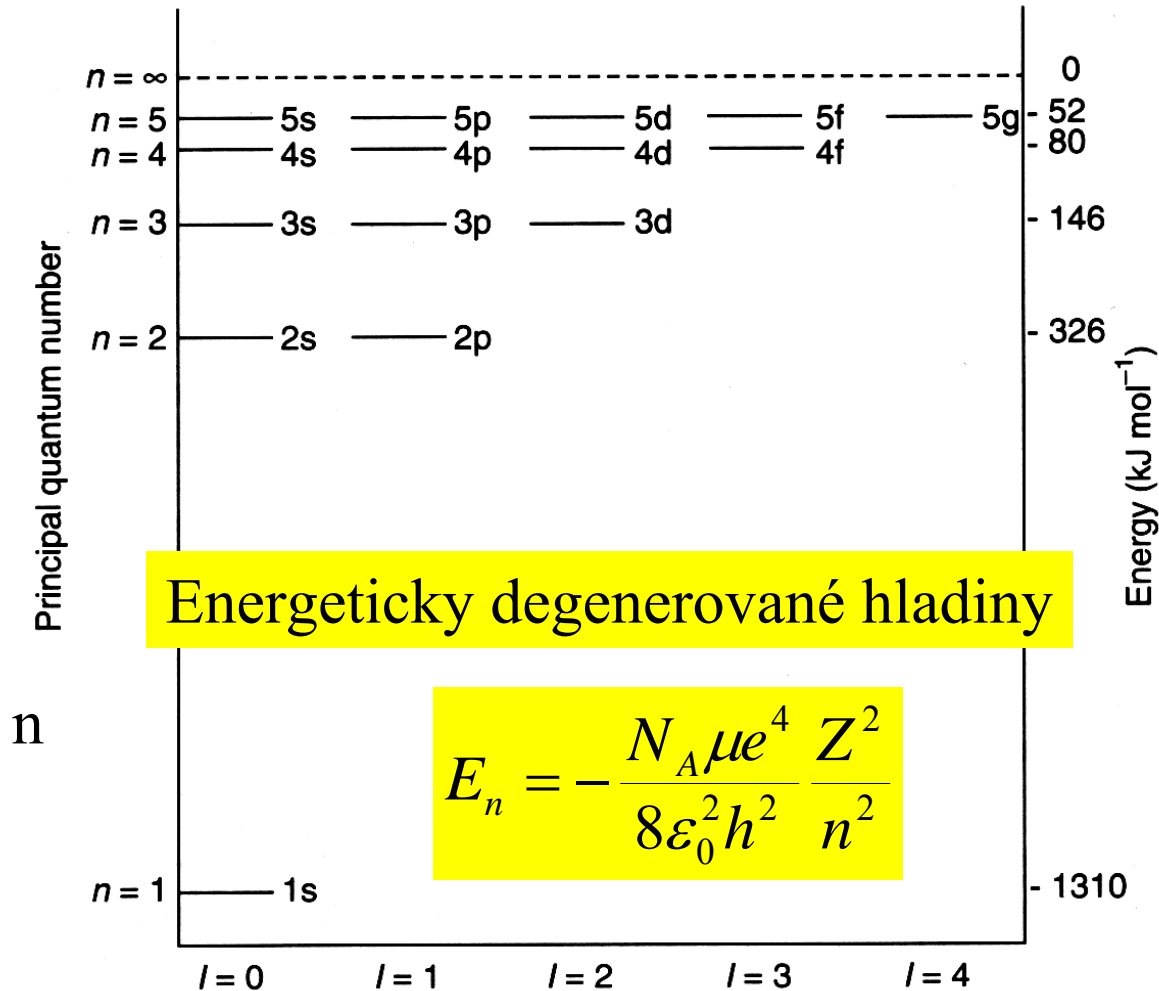
.

.



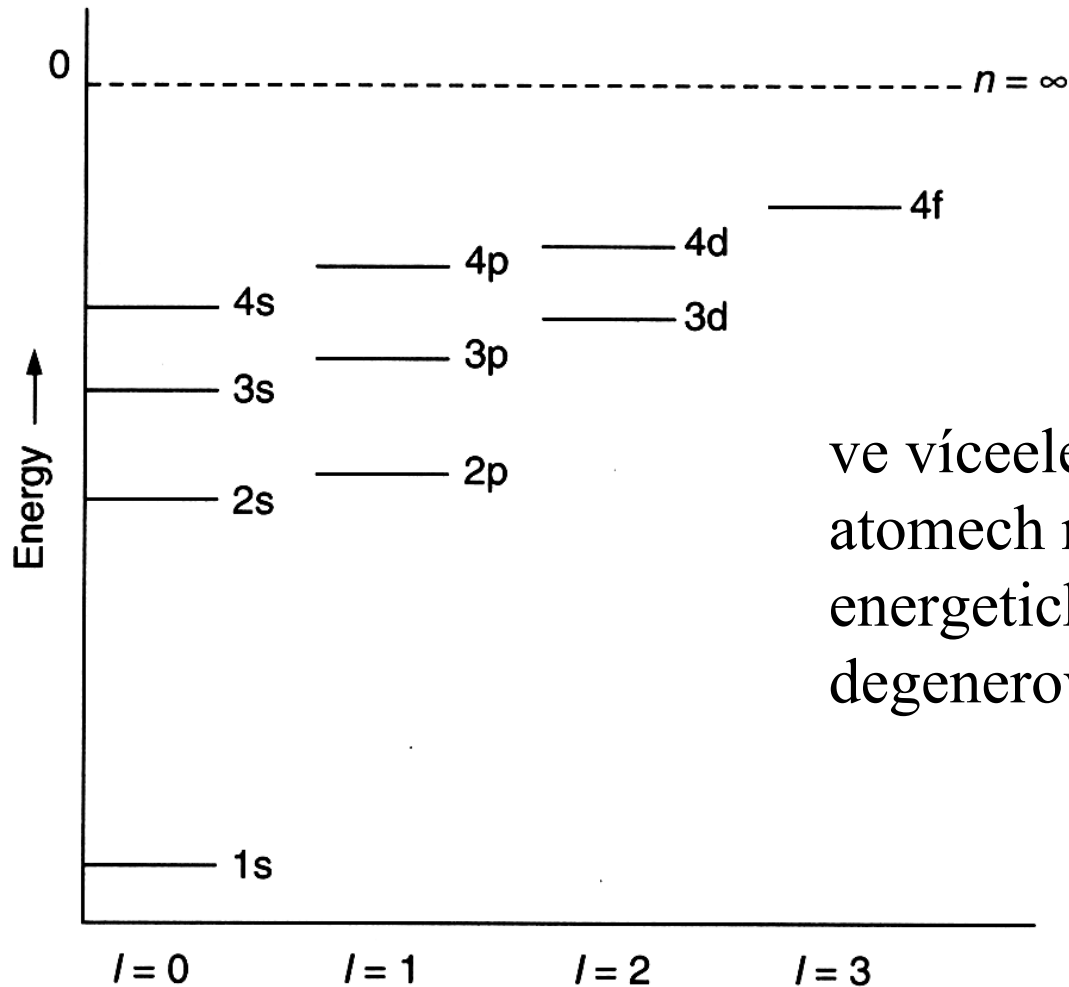
Pouze s-orbitaly mají nenulovou hodnotu vlnové funkce na jádře

# Energie orbitalů v H atomu



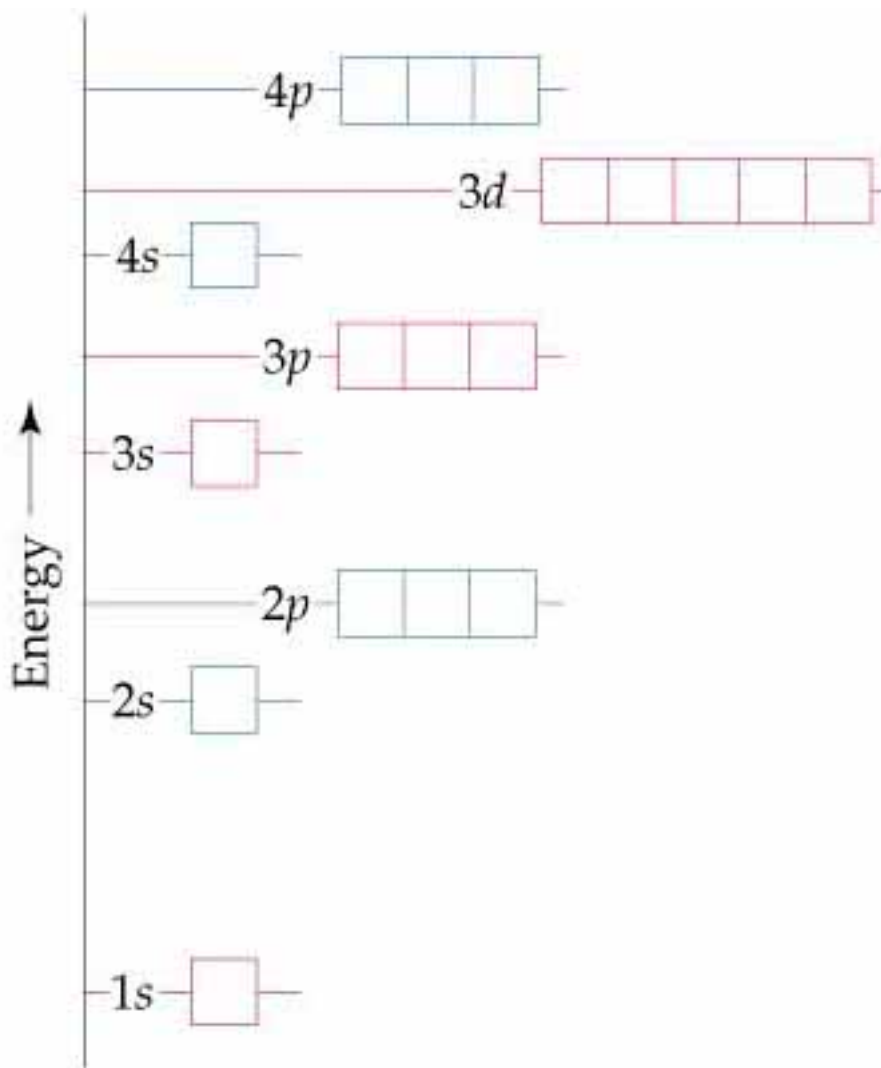


# Energie orbitalů ve víceelektronových atomech



ve víceelektronových  
atomech nejsou  
energetické hladiny  
degenerované

# Energie orbitalů ve víceelektronových atomech

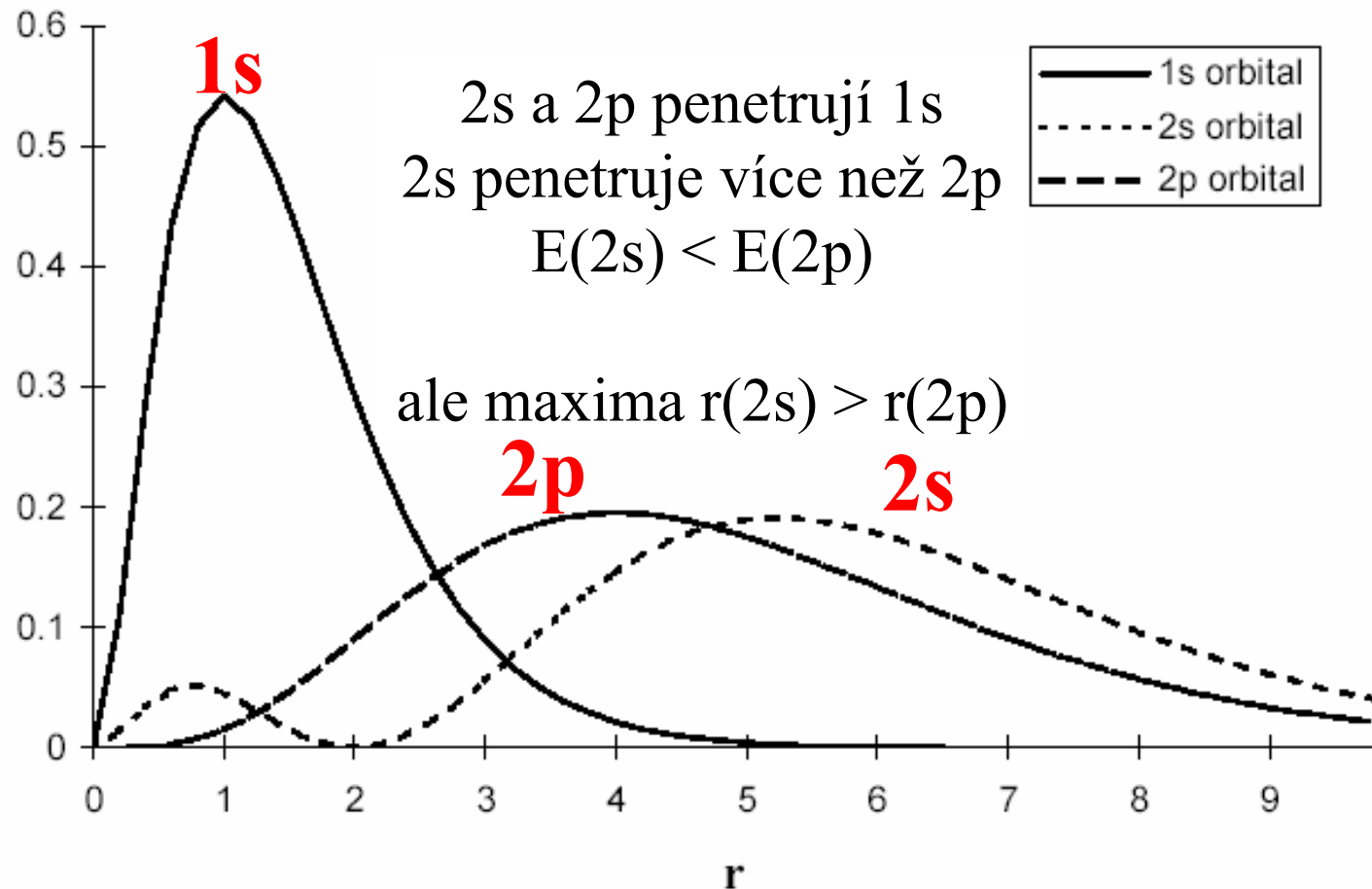


Stabilnější orbital  
(nižší energie)

Nižší ( $n + l$ )

Při rovnosti  $n + l$   
nižší  $n$

# Víceelektronové atomy – Penetrace a stínění



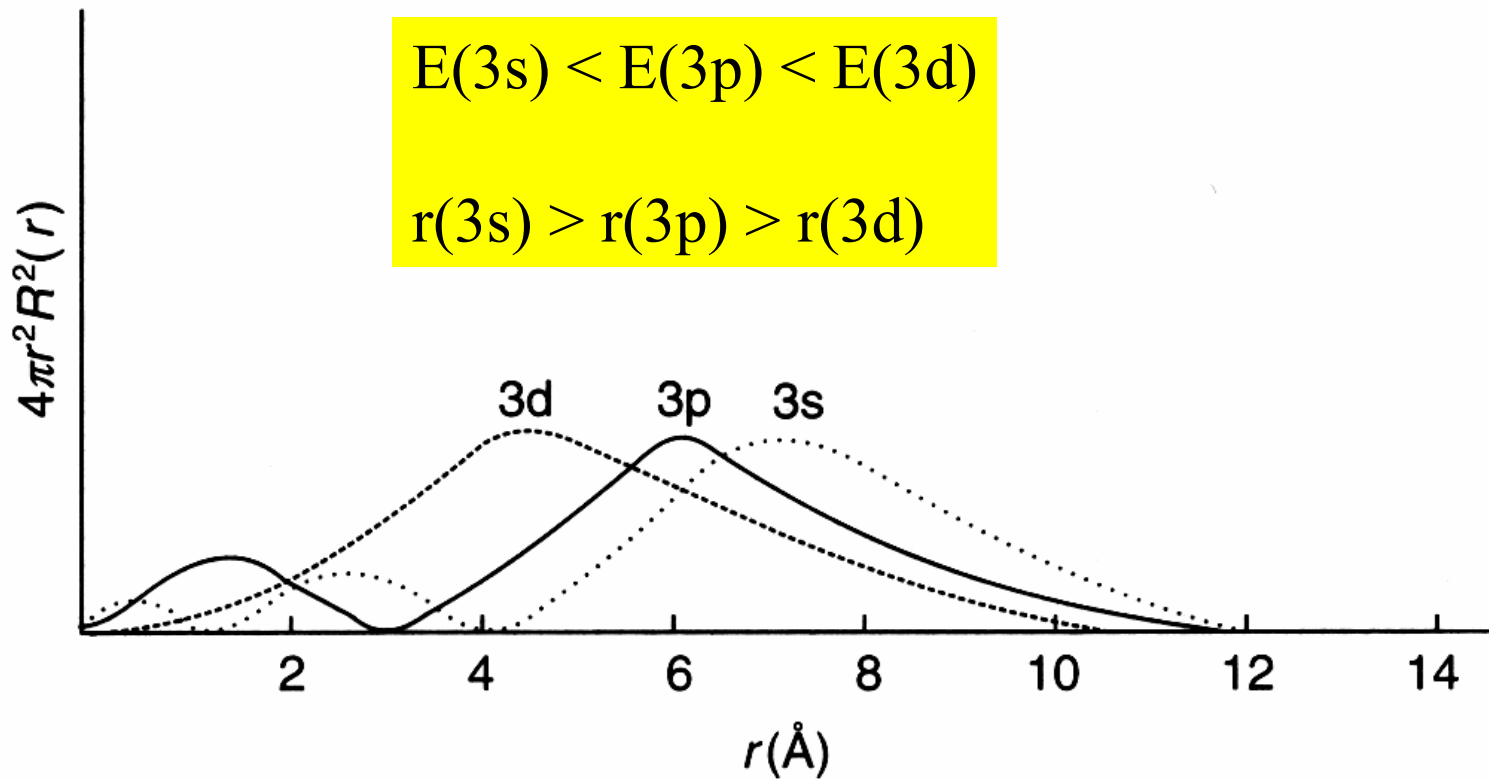
# Víceelektronové atomy – Penetrace a stínění

Čím se elektron **průměrně** nachází blíže k jádru, tím je pevněji vázán a má nižší energii

$$E(2s) < E(2p)$$

$$r(2s) > r(2p)$$

# Relativní energie orbitalů s, p, d



# Slaterovy orbitaly

Orbitaly pro víceelektronové atomy

- orbitaly (vlnové funkce) vodíkového typu
- azimutální část: stejná jako u H
- radiální část:

$$R(r) = N r^{n^*-1} \exp(-Z^* r/n^*)$$

$Z^*$  = efektivní náboj jádra

$$E_i = -N (Z_i^*/n_i) \quad N = 1313 \text{ kJ mol}^{-1}$$

# Efektivní náboj jádra

$$Z^* = Z - \sigma$$

$\sigma$  = stínící konstanta, součet pro všechny elektrony

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

Slaterova pravidla:

e napravo nestíní, nepřispívá k  $\sigma$

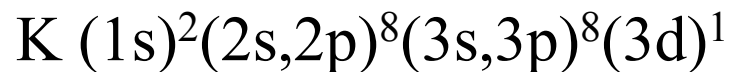
Uvnitř skupiny stíní 0.35 (1s jen 0.30)

$n - 1$  (s,p) stíní 0.85

$n - 2$  stíní 1.00

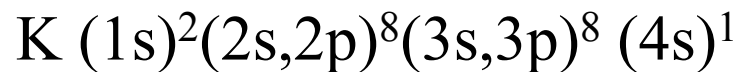
Pokud je elektron v d nebo f, vše nalevo stíní 1.00

## Efektivní náboj jádra



$$\sigma(3d) = 0 \times (0.35) + 8 \times 1.00 + 10 \times 1.00 = 18$$

$$Z^* = 19 - 18 = 1$$



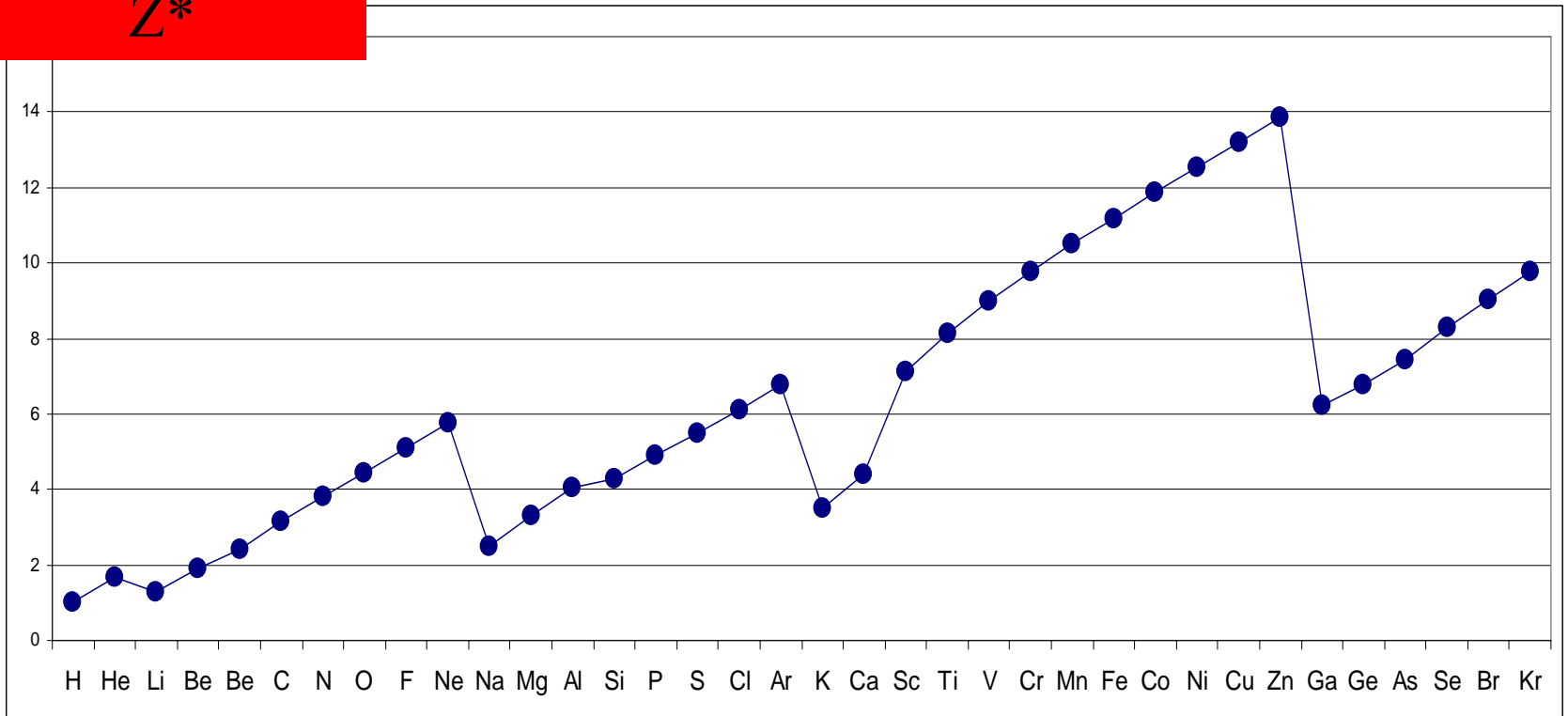
$$\sigma(4s) = 0 \times (0.35) + 8 \times 0.85 + 10 \times 1.00 = 16.8$$

$$Z^* = 19 - 16.8 = 2.2$$

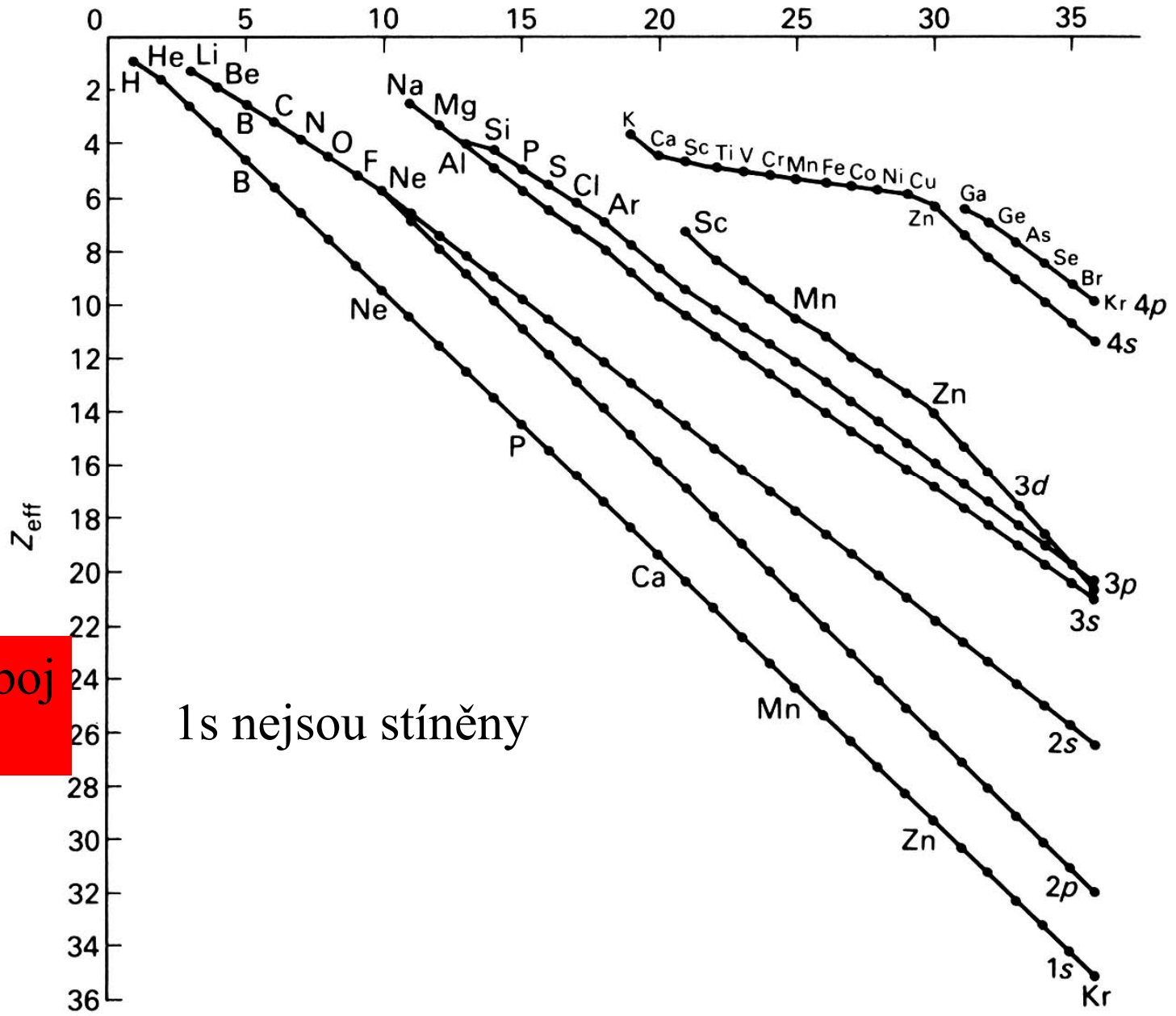


# Efektivní náboj jádra

Efektivní náboj  
 $Z^*$



Z



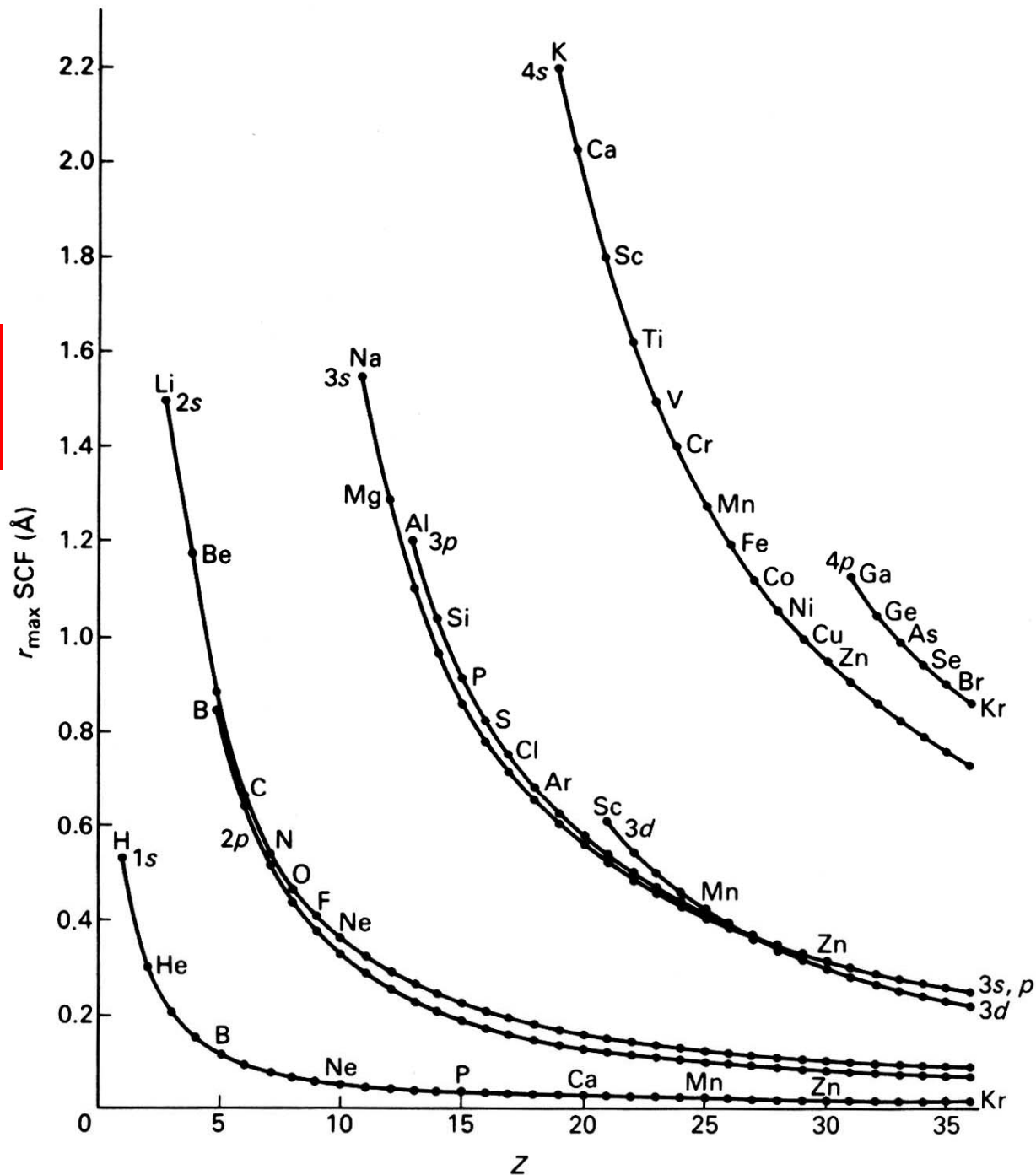
Efektivní náboj  
 $Z^*$

1s nejsou stíněny

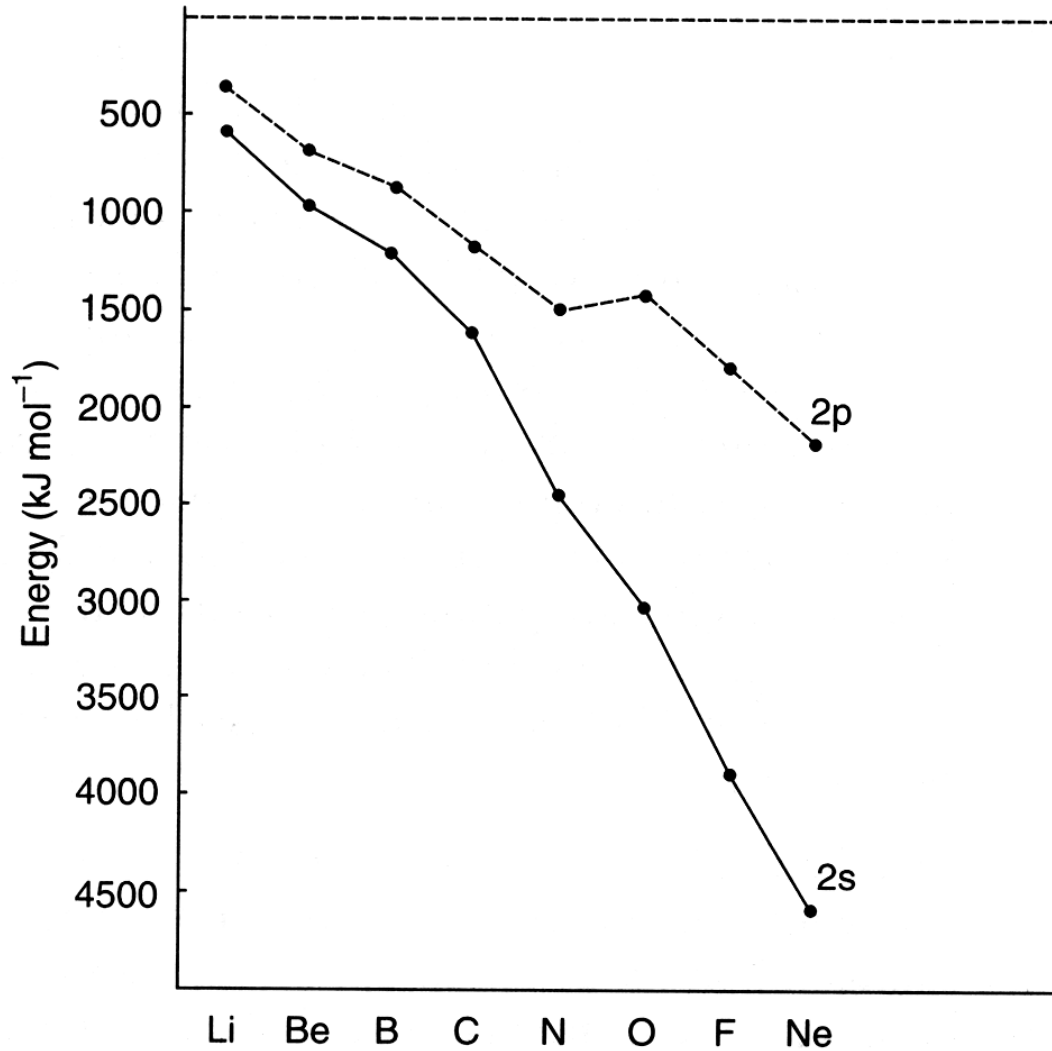
Poloměr maximální  
elektronové hustoty

$$r(2s) > r(2p)$$

$$r(3s) \sim r(3p)$$



# Energie orbitalů

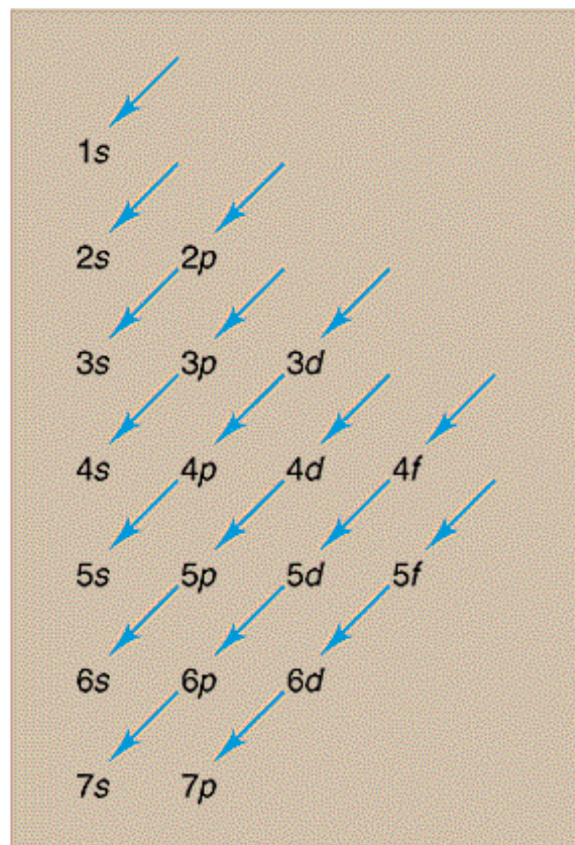


# Elektronová konfigurace atomu v základním stavu

Aufbau (výstavbový) princip:  
Elektronové hladiny se zaplňují elektrony v pořadí rostoucí energie tak, aby měl atom co nejnižší celkovou energii

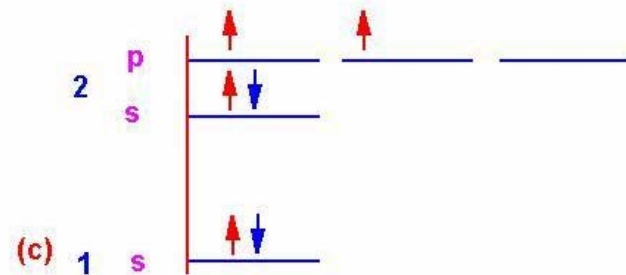
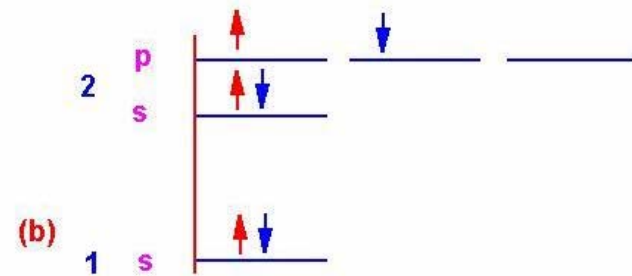
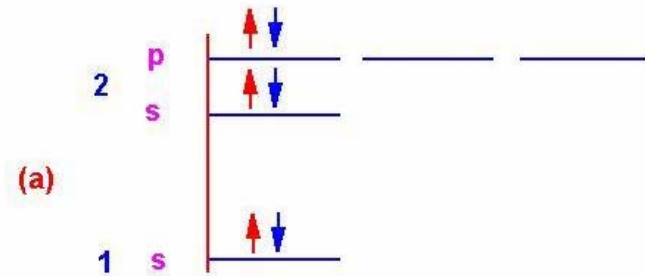
Pauliho princip:  
Žádné dva elektrony nemohou mít všechna 4 kvantová čísla stejná.

Hundovo pravidlo:  
V degenerovaných orbitalech je stav s max. počtem nepárových spinů nejstabilnější.



# Elektronová konfigurace C

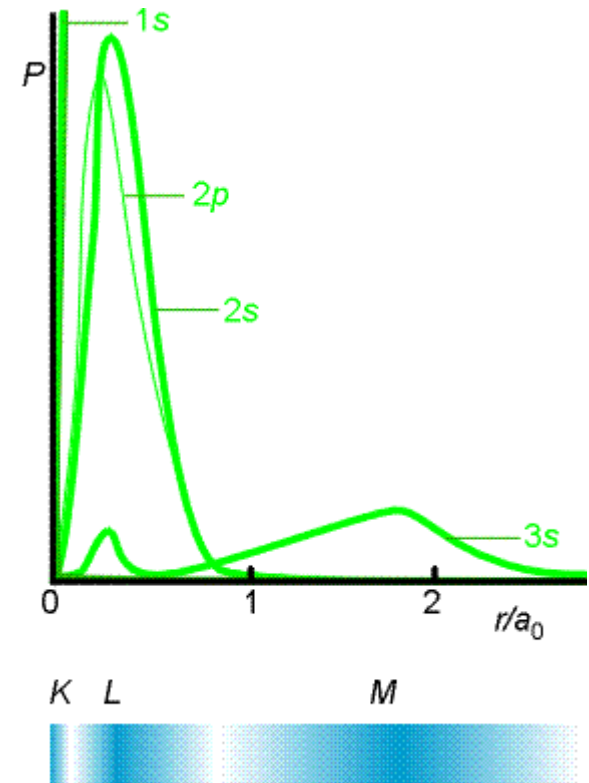
	1s	2s	2p		
a)	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	↑	↓	—
b)	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	↑↑	—	—
c)	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	↑	↑	—
d)	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	—	—



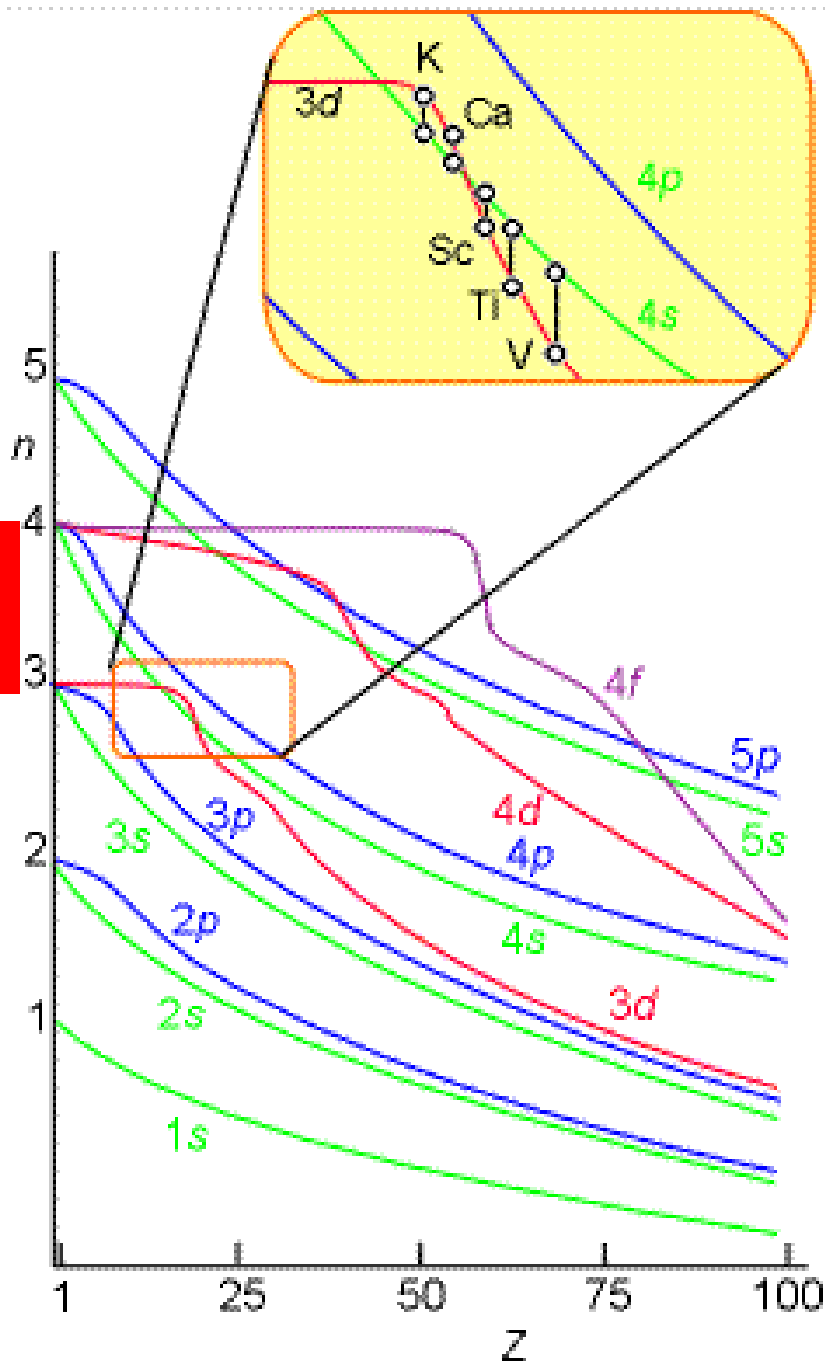
# Elektronová konfigurace valenční slupky

(Ne)

	3s	3p
Na	$\uparrow$	
Mg	$\uparrow\downarrow$	
Al	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$
Si	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow$
P	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow$
S	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$
Cl	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$
Ar	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$



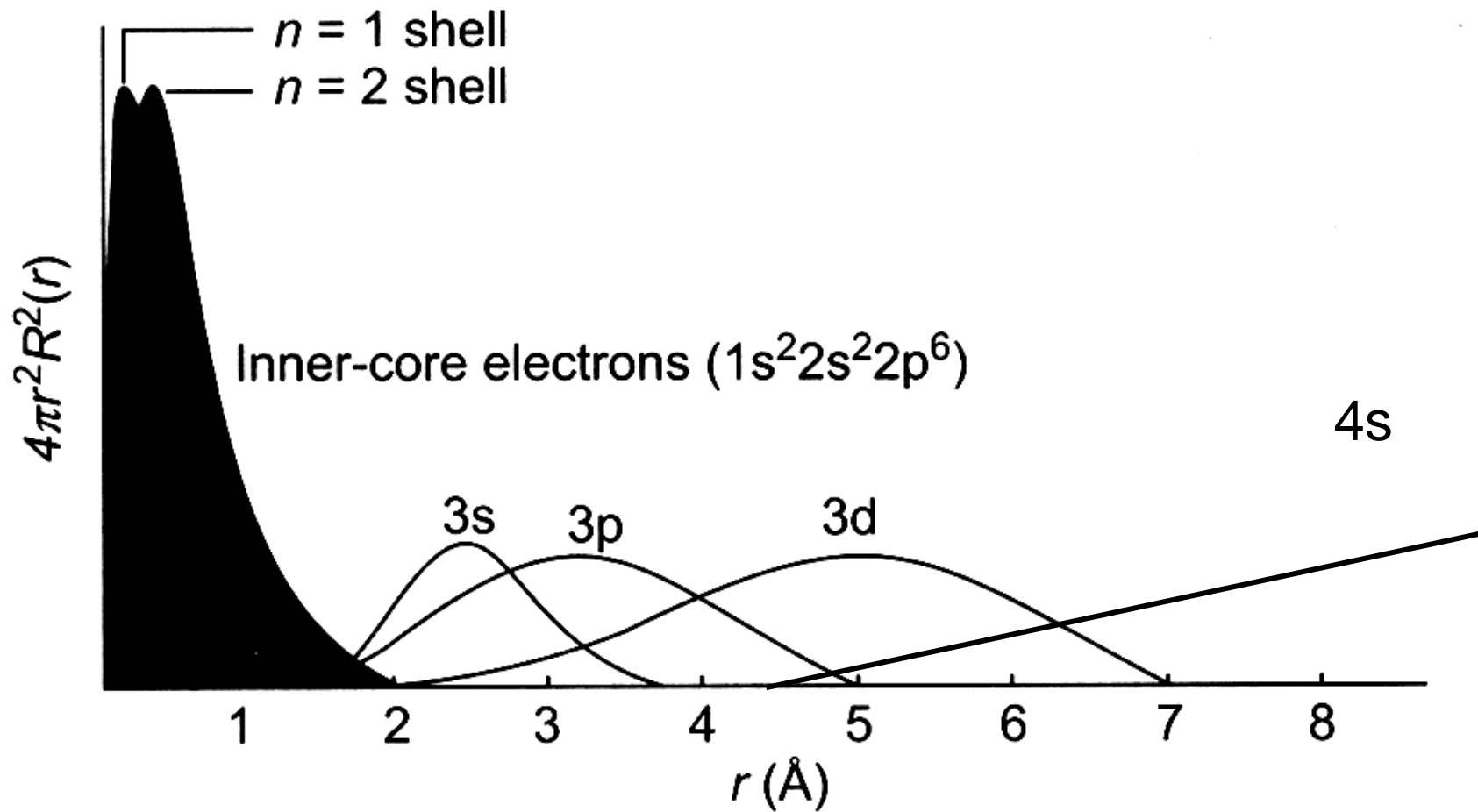
Energie orbitalu

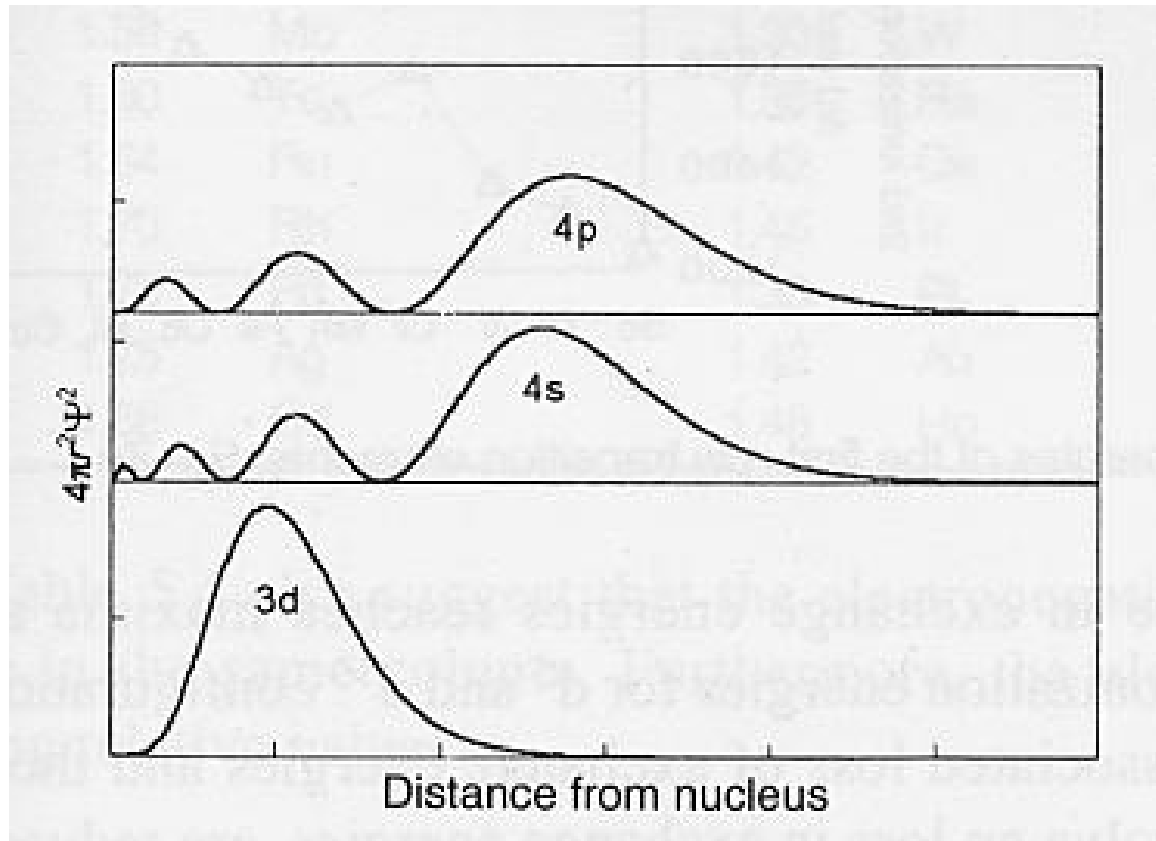


Obsazení orbitalů  
elektrony může  
změnit pořadí energií

Počínaje Sc, 3d  
orbitaly mají nižší  
energii než 4s

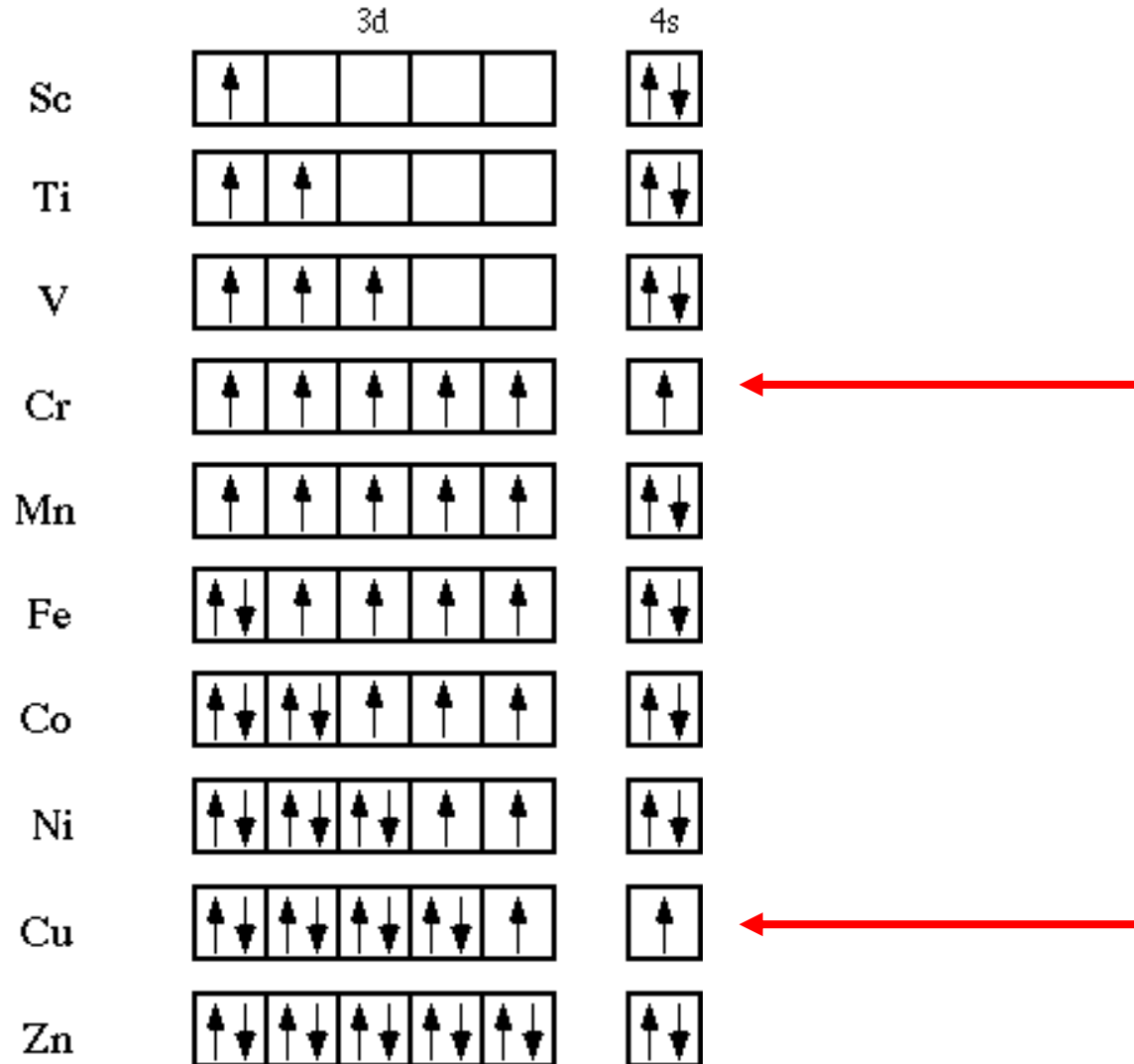






# Elektronová konfigurace valenční slupky

(Ar)



# Ionizační energie

