

Atomové jádro, elektronový obal

Atomové jádro

- ▶ Atomové jádro je tvořeno protony a neutrony
- ▶ Prvek je látka skládající se z atomů se stejným počtem protonů
- ▶ Nuklid je systém tvořený prvky se stejným počtem neutronů
- ▶ Izotopy jsou atomy prvku s různým počtem neutronů
 - ▶ ${}^12_6\text{C}$, ${}^{13}_6\text{C}$, ${}^{14}_7\text{N}$, ${}^{15}_7\text{N}$
- ▶ ${}^A_Z\text{X}$
 - ▶ A - nukleonové číslo - počet nukleonů (protonů a neutronů) v jádře
 - ▶ Z - protonové číslo - počet protonů v jádře
- ▶ **Relativní atomová hmotnost** je dána hmotnostním poměrem atomových hmotností jednotlivých izotopů prvku.
- ▶ Chlor: ${}^{35}\text{Cl}$ (75,529 %), ${}^{37}\text{Cl}$ (24,471 %)
- ▶ $Ar(\text{Cl}) = w({}^{35}\text{Cl}) \cdot A({}^{35}\text{Cl}) + w({}^{37}\text{Cl}) \cdot A({}^{37}\text{Cl}) = 0,75529 \cdot 34,97 + 0,24471 \cdot 36,97 = 35,45$

Stabilita atomových jader

- ▶ Na stabilitu má vliv velikost vazebné energie jádra a poměr mezi počtem protonů a neutronů. U lehkých jader je poměr zhruba 1:1, se vzrůstajícím protonovým číslem dochází ke zvyšování přebytku neutronů
- ▶ Vazebná energie je energie, která se uvolní při vzniku jádra z volných nukleonů
- ▶ Nejvíce stabilních jader má protonové i neutronové číslo sudé, např. $^{12}_6\text{C}$, $^{16}_8\text{O}$, ...
- ▶ Naopak kombinace lichého protonového a neutronového čísla je u stabilních jader vzácná, známe pouze čtyři: ^1_1H , ^6_3Li , $^{10}_5\text{B}$ a $^{14}_7\text{N}$

- ▶ Pokud je v jádru nadbytek neutronů nebo protonů, jádro se přemění na stabilnější.
 - ▶ α rozpad - rozpad charakteristický pro těžší jádra, dojde k uvolnění α -částice (jádro ${}^4_2\text{He}^{2+}$), vzniklé jádro má protonové číslo menší o 2 a nukleonové o 4
 - ▶ ${}^{226}_{88}\text{Ra} \longrightarrow {}^{222}_{86}\text{Rn} + {}^4_2\text{He}$
 - ▶ V případě nadbytku neutronů může dojít k rozpadu neutronu na proton a elektron, během přeměny se uvolňuje částice β^- (${}^0_{-1}e^-$)
 - ▶ ${}^{32}_{15}\text{P} \longrightarrow {}^{32}_{16}\text{S} + {}^0_{-1}e$
 - ▶ V případě nadbytku protonů může dojít k rozpadu protonu na neutron a pozitron, během přeměny se uvolňuje částice β^+ (${}^0_{+1}e^+$)
 - ▶ ${}^{11}_6\text{C} \longrightarrow {}^{11}_5\text{B} + {}^0_{+1}e$
 - ▶ Nadbytek protonů v jádře může být kompenzován i pomocí *elektronového zachytu*, kdy proton pohltí elektron a vznikne neutron
 - ▶ ${}^7_4\text{Be} + {}^0_{-1}e \longrightarrow {}^7_3\text{Li}$

- ▶ **Poločas rozpadu** - doba, za kterou dojde k rozpadu poloviny jader v systému
- ▶ Pravděpodobnostní veličina
- ▶ Charakteristika nestabilních jader, pohybuje se od zlomků sekund až po milióny let
- ▶ $\frac{dN}{dt} = -\lambda N$
- ▶ $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$
- ▶ $t_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \tau \ln 2$
 - ▶ N - počet částic
 - ▶ N_0 - počet částic na počátku
 - ▶ λ - rozpadová konstanta
 - ▶ τ - doba života jádra - $\tau = \frac{1}{\lambda}$

Elektronový obal

- ▶ Elektrony vázané k atomovému jádru
- ▶ Elektronový obal tvoří asi 0,01 % hmotnosti atomu, ale tvoří většinu jeho objemu
- ▶ Poloměr elektronového obalu je řádově 10^{-10} m
- ▶ Elektrony vykazují dualitu chování, v důsledku Heisenbergova principu neurčitosti nelze přesně určit polohu elektronu v atomu, proto popisujeme pouze pravděpodobnost výskytu elektronu
- ▶ Počet elektronů v obalu atomu (elektroneutrální částice) je shodný s počtem protonů v jádře
- ▶ Elektrony se v obalu pohybují v prostoru vymezeném řešením Schrödingerovy rovnice, tento prostor označujeme jako **atomový orbital**
- ▶ **Valenční elektrony** - elektrony v poslední zaplněné slupce obalu, účastní se chemických dějů

- ▶ Elektron v atomu můžeme popsat čtyřmi kvantovými čísly
 - ▶ Hlavní kvantové číslo (n) - popisuje příslušnost orbitalu do elektronové slupky – velikost orbitalu. Nabývá hodnot větších než 0.
 - ▶ Vedlejší kvantové číslo (l) - popisuje tvar orbitalu. Často se používá označení pomocí písmen: s, p, d, f, g, h, ... Nabývá hodnot v intervalu $< 0, n - 1 >$.
 - ▶ Magnetické kvantové číslo (m) - popisuje prostorovou orientaci orbitalu. Nabývá hodnot v intervalu $< -l; l >$.
 - ▶ Spinové kvantové číslo (s) - nepopisuje orbital, ale spin elektronu v orbitalu. Nabývá hodnot $\pm \frac{1}{2}$.
- ▶ **Pauliho princip vylučnosti** - v atomu nemohou existovat dva elektrony, které by měly shodná všechna čtyři kvantová čísla, musí se lišit alespoň spinem, tzn. že do jednoho atomového orbitalu se vejdou maximálně dva elektrony.
- ▶ **Výstavbový (Aufbau) princip** - elektrony zaplňují orbitály od energeticky nejnižších. První jsou zaplňovány volné orbitály s nejnižším součtem $n+l$.

Elektronová konfigurace

- ▶ Popisuje zaplnění atomových orbitalů elektrony
- ▶ Orbitaly jsou zaplňovány v pořadí: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p
- ▶ d-orbitaly se zaplňují až po zaplnění s-orbitalu s hlavním kvantovým číslem $(n+1)$, např. 3d orbital se začne plnit až po 4s
- ▶ Zápis elektronové konfigurace: C: $1s^2 2s^2 2p^2$; P: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
- ▶ Zkrácený zápis elektronové konfigurace: C: $[\text{He}] 2s^2 2p^2$; P: $[\text{Ne}] 3s^2 3p^3$
- ▶ U nepřechodných prvků (s a p blok PSP) je zaplňování orbitalů dáno jejich energetickým pořadím. Sb: $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p^3$
- ▶ U přechodných (d blok) a vnitřně přechodných (f blok) prvků nacházíme výjimky a nepravidelnosti v pořadí zaplňování orbitalů

► Změna pořadí energetických hladin

K [Ar] 4s¹ (3d⁰ 4p⁰)

Ca [Ar] 4s² (3d⁰ 4p⁰)

Sc [Ar] 3d¹ 4s² (4p⁰)

Ti [Ar] 3d² 4s² (4p⁰)

► Vyšší stabilita zcela zaplněných d-orbitalů

- U prvků 6. a 11. skupiny dochází k přeskoky jednoho elektronu z orbitalu s do orbitalu d, tím vzniká konfigurace se zcela nebo zcela zaplněným d-orbitalem.
- Cr: [Ar] 3d⁵ 4s¹
- Cu: [Ar] 3d¹⁰ 4s¹
- U f-prvků (lanthanoidy a aktinoidy) je elektronová konfigurace $(n-2)f^{1-14}(n-1)d^{0-1}ns^2$
- Gd: [Xe] 4f⁷ 5d¹ 6s²
- U: [Rn] 5f³ 6d¹ 7s²

Elektronová konfigurace iontů

- ▶ Při vzniku *kationtů* se uvolňují elektrony z HOMO orbitalu (Highest Occupied Molecular Orbital - nejvyšší obsazený molekulový orbital).
- ▶ Při vzniku *aniontů* elektrony vstupují do LUMO orbitalu (Lowest Unoccupied Molecular Orbital - nejnižší neobsazený molekulový orbital).

Na	[Ne] 3s ¹	Na ⁺	[Ne] (3s ⁰)
Ba	[Xe] 3s ²	Ba ²⁺	[Xe]
Fe	[Ar] 3d ⁶ 4s ²	Fe ³⁺	[Ar] 3d ⁵
Cu	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹	Cu ²⁺	[Ar] 3d ⁹
S	[Ne] 3s ² 3p ⁴	S ²⁻	[Ne] 3s ² 3p ⁶ ≡ [Ar]
Cl	[Ne] 3s ² 3p ⁵	Cl ⁻	[Ne] 3s ² 3p ⁶ ≡ [Ar]