

7. přednáška

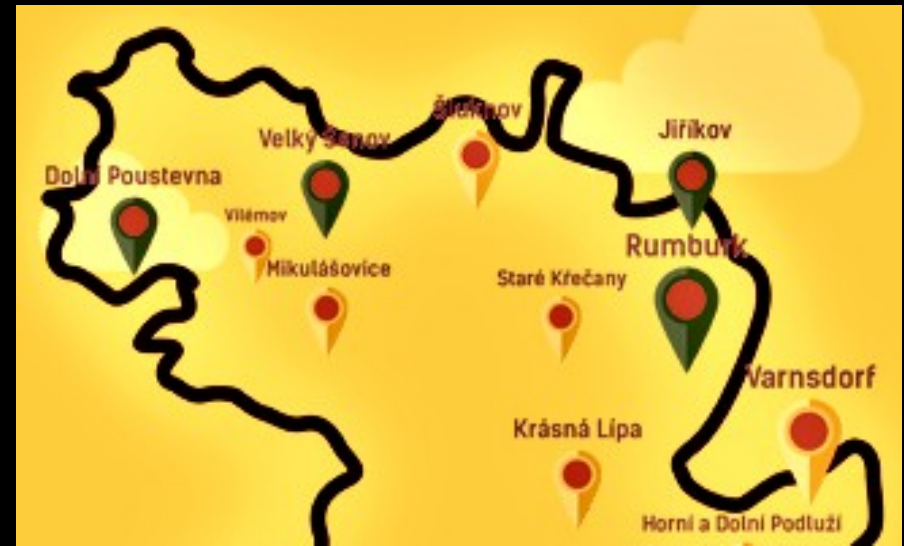
Atomové orbitaly

Atkins: výběr z kapitoly 9
s přesahy do kapitoly 8



schrödingerův
institut

Středisko volného času pro Šluknovský výběžek



<http://www.sinstitut.cz>



Erwin Schrödinger (* 1887 – † 1961)

rakouský teoretický fyzik

jeden ze zakladatelů kvantové mechaniky

formuloval Schrödingerovu rovnici

přesto obětí rasové nenávisti a xenofobie



9.1 Struktura a spektra atomů typu H

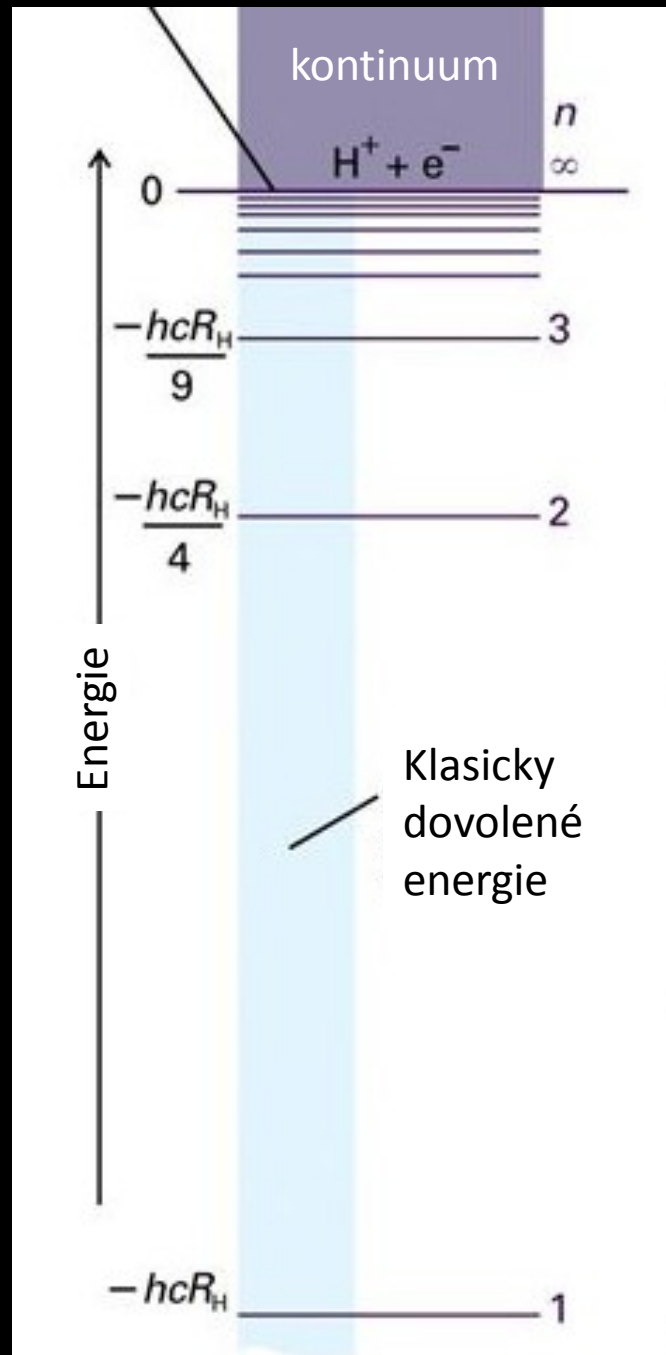


9.1.2 Atomové orbitaly a jejich E



9.1.2.2 Energetické hladiny

Obrázek 9.5

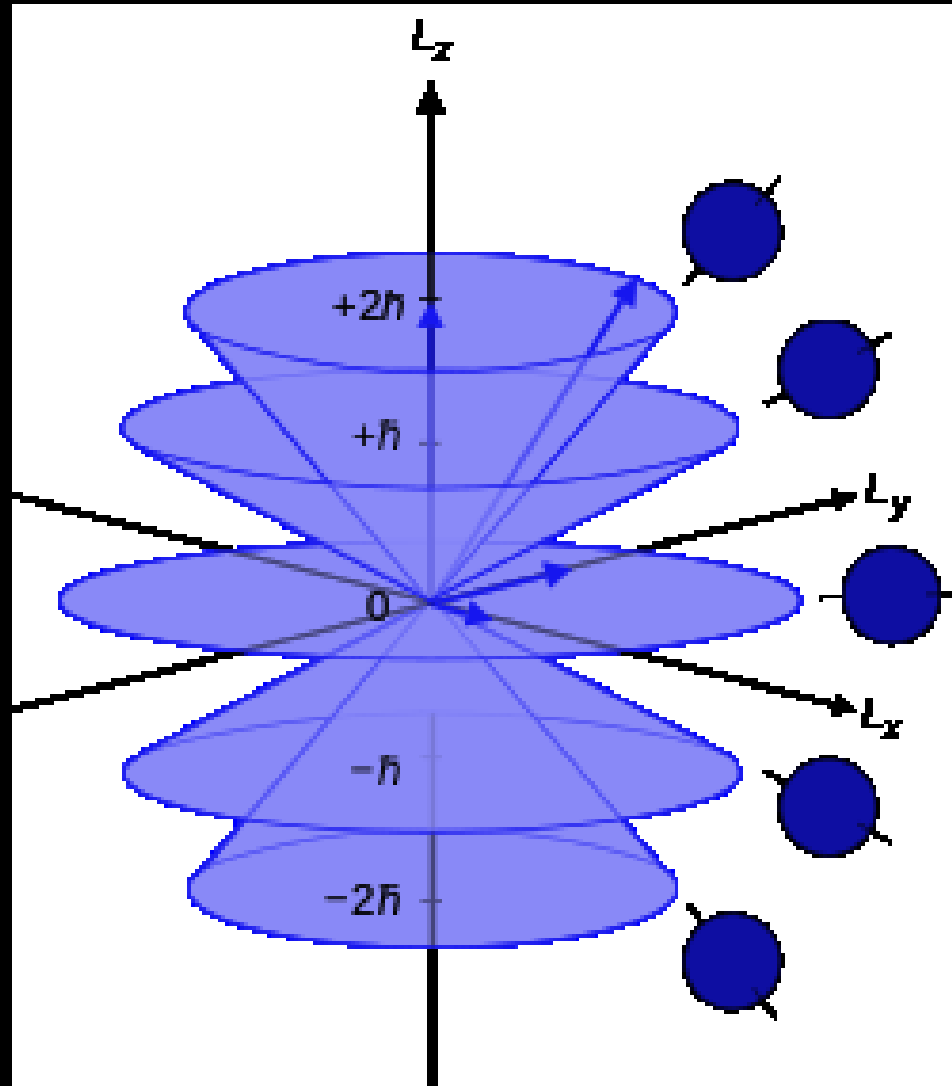


9.1.2.1 Specifikace orbitalů



9.1.2.2 Energetické hladiny

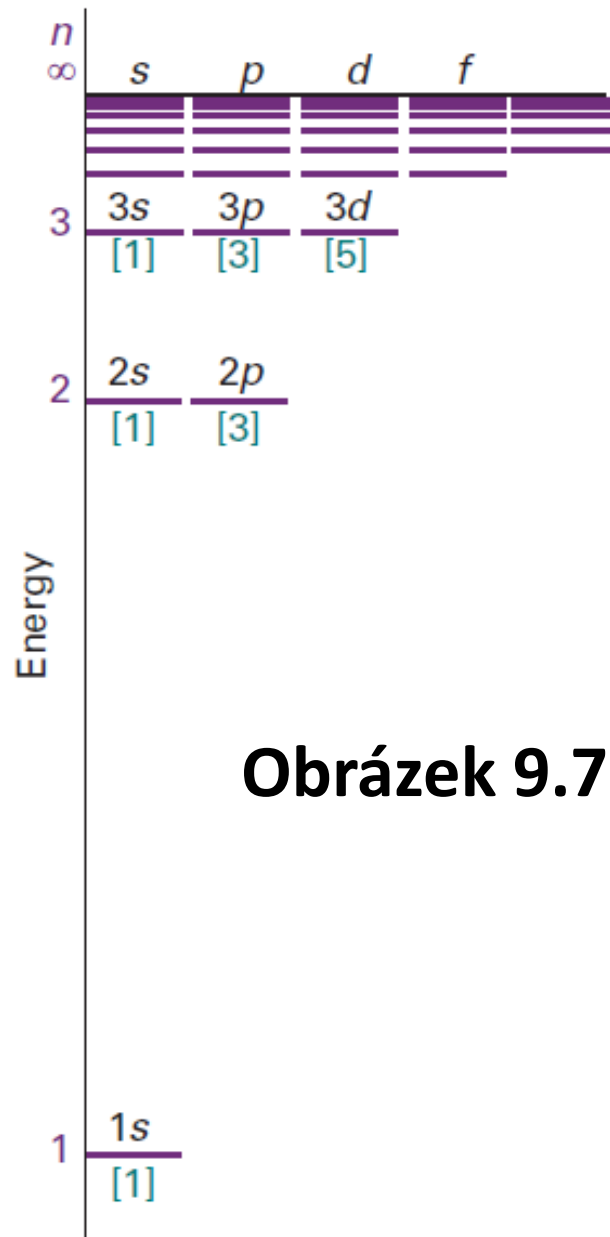
Obr. 8.37 Vektorový model momentu hybnosti



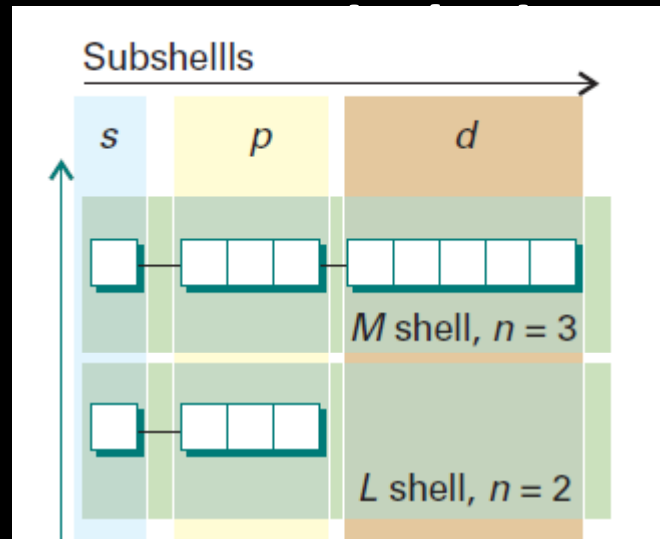
9.1.2.1 Specifikace orbitalů



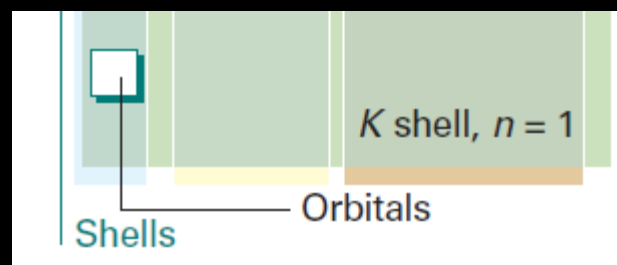
9.1.2.4 Slupky a podslupky



Obrázek 9.7



Obrázek 9.8



9.1.1.2/Obr. 9.4_a,b Radiální vlnové funkce

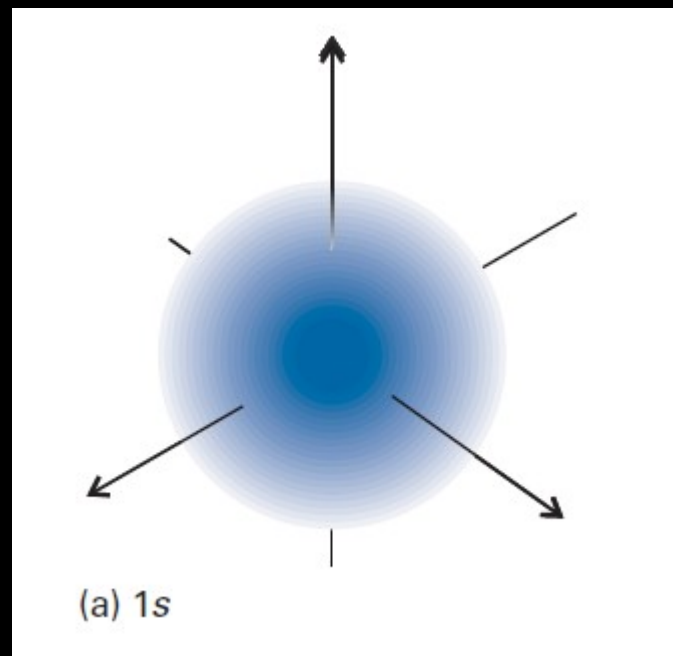
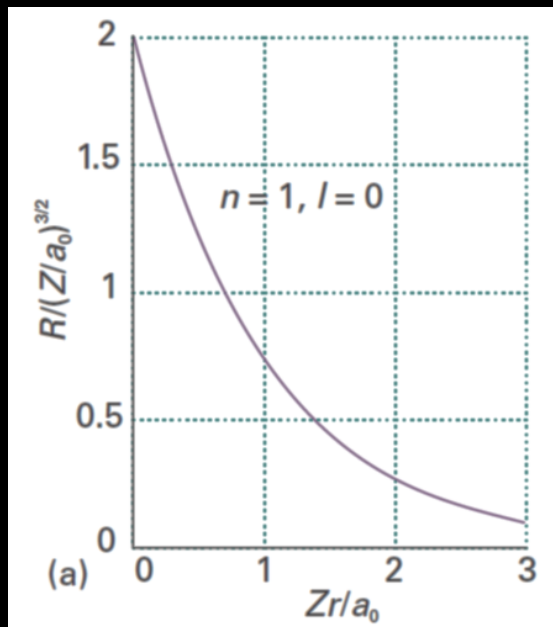


9.1.2.4 Slupky a podslupky

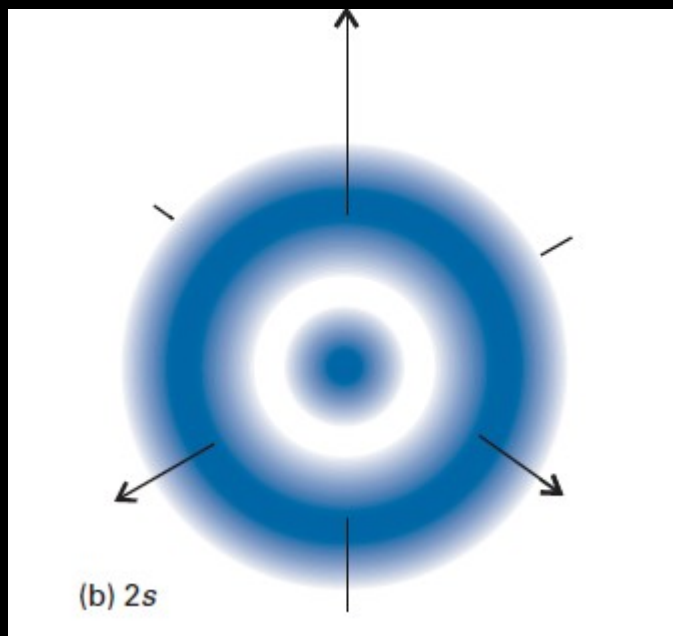
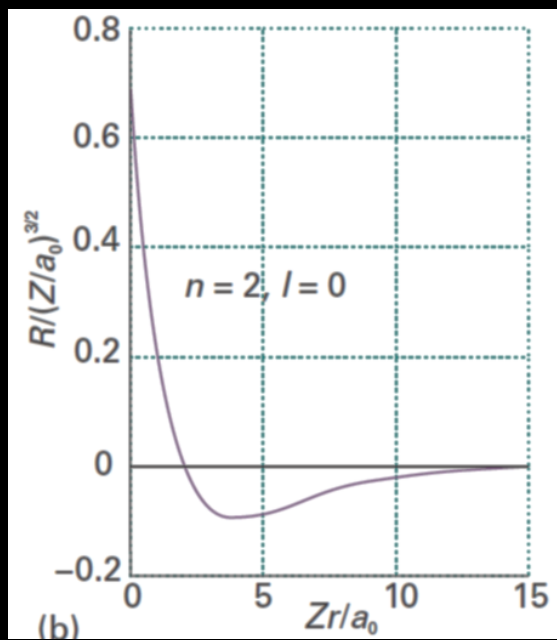


9.1.2.5 Orbitaly s

Obr.
9.4
a,b



Obr.
9.10



9.1.1.2/Obr. 9.4_d,e Radiální vlnové funkce

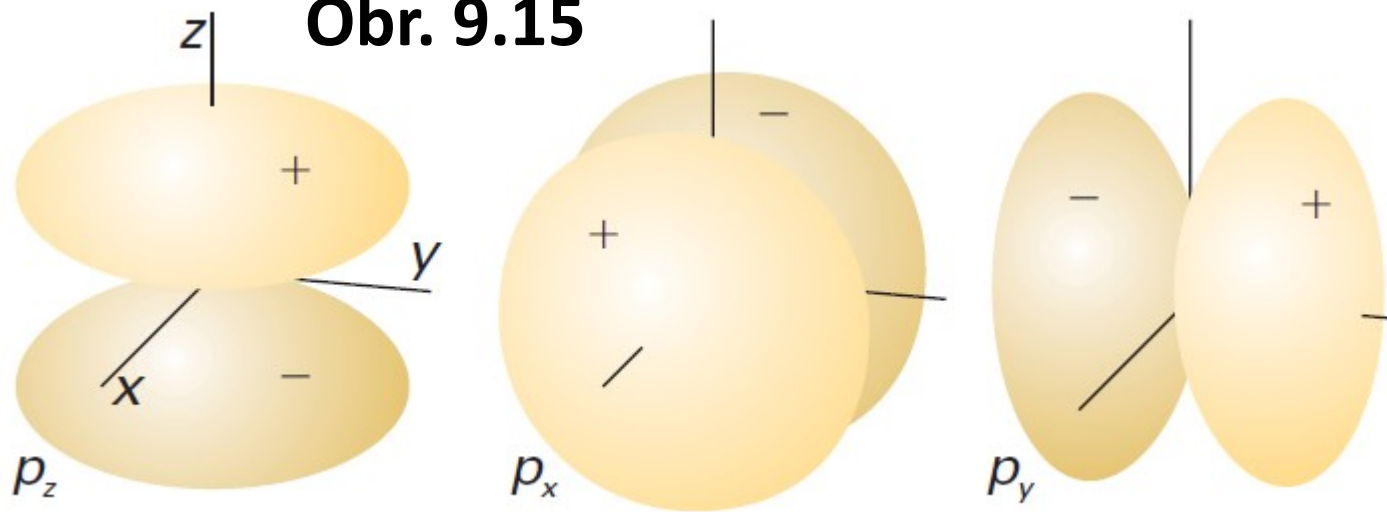


9.1.2.5 Orbitaly s

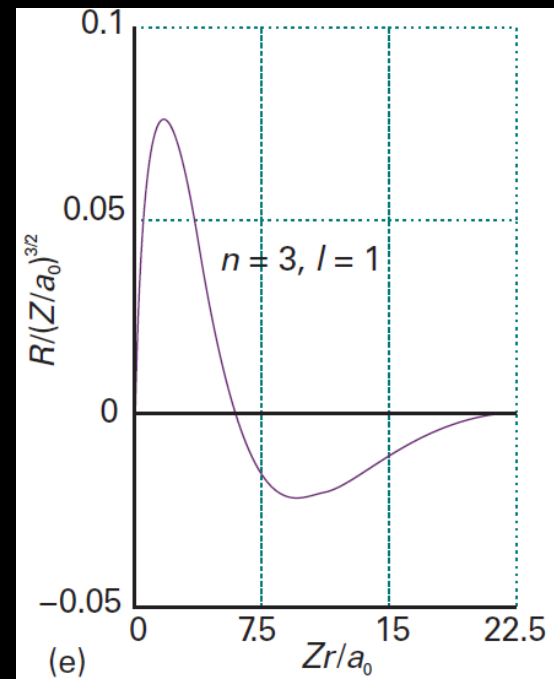
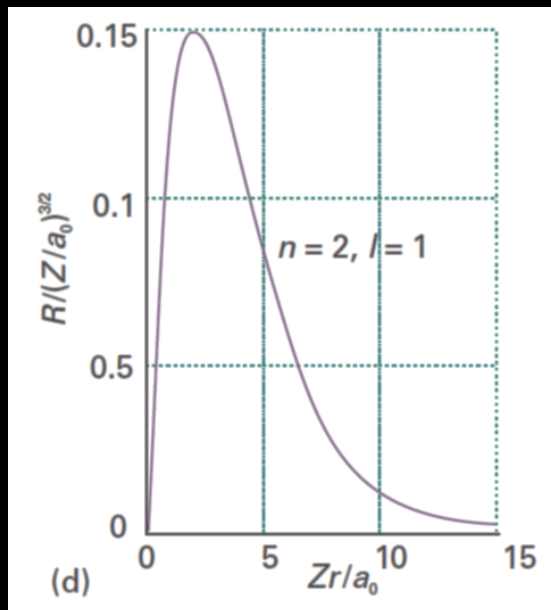


9.1.2.7 Orbitaly p

Obr. 9.15

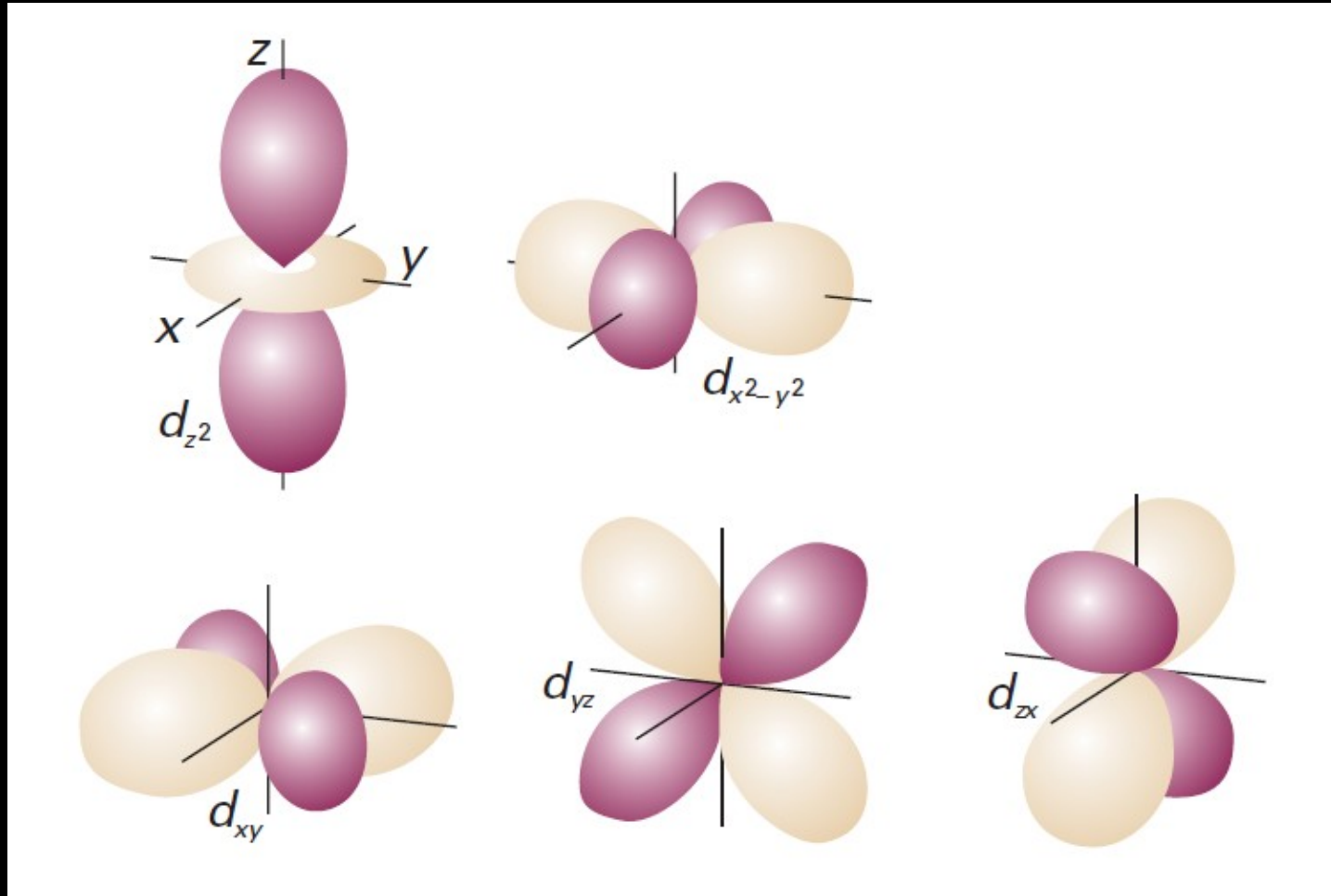


Obr. 9.4 c,d





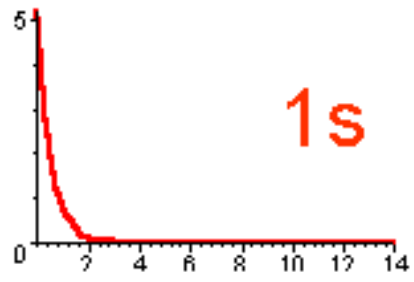
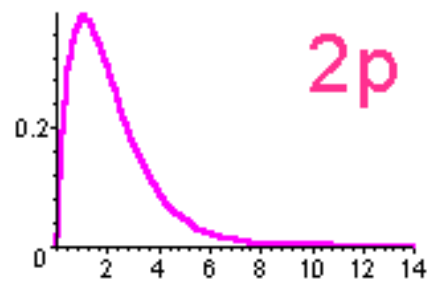
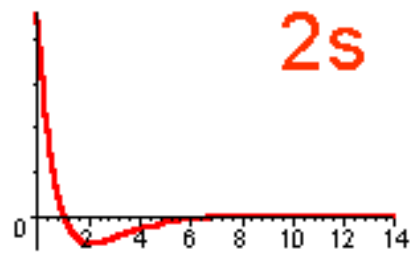
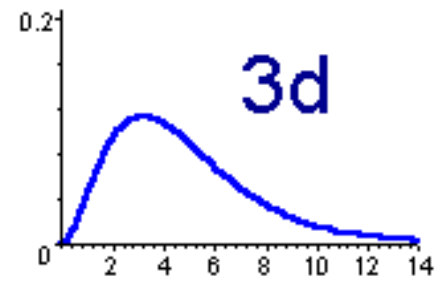
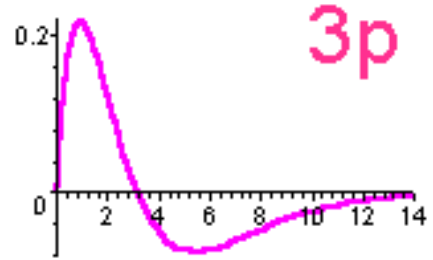
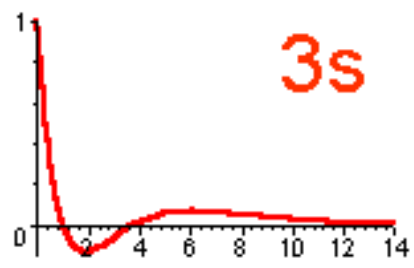
9.1.2.8/Obr. 9.16 Plochy konstantní hustoty pravděpodobnosti pro orbitaly d



9.1.1.1./Rovnice 9.7 Radiální a úhlová část vlnové funkce

$$\Psi = R(r) \times Y(\text{[redacted]})$$

Radiální část vlnové funkce, grafy



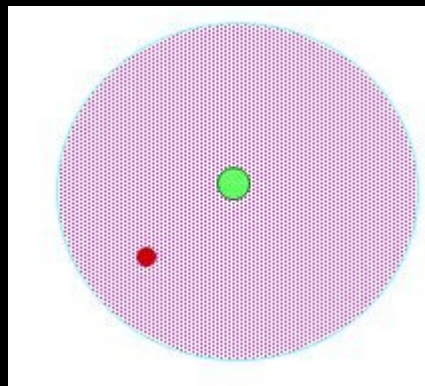
$r / 10^{-10} \text{ m}$



9.2 Struktura víceelektronových atomů

9.2.1 Orbitální aproximace

Vybraný e^-
interaguje
s časově
zprůměrovanou
hustotou
ostatních e^-



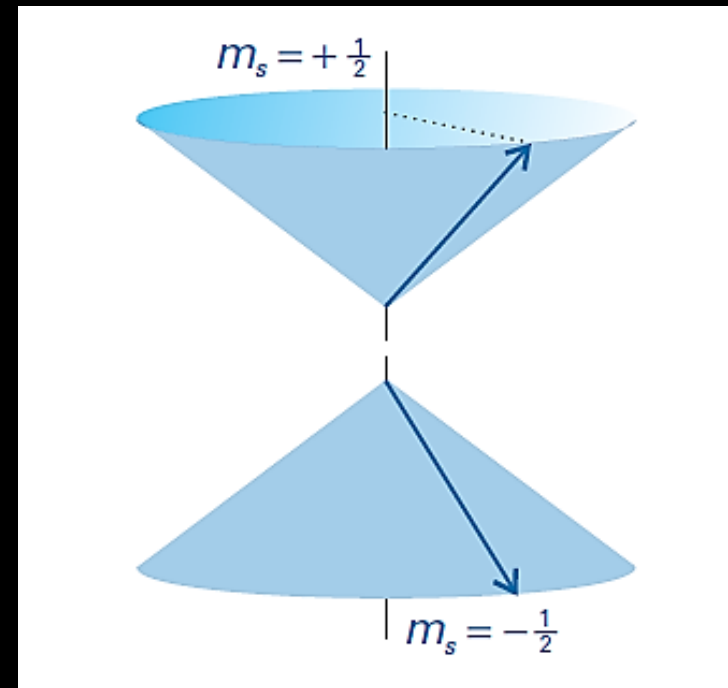
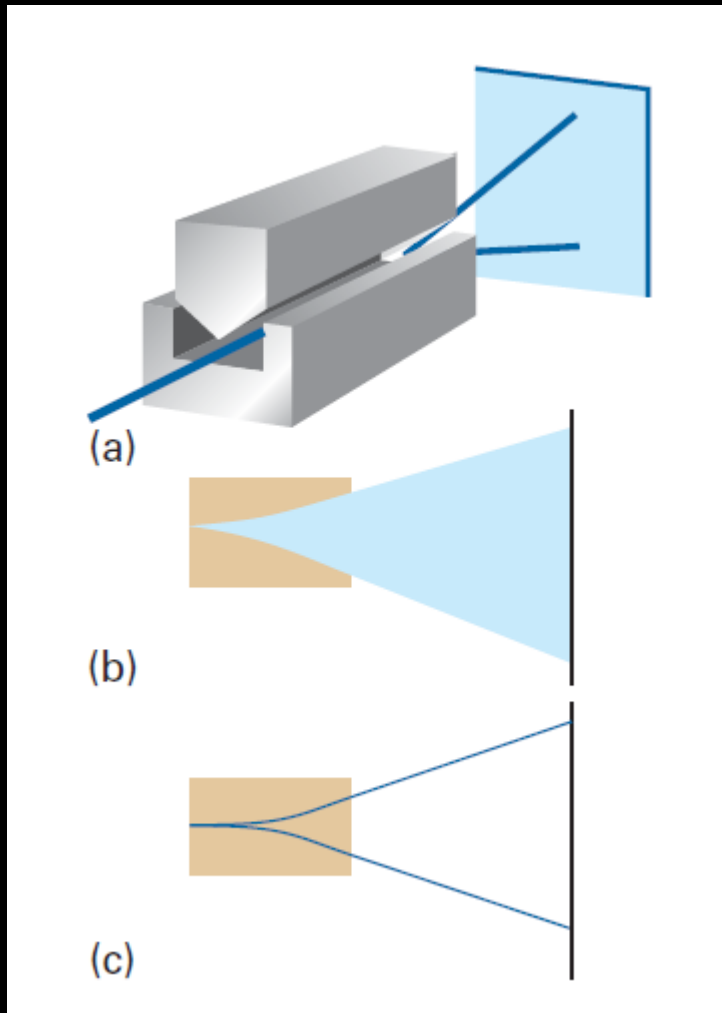
Skutečnost:



Znevýhodnění

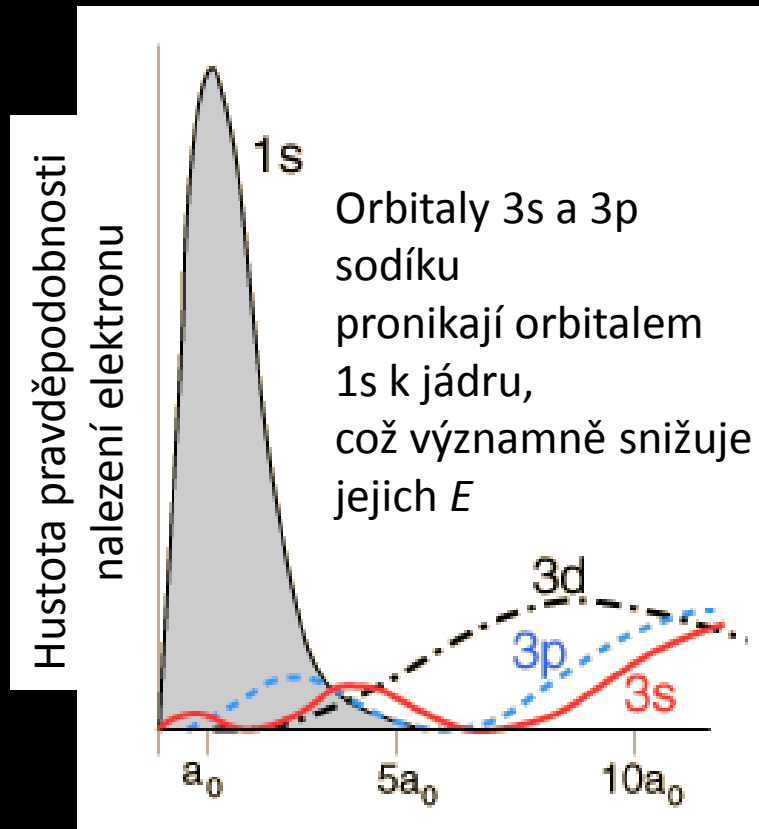
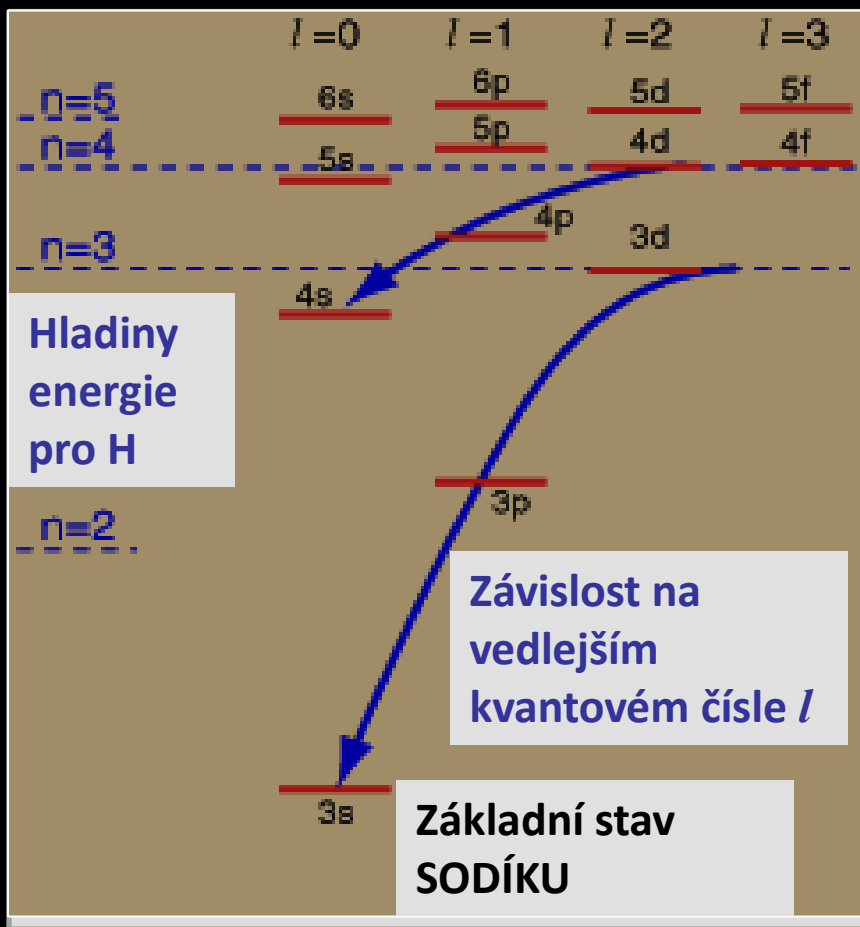
Zvýhodnění

8.3.3 Spin



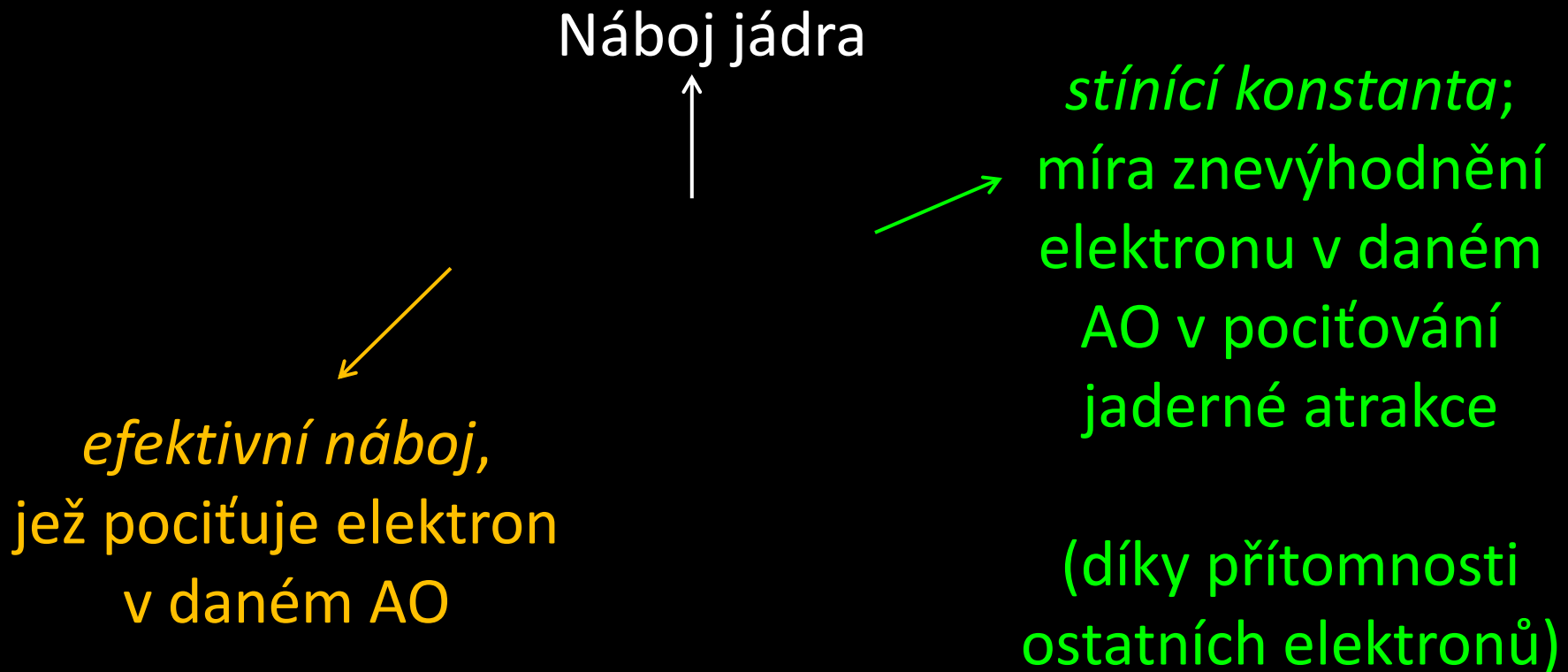
Hladiny energie pro jednotlivé AO

Víceelektronové atomy: Energie závisí na n a l !



Slaterova pravidla pro stínění AO

A. Pojem *efektivního náboje*



Slaterova pravidla pro stínění AO

B. Hierarchie AO dle stínících schopností

- Zápis el. konfigurace v pořadí rostoucího kvantového čísla n a poté l , rozdělení do skupin:

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



skupina 1 2 3 4 5 6 7 8 ...

- Každý elektron stíní všechny elektrony ve své skupině a nalevo od ní. Elektrony ve skupinách napravo **NESTÍNÍ**.
(ve Slaterových pravidlech vůbec, v přesnějších výpočtech málo).

Proč?

INTRODUCTION TO EFFECTIVE NUCLEAR CHARGE



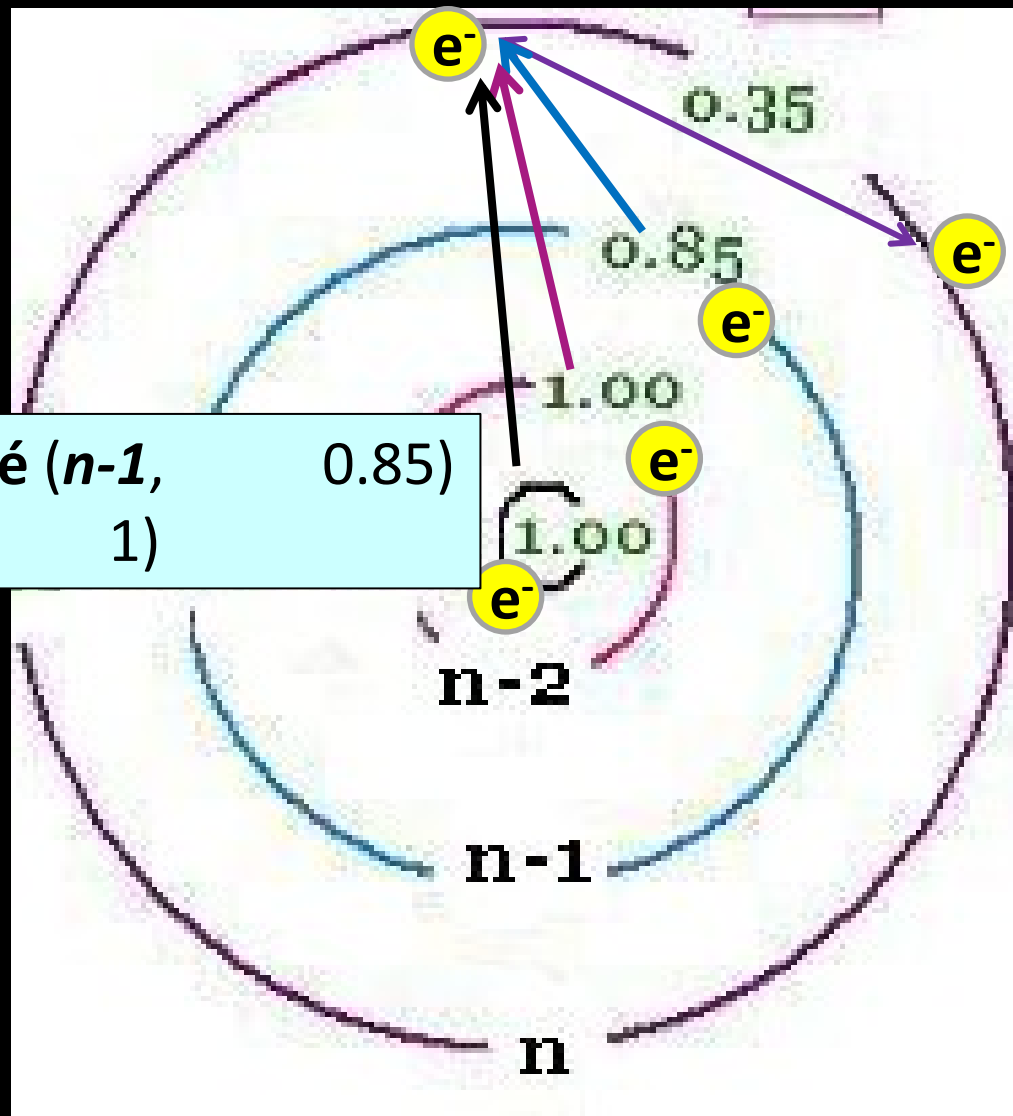
Čím dále se e^- v průměru od Nu nachází,
tj. čím vyšší je jeho n , tím více je znevýhodněn.
Naopak tím méně ovlivňuje elektrony v blízkosti jádra.

Slaterova pravidla pro stínění AO

C. Velikosti stínících příspěvků pro elektrony s, p



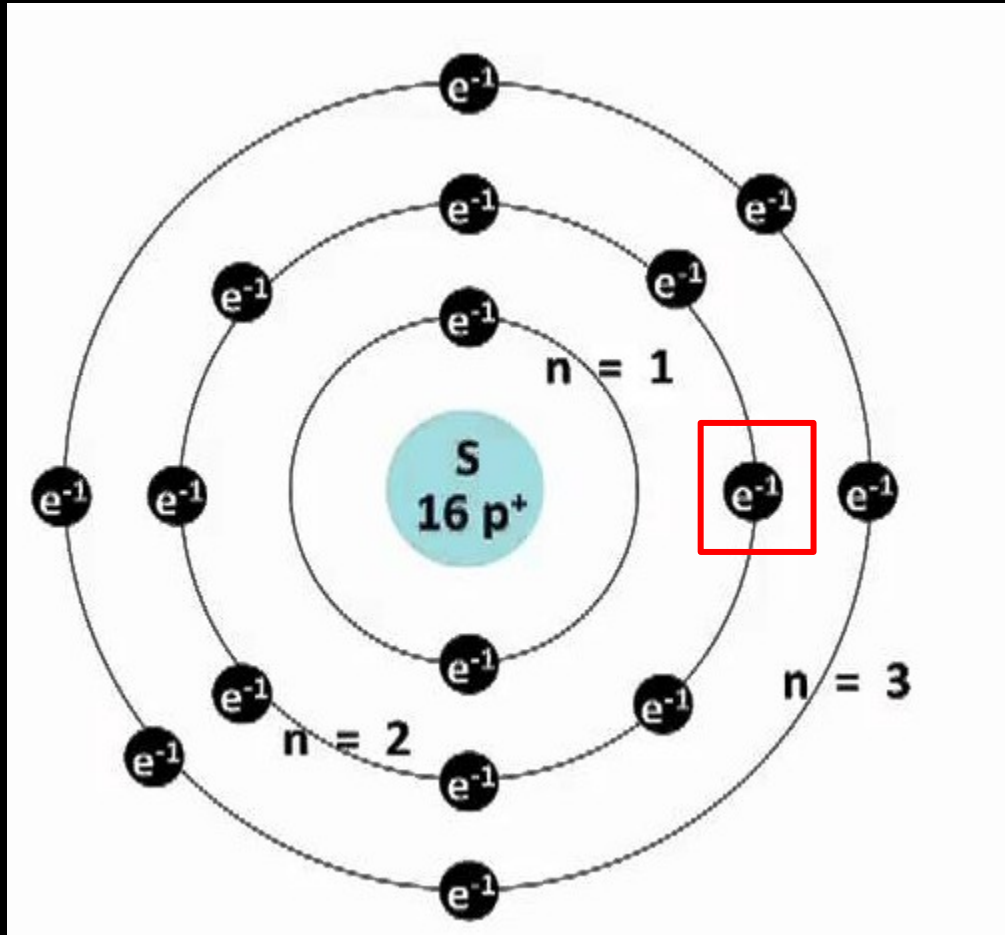
Slabé (stejné n ,	0.35)	Silné ($n-1$,	0.85)
Úplné ($n-2, n-3, \dots$,		1)	



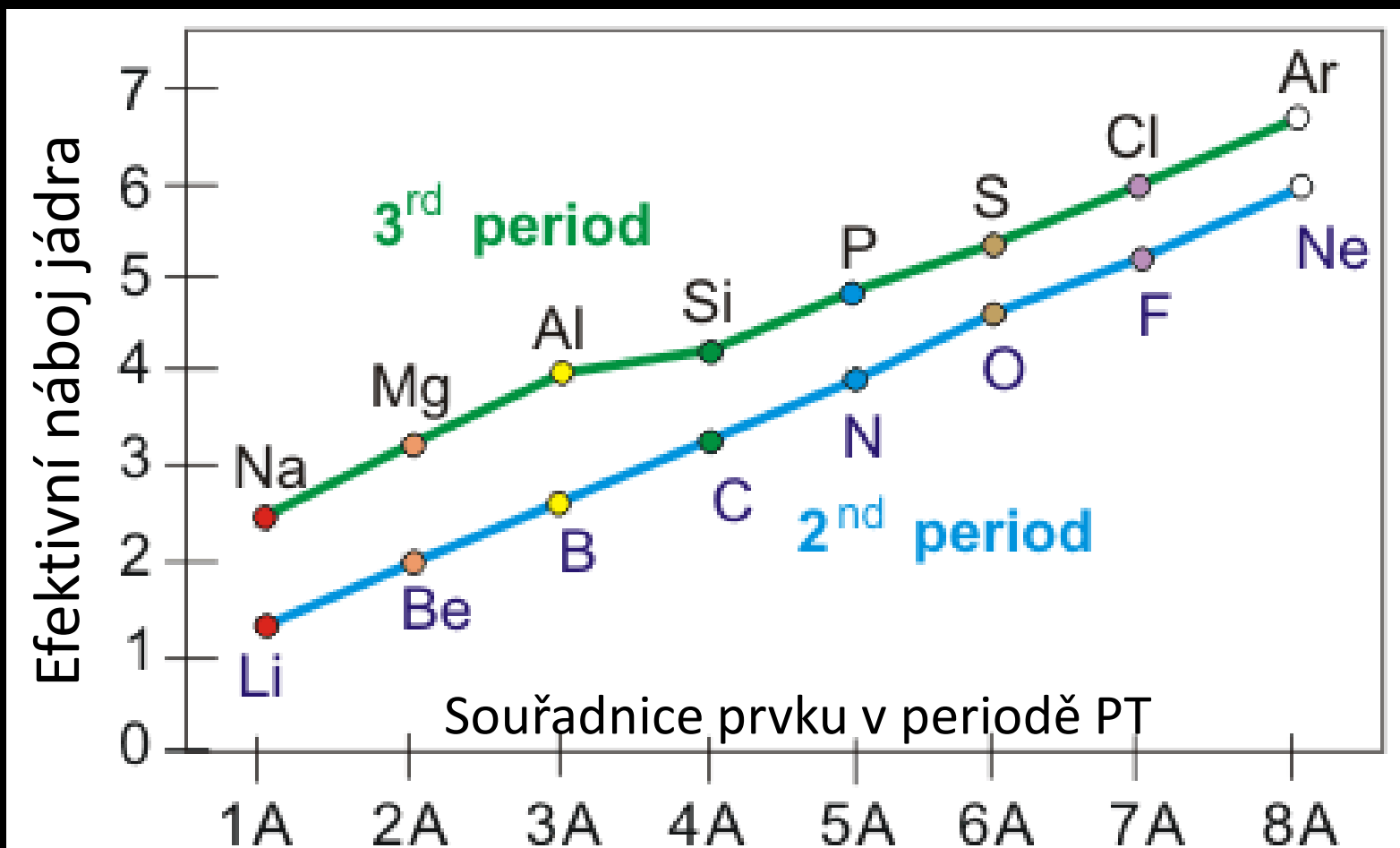
D. Sumace

Seminární příklad na výpočet Z^*

Jaké jsou
efektivní jaderné náboje,
pocítované
jednotlivými e^-
v atomu ${}_{16}\text{S}$?



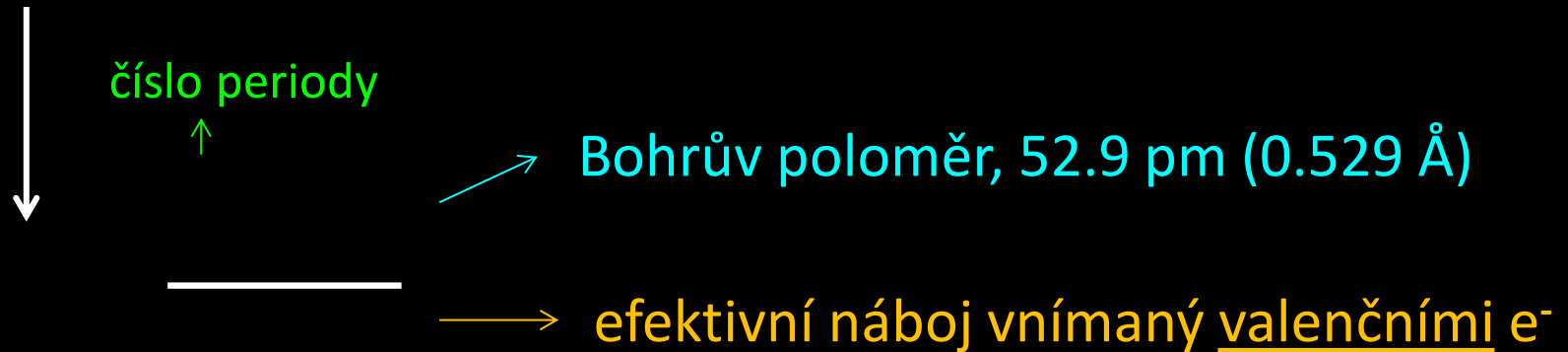
Slaterovy efektivní jaderné náboje & PT



Proč Z^* v periodách roste?

Proč prudce klesá na přelomu period?

Atomové poloměry podle Slatera a jejich využití



Vývoj kovalentních poloměrů v periodách pro prvky hlavních skupin

H 37							He 31
Li 152	Be 112	B 85	C 77	N 70	O 73	F 72	Ne 70
Na 186	Mg 160	Al 143	Si 118	P 110	S 103	Cl 99	Ar 98
K 227	Ca 197	Ga 135	Ge 123	As 120	Se 117	Br 114	Kr 112

Který prvek „vyčnívá“?