

## 8. Atomové orbitály - zadání

Vztahy:

$$\text{celková stínící konstanta } \sigma = \sum \sigma_i$$

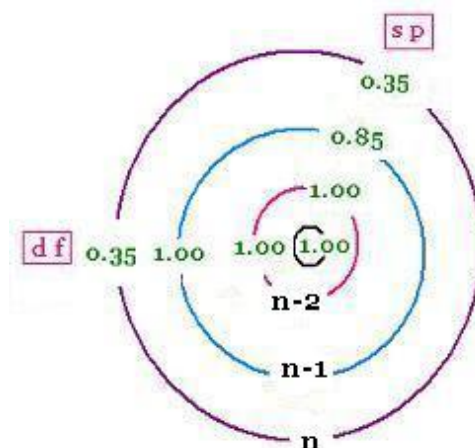
$$\text{efektivní náboj } Z^* = Z - \sigma$$

$$\text{orbitální poloměr } \rho = \frac{n^2 a_0}{Z^*}$$

Konstanty:

$$R_y = 13,6 \text{ eV}$$

$$\text{Bohrův poloměr } a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0,529 \text{ \AA}$$



Slaterova pravidla pro výpočet stínících konstant pro elektrony v s- a p-orbitalech:

Nachází-li se elektron v orbitalu	... ostatní elektrony z orbitalů s hlavním kvantovým číslem $n'$ přispívají k jeho stínění konstantou ...			
	$n' < n - 1$	$n' = n - 1$	$n' = n$	$n' > n$
1s	–	–	0,30	0
ns, np	1	0,85	0,35	0

Slaterova pravidla pro výpočet stínících konstant pro elektrony v d- a f-orbitalech:

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

Nachází-li se elektron ve Slaterově skupině ...	... vlevo ...	... stejné ...	... vpravo ...
... přispívá ke stínění elektronu v d- nebo f-orbitalu konstantou ...	1	0,35	0

Hodnoty efektivního hlavního kvantového čísla  $n^*$  pro 4., 5. a 6. periodu:

perioda	4.	5.	6.
$n^*$	3,7	4,0	4,2

Příklady:

Atomy s jedním elektronem (= atomy vodíkového typu)

- Uvažujte kation  $\text{He}^+$ . Vypočítejte degeneraci a energii obsazené hladiny a ionizační potenciál kationtu, nachází-li se kation v
  - základním stavu. [nedegenerovaný; -54,4 eV; 54,4 eV]
  1. excitovaném stavu. [4; -13,6 eV; 13,6 eV]
  2. excitovaném stavu. [9; -6,04 eV; 6,04 eV]
  3. excitovaném stavu. [16; -3,4 eV; 3,4 eV]

### Atomy s mnoha elektrony

2. Pro valenční elektrony s- a p-prvků 1.-5. periody vypočítejte

(i) stínící konstanty.

H 0							He 0,3
Li 1,7	Be 2,05	B 2,4	C 2,75	N 3,1	O 3,45	F 3,8	Ne 4,15
Na 8,8	Mg 9,15	Al 9,5	Si 9,85	P 10,2	S 10,55	Cl 10,9	Ar 11,25
K 16,8	Ca 17,15	Ga 26	Ge 26,35	As 26,7	Se 27,05	Br 27,4	Kr 27,75
Rb 34,8	Sr 35,15	In 44	Sn 44,35	Sb 44,7	Te 45,05	I 45,4	Xe 45,75

(ii) efektivní náboje.

H 1							He 1,7
Li 1,3	Be 1,95	B 2,6	C 3,25	N 3,9	O 4,55	F 5,2	Ne 5,85
Na 2,2	Mg 2,85	Al 3,5	Si 4,15	P 4,8	S 5,45	Cl 6,1	Ar 6,75
K 2,2	Ca 2,85	Ga 5	Ge 5,65	As 6,3	Se 6,95	Br 7,6	Kr 8,25
Rb 2,2	Sr 2,85	In 5	Sn 5,65	Sb 6,3	Te 6,95	I 7,6	Xe 8,25

(iii) orbitální poloměry v pm.

H 52,9							He 31
Li 163	Be 109	B 81	C 65	N 54	O 47	F 41	Ne 36
Na 216	Mg 167	Al 136	Si 115	P 99	S 87	Cl 78	Ar 71
K 329	Ca 254	Ga 145	Ge 128	As 115	Se 104	Br 95	Kr 88
Rb 385	Sr 297	In 169	Sn 150	Sb 134	Te 122	I 111	Xe 103

(iv) Jak se efektivní náboj a orbitální poloměr mění v periodě zleva doprava a na přelomu period?

3. Pro orbitály 3d titanu, 4d zirkonia a 5d lanthanu vypočítejte

(i) stínící konstanty. [Ti: 18,35; Zr: 36,35; La: 54]

(ii) efektivní náboje. [Ti: 3,65; Zr: 3,65; La: 3]

(iii) orbitální poloměry v pm. [Ti: 130,4 pm; Zr: 198,4 pm; La: 282,1 pm]