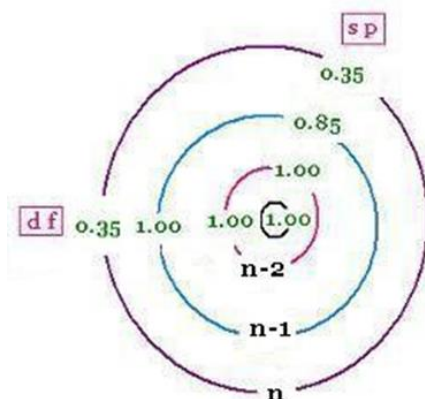


ATOMOVÉ ORBITALY

Konstanty: Rydberg: $Ry = 13.6 \text{ eV}$, Bohrov poloměr: $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0.529 \text{ \AA}$

Pozn. Ry není Rydbergova konstanta R_∞ , ale rydberg.



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	0.00
ns, np	1.00	0.85	0.35	0.00

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 skupiněvlevo...	...stejně...	...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

Úkol č. 4.1 (Atomy s jedním elektronem = atomy vodíkového typu)

Uvažujte kation He^+ . Vypočítejte degeneraci a energii obsazené hladiny E_i a ionizační energii (potenciál) kationtu E_i (IP), nachází-li se kation a) v základním stavu, b) v 1. excitovaném stavu, c) ve 2. excitovaném stavu a d) ve 3. excitovaném stavu. [a) deg = 0, $E_1 = -54.4$ eV, E_1 (IP) = 54.4 eV, b) deg = 4, $E_2 = -13.6$ eV, E_2 (IP) = 13.6 eV, c) deg = 9, $E_3 = -6.04$ eV, E_3 (IP) = 6.04 eV, d) deg = 16, $E_4 = -3.4$ eV, E_4 (IP) = 3.4 eV]

Úkol č. 4.2 (Slaterova pravidla, atomy s mnoha elektrony)

Pro valenční elektrony vybraných s a p prvků 1. – 4. periody vypočtete a) stínící konstanty σ , b) hodnotu efektivního náboje Z^* , c) orbitální poloměry ρ v pm a d) určete trendy v PTP, tzn. jak se mění efektivní náboj a orbitální poloměr v periodě zleva doprava a na přelomu period? V rámci domácího procvičování dopočítejte pro periodu 5 a 6. [viz řešení]

Úkol č. 4.3

Pro orbitály 3d titanu, 4d zirkonia a 5d lanthanu vypočtete a) stínící konstanty σ , b) hodnotu efektivního náboje Z^* , c) orbitální poloměry ρ v pm. [a) Ti: $\sigma = 18.35$, $Z^* = 3.65$, $\rho = 130.4$ pm, b) Zr: $\sigma = 36.35$, $Z^* = 3.65$, $\rho = 198.4$ pm, c) La: $\sigma = 54.00$, $Z^* = 3.0$, $\rho = 282.1$ pm].