

## ATOMOVÁ STRUKTURA

**Demokritos**, staré Řecko: “Veškerá hmota je tvořena malými neviditelnými částicemi, atomy.”

### Daltonova atomová teorie, 1807

- Všechny prvky jsou tvořené z velmi malých částic, které nazval atomy. (atoms (gr.) = nedělitelný).
- Atomy nemohou vznikat ani zanikat a jsou dále nedělitelné.
- Atomy stejného prvku jsou stejné, ale liší se od jiných prvků.
- Molekuly vznikají sloučením celistvých počtů stejných nebo různých atomů.

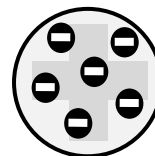
1. Které z těchto tvrzení neplatí?

### Thomsonův model atomu, 1899

V roce 1897 objevil Thomson ..... Na základě tohoto objevu navrhnul následující model atomu:

Atomy se skládají ze záporných elektronů umístěných v kladně nabitě kouli.

Záporné a kladné náboje jsou v rovnováze, proto jsou atomy .....

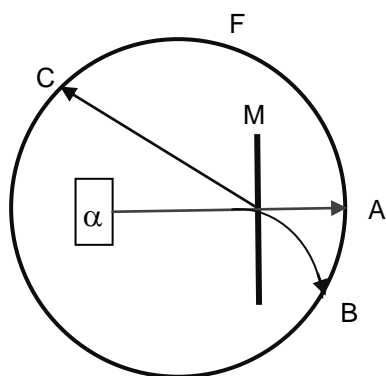


### Objev jádra, 1909

Geiger a Marsden bombardovali tenkou kovovou fólií  $\alpha$  částicemi ( $\text{He}^{2+}$  ionty).

Většina  $\alpha$  částic prošla fólií přímo nebo byly nepatrně vychýleny.

Některé  $\alpha$  částice se odrazily, protože narazily na částici s ..... hmotností a ..... nábojem, což bylo .....



$\alpha$  =

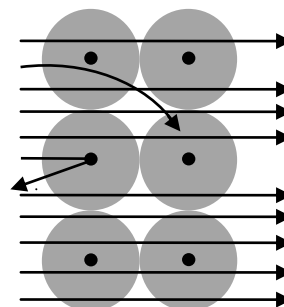
M = tenká kovová fólie ( $10^4$  atomů)

F = fluorescenční vrstva

A =

B =

C =



<http://www.mhhe.com/physsci/chemistry/essentialchemistry/flash/ruther14.swf>

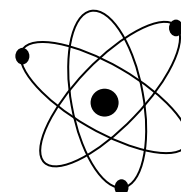
### Rutherfordův model, 1911

Většina hmotnosti atomu je soustředěna v ..... nabitým .....

Záporné elektrony se pohybují kolem jádra po ..... drahách.

Přitažlivá síla je v rovnováze se silou .....

Elektrony se chovají shodně s ..... principy  $\rightarrow$  planetární model.



Chadwick, 1932 objevil .....

### Bohrův model, 1913

Rutherfordův model nevyhovoval fyzikálním zákonům. Když elektron obíhá kolem jádra, vyzařuje elektromagnetické záření, jeho energie by klesala; elektron by se dostával blíže a blíže k jádru.

2. Co by se nakonec stalo?

Bohr předpokládal, že:

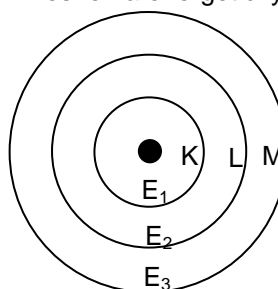
- Elektron se pohybuje kolem jádra po určitých drahách neboli orbitech.
- Elektron může vyzařít nebo přijmout energii, pouze když klesne na energeticky nižší hladinu nebo přeskočí na energeticky vyšší hladinu.

$$E_1 < E_2 < E_3 < \dots$$

$$\text{Bohrova rovnice: } E = -b/n^2,$$

$$\text{Pro atom vodíku: } b = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$n$  = hlavní kvantové číslo



Elektron může existovat pouze ve stavech s jistou energií a ta se může změnit po jistých dávkách, kvantech

Nicméně, Bohrův model a rovnice se dá uplatnit pouze u atomů s jedním elektronem (H, He<sup>+</sup>, Li<sup>2+</sup>).

## ELEKTRONOVÁ STRUKTURA

### **Kvantová mechanika, 1925 – 1927**

Elektrony mají duální charakter:

- **částicové vlastnosti**, např. hmotnost
- **vlnové vlastnosti**, například ohyb paprsku elektronů

⇒ **vlnově-korpuskulární dualismus** elektronu

- Je nemožné určit současně výskyt elektronu v atomu a jeho energii (Heisenbergův princip neurčitosti).
- Je možné vypočítat pravděpodobnost výskytu elektronu s danou energií v daném prostoru. (Schrödingerova rovnice).
- Energie elektronů je kvantována, může dosáhnout pouze určitých hodnot.
- Oblast v atomu s největší pravděpodobností výskytu elektronu s jistou (povolenou) hodnotou energie se nazývá **ORBITAL** (oblast s vysokou elektronovou hustotou).

### Kvantová čísla

Pro popis elektronu v atomu jako vlny potřebujeme tři čísla:  **$n$ ,  $l$ ,  $m$** . Všechna jsou to celá čísla, ale jejich hodnoty nemohou být zvoleny náhodně.

### 1. Hlavní kvantové číslo, $n = 1, 2, 3, \dots$

Určuje **energii elektronu**, také je mírou velikosti orbitalu. O dvou elektronech se stejnou hodnotou  $n$  se říká, že se nachází ve stejné **elektronové vrstvě (slupce)**.

$n$	1	2	3	4	5	6	7
Název slupky							

### 2. Vedlejší kvantové číslo, $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

Elektrony dané slupky mohou být seskupeny do podslupek; každé jsou charakterizovány odlišnou hodnotou  $l$ , která odpovídá odlišnému  **tvaru orbitalu**. Hodnota  $n$  určuje hodnoty  $l$ .

$n = 1 \Rightarrow l = \dots \Rightarrow \dots$  podslupka(y) ve slupce o  $n = 1$

$n = 2 \Rightarrow l = \dots \Rightarrow \dots$  podslupka(y) ve slupce o  $n = 2$

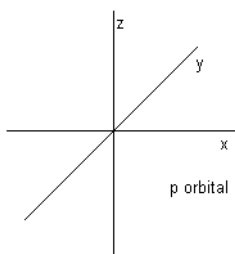
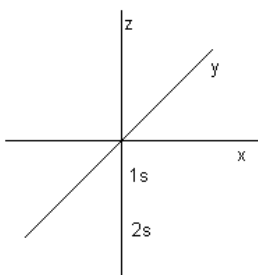
$n = 3 \Rightarrow l = \dots \Rightarrow \dots$  podslupka(y) ve slupce o  $n = 3$

$l$	0	1	2	3
Označení podslupky				

$s$  orbitaly ...kulovitý tvar

$p$  orbitaly...tvar prostorové osmičky

$d$  orbitaly ... složitější tvar

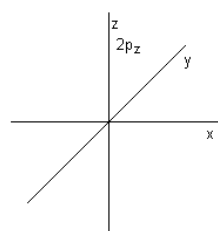
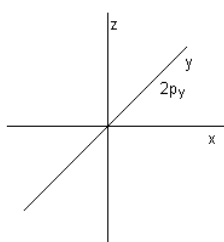
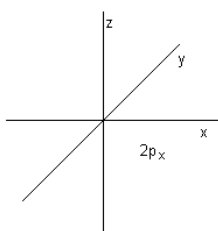


### 3. Magnetické kvantové číslo, $m = \{-l, \dots, 0, \dots, l\}$

Orbitaly v určité podslupce se liší pouze orientací v prostoru. Počet hodnot  $m$  pro danou podslupku ( $= 2l + 1$ ) určuje počet orientací, které existují pro orbitaly podslupek a tedy i počet orbitalů v podslupce.

$s$  orbital:  $l = 0 \Rightarrow m = \{\dots\}$ , ... hodnota  $m \Rightarrow$  pouze ...  $s$  orbital v každé slupce

$p$  orbitaly:  $l = 1 \Rightarrow m = \{\dots\}$ , ... hodnoty  $\Rightarrow$  ...  $p$  orbitaly:  $p_x, p_y, p_z$



$d$  orbitaly:  $l = 2 \Rightarrow m = \{ \dots \}$ , ... hodnot  $\Rightarrow$  ...  $d$  orbitalů

$f$  orbitaly:  $l = 3 \Rightarrow m = \{ \dots \}$ , ... hodnot  $\Rightarrow$  ...  $f$  orbitalů

Orbitaly se stejnými hodnotami  $n$  a  $l$  = **degenerované orbitaly**. Mají stejnou energii.

DÚ: Pokuste se vyrobit z nejrůznějších materiálů (papír, balonek, modurit...) modely orbitalů.

3. Doplňte následující tvrzení:

- Když  $n=2$ , hodnoty  $l$  mohou být \_\_\_ a \_\_\_ .
- Když  $l=1$ , hodnoty  $m$  mohou být \_\_\_ , \_\_\_ a \_\_\_ ; podslupka je označena písmenem \_\_\_ .
- Když  $l=2$ , podslupka se značí \_\_\_ .
- V podslupce  $s$  je hodnota  $l$  \_\_\_ a hodnota  $m$  \_\_\_ .
- Když je podslupka označena  $p$ , \_\_\_ orbital(y)(ů) se nachází v této podslupce.
- Když je podslupka označena  $f$ , existuje \_\_\_ hodnot  $m$  a \_\_\_ orbitalů se vyskytuje v této podslupce.

4. Jaké jsou hodnoty  $n$  a  $l$  pro každý z následujících orbitalů:  $6s$ ,  $4p$ ,  $5d$  a  $4f$ ?

5. Které z následujících trojic kvantových čísel mohou patřit jednomu elektronu?

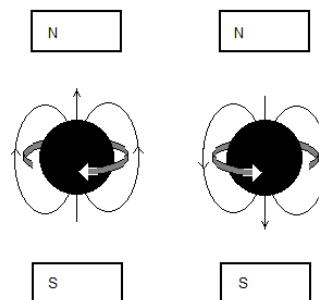
- |                      |                     |                      |
|----------------------|---------------------|----------------------|
| a. $n=5, l=2, m=0$   | d. $n=1, l=1, m=-1$ | g. $n=1, l=1, m=0$   |
| b. $n=4, l=-3, m=-3$ | e. $n=2, l=1, m=1$  | h. $n=0, l=-1, m=-1$ |
| c. $n=0, l=0, m=0$   | f. $n=1, l=2, m=2$  | i. $n=2, l=1, m=2$   |

#### 4. Spinové číslo (spin), $s = -\frac{1}{2}$ nebo $+\frac{1}{2}$

$n, l, m$  definují elektronový orbital.

$s$  – spinové číslo vyjadřuje chování elektronu v magnetickém poli. Je to rotace po směru hodinových ručiček ( $s = \frac{1}{2}$ ) nebo proti směru hodinových ručiček ( $s = -\frac{1}{2}$ ).

$\Rightarrow$  elektrony jsou vyjádřeny šipkami nahoru ( $\uparrow$ ) nebo dolů ( $\downarrow$ ).



#### Pauliho princip výlučnosti:

Žádné dva elektrony ve stejném atomu nemohou mít stejná všechna čtyři kvantová čísla.

Maximální počet elektronů v jakémkoliv orbitalu jsou dva elektrony a pokud se nachází dva elektrony v jednom orbitalu, liší se spinem.

Zápis pro dva elektrony v jednom orbitalu je:  $\uparrow\downarrow$

6. Jaký je maximální počet elektronů, které se mohou vyskytovat v plně obsazeném souboru:

- $s$ -orbitalů
- $p$ -orbitalů
- $d$ -orbitalů
- $f$ -orbitalů



### Hundovo pravidlo

Elektrony obsazují degenerované orbitály (o stejné energii) nejprve po jednom, se stejným spinem.

11. Rozhodněte, který z následujících zápisů je správný:

- a. 

↓↑	↓↑	↑	↑	↑
----	----	---	---	---
- b. 

↓↑	↓	
----	---	--
- c. 

↓	↓	↓	↓			
---	---	---	---	--	--	--
- d. 

↑	↓	↓	↓	↓	↓	↓
---	---	---	---	---	---	---

12. Zapište šipky (elektrony) do rámečkových diagramů následujících prvků a zapište jejich elektronové konfigurace.

- |    | 1s                       | 2s                       | 2p   |   |
|----|--------------------------|--------------------------|--|---|
| H  | <input type="checkbox"/> |                          |  | Jediný elektron vodíku je v 1s orbitalu, protože má ..... energii.  |
| He | <input type="checkbox"/> |                          |  | Dva elektrony helia mají ..... spin v souladu s ..... principem.  |
| Li | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |  | Třetí elektron lithia nemůže být v 1s orbitalu. Podle Pauliho principu výlučnosti jsou v každém orbitalu maximálně ..... elektrony. Třetí elektron je v orbitalu s druhou nejnižší energií: v ..... |
| Be | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |  |   |
| B  | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> | Pátý elektron boru je v ..... podslupce. Může být v kterémkoli z jejich orbitalů, protože mají stejnou .....  |
| C  | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> | Pátý a šestý elektron uhlíku nemohou být podle ..... pravidla ve stejném orbitalu a mají ..... spin.  |
| N  | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> |   |
| O  | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> |   |
| F  | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> |   |
| Ne | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> |   |

Zápis elektronové konfigurace neobsahuje pouze symboly podslupek ale také počet elektronů v každé podslupce.

13. Nakreslete rámečkový diagram orbitalů křemíku  ${}_{14}\text{Si}$  a zapište jeho elektronovou konfiguraci.
14. Zapište elektronovou konfiguraci vanadu ( $Z=23$ ) a znázorněte tuto konfiguraci do diagramu, který znázorňuje, jak se elektrony párují.
15. Napište elektronovou konfiguraci polonia ( $Z=84$ ).
16. Napište elektronové konfigurace pro:  ${}_{28}\text{Ni}$ ,  ${}_{51}\text{Sb}$ ,  ${}_{32}\text{Ge}$  and  ${}_{11}\text{Na}$ .

17. Napište a porovnejte elektronovou konfiguraci hořčíku a vápníku. Porovnejte elektronovou konfiguraci lithia a sodíku. Jaký je vztah mezi umístěním prvku v tabulce a jeho elektronovou konfigurací?

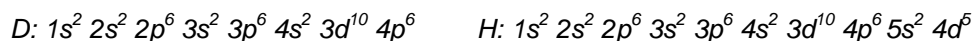
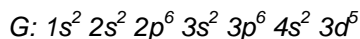
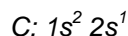
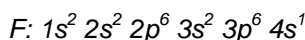
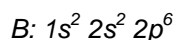
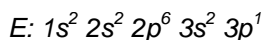
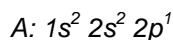
### Elektronová konfigurace prvku a Periodická soustava prvků

Periodická soustava prvků byla zavedena v roce 1896 ruským chemikem ..... Skládá se z:

- vertikálních .....; číslo skupiny odpovídá počtu ..... v poslední vrstvě.
- horizontálních .....; číslo periody odpovídá počtu ....., tedy ..... kvantovému číslu (n) poslední slupky.

**Valenční elektrony** = elektrony z poslední vrstvy + d nebo f elektrony z předchozí vrstvy, v tom případě, že jejich orbitály *jsou/nejsou* zcela zaplněny. Valenční elektrony určují ..... vlastnosti prvku.

18. Níže jsou uvedeny elektronové konfigurace prvků A – H (tato písmena nepředstavují chemické značky prvků):



- Podtrhněte jejich valenční elektrony a zakreslete je do rámečkových diagramů.
- Odhadněte, které prvky jsou v téže skupině periodické tabulky.
- Umístěte prvky do tabulky.

	I.A																		VIII.A	
1		II.A																		
2																				
3																				
4																				
5																				
6																				
7																				

Periodická tabulka je rozdělena do ..... bloků. Prvky v témže bloku mají podobné vlastnosti. Mají také podobné elektronové konfigurace.

**s - prvky: I.A and II.A skupina**

Konfigurace valenčních elektronů:

**p - prvky: III.A – VIII.A skupina**

Konfigurace valenčních elektronů:

**d - prvky: přechodné kovy**

Tyto prvky mají částečně zaplněné ..... orbitály, obecná elektronová konfigurace valenčních elektronů je:  $ns^2 (n-1)d^{\dots}$ .

**f - prvky: lanthanoidy and aktinoidy**

Tyto prvky mají částečně zaplněné ..... orbitály, obecná elektronová konfigurace valenčních elektronů je:  $ns^2 (n-2)f^{\dots}$

19. Označte v tabulce na předchozí straně čtyři bloky prvků s, p, d, f.

**Vytvoření elektronové konfigurace pomocí periodické soustavy prvků**

20. Odvodte elektronovou konfiguraci bromu s pomocí periodické tabulky.

Br:

21. Napište s pomocí periodické tabulky elektronovou konfiguraci:

- zinku
- india
- olova
- caesia
- niobu.



### Zápis elektronové konfigurace prvku s pomocí vzácného plynu

Zápis elektronové konfigurace atomu může být zkrácen použitím konfigurace vzácného plynu.

Např.  ${}_{19}\text{K}$ :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$  může být zkráceno na:  ${}_{19}\text{K}$ : ..... , protože  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$  je zcela zaplněná konfigurace vzácného plynu .....

22. Zapište s pomocí tabulky zkrácený zápis elektronové konfigurace:

- wolframu
- vápníku
- bismutu
- europia

### Excitovaný stav

Má-li atom své elektrony v energeticky nejnižších stavech, říkáme, že je v ..... stavu.

23. Co se stane, když budeme atomu dodávat energii?

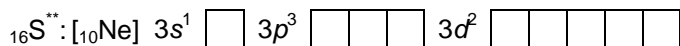
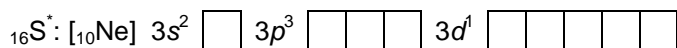
O atomu, který je v energeticky vyšším stavu, než je stav základní, říkáme, že je ve stavu ..... Pro jeden atom existuje velký počet možných excitovaných stavů, nejvýznamější jsou ..... **excitované stavy** – přeskok elektronu se uskuteční v rámci valenční vrstvy, elektron z energeticky ..... orbitalu skočí do prázdného energeticky ..... orbitalu. Počet nepárových elektronů se *zvýší/sníží*.

Valenční excitované stavy mají významnou roli při vytváření vazeb.

Např: atom uhlíku v jeho základním a excitovaném stavu:



Některé atomy mají více valenčních excitovaných stavů.



Některé atomy nemají žádný excitovaný stav, např. fluor nemá ve valenční vrstvě *d* orbitály.



24. Napište elektronovou konfiguraci a rámečkový diagram:

- $\text{B}^*$
- $\text{Si}^*$
- $\text{Al}^*$
- $\text{P}^*$

25. Existují valenční excitované stavy dusíku, germánia a kyslíku?

26. V kolika možných valenčních excitovaných stavech se může vyskytovat atom chloru?

Zakreslete jejich rámečkové diagramy.

### Vznik iontu

27. Co se stane, budeme-li atomu dodávat stále další a další energii?

28. Jakým způsobem může atom získávat energii?

Energie potřebná na odtržení elektronu z atomu v plynné fázi se nazývá .....

První ionizační energie  $I_1$ :  $M(g) \rightarrow e^- + \dots$

Druhá ionizační energie  $I_2$ :  $M^+(g) \rightarrow e^- + \dots$

Druhá ionizační energie je vždy vyšší/nížší než  $I_1$  protože..... Čím nižší/vyšší ionizační energie, tím snadněji se tvoří kation.

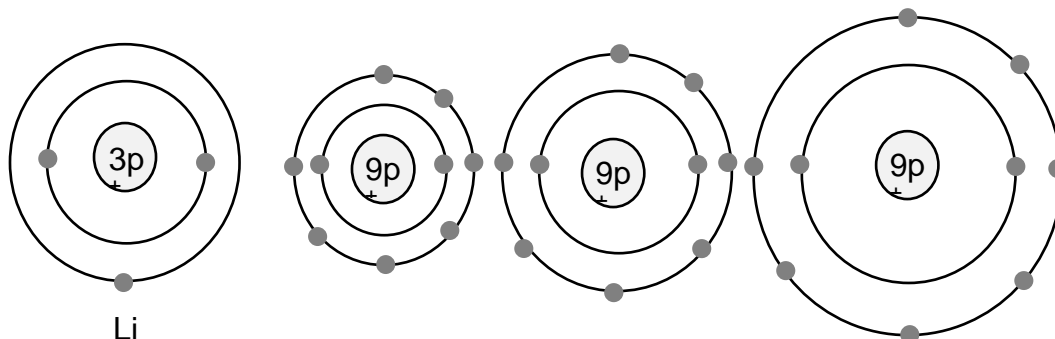
### Trendy v periodické soustavě prvků:

29. Nakreslete Bohrovův model atomu lithia a atomu draslíku.

30. Je jednodušší odtrhnout valenční elektron z atomu lithia nebo z atomu draslíku? Proč?

Závěr: Směrem dolů v tabulce se ionizační energie zvyšuje/snižuje.

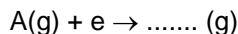
31. Na obrázku dole vidíte model atomu lithia. Porovnej velikosti atomů a navrhní, který z dalších tří modelů by mohl být modelem atomu fluoru. Zdůvodni svou odpověď.



32. Je jednodušší odtrhnout valenční elektron z lithia nebo fluoru? Proč?

Závěr: Ionizační energie se zvyšuje/snižuje v periodě zleva doprava.

Když atom přijme elektron, uvolňuje se energie. Její množství je vyjádřeno .....  
 ..... (EA)



Čím vyšší EA tím snadněji se vytvoří .....

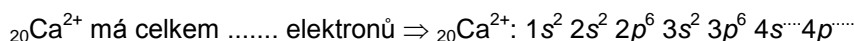
33. Vyberte správná slova v textu na základě obrázků viz výše.

Směrem dolů ve skupině atom *snadněji/obtížněji* přijímá elektron a proto elektronová afinita *roste/klesá* směrem dolů ve skupině..

Směrem zleva doprava v periodě atom *snadněji/obtížněji* přijímá elektron a proto elektronová afinita směrem zleva doprava v periodě *roste/klesá*.

### Elektronová konfigurace iontů

34. Napište elektronovou konfiguraci  ${}_9F^-$  a  ${}_{20}Ca^{2+}$ .



35. První ionizační energie lithia je 520 kJ/mol, sodíku 500, draslíku 420, rubidia 400 a cesia 380 kJ/mol. Vysvětlete, proč se ionizační energie snižuje s rostoucím protonovým číslem.

36. V tabulce jsou uvedeny ionizační energie (v kJ/mol) šesti prvků A, B, C, D, E, F.

Prvek	$I_1$	$I_2$	$I_3$	$I_4$	Číslo skupiny
A	500	4600	6900	9500	
B	420	3100	4400	5900	
C	740	1500	7700	10500	
D	900	1800	14800	21000	
E	580	1800	2700	11600	
F	710	1450	3100	4100	

- Odhadněte pozici prvku (číslo skupiny) v periodické tabulce.
- Který z prvků nejpravděpodobněji tvoří ion s nábojem 3+?
- Který z prvků potřebuje nejméně energie na vytvoření iontu s nábojem 2+?

37. Napište elektronovou konfiguraci následujících částic:  $Al^{3+}$ ,  $Li^+$ ,  $F^-$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $O^{2-}$ ,  $S^{2-}$  a  $Cl^-$ .

**Otázky:**1. *Doplň chybějící slova:*

Místo v atomu, kde můžeme s největší pravděpodobností nalézt elektron s určitou energií, se nazývá

.....

Elektron v atomu je popsán čtyřmi .....

První tři popisují ..... čtvrté popisuje chování elektronů v ..... poli.

Hlavní kvantové číslo se značí ..... a určuje ..... elektronu, popisuje také velikost orbitalu. O dvou elektronech s tímtéž hlavním kvantovým číslem říkáme, že jsou ve stejné .....

Elektrony téže slupky jsou rozděleny do .....; každá je charakterizována různou hodnotou ..... kvantového čísla, které se značí ..... Určuje ..... orbitalu.

Když  $l = 0$ , orbital má tvar ..... a značí se písmenem ..... Když  $l = 1$ , orbital má tvar ..... a značí se písmenem ..... Když  $n = 3$ ,  $l$  může nabývat hodnot ....., ....., a ....., což znamená, že ve třetí vrstvě mohou být orbitaly ....., ..... a .....

..... kvantovým číslem se popisuje orientace orbitalu v prostoru. Počet hodnot tohoto kvantového čísla pro dané  $l$  lze vypočítat jako: .....

Podslupka  $d$  má hodnotu  $l = \dots$ , její  $m$  může nabývat hodnot ....., což znamená, že v této podslupce se vyskytuje ..... orbitalů.

Orbitaly s totožnými hodnotami  $n$  a  $l$  se nazývají ..... orbitaly. Mají stejnou .....

Chování elektronu v magnetickém poli popisuje číslo ..... Nabývá hodnot buď ..... nebo .....

V podslupce  $l = 1$  může být maximálně ..... elektronů, ve třetí slupce může být maximálně ..... elektronů.

2. *Které z těchto symbolů orbitalů jsou chybné? 5s, 4d, 3f, 2p*3. *Zapiš s pomocí periodické tabulky a vzácného plynu elektronové konfigurace:*

- a. kyslíku
- b. jódu
- c. hořčíku
- d. draslíku
- e. uhlíku
- f. vodíku
- g. bismutu
- h. železa
- i. technecia

*Podtrhni jejich valenční elektrony a zakresli jejich rámečkové diagramy.*

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

4. Které z elektronových konfigurací patří prvkům z VI. skupiny periodické tabulky?
- a.  $1s^2 2s^2 2p^2$                       c.  $[Ar] 4s^2 3d^6$                       e.  $[Kr] 5s^2$   
b.  $1s^2 2s^2 2p^4$                       d.  $[Ar] 4s^2 3d^{10} 4p^6$                       f.  $[Xe] 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^4$
5. Jaká částice je tvořena 13 protony, 10 elektrony a 14 neutrony?
6. Napiš elektronové konfigurace:
- a.  $Sb^{3+}$   
b.  $Se^{2-}$   
c.  $Br^-$   
d.  $C^*$   
e.  $Al^*$
7. Vysvětli pojem: „první ionizační energie sodíku“.
8. Napiš rovnice k následujícím veličinám:
- a. první ionizační energie draslíku  
b. elektronová afinita chloru  
c. třetí ionizační energie hliníku
9. Porovnej první ionizační energii Li and B.
10. Porovnej  $EA(Cl)$  a  $EA(I)$