

# Kvantově mechanický model atomu

## Elektronová konfigurace v atomu

Elektron má částicové i vlnové vlastnosti - korpuskulárně vlnový dualismus. Záleží jen na pokusu, kterým se zjišťuje chování částice:

- fotony se chovají jako částice, kvanta (např. světelné energie)
- elektrony mohou vykazovat vlnové vlastnosti

Existence přesně vymezených trajektorií elektronů v obalu však odporuje představám kvantové fyziky. Podle ní není možné přesně určit polohu elektronu v okolí jádra atomu. V důsledku vztahů neurčitosti není možné určit přesný popis polohy elektronu v obalu atomu, proto se musíme omezit na pravděpodobnostní popis polohy. Lze pouze vyjádřit pravděpodobnost, s jakou se elektron vyskytuje v určitém bodu prostoru.

**Oblasti s největší pravděpodobností výskytu elektronu v obalu se označují jako atomové orbitaly.**

Stav částice (popř. systému částic) je vyjádřen pomocí její vlnové funkce a je možné tento stav vypočítat pomocí Schrödingerovy rovnice. Její řešení v trojrozměrném prostoru vede na problém tří kvantových čísel, které popisují orbital:

hlavní kvantové číslo  $n$   
vedlejší kvantové číslo  $l$   
magnetické kvantové číslo  $m_l$

Vlastnosti elektronu v orbitalu pak popisuje čtvrté kvantové číslo:

magnetické spinové kvantové číslo  $m_s$

Orbital a elektron v něm ( tj. vlnovou funkci elektronu) charakterizují tedy celkem **čtyři kvantová čísla**:

kvantové číslo	značka	hodnoty	význam
hlavní kvantové číslo	$n$	přirozená čísla 1,2,3,4,.....	určuje energii orbitalu, také popisuje vzdálenost orbitalu od atomového jádra
vedlejší kvantové číslo	$l$	0,1,2,3,4,.... až $n-1$	určuje tvar atomového orbitalu, dále upřesňuje energii orbitalu
magnetické kvantové číslo	$m_l$	$-l, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, +l$	popisuje počet orbitalů daného typu, dále upřesňuje energii orbitalu
magnetické spinové kvantové číslo	$m_s$	$+\frac{1}{2}$ nebo $-\frac{1}{2}$	spin je vnitřní vlastností elektronu, určuje "rotaci" elektronu

Stav elektronu v obalu je popsán pomocí čtyř kvantových čísel. První tři čísla jsou celočíselná a popisují vlastnosti příslušného atomového orbitalu.

## Vedlejší kvantové číslo:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

Vedlejší kvantová čísla jsou vyjádřena také písmeny

$$l = 0 \quad s$$

$$l = 1 \quad p$$

$$l = 2 \quad d$$

$$l = 3 \quad f$$

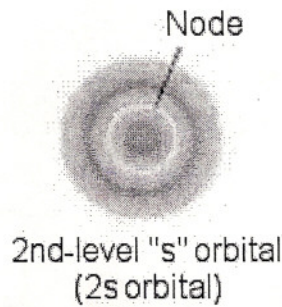
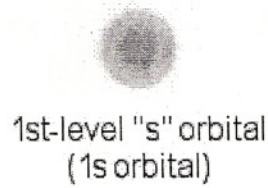
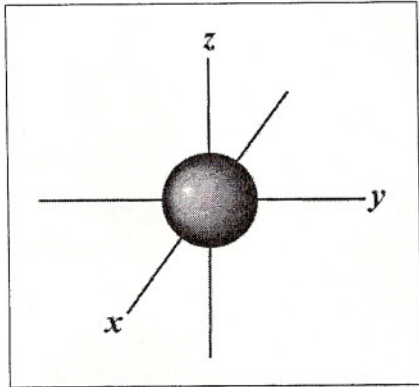
$l = 4 \quad g$  (prvek s tak vysokým protonovým číslem ještě nebyl objeven – první, jehož elektrony by vstupovaly do orbitalů  $g$  by měl protonové číslo 121)

Označení  $s, p, d, f$  má původ v označení odpovídajících čar ve spektrech „sharp“ (ostrá), „principal“ (hlavní), „diffuse“ (difuzní), „fundamental“ (základní). Další orbitály se již označují po sobě jdoucími písmeny abecedy  $g, h, \dots$

Toto číslo určuje tvar orbitalu:

## 1) Orbital s

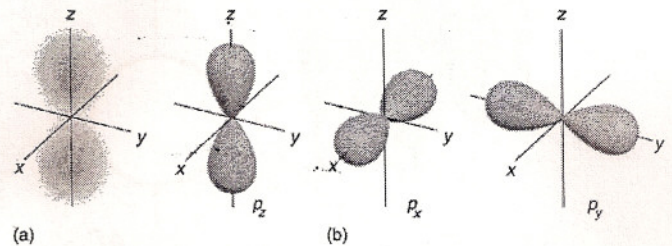
Orbital atomu vodíku pro základní stav má kulový tvar, elektron se může vyskytovat v určité vzdálenosti od jádra.



Idealizovaný tvar atomového orbitalu 1s a 2s podle rozložení elektronové hustoty

## 2) Orbital p

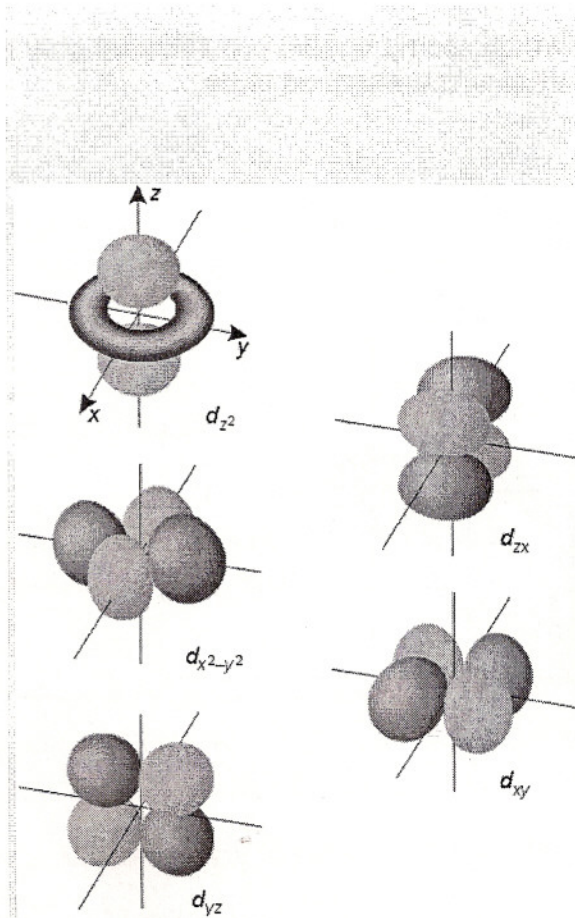
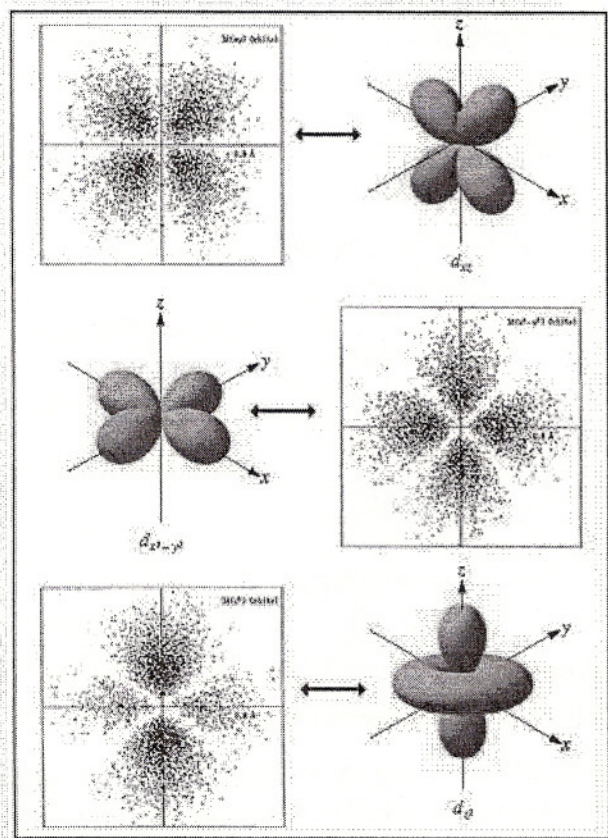
Má tvar laloků ve směrech os x, y, z



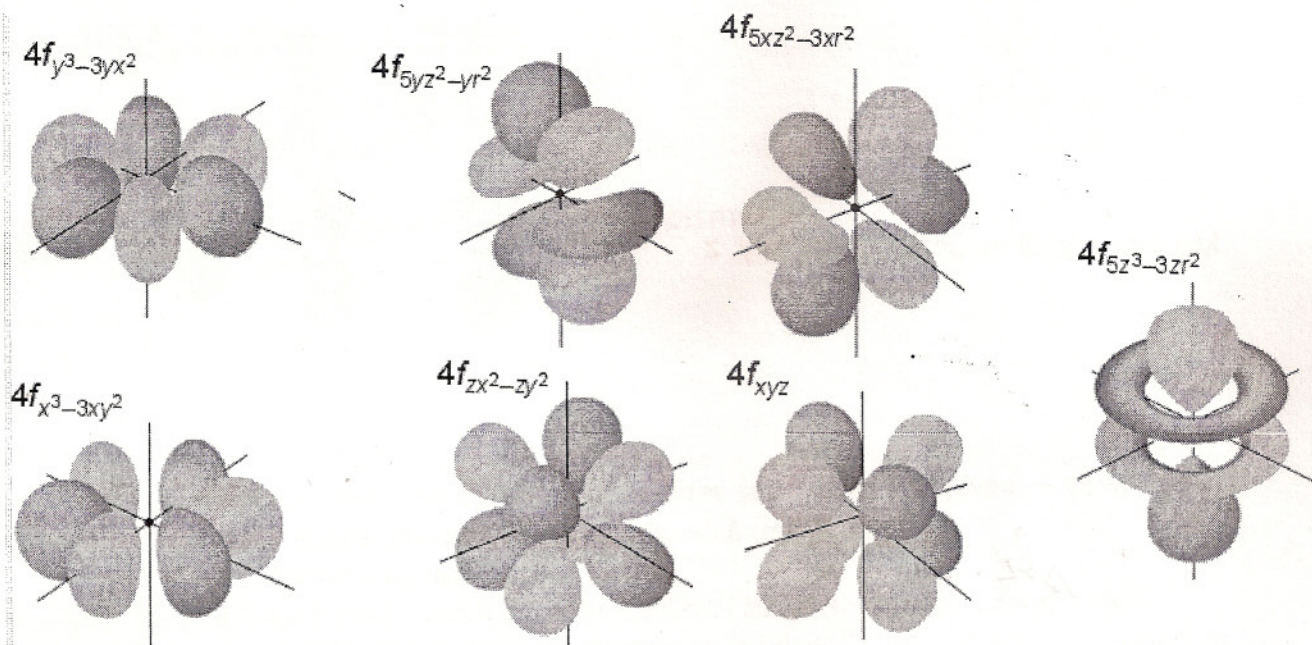
Idealizovaný tvar p-orbitalů s různou prostorovou orientací

str. 3

Atomové orbitály pro různá kvantová čísla se liší rozměrem a tvarem. Orbitály pro vyšší kvantová čísla  $n$ , popř. pro jiné prvky než vodík, však nejsou tak jednoduché jako v uvedeném případě.



Idealizované tvary různých typů d-orbitalů



*sh. 4*

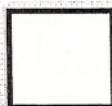
## Magnetické kvantové číslo:

$$m_l = -l, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, l$$

určuje počet orbitalů daného typu

Př.:

orbital 1s:  $l = 0$   $m_l = 0$  .....jedna hodnota, proto 1 orbital tohoto typu  
(orbital značíme čtverečkem)

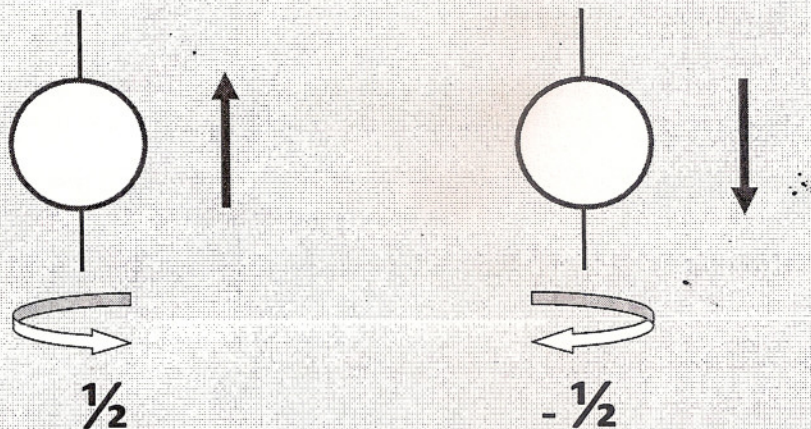


orbital 2p:  $l = 1$   $m_l = -1, 0, 1$  ..... tři hodnoty, proto 3 orbitaly tohoto typu



## Magnetické spinové kvantové číslo:

Na elektron podle zobecněného dualismu můžeme nahlížet jako na částici, pak toto kvantové číslo popisuje jeho rotaci (spin .....točit se, rotovat, rotace)



$m_s$  :

$\frac{1}{2}$

$-\frac{1}{2}$

sb. 5

Protože existují pouze dvě hodnoty spinu, mohou být v každém orbitalu pouze dva elektrony (viz také Pauliho vylučovací princip a Hundovo pravidlo).

Př.:

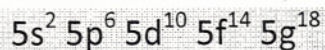
		počet orbitalů	maximální počet elektronů	
$n = 5$	$l = 0$	$m = 0$	1 orbital typu s	2
	$l = 1$	$m = -1, 0, +1$	3 orbitaly typu p	6
	$l = 2$	$m = -2, -1, 0, +1, +2$	5 orbitalů typu d	10
	$l = 3$	$m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$	7 orbitalů typu f	14
	$l = 4$	$m = -4, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, +4$	9 orbitalů typu g	18

Symbol každého orbitalu má exponent, který označuje počet elektronů přítomných v orbitalu.



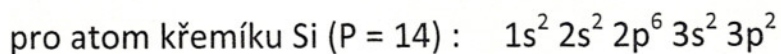
1)

Tabulku lze jednoduše zapsat takto:



2)

Symbolika používaná pro vyjádření elektronové konfigurace atomu:



str 6

# Pauliho vylučovací princip

Formulace principu:

**V daném atomu nemohou existovat dva elektrony ve stejném kvantovém stavu, tj. se stejnými kvantovými čísly  $n, l, m_l, m_s$ .**

Podle tohoto principu v atomovém orbitalu charakterizovaném určitou hodnotou kvantových čísel  $n, l, m_l$  mohou být jen dva elektrony, které se liší hodnotou magnetického spinového kvantového čísla.

Toto pravidlo omezuje **v daném orbitalu** počet elektronů na dva s opačným magnetickým spinovým číslem. Taková dvojice se pak označuje jako elektronový pár.

V atomu tedy nemohou existovat dva elektrony, které by měly všechna čtyři kvantová čísla stejná.

Částice, pro které **platí** Pauliho vylučovací princip, se nazývají **fermiony** (elektrony, protony, neutrony). Částice, pro které **neplatí**, jsou **bosony** (např. fotony).

str. 7

# Výstavbový princip

Jako výstavbový princip se označuje myšlený postup obsazování elektronů do jednotlivých orbitalů podle jejich rostoucí energie v souladu s Pauliho vylučovacím principem.

Výstavbový princip říká, že orbitaly s nižší energií se zaplňují elektrony dříve než orbitaly s vyšší energií.

Formulace principu (tzv. pravidlo  $n + l$ ):

**Pro obsazování orbitalů elektrony je rozhodující součet hlavního kvantového čísla  $n$  a vedlejšího kvantového čísla  $l$ :**

- dříve se zaplní orbital, u něhož je součet  $n + l$  menší
- jsou-li dva nebo více orbitalů se stejným součtem  $n + l$ , pak se první zaplní ten, jehož  $n$  je menší

Rozhodující je tedy součet kvantových čísel  $n$  a  $l$  a pak velikost  $n$ .

Orbitaly se tedy zaplňují v pořadí: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, ...

Pořadí vyplňování orbitalů:

(první řádek: kvantová čísla orbitalu  $n-l$ , druhý: pro  $l$  použita písmena)

1-0, 2-0, 2-1, 3-0, 3-1, 4-0, 3-2, 4-1, 5-0, 4-2, 5-1, 6-0, 4-3, 5-2, 6-1, 7-0, 5-3, 6-2  
1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d

sk. 8



# Hundovo pravidlo

Pro vyplňování orbitalů elektrony platí ještě Hundovo pravidlo. V atomu v základním stavu obsazují elektrony orbitály tak, že je co nejvíce orbitalů obsazeno jedním elektronem dříve, než začnou vznikat párové elektrony. Nepárové elektrony v orbitalu mají souhlasný spin, protože energie jejich vzájemné interakce je menší, tedy výhodnější.

Formulace pravidla:

V každém orbitalu daném magnetickým kvantovým číslem vznikají elektronové páry až po zaplnění každého orbitalu jedním elektronem. Všechny nespárované elektrony mají stejný spin.

Elektrony nejprve po jednom vstoupí do orbitalů se stejným  $n$ ,  $l$ ,  $m_s$ , ale různým  $m_l$ . Teprve potom vstoupí do těchto orbitalů elektrony i s opačným spinem.

Elektronový pár se stejnou orientací spinů obou elektronů má mírně menší energii, než elektronový pár s opačnou orientací spinů. Protože v jednom orbitalu mohou být pouze elektrony s opačným spinem (viz Pauliho princip), dochází nejprve k obsazení identických orbitalů (se stejným  $n$  a  $l$ ) jedním elektronem a poté teprve dochází k párování elektronů.

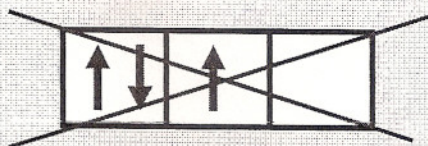
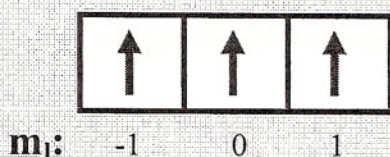
PŘ.: ORBITAL  $2p^3$

$$n = 2$$

$$l = 1 \text{ (písmeno p)}$$

$$m_l = -1, 0, 1$$

grafické znázornění pravidla:



NE

sb. 9