

Univerzita veterinárskeho lekárstva a farmácie v Košiciach



ATÓM

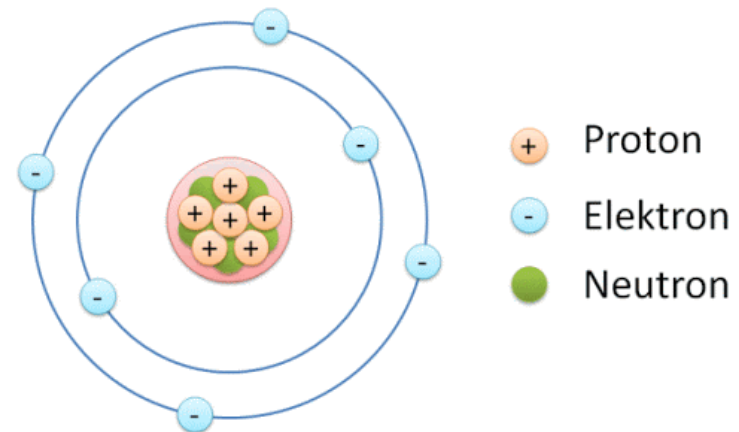


RNDr. Monika Šuleková, PhD.

Katedra chémie, biochémie a biofyziky

Univerzita veterinárskeho lekárstva a farmácie v Košiciach

Atóm a jeho štruktúra



- je elektricky neutrálna častica, ktorá sa skladá z kladne nabitého jadra (protóny a neutróny) a záporne nabitého elektrónového obalu (elektróny).

<u>Častica</u>	<u>Hmotnosť/kg</u>	<u>Náboj</u>	<u>Symbol</u>
protón	$1,6729 \times 10^{-27}$	kladný	p^+
neutrón	$1,6749 \times 10^{-27}$	bez náboja	n
elektrón	$9,1091 \times 10^{-31}$	záporný	e^-

Jadro atómu

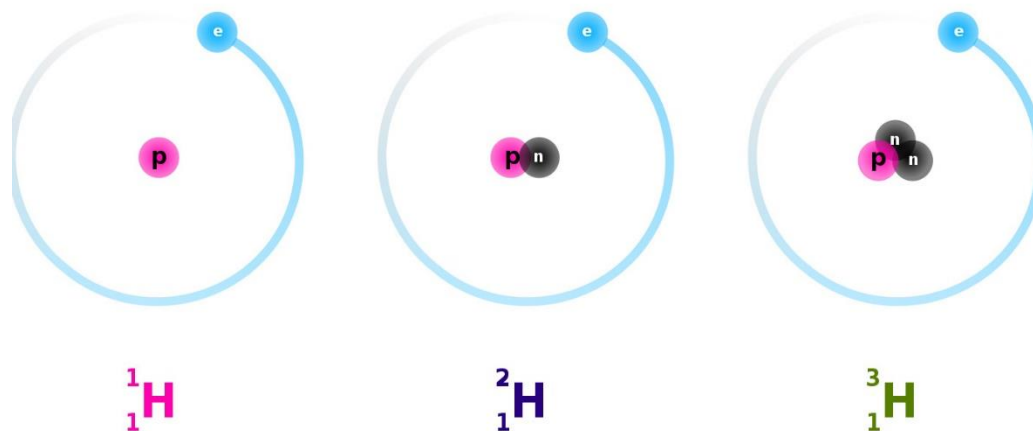


Z - protónové (atómové) číslo;
A - nukleónové (hmotnostné) číslo atómu.

- ▶ skladá sa z častíc: protóny a neutróny = nukleóny.
- ▶ **Nukleónové** (hmotnostné) **číslo A** – udáva počet nukleónov v jadre.
- ▶ **Protónové** (atómové) **číslo Z** – udáva počet protónov v jadre a zároveň aj počet elektrónov v elektrónovom obale elektroneutrálneho atómu. Udáva aj poradie prvku v PSP.
- ▶ **Neutrónové číslo N** – udáva počet neutrónov v jadre atómu.

$$A = N + Z$$

- **Prvok** je chemicky čistá látka zložená z atómov, ktoré majú rovnaké Z .
- Látka, ktorej atómy sú definované určitým (rovnakým) protónovým a nukleónovým číslom je **nuklid (X)**.
- Pr. nuklid $^{12}_6\text{C}$ je zložený z atómov, ktoré majú $A = 12$ a $Z = 6$.
- **Izotopy** – nuklidy toho istého prvku s rovnakým Z a rôznym A .

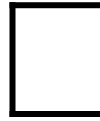


- **Izotony** – látky, ktorých atómy majú rovnaké N a rôzne Z .
- **Izobary** – látky, ktorých atómy majú rovnaké A a rôzne Z .

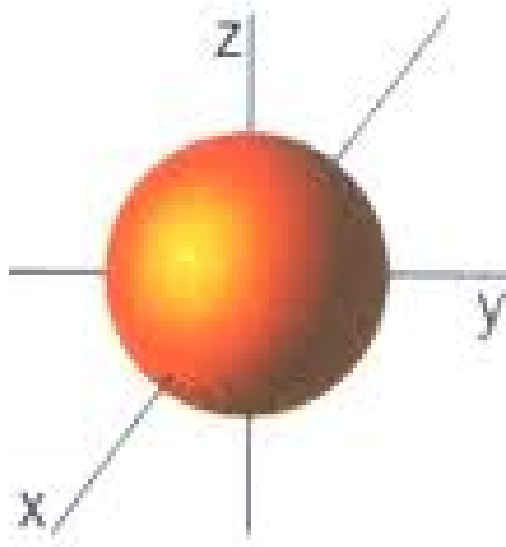
Elektrónový obal atómu

- ▶ **Orbitál** – najpravdepodobnejšia oblasť výskytu elektrónu v okolí jadra atómu
- ▶ Orbitál charakterizujú tri kvantové čísla
- ▶ Typy orbitálov – s, p, d a f. Každý z orbitálov môže byť obsadený max 2 e⁻

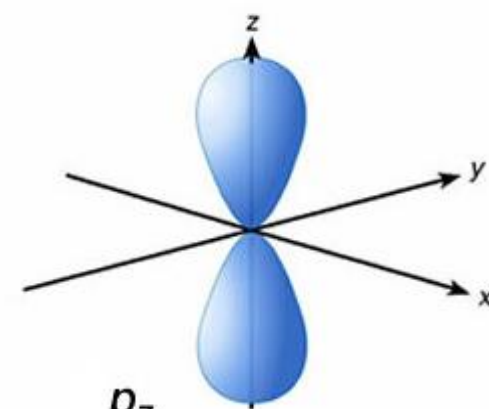
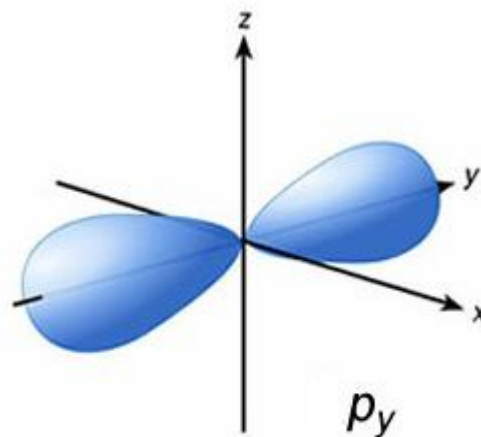
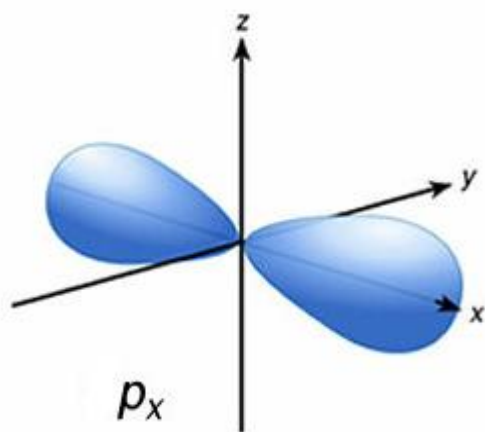
Atómový orbitál s



- ▶ Je guľovo symetricky nedegenerovaný orbitál
- ▶ Maximálny počet elektrónov v s orbitály: 2
- ▶ Elektróny obsadzujú s orbitál už v prvej elektrónovej vrstve



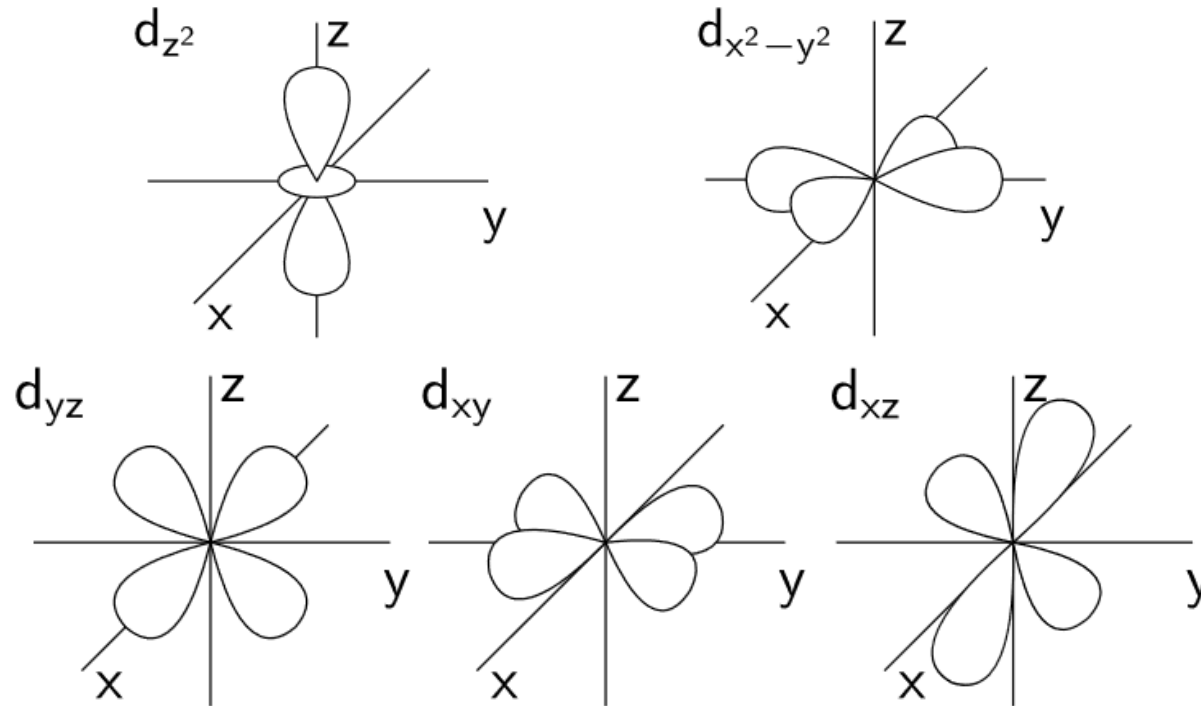
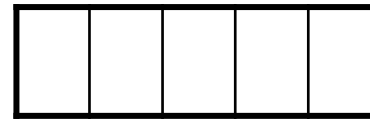
Atómový orbitál p



- Tvar priestorovej osmičky
- Sú 3-krát degenerované: p_x , p_y a p_z
- Maximálny počet elektrónov je 6
- Elektróny obsadzujú orbitály p až v druhej elektrónovej vrstve

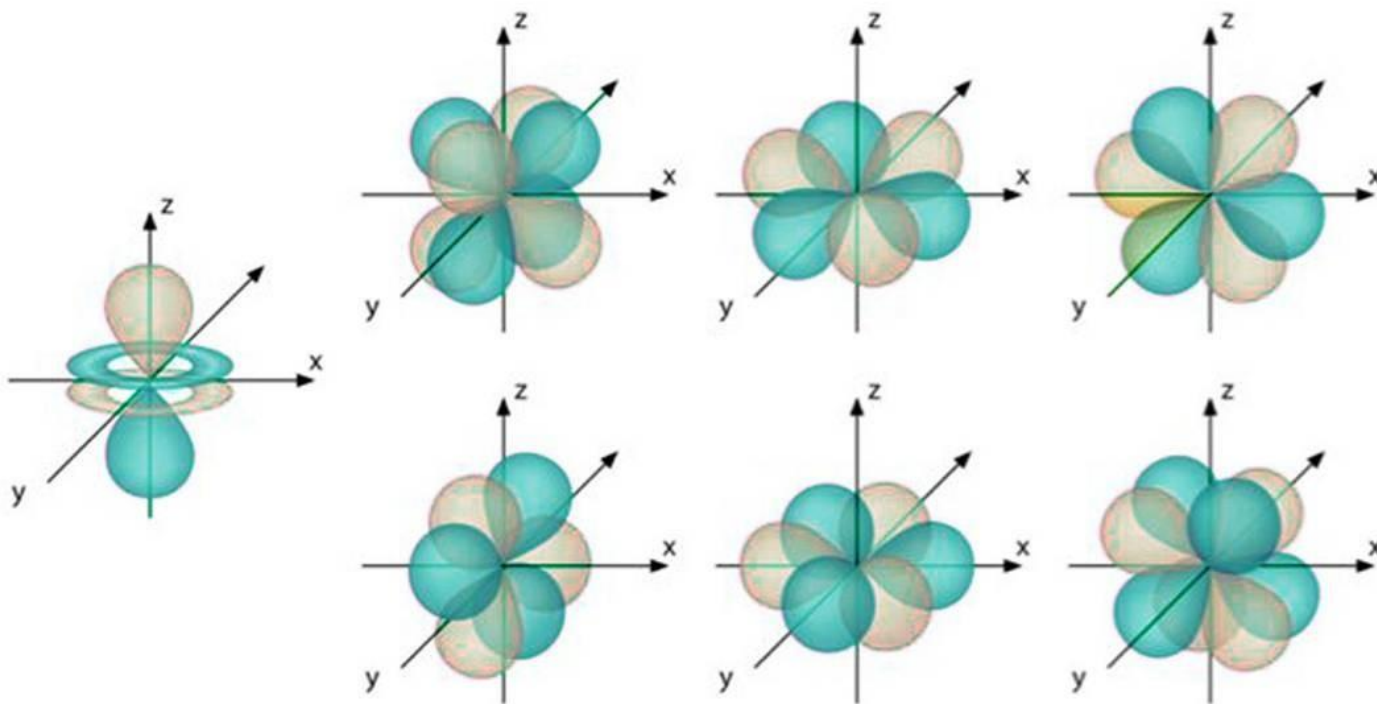


Atómový orbitál d



- Je obsadzovaný až v 3. elektrónovej vrstve
- Je 5-krát degenerovaný (d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} , $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2})
- maximálny počet e^- je 10

Atómový orbitál f



- sú obsadzované elektrónmi až v 4 elektrónovej vrstve
- sú 7-krát degenerované, maximálny počet e^- je 14

Kvantové čísla

Každý elektrón je charakterizovaný štyrmi kvantovými číslami.

1. Hlavné kvantové číslo n
2. Vedľajšie kvantové číslo l
3. Magnetické kvantové číslo m
4. Spinové kvantové číslo s

Hlavné kvantové číslo: n

- ▶ Vyjadruje veľkosť a energiu orbitálu a udáva nám číslo elektrónovej vrstvy, v ktorej sa elektrón nachádza (zhoduje sa s číslom periódy).
- ▶ $n = 1, 2, 3, 4...$
- ▶ Ak je atóm v **základnom** stave, elektróny majú najnižšiu energiu. Ak je atóm v **excitovanom** (vzbudenom) stave, dodaním energie elektróny prechádzajú do stavu s vyššou energiou.

Elektrónová vrstva

- ▶ Elektróny v stavoch s rovnakým hlavným kvantovým číslom tvoria elektrónovú vrstvu. Atómy doteraz známych prvkov obsadzujú elektrónmi najviac 7 elektrónových vrstiev
- ▶ Jednotlivé vrstvy označujeme písmenami

K, L, M, N, O, P, Q

K	$n = 1$	L	$n = 2$
M	$n = 3$	N	$n = 4$
O	$n = 5$	P	$n = 6$
Q	$n = 7$		

Vedľajšie kvantové číslo: l

- ▶ vyjadruje tvar orbitálu (určuje druh orbitálu)
- ▶ sa mení v závislosti od hodnoty hlavného kvantového čísla a hodnota l sa definuje pre interval $< 0, - , n-1 >$

Hodnota l	0	1	2	3
Typ orbitálu	s	p	d	f

Vedľajšie kvantové číslo: l

- Energia orbitálov s rovnakým hlavným kvantovým číslom narastá v poradí

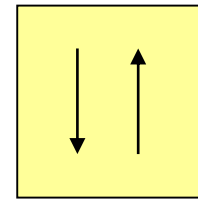
$$s < p < d < f$$

- Písmená s , p , d , f sa píše za hlavné kvantové číslo – hovoríme o stave $1s$, $2s$, $2p$

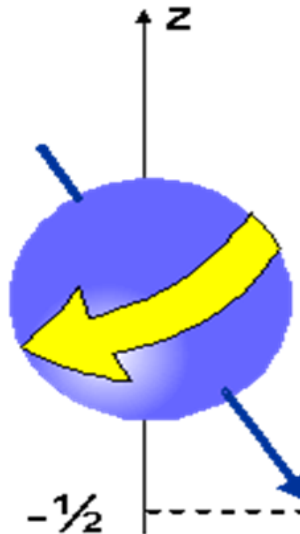
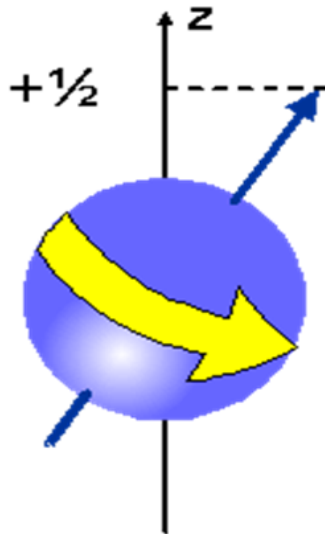
Magnetické kvantové číslo: m

- ▶ udáva **orientáciu orbitálov v priestore**
- ▶ nadobúda hodnoty od **$-l$ cez 0 až po $+l$**
- ▶ počet hodnôt magnetického kvantového čísla udáva súčasne aj **počet orbitálov** určitého typu.
- ▶ počet možných hodnôt je **$2l + 1$**
- ▶ orbitály, ktoré majú rovnakú energiu (majú rovnakú hodnotu **n, l** , líšia sa iba **m** sú *degenerované*.

Spinové kvantové číslo: s



- ▶ označuje spin elektrónu a jeho smerovú orientáciu
- ▶ môže nadobúdať hodnoty $+1/2$ alebo $-1/2$



Druh orbitálov	Vedľajšie kvantové číslo	Magnetické kvantové číslo	Počet orbitálov	Maximálny počet elektrónov v orbitáloch
s	0	0	1	2
p	1	1 0 -1	3	6
d	2	2 1 0 -1 -2	5	10
f	3	3 2 1 0 -1 -2 -3	7	14

Elektrónová konfigurácia atómu

- ▶ obsadzovanie jednotlivých atómových orbitalov elektrónmi
- ▶ znázorňujeme pomocou orbitalových alebo rámčkových diagramov
- ▶ rámček predstavuje orbitál a šípka v rámčeku znázorňuje elektrón a jeho spin

Pravidlá obsadzovania jednotlivých orbitálov elektrónmi

1. Výstavbový princíp

Elektrón obsadzuje najskôr ten orbitál, ktorý má najnižšiu energiu, (elektróny obsadzujú jednotlivé hladiny podľa ich stúpajúcej energie)

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

Pravidlá obsadzovania jednotlivých orbitálov elektrónmi

2. Pauliho vylučovací princíp

V každom stave charakterizovanom 3 kvantovými číslami (n, l, m) sa môžu nachádzať najviac 2 elektróny, ktoré sa líšia spinovým kvantovým číslom.

Pravidlá obsadzovania jednotlivých orbitálov elektrónmi

3. Hundovo pravidlo

Orbitály s rovnakou energiou (degenerované) sa obsadzujú najprv jedným elektrónom a až potom vytvárajú elektrónové páry. Nespárené elektróny majú súhlasné (paralelné) spiny.

Elektrónová konfigurácia atómu

- ▶ zápis elektrónovej konfigurácie atómu sa často používa aj v skrátenej tvare, v ktorom sa využíva elektrónová konfigurácia **predchádzajúceho najbližšieho vzácneho plynu** k danému atómu a doplní sa len posledná vrstva atómu.
- ▶ najvzdialenejšia elektrónová vrstva od jadra atómu sa nazýva **valenčná vrstva**. Elektróny v nej sú **valenčné elektróny** a určujú chemické vlastnosti prvkov.
- ▶ elektróny na vnútorných vrstvách sú vnútorné elektróny.

Elektrónová konfigurácia atómu

Pr.

Celkový zápis



Skrátený zápis



Periodická sústava prvkov (PSP)

- ▶ Periódy sú číslované arabskými číslicami 1 – 7 a obsahujú 2, 8, 8, 18, 18, 32 a 32 prvkov. Môžu sa označovať tak, ako sú označované elektrónové vrstvy v atómovom obale (K, L, M, N, O, P, Q).
- ▶ Skupiny: 1 - 18
- ▶ Podskupiny: VIII A (hlavné) – neprechodné prvky
VIII B (vedľajšie) – prechodné prvky

Periodický zákon: vlastnosti prvkov sú periodickou funkciou ich protónových čísel.

IA 1	"representative elements"										IIIA 13	IVA 14	VA 15	VIA 16	VIIA 17	VIIA 18		
H	Li	Be										B	C	N	O	F	He	
Na	Mg		IIIB 3	IVB 4	VB 5	VIB 6	VIIB 7	VIII 8	VIII 9	VIII 10	IB 11	IIB 12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Cs	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Rb	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds			"main group elements"						

Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu

Lanthanides

Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr

Actinides

Periodická sústava prvkov (PSP)

Rozdelenie – **kovy, nekovy a polokovy**.

V PSP kovové vlastnosti prvkov narastajú v skupinách s narastajúcim Z. V periódach s narastajúcim Z kovové vlastnosti prvkov klesajú.

I.A – **alkalické kovy**

II.A – **kovy alkalických zemín**

VI. A – **chalkogény**

VII.A – **halogény**

VIII.A – **vzácne plyny**

Elektronegativita x

- schopnosť kovalentne viazaného atómu priťahovať k sebe väzbový elektrónový pár.
- periódach s narastajúcim Z rastie
- v skupinách s narastajúcim Z klesá

Vznik iónov

- **Ionizácia** – proces, pri ktorom z elektroneutrálneho atómu vznikajú ióny (katióny, anióny)
- **Ionizačná energia I** – energia, potrebná na odštiepenie jedného elektrónu z valenčnej hladiny nezlúčeného atómu v základnom stave, [kJ.mol⁻¹]



- prvky, ktoré ľahko tvoria katióny majú nízke hodnoty I
- **Elektrónová afinita A** – energia, ktorá sa uvoľní prijatím elektrónu za vzniku aniónu z atómu.



- prvky, ktoré ľahko tvoria anióny majú veľkú hodnotu elektrónovej afinity.

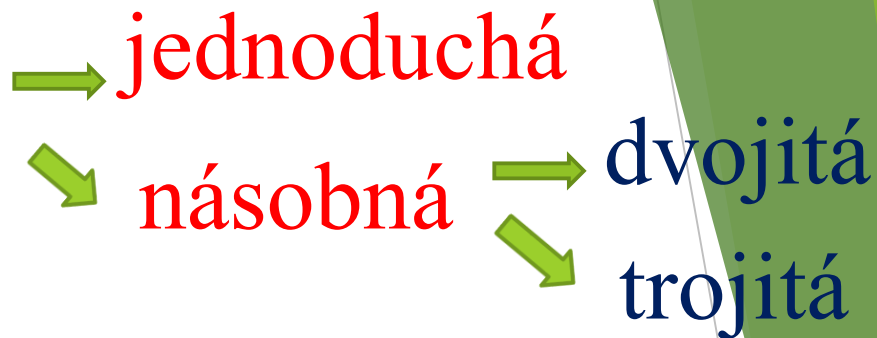
Chemická väzba

- Interakcia medzi vzájomne viazanými atómami v molekule.
- *Väzbová energia* – energia, ktorá sa uvoľní pri vzniku chemickej väzby (molekuly).
- *Disociačná energia* – energia, ktorá je potrebná na rozštiepenie chemickej väzby medzi atómami.

Kovalentná väzba

- vzniká prekrytím valenčných atómových orbitálov obsahujúcich vždy 1 e^- s opačnými spinmi za vzniku spoločného väzbového el. páru.
- má smerový charakter

Kovalentná väzba

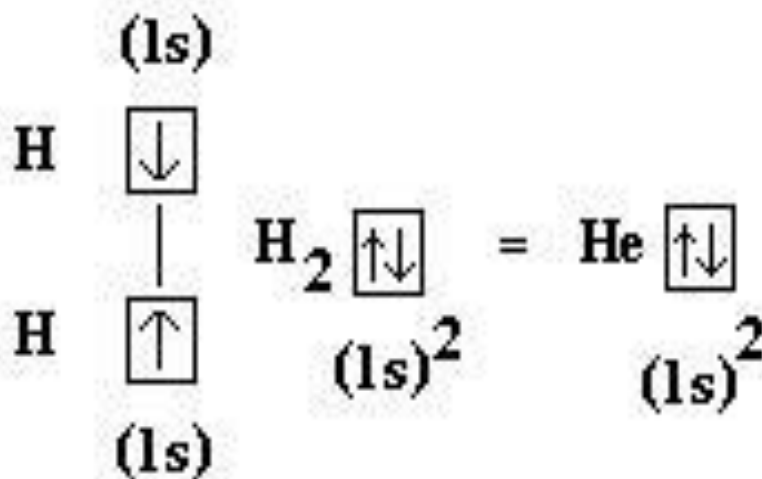


Jednoduchá kovalentná väzba σ

- na jej vzniku sa podieľa z každého z viazaných atómov 1. valenčný elektrón s opačným spinom
- vzniká prekrytím atómových orbitálov lokalizovaných na spojnici dvoch jadier
- má rotačnú symetriu vzhľadom na os väzby

Jednoduchá kovalentná väzba

Pr.: H_2 , HCl , Cl_2 , H_2O ...



Na jej vzniku sa podieľajú valenčné elektróny z každého atómu. Podmienkou je, aby mali opačný spin.

Atómy vytvorili 1 spoločný elektrónový pár,
teda **jednoduchú kovalentnú väzbu**.

Násobná kovalentná väzba π - dvojité väzba

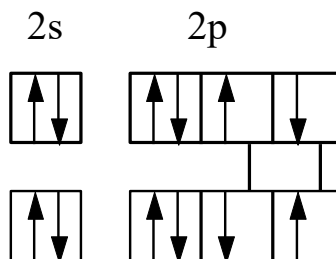
- na jej vzniku sa podieľajú z každého z viazaných atómov 2 válenčné elektróny
- vzniká prekrytím atómových orbitálov lokalizovaných kolmo na spojnici dvoch jadier
- nemá rotačnú symetriu vzhľadom na os väzby.

Násobná kovalentná väzba π – trojitá väzba

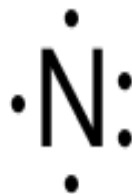
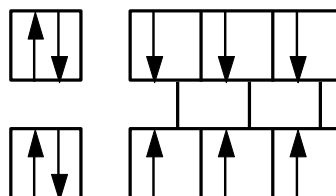
- na jej vzniku sa podieľajú z každého z viazaných atómov 3 válenčné elektróny
- **Väzbovosť** – počet kovalentných väzieb, ktorými sa atóm daného prvku viaže v zlúčenine. Odvodzuje sa od elektrónovej konfigurácie atómu v základnom aj excitovanom stave.

Znázornenie molekuly kyslíka a dusíka

O₂



N₂



Pevnosť a dĺžka chemickej väzby

Väzby	Energia [kJ.mol ⁻¹]	Dĺžka [nm]
C – C	245	0,154
C = C	418	0,133
C ≡ C	519	0,120

Polarita kovalentnej väzby

Mierou polarity kovalentnej väzby je rozdiel elektronegativít:

$\Delta x = 0 - 0,4$ (nepolárna kovalentná väzba)

Pr.: H_2 , N_2 , Br_2

$\Delta x = 0,4 - 1,7$ (polárna kovalentná väzba)

Pr.: HCl , H_2O , NH_3

$\Delta x > 1,7$ (iónová väzba)

Pr.: NaCl , CaF_2 , BaBr_2

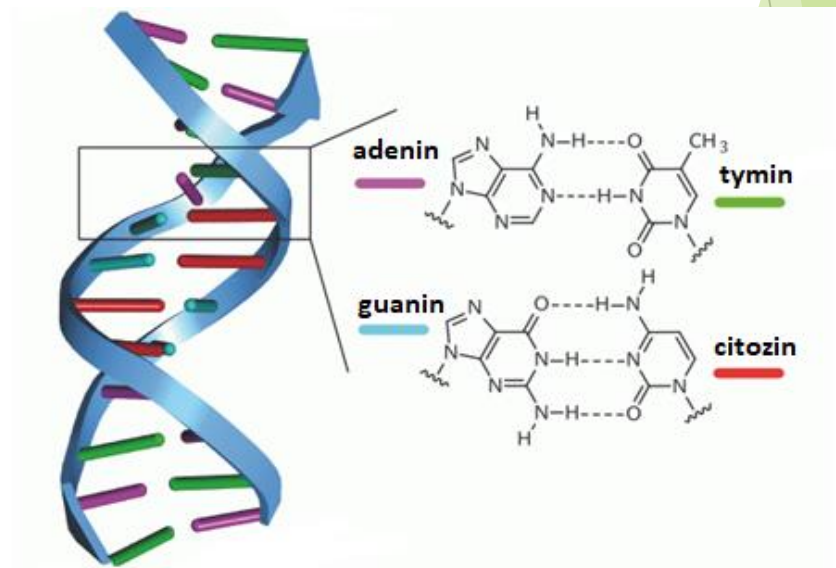
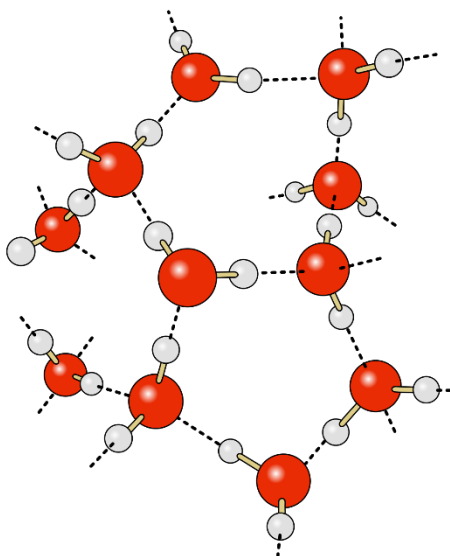
Koordinačná (donor-akceptorná) väzba

- ▶ vzniká prekrytím atómového orbitálu jedného atómu, ktorý obsahuje elektrónový pár s prázdny atómovým orbitálom druhého atómu (elektróny poskytuje iba jeden z viazaných atómov).
- ▶ **Donor** – atóm (častica), ktorý poskytuje elektrónový pár na vytvorenie koordinačnej väzby.
- ▶ **Akceptor** – atóm (častica), ktorý prijíma elektróny a poskytuje prázdny atómový orbitál.

Pr.: NH_4^+ , H_3O^+ , $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$

Vodíková väzba

- patrí medzi najsilnejšie medzimolekulové interakcie, ktoré vznikajú hlavne v polárnych zlúčeninách.
- vzniká medzi atómom vodíka kovalentne viazaného k silne elektronegatívnu prvku.
- pôsobenie medzi molekulami HF, H₂O, NH₃ ...
- je mimoriadne dôležitá pre živé organizmy
- voda pri bežných podmienkach je kvapalina a sulfán je plynná látka.

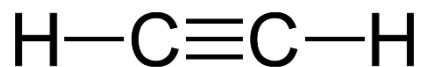


Hybridizácia

- linárnou kombináciou energeticky rozdielnych atómových orbitálov sa vytvárajú energeticky rovnocenné hybridné orbitály, ktoré sa zúčastňujú na tvorbe kovalentných väzieb s inými atómami
- hybridné orbitály môžu vzniknúť iba kombináciou energeticky blízkych atómových orbitálov
- počet vytvorených hybridných orbitálov sa rovná počtu pôvodných atómových orbitálov, z ktorých vznikli
- hybridizujú orbitály, ktoré vytvárajú σ -väzbu.

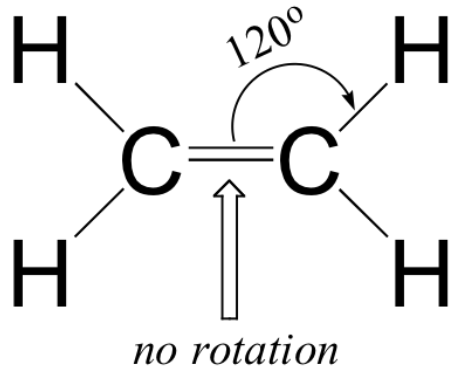
sp hybridizácia

- linárnou kombináciou jedného atómového orbitálu s a jedného atómového orbitálu p vznikajú 2 hybridné orbitály **sp**.
- lineárne usporiadanie – 180° uhol.
- acetylén, HCN, BeCl_2

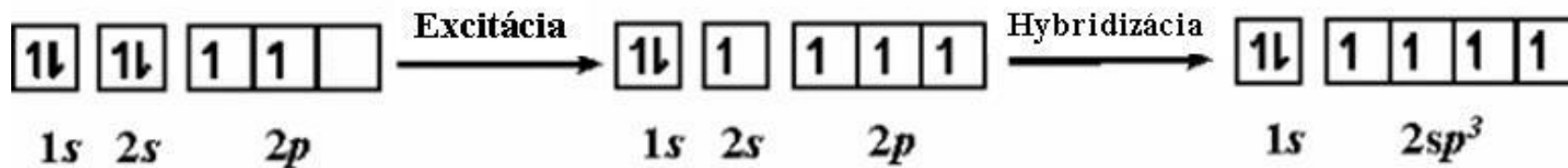


sp^2 hybridizácia

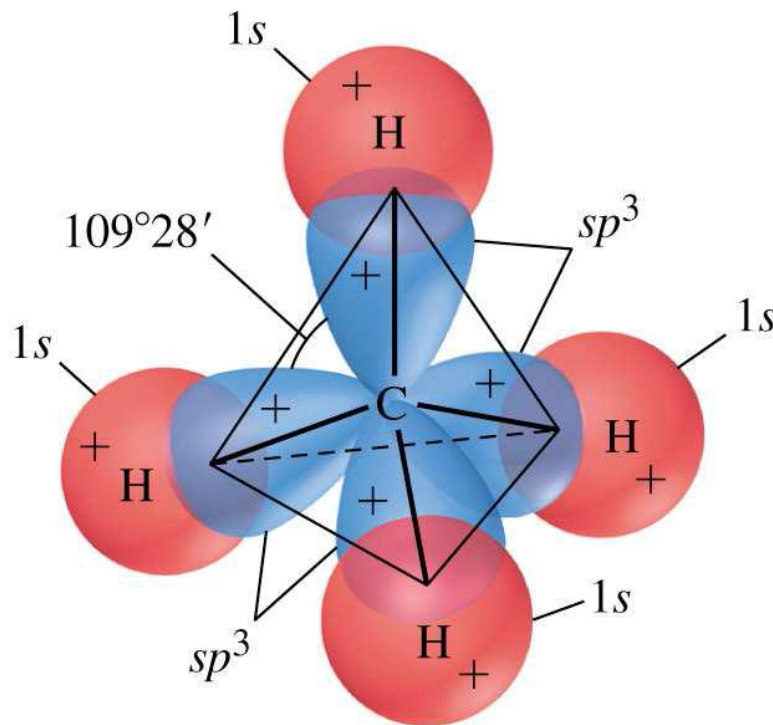
- Linárnou kombináciou jedného atómového orbitálu **s** a dvoch atómových orbitálov **p** vznikajú 3 hybridné orbitály sp^2 .
- trigonálne usporiadanie, rovnostranný trojuholník (rovinné) – 120° uhol.
- BF_3 , alkény



sp^3 hybridizácia



- linárnou kombináciou jedného atómového orbitálu **s** a troch atómových orbitálov **p** vznikajú 4 hybridné orbitály sp^3
- tetraedrické usporiadanie
- $109^\circ 28'$ uhol
- nasýtené uhl'ovodíky



Štruktúra molekúl

Typ hybridizácie	Tvar molekuly
SP	lineárna
SP ²	rovnostranný trojuholník
SP ³	tetraeder
SP ³ D	trigonálna bipyramída
SP ³ D ²	oktaeder

Ďakujem za pozornosť

