

1. Atóm

Každá látka je zložená z nepatrných hmotných častíc- atómov, ktoré sa nedajú chemickými postupmi ďalej deliť. Fyzici zistili, že každý atóm sa skladá z kladne nabitého jadra a záporne nabitého obalu. V jadre atómu je sústredená väčšina jeho hmotnosti.

1.1. Stavba jadra atómu

Jadro atómu je tvorené protónmi- časticami s jednotkovým kladným nábojom a neutrónmi, ktoré sú bez náboja. Pokojová hmotnosť protónu a neutrónu je približne rovnaká. **Celkový počet protónov v jadre býva označovaný ako protónové (atómové) číslo a značí sa písmenom Z.** Zapisuje sa pomocou dolného indexu pred chemickou značkou prvku (napr. ${}^6\text{C}$, ${}^7\text{N}$, ${}^8\text{O}$, ${}^{16}\text{S}$, ${}^{17}\text{Cl}$). **Počet neutrónov v jadre vyjadruje neutrónové číslo N.** U značky prvku sa neuvádza.

Protóny a neutróny, ktoré tvoria jadro atómu, majú spoločný názov nukleóny (z lat. nucleus = jadro) a ich celkový počet v jadre vyjadruje tzv. **nukleónové číslo A.** Nukleónové číslo je teda rovné súčtu všetkých protónov a neutrónov v jadre: $A = Z + N$

Zapisuje sa podobne ako protónové číslo – pred značku prvku, ale pomocou horného indexu (napr. ${}^{12}\text{C}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{32}\text{S}$, ${}^{35}\text{Cl}$).

Množina atómov majúca rovnaké protónové a nukleónové číslo sa nazýva nuklid.

Nuklid je napr. ľubovoľná množina atómov ${}^{37}_{17}\text{Cl}$ alebo ${}^{18}_8\text{O}$.

Látka tvorená výhradne atómami s rovnakým protónovým číslom sa nazýva prvok. Definícia prvku nehovorí nič o počte neutrónov. Z toho vyplýva, že všetky atómy daného prvku musia mať rovnaký počet protónov, ale sa môžu líšiť počtom neutrónov. Prvkom je napr. súbor atómov ${}^{37}_{17}\text{Cl}$, ale tiež súbor

tvorený zmesou atómov ${}^{37}_{17}\text{Cl}$ a ${}^{35}_{17}\text{Cl}$. **Atómy toho istého prvku, ktoré sa od seba líšia iba**

neutrónovým číslom, sa nazývajú izotopy (napr. ${}^1_1\text{H}$ - Prócium (ľahký vodík),

${}^2_1\text{H}$ - Deutérium – D (ťažký vodík), ${}^3_1\text{H}$ - Trícium – T (superťažký vodík) alebo ${}^{37}_{17}\text{Cl}$ a ${}^{35}_{17}\text{Cl}$).

Treba si zapamätať, že počet protónov v jadre atómu je vždy zhodný s počtom elektrónov v jeho obale, čo vysvetľuje, prečo je atóm navonok elektroneutrálny.

1.2. Stavba elektrónového obalu atómu

Obal atómu je tvorený časticami, ktoré sa nazývajú elektróny a majú jednotkový záporný náboj. Ich pokojová hmotnosť je približne 1840 krát menšia než hmotnosť protónu. **Stavba elektrónového obalu atómu podmieňuje chemické vlastnosti každého prvku.**

Mnohí si predstavujú elektrón ako veľmi malú guľičku, ktorá obieha okolo jadra po určitej dráhe. Táto predstava má svoje historické opodstatnenie, ale skutočnosť je úplne iná. Dnes už vieme, že **pre popis vlastností mikročastíc, teda aj elektrónu, nemožno využiť klasickú fyziku**, ktorá dôsledne oddeľuje pojem častice (korpuskule) od pojmu vlnenie. Tento prístup je charakteristický tým, že za časticu je považovaný hmotný, od okolia ostre ohraničený útvar, ktorého polohu v priestore možno presne určiť a je možné definovať dráhu, po ktorej sa pohybuje. Vlnenie je potom chápané ako šírenie vzruchu v hmotnom prostredí. Pre lepšiu predstavu si treba spomenúť, akým spôsobom sa pohybuje hladina vody, do ktorej sme hodili kameň. Vlnenie sa vyznačuje prítomnosťou ohybových (difrakčných) a interferenčných javov.

Vedci postupne zistili, že **mikročastice majú v závislosti na type experimentu, ktorý sa s nimi vykonáva, niekedy korpuskulárny, inokedy vlnový charakter.** Preto bola pripustená dvojakoť (dualizmus) ich správania. Pre mikročastice je teda charakteristické, že v sebe spájajú vlastnosti vlnenia i hmotných častíc. Z vyššie uvedených dôvodov bolo potrebné pri popise stavby elektrónového obalu opustiť klasickú predstavu o pohybe elektrónov po kruhových či eleptických dráhach a tieto dráhy nahradiť vymedzením priestoru tzv. orbitalu, v ktorom sa elektrón nachádza s najväčšou pravdepodobnosťou.

Orbital je definovaný ako časť priestoru (oblasť) v okolí jadra atómu, v ktorom sa elektrón vyskytuje minimálne s 95 % pravdepodobnosťou.

Otázky a úlohy:

1. Objasnite pojmy: protónové číslo, nukleónové číslo, nuklid, prvok a izotop.
2. Aký je rozdiel medzi prvkom a nuklidom ?
3. V atóme sa vždy zhoduje počet protónov s počtom
4. Charakterizujte elektrón
5. V čom spočíva dualistická povaha mikročastíc ?

1.2.1. Kvantové čísla

Pre názornosť si elektróny tvoriace obal atómu predstavíme ako obyvateľov viacposchodového domu. Pokiaľ by sme chceli popísať, kde niektorý z obyvateľov býva, asi by sme uviedli číslo poschodia, o aký byt ide, prípadne ďalšie informácie. Podobným spôsobom možno popísať miesto najpravdepodobnejšieho výskytu elektrónu v obale.

Elektróny sa v elektrónovom obale atómu nachádzajú v niekoľkých hladinách (vrstvách), pričom ich energia s rastúcou vzdialenosťou od jadra rastie. Energetické hladiny môžeme prirovnať k poschodiam domu. K popisu hladiny, v ktorej sa elektrón nachádza, slúži tzv. **hlavné kvantové číslo**. Označuje sa písmenom **n** a môže nadobúdať hodnoty celých kladných čísel ($n = 1, 2, 3, \dots$). Niekedy sa tieto čísla nahradzujú veľkými písmenami ($1 = K, 2 = L, 3 = M, 4 = N, 5 = O, 6 = P, 7 = Q, \dots$). Čím je viac elektrón vzdialený od jadra atómu, tým má vyššiu energiu a tým je hodnota **n** väčšia.

Hlavné kvantové číslo n rozhoduje o energii elektrónu a tiež o jeho vzdialenosti od jadra. Nadobúda vždy kladné celočíselné hodnoty.

Typ orbitalu je určený hodnotou **vedľajšieho kvantového čísla l**, ktoré môže nadobúdať hodnoty od 0 až po $n-1$ (napr. pre **n = 2** je vedľajšie kvantové číslo **l** rovné **0 a 1**).

Vedľajšie kvantové číslo spoločne s hlavným kvantovým číslom určuje energiu elektrónu a rozhoduje o tvare orbitalu. Nadobúda hodnoty od 0 až po n-1.

Orientácia jednotlivých orbitalov v priestore sa určuje vzhľadom k trojrozmernému systému súradníc a vyjadruje sa prostredníctvom **magnetického kvantového čísla m_l**. Magnetické kvantové číslo nadobúda hodnoty od $-l$ cez nulu do $+l$ (napr. pre $l = 2$ je magnetické kvantové číslo $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$).

kvantové čísla		
hlavné n	vedľajšie l	magnetické m _l
1	0	0
2	0	0
	1	-1, 0, 1
3	0	0
	1	-1, 0, 1
	2	-2, -1, 0, 1, 2

Magnetické kvantové číslo m_l udáva orientáciu orbitalu v priestore. Nadobúda hodnoty od -l cez 0 do +l.

Pre jednoznačný popis elektrónu v obale atómu je potrebné ešte štvrté kvantové číslo, ktoré sa nazýva **spinové kvantové číslo** a označuje sa **m_s** (spin z angl. vír, rotácia). Spinové kv.č. popisuje zvláštnu vlastnosť častice, ktorá v oblasti klasickej mechaniky nemá obdobu. Touto vlastnosťou je tzv. vnútorný moment hybnosti. Jeho pôsobenie na okolie si možno veľmi približne predstaviť ako účinky rotujúcej nabitej guľičky.

Spinové kvantové číslo m_s môže nadobúdať len dve hodnoty: +1/2 a -1/2. Súborom štyroch kvantových čísel možno jednoznačne charakterizovať ktorýkoľvek elektrón v obale atómu. Tento fakt vyjadruje **Pauliho vylučovací princíp: V atóme nemôžu existovať dva elektróny, ktoré by mali všetky štyri kvantové čísla rovnaké.**

1.2.2. Tvary a priestorová orientácia orbitalov

Vráťme sa ešte k vedľajšiemu kv.číslu **l**. Už vieme, že okrem energie elektrónu určuje tiež tvar orbitalu, teda miesta najpravdepodobnejšieho výskytu elektrónu. **Orbital, ktorého l = 0, sa označuje ako orbital s. Má tvar gule**, ktorej polomer sa s rastúcou hodnotou **n** zväčšuje. Každá hladina (vrstva) elektrónového obalu obsahuje iba jeden orbital s.

Pre **l = 1** je charakteristické, že v každej hladine elektrónového obalu sú tri **orbitály typu p**. Vyplýva to z počtu hodnôt magnetického kv. čísla (**m_l = -1, 0, 1**). Magnetické kv.číslo **m_l** rozhoduje tiež o orientácii orbitalov **p** v priestore. Všetky tri orbitály typu **p** majú rovnakú energiu, ale sa líšia priestorovou orientáciou. Takéto orbitály sa označujú ako **degenerované**.

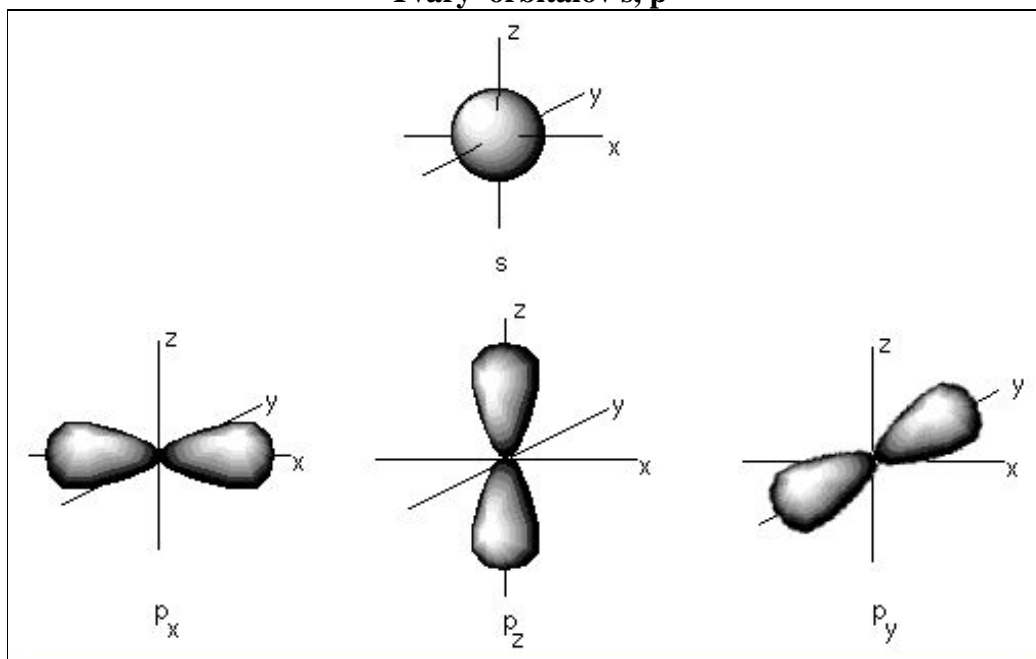
[Spracoval: M.Kozák]

Degenerované orbitály majú rovnakú hodnotu hlavného a vedľajšieho kvantového čísla (teda rovnakú energiu) a líšia sa v čísle magnetickom.

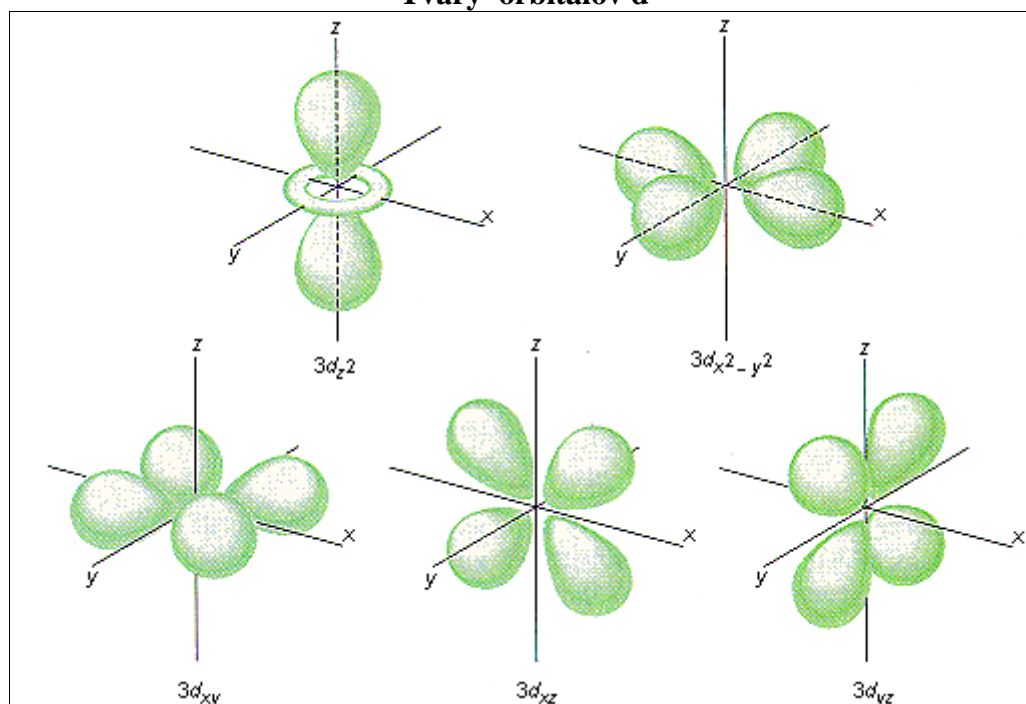
Hodnota $l = 2$ odpovedá päť hodnôt magnetického kv. čísla ($m_l = -2, -1, 0, 1, 2$) a tiež päť rôznych orbitalov, ktoré sa označujú ako **orbitály typu d**. Orbitály d sú opäť degenerované – majú rovnakú energiu a líšia sa priestorovou orientáciou.

Pre $l = 3$ nadobúda m_l sedem rôznych hodnôt ($m_l = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$). To znamená, že existuje sedem energeticky rovnocenných orbitalov, líšiacich sa priestorovou orientáciou. Tieto orbitály sa označujú ako **orbitály typu f**. Tvary orbitalov typu f si na tomto mieste uvádzať nebudeme.

Tvary orbitalov s, p



Tvary orbitalov d

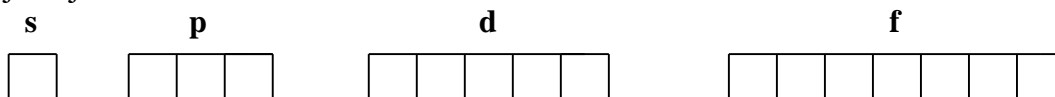


1.2.3. Znázorňovanie orbitalov

Znázorňovanie orbitalov pomocou priestorových tvarov je veľmi zdĺhavé a graficky náročné. preto boli zavedené nasledujúce postupy:

Zápis orbitalov pomocou rámečkov

- všetky orbitály sa znázorňujú rovnako veľkými rámečkmi
- ak sú orbitály degenerované, odpovedajúci počet rámečkov (3 pre orbitály typu p, 5 pre d a 7 pre f) sa spojí do jedného celku



- jednotlivé **elektróny** sa znázorňujú pomocou šípok umiestnených v príslušnom rámečku.

Úloha: Zapište, že v orbitáli s sú dva elektróny líšiace sa spinom.

Riešenie:



nesprávne



správne

Zápis orbitalov pomocou hlavného a vedľajšieho kvantového čísla

- Hlavné kvantové číslo n sa zapisuje veľkou arabskou číslicou a za ňou sa malým písmenom (s,p,d,f) vyznačí typ orbitalu, určený vedľajším kvantovým číslom l.

vedľajšie kvantové číslo l	0	1	2	3
typ orbitalu	s	p	d	f

- Počet elektrónov v orbitaloch sa zapisuje pomocou exponentu. Napr. zápis $1s^2$ (čítaj “jedna es dva”) hovorí, že v orbitáli typu s ($l = 0$) prvej vrstvy ($n = 1$) sa nachádzajú dva elektróny.

Otázky a úlohy:

- Koľko kvantových čísel je potrebných k jednoznačnému popisu určitého elektrónu v obale atómu? Vymenujte ich.
- Rozhodnite, aké hodnoty môže nadobúdať vedľajšie kvantové číslo l, ak: a) $n = 1$, b) $n = 3$, c) $n = 5$.
- Degenerované orbitály majú: a) rovnakú hodnotu n, l, m_l
b) rovnakú hodnotu n, l a líšia sa v m_l
c) rovnakú hodnotu n, ale musia sa líšiť v l
- Zapište pomocou rámečkov orbitály 4s, 3d, 5f, 2p.
- Zapište pomocou rámečkov, že v orbitaloch 3p sa nachádza:
a) 1 elektrón, b) 3 elektróny, c) 6 elektrónov.
- Zapište pomocou hlavného a vedľajšieho kvantového čísla, že v orbitaloch
a) 3d sa nachádza 6 elektrónov,
b) 4p sa nachádza 5 elektrónov,
c) 5f sa nachádza 7 elektrónov.

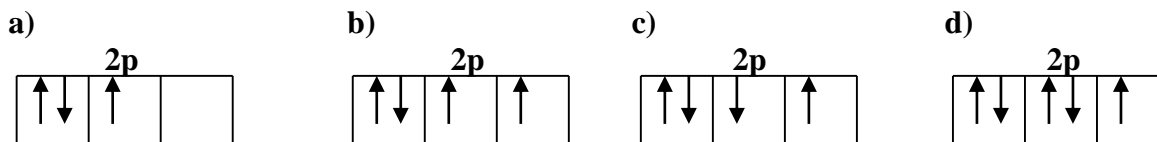
[Spracoval: M.Kozák]

1.2.4. Pravidlá zaplňania orbitalov elektrónmi

1. Pauliho vylučovací princíp: V jednom orbitali môžu byť maximálne dva elektróny, ktoré sa líšia hodnotou spinového kvantového čísla.

2. Hundovo pravidlo: V degenerovaných orbitaloch vznikajú elektrónové páry až po zaplnení každého orbitalu jedným elektrónom. Všetky nespárené elektróny majú rovnaký spin. V tomto prípade má systém najnižšiu energiu, preto je najstabilnejší.

Prehliadnite si nasledujúce zápisy, ktoré znázorňujú obsadzovanie orbitalov 2p tromi, štyrmi, resp. piatimi elektrónmi a rozhodnite, ktorý zo zápisov je správny a ktorý nesprávny. Svoje rozhodnutie zdôvodnite:



3. Orbitály s nižšou energiou sa zaplňajú elektrónmi skôr než orbitály s vyššou energiou.

Energia orbitalov sa zvyšuje s rastúcou hodnotou súčtu hlavného (n) a vedľajšieho kvantového čísla (l). Ak majú dva rôzne orbitály rovnaký súčet $n + l$ (napr. pre orbital 3s a 2p je súčet $n + l$ rovný 3), potom je rozhodujúca hodnota hlavného kvantového čísla. Orbital, ktorého hodnota n je menšia, má nižšiu energiu a preto sa zaplní elektrónmi skôr. (V našom prípade je to orbital 2p.)

Príklad 1: Rozhodnite, ktorý z uvedených orbitalov: 3s, 3p a 2p má najvyššiu, resp. najnižšiu energiu.

Riešenie: Pre orbital 3s je súčet $n + l$ rovný 3, pre 3p rovný 4 a pre 2p rovný 3. Z toho vyplýva, najvyššiu energiu má orbital 3p a najnižšiu 2p (orbital 2p má v porovnaní s orbitalom 3s nižšiu hodnotu hlavného kvantového čísla).

Teraz na základe pravidla „ $n + l$ “ zapíšeme jednotlivé orbitály v poradí, v akom budú postupne zaplňované elektrónmi:

Výstavbový princíp: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p 8s

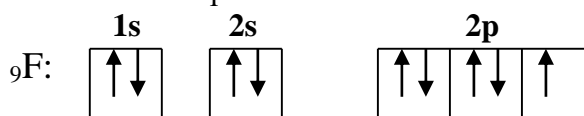
Uvedomme si, že napr. orbitály 3d, ktoré sú súčasťou 3. vrstvy elektrónového obalu ($n = 3$) sa v porovnaní s orbitalmi 4s ($n = 4$) zaplňajú elektrónmi neskôr, i keď štvrtá vrstva má v porovnaní s treťou vyššiu energiu.

Je to niečo podobné, ako keď majiteľ domu povolí obsadiť päťizbový byt na treťom poschodí (orbital 3d) až vtedy, keď bude mať obsadený jednoizbový byt na štvrtom poschodí (orbital 4s). Je nutné pochopiť, že vyššie uvedený zápis udáva iba poradie, v akom sú orbitály 3d a 4s zaplňované elektrónmi. (Byt v dome tiež nemení svoju polohu vzhľadom k poradiu, v akom bol obsadzovaný.)

Príklad 2: Napište elektrónovú konfiguráciu atómu fluóru.

Riešenie: Atóm fluóru má v jadre 9 protónov a v elektrónovom obale 9 elektrónov. S využitím vyššie uvedených pravidiel o zaplňaní orbitalov môžeme písať:

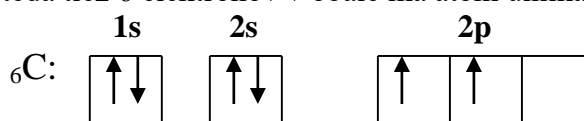
${}^9\text{F}: 1s^2 2s^2 2p^5$ alebo



Príklad 3: Napište elektrónovú konfiguráciu atómu, ktorý má v jadre 6 protónov.

Riešenie: Šesť protónov v jadre a teda tiež 6 elektrónov v obale má atóm uhlíka (${}^6\text{C}$):

${}^6\text{C}: 1s^2 2s^2 2p^2$ alebo



Príklad 4: Určte, koľko orbitalov sa nachádza v tretej vrstve elektrónového obalu.

Riešenie: Ide o tretiu vrstvu elektrónového obalu – hlavné kvantové číslo je rovné 3. Ďalej odvodíme vedľajšie a magnetické kvantové číslo:

$$\begin{array}{ll} l = 0 \text{ (orbital s)} & m_l = 0 \\ l = 1 \text{ (orbital p)} & m_l = -1, 0, 1 \\ l = 2 \text{ (orbital d)} & m_l = -2, -1, 0, 1, 2 \end{array}$$

Z uvedeného vyplýva, že v tretej vrstve elektrónového obalu je 9 orbitalov (v každom môžu byť 2 elektróny, ktoré majú opačný spin).

Podobným spôsobom možno odvodiť počty orbitalov a elektrónov i v ďalších vrstvách elektrónového obalu. Z takto získaných výsledkov sú odvodené všeobecné vzťahy:

- počet orbitalov v každej vrstve elektrónového obalu je daný vzťahom n^2 (n je hodnota hlavného kvantového čísla),
- maximálny počet elektrónov vo vrstve určuje vzťah $2n^2$.

Otázky a úlohy:

1. Rozhodnite, ktorý z nasledujúcich zápisov je správny. Svoje tvrdenie zdôvodnite:

a) $2s^3$, b) $2d^8$, c) $4p^6$, d) $1p^7$, e) $5f^{10}$.

2. Ako znie Pauliho vylučovací princíp ?

3. Určte, ktoré z nasledujúcich zápisov sú správne:

a) $n = 2, l = 2, m_l = 1$ b) $n = 3, l = 0, m_l = -1$ c) $n = 1, l = 0, m_l = 0$
d) $n = 3, l = 2, m_l = 0$ e) $n = 1, l = 0, m_l = 1$ f) $n = 2, l = -1, m_l = 0$

4. Hodnote $l = 1$ odpovedajú orbitály typu

5. Zapište, že:

- a) v orbitaloch p tretej vrstvy sa nachádzajú dva elektróny,
- b) v orbitaloch d štvrtej vrstvy sa nachádza päť elektrónov,
- c) v orbitaloch s tretej vrstvy sa nachádzajú dva elektróny a v orbitaloch p tej istej vrstve štyri elektróny.

6. O čom rozhoduje pravidlo $n + l$?

7. Rozhodnite, ktoré z orbitalov sa zaplnia skôr:

a) 3s alebo 3p b) 4s alebo 3p c) 4p alebo 3d d) 4s alebo 3d e) 4f alebo 5d
f) 5p alebo 6s g) 6s alebo 4f h) 4d alebo 5p i) 5d alebo 6p j) 7s alebo 5d

8. Napíšte elektrónové konfigurácie nasledujúcich prvkov: ${}_5\text{B}$, ${}_8\text{O}$, ${}_{15}\text{P}$, ${}_{33}\text{As}$, ${}_{35}\text{Br}$.

[Spracoval: M. Kozák]