

Atomové jádro, elektronový obal

Atomové jádro

- Atomové jádro je tvořeno protony a neutrony
- Prvek je látka skládající se z atomů se stejným počtem protonů
- Nuklid je systém tvořený prvky se stejným počtem neutronů
- Izotopy jsou atomy prvku s různým počtem neutronů
 - ${}^{12}_6\text{C}$, ${}^{13}_6\text{C}$, ${}^{14}_7\text{N}$, ${}^{15}_7\text{N}$
- ${}^A_Z\text{X}$
 - A - nukleonové číslo - počet nukleonů (protonů a neutronů) v jádře
 - Z - protonové číslo - počet protonů v jádře
- **Relativní atomová hmotnost** je dána hmotnostním poměrem atomových hmotností jednotlivých izotopů prvku.
- Chlor: ${}^{35}\text{Cl}$ (75,529 %), ${}^{37}\text{Cl}$ (24,471 %)
- $$Ar(\text{Cl}) = w({}^{35}\text{Cl}) \cdot A({}^{35}\text{Cl}) + w({}^{37}\text{Cl}) \cdot A({}^{37}\text{Cl}) = 0,75529 \cdot 34,97 + 0,24471 \cdot 36,97 = 35,45$$

Stabilita atomových jader

- Na stabilitu má vliv velikost vazebné energie jádra a poměr mezi počtem protonů a neutronů. U lehkých jader je poměr zhruba 1:1, se vzrůstajícím protonovým číslem dochází ke zvyšování přebytku neutronů
- Vazebná energie je energie, která se uvolní při vzniku jádra z volných nukleonů
- Nejvíce stabilních jader má protonové i neutronové číslo sudé, např. $^{12}_6\text{C}$, $^{16}_8\text{O}$, ...
- Naopak kombinace lichého protonového a neutronového čísla je u stabilních jader vzácná, známe pouze čtyři: ^1_1H , ^6_3Li , $^{10}_5\text{B}$ a $^{14}_7\text{N}$

Radioaktivní rozpady

- Pokud je v jádru nadbytek neutronů nebo protonů, jádro se přemění na stabilnější.
 - α rozpad - rozpad charakteristický pro těžší jádra, dojde k uvolnění α -částice (jádro ${}^4_2\text{He}^{2+}$), vzniklé jádro má protonové číslo menší o 2 a nukleonové o 4
 - ${}^{226}_{88}\text{Ra} \longrightarrow {}^{222}_{86}\text{Rn} + {}^4_2\text{He}$
 - V případě nadbytku neutronů může dojít k rozpadu neutronu na proton a elektron, během přeměny se uvolňuje částice β^- (${}^0_{-1}e^-$)
 - ${}^{32}_{15}\text{P} \longrightarrow {}^{32}_{16}\text{S} + {}^0_{-1}e^-$
 - V případě nadbytku protonů může dojít k rozpadu protonu na neutron a pozitron, během přeměny se uvolňuje částice β^+ (${}^0_{+1}e^+$)
 - ${}^{11}_6\text{C} \longrightarrow {}^{11}_5\text{B} + {}^0_{+1}e^+$
 - Nadbytek protonů v jádře může být kompenzován i pomocí *elektronového záchytu*, kdy proton pohltí elektron a vznikne neutron
 - ${}^7_4\text{Be} + {}^0_{-1}e^- \longrightarrow {}^7_3\text{Li}$

- **Poločas rozpadu** - doba, za kterou dojde k rozpadu poloviny jader v systému
- Pravděpodobnostní veličina
- Charakteristika nestabilních jader, pohybuje se od zlomků sekund až po milióny let
- $\frac{dN}{dt} = -\lambda N$
- $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$
- $t_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \tau \ln 2$
 - N - počet částic
 - N_0 - počet částic na počátku
 - λ - rozpadová konstanta
 - τ - doba života jádra - $\tau = \frac{1}{\lambda}$

Elektronový obal

- Elektrony vázané k atomovému jádru
- Elektronový obal tvoří asi 0,01 % hmotnosti atomu, ale tvoří většinu jeho objemu
- Poloměr elektronového obalu je řádově 10^{-10} m
- Elektrony vykazují dualitu chování, v důsledku Heisenbergova principu neurčitosti nelze přesně určit polohu elektronu v atomu, proto popisujeme pouze pravděpodobnost výskytu elektronu
- Počet elektronů v obalu atomu (elektroneutrální částice) je shodný s počtem protonů v jádře
- Elektrony se v obalu pohybují v prostoru vymezeném řešením Schrödingerovy rovnice, tento prostor označujeme jako **atomový orbital**
- **Valenční elektrony** - elektrony v poslední zaplněné slupce obalu, účastní se chemických dějů

Elektronový obal

- Elektron v atomu můžeme popsat čtyřmi kvantovými čísly
 - Hlavní kvantové číslo (n) - popisuje příslušnost orbitalu do elektronové slupky – velikost orbitalu. Nabývá hodnot větších než 0.
 - Vedlejší kvantové číslo (l) - popisuje tvar orbitalu. Často se používá označení pomocí písmen: s, p, d, f, g, h, ... Nabývá hodnot v intervalu $< 0, n - 1 >$.
 - Magnetické kvantové číslo (m) - popisuje prostorovou orientaci orbitalu. Nabývá hodnot v intervalu $< -l; l >$.
 - Spinové kvantové číslo (s) - nepopisuje orbital, ale spin elektronu v orbitalu. Nabývá hodnot $\pm \frac{1}{2}$.
- **Pauliho princip výlučnosti** - v atomu nemohou existovat dva elektrony, které by měly shodná všechna čtyři kvantová čísla, musí se lišit alespoň spinem, tzn. že do jednoho atomového orbitalu se vejdou maximálně dva elektrony.
- **Výstavbový (Aufbau) princip** - elektrony zaplňují orbitály od energeticky nejnižších. První jsou zaplňovány volné orbitály s nejnižším součtem $n+l$.

Elektronová konfigurace

- Popisuje zaplnění atomových orbitalů elektrony
- Orbitaly jsou zaplňovány v pořadí: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p
- d-orbitaly se zaplňují až po zaplnění s-orbitalu s hlavním kvantovým číslem (n+1), např. 3d orbital se začne plnit až po 4s
- Zápis elektronové konfigurace: C: $1s^2 2s^2 2p^2$; P: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
- Zkrácený zápis elektronové konfigurace: C: [He] $2s^2 2p^2$; P: [Ne] $3s^2 3p^3$
- U nepřechodných prvků (s a p blok PSP) je zaplňování orbitalů dáno jejich energetickým pořadím. Sb: [Kr] $4d^{10} 5s^2 5p^3$
- U přechodných (d blok) a vnitřně přechodných (f blok) prvků nacházíme výjimky a nepravidelnosti v pořadí zaplňování orbitalů

Elektronová konfigurace

- **Změna pořadí energetických hladin**

K [Ar] 4s¹ (3d⁰ 4p⁰)

Ca [Ar] 4s² (3d⁰ 4p⁰)

Sc [Ar] 3d¹ 4s² (4p⁰)

Ti [Ar] 3d² 4s² (4p⁰)

- **Vyšší stabilita zcela zaplněných d-orbitalů**

- U prvků 6. a 11. skupiny dochází k přeskoku jednoho elektronu z orbitalu s do orbitalu d, tím vzniká konfigurace se zcela nebo zcela zaplněným d-orbitalem.

- Cr: [Ar] 3d⁵ 4s¹

- Cu: [Ar] 3d¹⁰ 4s¹

- U f-prvků (lanthanoidy a aktinoidy) je elektronová konfigurace (n-2)f¹⁻¹⁴(n-1)d⁰⁻¹ns²

- Gd: [Xe] 4f⁷ 5d¹ 6s²

- U: [Rn] 5f³ 6d¹ 7s²

Elektronová konfigurace

- Při vzniku *kationtů* se uvolňují elektrony z HOMO orbitalu (Highest Occupied Molecular Orbital - nejvyšší obsazený molekulový orbital).
- Při vzniku *aniontů* elektrony vstupují do LUMO orbitalu (Lowest Unoccupied Molecular Orbital - nejnižší neobsazený molekulový orbital).

Na	[Ne] $3s^1$	Na^+	[Ne] ($3s^0$)
Ba	[Xe] $3s^2$	Ba^{2+}	[Xe]
Fe	[Ar] $3d^6 4s^2$	Fe^{3+}	[Ar] $3d^5$
Cu	[Ar] $3d^{10} 4s^1$	Cu^{2+}	[Ar] $3d^9$
S	[Ne] $3s^2 3p^4$	S^{2-}	[Ne] $3s^2 3p^6 \equiv [\text{Ar}]$
Cl	[Ne] $3s^2 3p^5$	Cl^-	[Ne] $3s^2 3p^6 \equiv [\text{Ar}]$