

STAVBA ELEKTRONOVÉHO OBALU

Elektron má podobně jako světlo dualistickou povahu, a proto při jeho pohybu musíme vedle **korpuskulárního** charakteru (chová se jako hmotná částice) uvažovat i jeho charakter **vlnový**. Vzhledem ke svému náboji je elektron poután přitažlivými silami k atomovému jádru a zaujímá kolem jádra prostor, jehož velikost a prostorová orientace závisí na hodnotách tří kvantových čísel.

Oblast, v níž se nejčastěji vyskytuje elektron v prostoru u atomového jádra, se nazývá orbital.

Kvantová čísla

Pro jednoznačný popis prostoru, v němž se vyskytuje elektron, je nutné znát velikost orbitalu (popř. energii elektronu), prostorový tvar orbitalu a umístění orbitalu v prostoru. Tyto charakteristiky orbitalu udávají hodnoty tří kvantových čísel, která se označují symboly **n**, **l**, **m**. Čtvrté kvantové číslo, označené symbolem **s**, se zavádí k popisu chování elektronu v orbitalu.

Symbol kvantového čísla	Název kvantového čísla
n	hlavní
l	vedlejší
m	magnetické
s	spinové

Energie elektronu závisí na hlavním kvantovém čísle n.

Častěji se uvádí, že elektrony o stejném hlavním kvantovém čísle se vyskytují v určitých slupkách (vrstvách, hladinách) atomů. Slupky se označují následujícím způsobem:

Hodnota hlavního kvantového čísla n	1	2	3	4	5	6	7
Označení slupky atomu	K	L	M	N	O	P	Q

Hlavní kvantové číslo může nabývat u dosud známých prvků hodnot celých kladných čísel, maximálně se rovná sedmi. Platí, že energie elektronu se zvětšuje se stoupající hodnotou jeho hlavního kvantového čísla.

Vedlejší kvantové číslo l udává tvar orbitalu.

Toto kvantové číslo nabývá hodnot celých kladných čísel včetně nuly, přičemž jeho maximální hodnota je o jednotku menší, než je hodnota příslušného hlavního kvantového čísla, tedy kvantové číslo **l** nabývá všech hodnot celých kladných čísel od 0 až do **n-1** (např. je-li **n=3**, pak **l** nabývá hodnot 0, 1 a 2).

Orbitaly o stejné hodnotě l mají i stejný prostorový tvar.

Hodnota vedlejšího kvantového čísla	0	1	2	3
Označení typu orbitalu	s	p	d	f

Magnetické kvantové číslo m udává vzájemnou polohu orbitalů v prostoru. Počet hodnot tohoto kvantového čísla udává současně i počet orbitalů v dané podslupce.

Magnetické kvantové číslo nabývá všech hodnot od $-l$ do $+l$ včetně nuly. Např. je-li $l=2$, pak m nabývá hodnot $-2, -1, 0, +1, +2$, tj. pro podslupku d existuje celkem pět hodnot magnetického kvantového čísla.

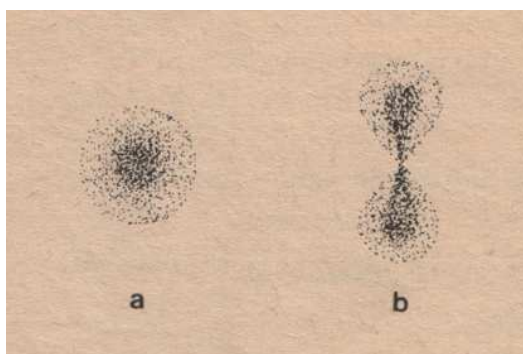
Spinové kvantové číslo s charakterizuje spin (rotaci) elektronu a může nabývat pouze dvou hodnot, $+1/2$ a $-1/2$.

Toto kvantové číslo se zavádí k určení chování elektronu v orbitalu. Maximální počet elektronů v orbitalu určuje **Pauliho vylučovací princip**:

V orbitalu mohou být maximálně dva elektrony s opačným spinem, které vytvářejí elektronový pár.

Prostorové tvary orbitalů

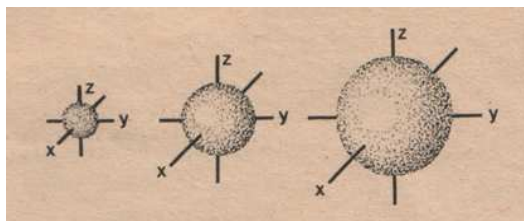
Hustota výskytu elektronu v orbitalu s (a) a v orbitalu p (b), větší hustota tečkování znamená větší pravděpodobnost výskytu:



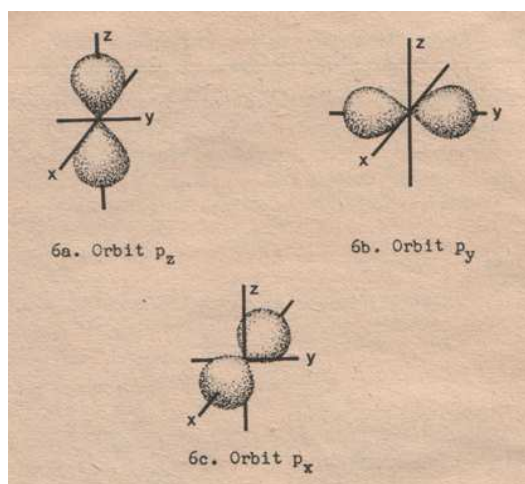
Pro rozlišení jednotlivých orbitalů předrazujeme jejich označení číselnou hodnotu příslušného hlavního kvantového čísla, např. $2s$ udává orbital s ze slupky L ($n=2$).

Orbital s má hodnotu vedlejšího kvantového čísla rovnu nule. Orbital s je vždy kulově symetrický.

Orbitaly s se od sebe liší svým poloměrem, který se zvětšuje s rostoucí hodnotou hlavního kvantového čísla:



Orbitaly p mají hodnotu vedlejšího kvantového čísla rovnu jedné. Orbitaly p mají tvar připomínající prostorovou osmičku. Pro kvantové číslo $l=1$ existují tři hodnoty magnetického kvantového čísla ($m = -1, 0, +1$). Proto existují i tři orbitaly p. Podle osy, v níž leží oblast nejpravděpodobnějšího výskytu elektronů, se upřesňují jejich názvy (p_x, p_y, p_z).



Orbitaly d a f jsou složitějších tvarů.

Znázornění a zápis elektronů a orbitalů

Jeden elektron znázorníme jednou šipkou směřující nahoru \uparrow nebo dolů \downarrow . Různé směry šipky udávají opačné spiny elektronu.

Orbitaly znázorníme:

- jejich prostorovým tvarem
- pomocí jejich symbolů (exponent udává počet elektronů v daném orbitalu (např. zápis $2p^3$ znamená, že v orbitalu $2p$ jsou tři elektrony)
- pomocí rámečků, které jsou rozděleny na tolik políček, kolik orbitalů určitého druhu existuje.

orbital s:

orbital p:

orbital d:

orbital f:

Pro přesnější popis znázorněného orbitalu zapisujeme k rámečku jeho symbol s hodnotou hlavního kvantového čísla:

orbital 1s znázorníme 1s

orbital 3d znázorníme 3d

Přehled kvantových čísel:

Kvantová čísla			Počet	
Hlavní n (slupka)	Vedlejší l (podslupka)	Magnetické m	Orbitalů v dané slupce	Elektronů v dané slupce
n=1 (K)	l=0 (s)	0	1	2
n=2 (L)	l=0 (s)	0	4	8
	l=1 (p)	-1, 0, +1		
n=3 (M)	l=0 (s)	0	9	18
	l=1 (p)	-1, 0, +1		
	l=2 (d)	-2, -1, 0, +1, +2		
n=4 (N)	l=0 (s)	0	16	32
	l=1 (p)	-1, 0, +1		
	l=2 (d)	-2, -1, 0, +1, +2		
	l=3 (f)	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3		

Cvičení:

- 1) Jakou hodnotu hlavního kvantového čísla mají elektrony ze slupky L.
- 2) Do které slupky atomu patří elektrony, jejichž hodnota hlavního kvantového čísla je rovna čtyřem.
- 3) Určete, jakých hodnot nabývá vedlejší kvantové číslo, je-li a) $n=2$, b) $n=4$.
- 4) Jak se nazývá podslupka atomu, jejíž hodnota $l=1$.
- 5) Kolik existuje celkem orbitalů v podslupce jejíž hodnota $l=1$.
- 6) Určete, zda existuje podslupka, v níž existuje pouze orbital s.
- 7) Určete maximální počet elektronů v podslupce p.
- 8) Určete maximální počet elektronů ve slupce L, která obsahuje jednak podslupku s a jednak podslupku p.