

Inovace studia molekulární a buněčné biologie reg. č. CZ.1.07/2.2.00/07.0354

Investice do rozvoje vzdělávání



INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Předmět: LRR/CHPB1/Chemie pro biology 1

Investice do rozvoje vzdělávání



INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Elektronový obal

Mgr. Karel Doležal Dr.

Investice do rozvoje vzdělávání



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Cíl přednášky: seznámit posluchače se stavbou elektronového obalu atomu

Klíčová slova: Heisenbergův princip neurčitosti, Planckova konstanta, Schrödingerova rovnice, atomové orbitaly, Pauliho princip výlučnosti, kvantová čísla, tvar a energie atomových orbitalů, Hundovo pravidlo, ionizační energie

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Ernest Rutherford – planetární model

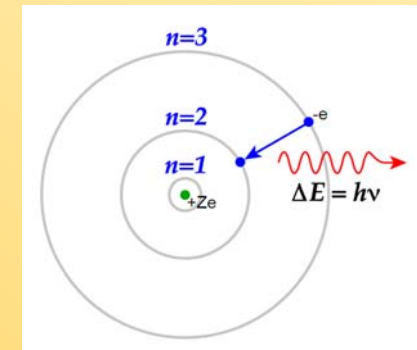
Uprostřed atomu se nachází malé a (relativně) velmi hmotné atomové jádro. Kolem tohoto jádra se pak pohybují elektrony. (Na základě výsledků experimentu s rozptylem částic α na tenké kovové (zlaté) fólii –pouze ty částice, které se dostanou do přímého styku s jádrem, mění podstatně směr svého pohybu) (1908 Nobelova cenu za chemii)

Dle představ klasické fyziky, nabitě částice se navzájem přitahují, nestabilní

Elementární částice – dle představ kvantové mechaniky

- Kvantování energie elementárních částic
- Korpuskulárně-vlnový charakter částic
- Nemožnost určovat s libovolnou přesností fyzikální veličiny charakterizující stav dané částice

- Klasická fyzika – částice mohou nabývat libovolné energie
- Energie elementárních částic kvantována – normální a excitované stavy
- německý fyzik Max Karl Ernst Ludwig Planck (1899) záření absolutně černého tělesa
- Energie elementárního kvanta záření závisí na jeho frekvenci
- $E = h\nu$, h – Planckova konstanta $6,6256 \cdot 10^{-34} \text{ Js}^{-1}$



Využití kvantování 1913
 Niels Bohr
 Bohrov model atomu
 Použil planetární model
 Do pohyb. rovnic zavedl
 kvantování, vysvětlil vodík. spektra

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

- Klasická fyzika rozlišuje pojem částice a vlnění.
Znaky částic:
 - - přesná lokalizace v prostoru
 - - existence definované dráhy pohybu
 - - ostré vymezení povrchu
- Vlnění – šíření vzruchu ve hmotném prostředí, difrakční (ohybové) a interferenční jevy
- Elementární částice (v závislosti na uspořádání experimentu) mohou vykazovat korpuskulární, jindy vlnový charakter – rozptyl proudu elektronů nebo atomů na foliích kovů způsobuje typické interferenční jevy specifické pro vlnění. Naopak tok elektromagnetických vln může podložce předávat měřitelnou energii, způsobovat hybnost, může z ní vyražet elektrony

- Foton - spojení Planckova a Einsteinova vztahu $E = h\nu$, $E = m_f \cdot c^2$

$m_f = h\nu/c^2$, $p_f = m_f \cdot c = h\nu/c$ Je možné vyjádřit jak hmotnost, energii, hybnost fotonu (veličiny vystihující jeho korpuskulární charakter), tak i vlnovou délku resp. frekvenci

- Francouzský kvant. fyzik Louis de Broglie (1924)
- zobecnění pro všechny elementární částice $\lambda = h/mv$
- Hmotové vlny
- Experimentálně potvrzena pro elektron (1927), později
- Pro alfa částice, protony, atomy vodíku (1930)
- Elementární částice nemohou mít současně všechny vlastnosti klasické částice a vlny, některé protikladné, např. ohraničenost. Platí **Heisenbergův princip neurčitosti**:
- **Součin každé dvojice dynamicky proměnných veličin, který má rozměr Planckovy konstanty, nemůže být stanoven s menší nepřesností, než je hodnota Planckovy konstanty.**
- **Např. u mikročástice nelze současně přesně změřit polohu a hybnost (rychlost).**

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

- Rakouský teoretický fyzik Erwin Schrödinger – formuloval obecně platnou diferenciální rovnici, kterou musí splňovat funkce popisující stav libovolného objektu. Vlnová funkce Ψ , základním postulátem kvantové mechaniky. Ψ^2 má fyzikální význam pravděpodobnosti
- výskytu částice. Popisuje časový vývoj vlnové funkce částice, která se
- pohybuje v poli sil.

$$\mathcal{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H}(t)\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

- Hamiltonův operátor, popisující pohyb částice v časově závislých vnějších polích, vyjadřuje ve formě operátoru celkovou energii částice jako součet kinetické a potenciální energie (operátor - symbol pro provedení určité matematické operace, není součin)
- Funkce Ψ , pro kterou rovnice splněna, stejně jako přípustné hodnoty energie představují řešení Schrödingerovy rovnice – objasnění uspořádání elektronového obalu izolovaného atomu (po vnesení údajů charakterizujících uspořádání atomu, o hmotnosti a náboji částic atd.), stav elektronu v atomu.

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + E_p$$

- Oblasti nejpravděpodobnějšího výskytu elektronu v atomu – **atomové orbitaly (AO)**. Každý AO má svoji vlnovou funkci – závislá na souřadnicích. Souřadné systémy atomu a) pravouhlé souřadnice, b) sférické souřadnice – výhodnější
- (počátek umístěn do jádra) Přesné řešení – jen pro dvojici částic (atom vodíku)



Investice do rozvoje vzdělávání

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Pro specifický atom více řešení – každý orbital definován kvantovými čísly n, l, m

(výraz dále obsahuje souřadnice a některé fyz. konstanty – h, π , dvě části – radiální a polární)

Hlavní kvantové číslo rozhoduje o energii daného AH, nabývá kladných celočíselných hodnot $n=1,2,3,4,\dots$

Vedlejší kvantové číslo určuje směr a tvar rozložení elektron. obalu. Nabývá kladných celočíselných hodnot (včetně 0), limitováno n .
 $l=0,1,2,3,\dots,n-1$

Magnetické kvantové číslo – vlnové funkce s l přísluší $2l+1$ hodnot m_l . Nabývají hodnoty $-l, -l+1, \dots, +l-1, +l$

Některé orbitaly mají shodnou energii (určována hlavně n (a l)) – skupiny orbitalů „degenerované orbitaly“

Řešením Schrödingerovy rovnice získáváme pro AO informace o:

- 1. Vlnové funkce jednotlivých AO, charakterizované kvant. čísly**
- 2. Hodnoty energie všech AO**
- 3. Průběh vln. funkce v závislosti na souřadnicích – představa o pravděpodobnosti výskytu elektronu**

Investice do rozvoje vzdělávání



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Kvantové číslo	Značka	Rozsah	Popis
Hlavní kvantové číslo	n	jen přirozená čísla, 1 a více	určuje energii orbitalu, také popisuje vzdálenost orbitalu od atomového jádra
Vedlejší kvantové číslo	l	celočíslné, 0 až $n-1$	orbitální moment hybnosti elektronu, čímž určuje tvar atomového orbitalu
Magnetické kvantové číslo	m	celočíslné, $-l$ až $+l$	magnetický moment hybnosti elektronu, také popisuje prostorovou orientaci atomového orbitalu
Spinové kvantové číslo	s	$+\frac{1}{2}$ nebo $-\frac{1}{2}$	Spin je vnitřní vlastností elektronu a je nezávislý na předchozích kvantových číslech, určuje "rotaci" elektronu

Investice do rozvoje vzdělávání

Příklad

Slupka	Podslupka	Orbital		Počet elektronů
$n = 5$	$l = 0$	$m = 0$	→ 1 typ s orbitalu	→ max 2 elektrony
	$l = 1$	$m = -1, 0, +1$	→ 3 typy p orbitalu	→ max 6 elektronů
	$l = 2$	$m = -2, -1, 0, +1, +2$	→ 5 typů d orbitalu	→ max 10 elektronů
	$l = 3$	$m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$	→ 7 typů f orbitalu	→ max 14 elektronů
	$l = 4$	$m = -4, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, +4$	→ 9 typů g orbitalu	→ max 18 elektronů
				Celkem: max 50 elektronů

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.



- Označování AO – hlavní kvant. číslo + písmeno přiřazené k l ($l=1 \rightarrow s$, $l=2 \rightarrow p$, $l=2 \rightarrow d$, $l=3 \rightarrow f$)
- př. $2s$ znamená $n=2$, $l=0$, ($m_l=0$)
- Degenerace orbitalů: s nedegenerované, p 3x, d 5x, f 7x
- Elektron – kromě vlnové funkce ještě moment hybnosti – spin (další stupeň volnosti, „rotace“). Spinová funkce $\sigma = +1/2$, $-1/2$
- Pauliho princip výlučnosti (1925) – žádné dva elektrony v atomu nemohou existovat ve stejném kvant. stavu \rightarrow každý AO může být obsazen nejvýše dvěma elektrony. Degenerované AO – max. počet elektronů je dvojnásobkem stupně degenerace
- Vakantní, neobsazený orbital, pomyslné vyjádření místa, které by mohl zaujmout elektron v okolí jádra atomu

Tvar AO

- s – kulový (difuzní, neohraničený charakter) ($l=0$, $m_l=0$)
- p ($l=1$, nutno transformovat np_{-1} , np_0 , np_{+1} na np_x , np_y , np_z , komplexní vlnové funkce na reálné, jdoucí prostorově znázornit) pro vyšší n složitější tvar, většinou zanedbáváme na tvar dvojvřetena
- d (5x degenerované) vln. funkce i tvar složitý, zjednodušeně na obr.

Energie orbitalů

- Výstavbový princip (změny energie AO v závislosti na atomovém čísle). Elektronů postupně zaujmají orbitály, na nichž dosahují nejnižší energie (při respektování Pauliho principu)
- Pravidlo $n + l$ empirické, ze dvou orbitalů má menší energii ten, který má menší $n + l$. Při stejném $n + l$ rozhoduje menší n

Výstavbový trojúhelník – pořadí AO podle vzrůstající energie (jednotlivé kvantové sféry se překrývají): 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p 8s ...

Zaplňování degenerovaných orbitalů

Hundovo pravidlo: Elektronů se na degenerovaném orbitalu rozmístí vždy tak, aby co největší počet AO byl obsazen jen jedním elektronem (tak dosáhne atom minima energie)

- Snaha o dosažení minima celkové energie vede někdy až k porušení výstavbového principu. Př. Atom Cr měl by mít konfiguraci: $[Ar] 4s^2 3d^4$
- Experimentálně nacházíme uspořádání $[Ar] 4s^1 3d^5$

Možno považovat za projev Hundova pravidla - orbitaly 4s a 3d energeticky velmi blízké

Valenční sféra – neúplně zaplněné orbitaly (nepatří do konfigurace nejbližšího vzácného plynu)

Na základě podobnosti ve struktuře valenční sféry atomů lze sestavit periodickou tabulku prvků (!) (bez přihlídnutí k chem. vlastnostem – struktura val. sféry rozhoduje)

1869 – představa atomárního uspořádání hmoty teprve zvolna pronikala do chemie, Mendělejev pochopil souvislost mezi (tehdy zcela neznámou !) strukturou atomu a vlastnostmi chemických prvků

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Ionizační energie

- Valenční elektrony rozhodují o chemických (a mnohých fyzikálních vlastnostech atomu)
- Práce kterou je nutno vynaložit abychom z atomu v základním stavu odtrhli nejslaběji poutaný elektron a úplně jej vzdálili z prostoru atomu (eV nebo J, vztahuje se buď na jeden atom nebo na 1 mol)
- Vytváření iontů s vyšším nábojem – ionizační energie vyšších stupňů
- Při zachycení elektronu atomem se energie uvolňuje – elektronová afinita

Investice do rozvoje vzdělávání



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.